NARODOWE CENTRUM BADAŃ JĄDROWYCH

Konfiguracje równowagi w najcięższych jądrach atomowych i analiza procesów ich rozpadu

mgr Wojciech Brodziński

Rozprawa doktorska

Promotor:
dr hab. Janusz Skalski, prof. NCBJ
Promotor pomocniczy:
dr hab. Michał Kowal, prof. NCBJ

Warszawa 2019

Moim Rodzicom

PODZIĘKOWANIA

Chciałbym serdecznie podziękować i wyrazić swoją wdzięczność Profesorowi Januszowi Skalskiemu za merytoryczne wsparcie, poświęcony czas, niezliczone dyskusje i cenne wskazówki oraz osobiste zaangażowanie w projekt. Rozprawa ta w obecnej formie nie mogłaby powstać bez Jego pomocy.

Dziękuję także Profesorowi Michałowi Kowalowi za wartościowe uwagi, które uczyniły tę pracę lepszą oraz za gotowość do pomocy zawsze, gdy była ona potrzebna.

Szczególne podziękowania kieruję do moich Rodziców i Przyjaciół za obecność, troskę, wsparcie, uśmiech i dobre słowa, które dodawały mi otuchy.

Abstract

The thesis is devoted to the theoretical research concerning the existence and stability of the heaviest nuclei. In its first part we focus on the exploration of the weakly known region of nuclei with proton number $Z > 126$. In order to determine, whether increased stability could be expected for some of these exotic systems, calculations for a number of even-even nuclei were performed. Two methods commonly used in nuclear physics were employed: the microscopic-macroscopic model with deformed Woods-Saxon potential and the selfconsistent method with Skyrme interaction SLy6. As a result, potential energy surfaces for 46 nuclei were obtained in both models. All calculations were performed with nonaxiality included. As we show, admitting nonaxial shapes has significant impact on the results. On the basis of obtained energy landscapes we determined possible equilibrium configurations and their corresponding fission barriers. For systems with highest barrier found we estimate the spontaneous fission and α-decay half-lives, and comment on the stability against other decay channels.

The second part of the thesis concentrates on the theoretical description of spontaneous fission, which is one of the main decay modes limiting the stability of superheavy nuclei. Starting from the imaginary time formalism we formulate the instanton method for estimation of fission lifetimes, which goes beyond adiabatic approximation and is, therefore, more general than the commonly used cranking approach. The aim is to obtain a tool, that could be applied for the estimation of stability of odd nuclei and other systems with unpaired nucleons, in the case of which the adiabatic approximation is no longer valid. The detailed studies of the instanton method are presented in the following part of this work, where we discuss its properties and behaviour of the resulting action (which translates directly to the fission lifetimes).

As an example, the method is applied for the odd ^{257}Rf isotope. We check, whether this approach is able to explain the experimentally observed fission hindrance of odd nuclei (3-5 orders of magnitude in lifetimes relative to their even-even neighbours). Since the instanton method (in the form we use it) does not take into account pairing force, further calculations for chosen odd systems are performed within the "hybrid" model, in which only the contribution to the action coming from unpaired nucleon is estimated using the instantons. This study allows to test some hypotheses concerning the problem of configuration conservation during the fission process. As we show, keeping the configuration of decaying metastable state fixed greatly affects the fission barriers and resulting lifetimes.

Conclusions from our studies are presented in the final part of the thesis.

Streszczenie

Praca poświęcona jest teoretycznym badaniom dotyczącym istnienia i stabilności najcięższych jąder atomowych. Pierwsza część pracy skupia się na eksploracji słabo poznanego obszaru mapy nuklidów o liczbie protonowej $Z > 126$. Celem określenia, czy w tak egzotycznym obszarze można się spodziewać konfiguracji o podwyższonej stabilności, dla szeregu jąder parzysto-parzystych wykonano obliczenia oparte na dwóch popularnych w fizyce jądrowej metodach: mikroskopowo-makroskopowej ze zdeformowanym potencjałem Woodsa-Saxona oraz samozgodnej z oddziaływaniem Skyrme'a SLy6. W sumie uzyskano powierzchnie energii potencjalnej dla 46 jąder w obu tych modelach. Wszystkie rachunki wykonane zostały z uwzględnieniem deformacji nieosiowej, co, jak pokazujemy, ma istotny wpływ na wyniki. Otrzymane powierzchnie pozwoliły na określenie możliwych konfiguracji równowagi i odpowiadających im barier rozszczepieniowych. Dla znalezionych układów o najwyższych barierach oszacowano czasy życia ze względu na rozszczepienie spontaniczne oraz rozpad α i przedyskutowano stabilność względem innych kanałów rozpadu.

Druga część rozprawy koncentruje się na teoretycznym opisie rozszczepienia spontanicznego – jednego z głównych kanałów ograniczających stabilność jąder superciężkich. Opierając się na formalizmie czasu urojonego proponujemy metodę instantonową oszacowywania rozszczepieniowych czasów życia, która wychodząc poza przybliżenie adiabatyczne, jest ogólniejsza od zwykle stosowanego podejścia cranking. Celem jest uzyskanie narzędzia, które mogłoby posłużyć do oceny stabilności jąder nieparzystych i innych układów z niesparowanymi cząstkami (takich jak izomery K), w przypadku których warunki stosowalności przybliżenia adiabatycznego przestają być spełnione. Szczegółowe badania metody instantonowej stanowią treść dalszej części pracy, w której dyskutujemy jej własności i zachowanie się wynikających z niej działań (bezpośrednio przekładających się na czasy życia).

Omawianą metodę stosujemy na przykładzie nieparzystego izotopu ^{257}Rf. Próbujemy tu odpowiedzieć na pytanie, czy tak sformułowany model dostarcza wyjaśnienia obserwowanego wzbronienia na rozszczepienie jąder nieparzystych (3-5 rzędów wielkości w eksperymentalnych czasach życia względem ich parzysto-parzystych sąsiadów). Mając na uwadze, że metoda w wersji przez nas stosowanej nie uwzględnia oddziaływania pairing, dalsze obliczenia dla wybranych jąder nieparzystych wykonujemy w modelu hybrydowym, w którym tylko wkład do działania od niesparowanego nukleonu oceniany jest metodą instantonową. Rachunek ten służy przetestowaniu hipotez dotyczących problemu zachowywania konfiguracji w procesie rozszczepienia; jak pokazujemy, trzymanie konfiguracji rozpadającego się stanu ma silny wpływ na barierę i, w konsekwencji, na czasy życia.

Wnioski z przeprowadzonych badań przedstawiamy w końcowej części pracy.

Spis treści

Wprowadzenie 1

1. Przewidywania stabilności dla jąder parzystych o $Z > 126$ 7

1.1. Wstęp 7

1.2. Metody obliczeniowe 8

1.2.1. Model mikroskopowo-makroskopowy 8

1.2.2. Metoda samozgodna Hartree-Focka 10

1.3. Wyniki obliczeń i ich dyskusja 13

1.3.1. Energia makroskopowa 13

1.3.2. Poprawka powłokowa 15

1.3.3. Bariery rozszczepieniowe i oszacowania stabilności 17

1.4. Wnioski i podsumowanie 24

2. Teoretyczny opis procesu rozszczepienia spontanicznego – w tym jąder nieparzystych . . 27

2.1. Wstęp 27

2.2. Przybliżenie adiabatyczne i jego niedostatki 29

2.3. Formalizm czasu urojonego 33

2.4. Metoda instantonowa 37

2.5. Metoda instantonowa z pairingiem - formalizm kwazicząstek 43

2.6. Model uproszczony z samozgodną $\Delta(\tau)$ 47

3. Numeryczne rozwiązywanie równania instantonowego 53

3.1. Metoda fourierowska 53

3.2. Metoda macierzy monodromii 54

3.3. Testy poprawności uzyskiwanych rozwiązań 57

4. Rozwiązania instantonowe i ich własności 59

4.1. Model dwupoziomowy 59

4.1.1. Analiza zależności działania od parametrów modelu 59

4.1.2. Granica adiabatyczna 65

4.2. Zachowanie się działań S oraz stałych ζ przy rosnącym okresie T 66

4.3. Zależność działania od wymiaru bazy $\mathcal{N}$ 69

4.4. Zależność działania od prędkości kolektywnej $\dot{q}$ 70

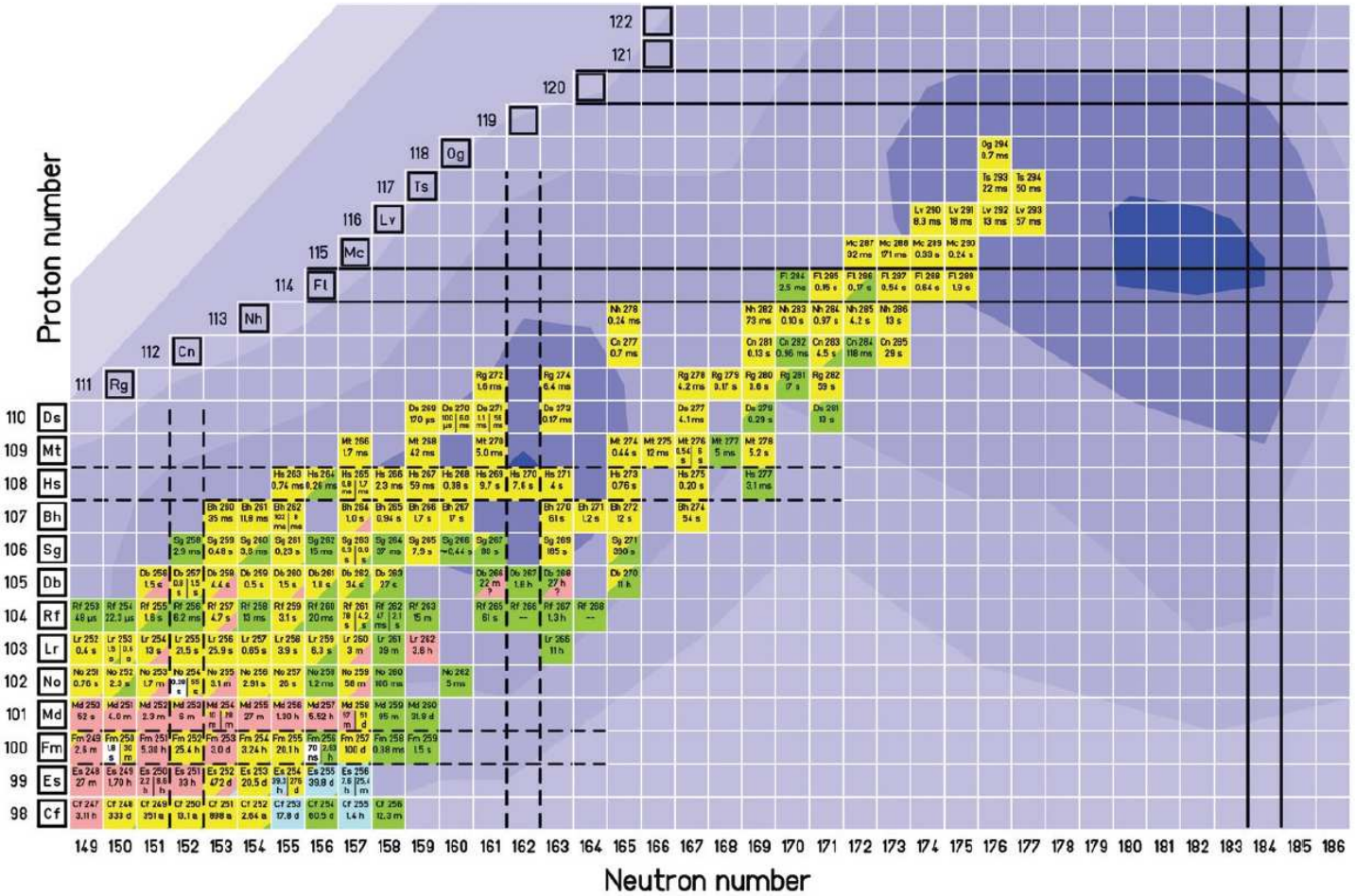
4.5. Dyskusja przebiegu funkcji podcałkowych działania i problemu parametru masowego w metodzie instantonowej 71

5. Nieosiowe deformacje jąder w metodzie instantonowej i trudności z nimi związane 75
5.1. Problem ostrych pseudoprzecięć w rachunkach nieosiowych 75
5.2. Wyniki obliczeń dla stanów neutronowych ^{272}Mt 79
6. Rozszczepienie spontaniczne jąder nieparzystych – wyniki obliczeń 83
6.1. Spowolnienie rozszczepienia w jądrach nieparzystych – wprowadzenie 83
6.2. Metoda instantonowa w zastosowaniu do jądra $^{\mathbf{257}}$Rf 86
6.3. Obliczenia z parametrem masowym jądra parzystego oraz uwzględnieniem przyczynku instantonowego dla wybranych jąder 91
6.3.1. Wyniki obliczeń czasów życia i HF przy $E_{zp} = 0.5$ MeV 93
6.3.2. Wyniki obliczeń czasów życia i HF przy dopasowywanym E_{zp} 100
Podsumowanie 105
Bibliografia 109

Wprowadzenie

Poszukiwania i próby syntezy jąder o coraz większej liczbie protonów Z i neutronów N stanowią jeden z głównych kierunków badawczych fizyki jądrowej niskich energii. Pytanie o to, jaka jest największa możliwa liczba atomowa Z układu jądrowego, a więc jak daleko może rozciągać się układ okresowy pierwiastków, pozostaje wciąż otwarte. Wiadomym jest, że w miarę wzrostu Z stabilność jąder jest generalnie niszczona przez coraz silniejsze odpychanie kulombowskie protonów; w modelu kroplowym bariera na rozszczepienie spontaniczne zanika już przy $Z \gtrsim 100$ [1]. Dla pewnych szczególnych kombinacji Z i N mogą jednak wystąpić stabilizujące układ kwantowe efekty powłokowe. Istnienie najcięższych jąder i odpowiadających im pierwiastków jest całkowicie zależne od wystąpienia tych efektów. Kluczowe jest zatem określenie, gdzie na mapie nuklidów w zakresie jąder superciężkich (SHN – *ang. Superheavy Nuclei*) można spodziewać się takich wysp stabilności. Przewidywania teoretyczne z końca lat 60-tych ubiegłego stulecia wskazują na układ o $Z = 114$ i $N = 184$ jako kolejne jądro podwójnie magiczne (po izotopie ^{208}Pb) i tym samym centrum wyspy stabilności SHN [2, 3]. Od tego czasu trwają wysiłki eksperymentalne mające na celu syntezę coraz cięższych pierwiastków i dojście do przewidywanego obszaru zwiększonej stabilności. Eksperymenty wykonane w ostatnich czasach przede wszystkim w laboratoriach w Dubnej (JINR) [4], ale także w Darmstadt (GSI) [5] i w Japonii (RIKEN) [6] pozwoliły na syntezę kolejnych jąder znacznie poszerzając naszą znajomość mapy nuklidów w obszarze SHN – stan na rok 2018 przedstawia rysunek 1. Zaznaczono na nim także dominujący dla danego nuklidu kanał rozpadu; widać, że najcięższe jądra rozpadają się głównie poprzez emisję α i rozszczepienie spontaniczne. Obecnie najcięższym uzyskanym pierwiastkiem jest oganesson ($Z = 118$). Obserwuje się także zwiększanie stabilności w miarę zbliżania się do hipotetycznej liczby magicznej $N = 184$, co stanowi przesłankę na rzecz jej istnienia.

Badania eksperymentalne w dziedzinie jąder superciężkich cechują szczególne wyzwania. Najcięższe jądra uzyskano w reakcjach tzw. gorącej fuzji stosując podwójnie magiczny izotop wapnia ^{48}Ca jako pocisk i tarcze zbudowane z aktynowców takich jak ^{243}Am, ^{245,248}Cm, ^{249}Bk czy $^{249-251}$Cf. Przekroje czynne na syntezę SHN są jednak niezwykle małe, na poziomie 1-10 pb – w efekcie eksperymenty trzeba często prowadzić miesiącami w trybie ciągłym, by wyprodukować pojedyncze jądra. Czasy życia takich nuklidów są również niezwykle krótkie, < 1 ms dla najcięższych, obecnie znanych układów. Wymaga to stosowania wyrafinowanych technik zarówno prowadzenia samej reakcji jak i detekcji powstałych produktów. Stąd też



Rysunek 1: Mapa nuklidów w obszarze SHN przedstawiająca obecnie znane, najcięższe jądra (rys. 1 z pracy [7], stan na 2018 rok). Kolorami oznaczono dominujący dla danego jądra kanał rozpadu: emisję cząstki α (żółty), rozszczepienie spontaniczne (zielony), rozpad β^+ i wychwyt elektronu (czerwony), rozpad β^- (niebieski) oraz izomery rozpadające się przez emisję γ (biały). Czarnymi, ciągłymi liniami zaznaczono liczby $Z = 114$ i 120 oraz $N = 184$, przy których następuje zamknięcie sferycznej powłoki/podpowłoki. Czarne, przerywane linie oznaczają liczby protonowe i neutronowe dla których jądra wykazują podwyższoną stabilność dla zdeformowanych kształtów. Głębia koloru tła symbolizuje wielkość poprawki powłokowej w stanie podstawowym wyliczonej w modelu mikroskopowo-makroskopowym [8, 9, 10] począwszy od -7 MeV (ciemnoniebieski) do - 3 MeV (jasnoniebieski): zmiana co 1 MeV. Widoczna jest tu podwyższona stabilność w obszarze jąder zdeformowanych dla otoczenia Z=108, N=162 oraz wyspa stabilności w pobliżu Z=114, N=184.

niezwykle ważne jest równoległe prowadzenie obliczeń teoretycznych wskazujących, które spośród jąder mogą wykazywać podwyższoną stabilność, jaki jest dominujący kanał ich rozpadu i jakich czasów życia należy się spodziewać.

Szczególną rolę pośród jąder najcięższych mogą odgrywać układy z jednym lub więcej niesparowanymi nukleonami tj. jądra nieparzyste, nieparzysto-nieparzyste oraz tzw. izomery K w jądrach parzystych (gdzie K oznacza rzut całkowitego momentu pędu na oś symetrii). Dane eksperymentalne dla lżejszych jąder nieparzystych/nieparzysto-nieparzystych tj. aktynowców i układów transfermowych wskazują na silny efekt wzbronienia procesu rozszczepienia spontanicznego w porównaniu do ich parzysto-parzystych sąsiadów – różnice w rozszczepieniowych czasach życia sięgają 3-5 rzędów wielkości [11]. Efekt ten wciąż nie jest dobrze zrozumiany na gruncie teoretycznym. Podobne wzbronienie może występować także w stanach izomerycznych o wysokim K, ponadto rachunki wskazują, że również rozpad α będzie spowolniony dla takich układów [12]. Prowadzi to do uzasadnionego przewidywania, że właśnie wśród jąder z niesparowanymi nukleonami można spodziewać się najbardziej stabilnych układów superciężkich, o ile tylko pozostałe, istotne kanały rozpadu również będą powolne.

Warto dodać, że motywacja stojąca za badaniami w dziedzinie jąder superciężkich nie ogranicza się jedynie do produkcji coraz cięższych pierwiastków i ich izotopów oraz określenia największego możliwego Z. Tego typu układy umożliwiają także testowanie stosowanych w fizyce jądrowej modeli teoretycznych i ich przewidywań w ekstremalnych warunkach dużych Z i N. Ich badania prowadzą do lepszego zrozumienia efektów i mechanizmów decydujących o stabilności określonych konfiguracji protonowo-neutronowych. Pierwiastki superciężkie są również ciekawe z punktu widzenia fizyki atomowej i chemii: silne efekty relatywistyczne, których należy się spodziewać dla dużych liczb atomowych, będą wpływać na własności fizyczne i chemiczne tych pierwiastków, co czyni je egzotycznymi w układzie okresowym. Wreszcie jądra superciężkie mogą powstawać w niektórych, specyficznych scenariuszach kosmicznych takich jak zderzenia gwiazd neutronowych [13], zatem są one interesujące również z astrofizycznego punktu widzenia.

Podstawowym celem teoretycznych przewidywań dotyczących jąder superciężkich jest zbadanie czy istnieją dla nich konfiguracje równowagi, tzn. minima energetyczne dające szansę na stan metastabilny, oraz oszacowanie ich czasu życia, a więc prędkości najbardziej prawdopodobnego rozpadu. Rozprawa dotyczy tych zagadnień i składa się z dwóch części.

Pierwsza część rozprawy, którą stanowi rozdział 1, poświęcona jest eksploracji słabo poznanego obszaru mapy nuklidów o $Z > 126$, nazywanych czasem hipersiężkimi. Istnienie takich układów jest hipotetyczne, a stosowanie modeli testowanych dla jąder znanych – ekstrapolacją dalszą niż dla jąder superciężkich. Próbujemy tu odpowiedzieć na pytanie, czy można spodziewać się kolejnych obszarów o podwyższonej stabilności przy tak dużych liczbach atomowych. W tym celu dla szeregu jąder parzysto-parzystych wykonano obliczenia

ich powierzchni energii potencjalnej z użyciem dwóch, dość realistycznych w znanym zakresie jąder, modeli: mikroskopowo-makroskopowego z potencjałem Woodsa-Saxona oraz samozgodnego z oddziaływaniem Skyrme'a SLy6. Pozwoliło to na określenie możliwych konfiguracji równowagi i oszacowanie odpowiadających im barier rozszczepieniowych. W tym badaniu zostały konsekwentnie wzięte pod uwagę, na ile wiemy po raz pierwszy, trójosiowe kształty jąder, co ma drastyczny wpływ na wyniki (patrz: publikacja [14]). Dla znalezionych konfiguracji równowagi oszacowane zostały czasy życia ze względu na rozszczepienie spontaniczne oraz rozpad alfa i przedyskutowane inne kanały rozpadu. Wynikające z przeprowadzonego rachunku przewidywania i wnioski sformułowane są w końcowej części rozdziału.

W drugiej części pracy koncentrujemy się na procesie rozszczepienia spontanicznego, który jest jednym z głównych (obok emisji α) kanałów rozpadu ograniczających stabilność najcięższych jąder. Na szybkość tego procesu ma wpływ zarówno bariera energii potencjalnej (jej wysokość, długość i kształt) jak i efekty dynamiczne zachodzące w trakcie rozszczepienia. Dotychczasowe metody obliczania czasów życia ze względu na spontaniczne rozszczepienie opierają się na przybliżeniu adiabatycznym oraz fenomenologicznej parametryzacji kształtu jądra. Tymczasem można się spodziewać, że w przypadku jąder o niesparowanych nukleonach (ok. 3/4 istniejących) i dla tzw. K-izomerów istotną rolę odgrywać będą przejścia nieadiabatyczne. Z kolei ograniczenie stopni swobody w rozszczepieniu do fenomenologicznych parametrów kształtu, związanych z obrazem kropli cieczy, jest niespójne z wielością współrzędnych, jaką stanowi zestaw jednocząstkowych funkcji falowych, będący podstawą opisu w uważanych obecnie za standardowe samozgodnych metodach średniego pola.

Dlatego zajęliśmy się badaniem podejścia opartego na rozwiązaniach instantonowych równań średniego pola - periodycznych rozwiązaniach w czasie urojonym, dających przybliżenie quasi-klasyczne czasów życia. A priori daje ono szansę oszacowania stabilności układów, dla których załamuje się przybliżenie adiabatyczne jak również opisuje pełną zmienność jednocząstkowych orbitali w procesie tunelowania. Wydaje się, że metoda ta nie była dotychczas, poza jednym, mało realistycznym przypadkiem, stosowana do obliczeń szybkości rozszczepienia w fizyce jądrowej. Z uwagi na stopień komplikacji pełnego problemu zrezygnowaliśmy z samozgodności z myślą o uzyskaniu rozwiązań w czasie urojonym, które można by uważać za redukcję metody samozgodnej do obrazu przybliżenia mikroskopowo-makroskopowego. Własności takich rozwiązań otrzymanych z fenomenologicznym potencjałem Woodsa-Saxona oraz wnioski z nich są głównym wynikiem tej części pracy. Podaliśmy również sformułowanie uproszczonego modelu z pairingiem, w którym występuje potencjał jednocząstkowy oraz schematyczne oddziaływanie ze stałym elementem macierzowym.

W rozdziale 2 przypominamy wpierw klasyczne podejście do teoretycznego wyznaczania rozszczepieniowych czasów życia oparte na założeniu o adiabatyczności procesu rozszczepienia. Wskazujemy tu na niedostatki tej metody w odniesieniu do układów z niesparowanymi

nukleonami i wynikającą stąd konieczność wyjścia poza przybliżenie adiabatyczne. Dalszą część rozdziału stanowi omówienie formalizmu czasu urojonego, który daje podstawy pod opis rozszczepienia uwzględniający jego dynamiczny charakter i jest motywacją dla proponowanej przez nas metody instantonowej opisanej w końcowej części rozdziału.

W rozdziale 3 dyskutujemy specyficzne dla równań instantonowych problemy występujące przy poszukiwaniu ich rozwiązań oraz zastosowane w pracy metody numeryczne pozwalające te trudności przezwyciężyć. Omówiono w nim również wyniki testów na poprawność i dokładność otrzymanych rozwiązań.

W rozdziale 4 omawiamy na przykładach zachowanie się rozwiązań instantonowych i wynikających z nich działań. Zaczynamy od prostego przypadku dwóch poziomów przedstawiając zależność działania od parametrów modelu i wskazując wrażliwość metody na ostre pseudoprzecięcia (tj. obszary, w których oddziaływanie między poziomami jest bardzo słabe, ale wciąż niezerowe). Dalszą dyskusję przeprowadzamy dla bardziej realistycznego przypadku poziomów jednocząstkowych potencjału Woodsa-Saxona wziętych dla wybranego jądra wzdłuż zadanej trajektorii w przestrzeni parametrów deformacji.

Rozdział 5 stanowi dyskusja problemów wynikających z uwzględnienia ścieżek rozszczepieniowych przebiegających przez deformację γ łamiącą symetrię osiową jądra. Pojawiające się wówczas liczne, bardzo słabe oddziaływania między poziomami (nieoddziałującymi przy ograniczeniu się do deformacji osiowo symetrycznych) stanowią istotną trudność w zastosowaniu metody instantonowej do takich dróg. Przedstawiamy tu wynik otrzymany dla wybranej ścieżki nieosiowej i porównujemy z rezultatem uzyskanym dla drogi osiowej.

Rozdział 6 zaczynamy od prezentacji obecnego stanu wiedzy eksperymentalnej dotyczącego rozszczepienia spontanicznego jąder nieparzystych/nieparzysto-nieparzystych oraz obserwowanego wzbronienia na ten proces. Stanowi ona kontekst dla wykonanych następnie obliczeń. Metodę instantonową stosujemy do jądra nieparzystego ^{257}Rf oraz do parzysto-parzystego jądra sąsiedniego ^{256}Rf. Dyskutujemy otrzymany wynik. Następnie dla szeregu wybranych jąder nieparzystych obliczamy czasy życia traktując działanie dla tych układów jako sumę wkładu od parzysto-parzystego rdzenia (obliczanego w oparciu o przybliżenie cranking) oraz wkładu od niesparowanego nukleonu (ocenianego metodą instantonową). Rozważamy przy tym dwa skrajne scenariusze: zachowywanie konfiguracji rozpadającego się stanu (tj. liczby K i parzystości) na całej trajektorii rozszczepienia oraz blokowanie adiabatyczne, w przypadku którego nieparzysty nukleon obsadza zawsze stan minimalizujący energię jądra w danym punkcie ścieżki (bez względu na jego liczby kwantowe). Wyniki otrzymane w obu tych przypadkach konfrontujemy z danymi eksperymentalnymi.

W końcowej części pracy podsumowujemy przeprowadzone rachunki i wynikające z nich wnioski.

1. Przewidywania stabilności dla jąder parzystych o $Z > 126$

1.1. Wstęp

W odróżnieniu od jąder lżejszych, dla których wykonano sporo rachunków dotyczących ich stabilności (patrz np. [15, 16, 17, 18]), układy jądrowe o $Z > 126$ stanowią wciąż słabo poznany obszar mapy nuklidów. Celem obliczeń, których wyniki przedstawimy w bieżącym rozdziale, było lepsze przebadanie tego obszaru i próba odpowiedzi na pytanie, czy można spodziewać się konfiguracji o podwyższonej stabilności wśród jąder jeszcze cięższych od obecnie dostępnych w eksperymentach. Motywacja tych badań ma więc charakter poznawczy, staramy się zrozumieć na gruncie teoretycznym, czy takie jądra (a tym samym odpowiadające im pierwiastki) mogą istnieć i jakie czynniki o tym będą decydować.

Nasze obliczenia bazują na dwóch popularnych w fizyce jądrowej modelach: mikroskopowo-makroskopowym ze zdeformowanym potencjałem Woodsa-Saxona oraz samozgodnym Hartree-Focka z efektywnym oddziaływaniem typu Skyrme'a. Oba te podejścia są z powodzeniem stosowane do oszacowywania barier rozszczepieniowych i czasów życia w jądrach lżejszych. Niemniej należy zwrócić uwagę, że stosowanie tych modeli do tak ciężkich jąder stanowi ich daleką ekstrapolację. Już dla $Z \leq 126$ obie metody dają inne rezultaty dla barier, przy czym wyższe bariery otrzymuje się dla oddziaływań Skyrme'a w porównaniu z modelem mikroskopowo-makroskopowym. Wyniki naszego rachunku pozwalają ocenić, jak ta różnica między modelami zachowuje się przy przejściu do jeszcze cięższych jąder.

Jeżeli chodzi o deformacje, przy których pojawiają się minima w energii jądra, to w pobliżu $Z = 126$ dominują konfiguracje osiowo symetryczne oblate i superdeformed oblate [19]. Obecny rachunek pokazuje, jak te minima zachowują się przy dalszym zwiększaniu Z.

Jako że stabilność układów superciężkich warunkowana jest nie tylko przez rozszczepienie spontaniczne, ale i inne procesy, podamy w pracy również oszacowania czasów życia na rozpad α dla wybranych jąder i skomentujemy ich stabilność względem innych kanałów rozpadu.

W obliczeniach ograniczamy się do standardowych deformacji jądrowych tj. do konfiguracji zwartych – nie rozważamy tutaj bardziej egzotycznych kształtów takich jak bańki i torusy. Niektóre prace [20, 21, 22, 23, 24] przewidują istnienie minimów energetycznych dla takich właśnie specyficznych konfiguracji, niemniej ocena ich stabilności wymaga dalszych studiów w tym wzięcia pod uwagę nieosiowych stopni swobody i dodatkowych możliwości rozpadu.

1.2. Metody obliczeniowe

Obliczenia, których wyniki tutaj przedstawimy, zostały wykonane przy użyciu metody mikroskopowo-makroskopowej oraz metody samozgodnej Hartree-Focka. Omówimy teraz krótko główne cechy obu modeli i sposób, w jaki zostały one zastosowane w naszych rachunkach.

1.2.1. Model mikroskopowo-makroskopowy

W podejściu mikroskopowo-makroskopowym (mikro-makro) energię potencjalną jądra E_{tot} o Z protonach i N neutronach zapisuje się jako sumę dwóch części:

$$E_{tot}(Z,N,\beta_i) = E_{macro}(Z,N,\beta_i) + E_{micro}(Z,N,\beta_i), \tag{1.1}$$

gdzie E_{macro} jest makroskopową częścią energii, zaś E_{micro} stanowi energię mikroskopową, obie zaś zależą od parametrów β_i opisujących deformację jądra. Parametry te są uwzględnione poprzez definicję kształtu powierzchni jądrowej, którą w naszym przypadku przyjmujemy w postaci [25]:

$$R(\theta,\varphi) = c(\{\beta\})R_0\left\{1 + \sum_{\lambda>1}\beta_{\lambda 0}Y_{\lambda 0}(\theta,\varphi) + \sum_{\lambda>1,\mu>0,even}\beta_{\lambda\mu}Y^c_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\right\}. \tag{1.2}$$

W powyższym wzorze $Y^c_{\lambda\mu}$ o parzystych $\mu > 0$ są harmonikami sferycznymi przyjmującymi wartości rzeczywiste, zdefiniowanymi poprzez zwykłe harmoniki jako: $Y^c_{\lambda\mu} = (Y_{\lambda\mu} + Y_{\lambda-\mu})/\sqrt{2}$. Czynnik $c(\{\beta\})$ jest dobierany tak, by zachować objętość jądra przy zmianie jego kształtu.

Energia makroskopowa we wzorze (1.1) stanowi gładką część energii jądra opisującą jego globalne własności. Ten wkład zwykle modeluje się traktując jądro jako kroplę cieczy i uwzględniając dodatkowe elementy takie jak rozmycie powierzchni jądrowej czy ograniczony zasięg oddziaływania jądrowego. W rachunkach wykonanych w tej pracy do obliczenia części makroskopowej E_{macro} używamy modelu Yukawa plus exponential [26].

Energia mikroskopowa E_{micro} uwzględnia poprawki wynikające z kwantowych efektów powłokowych nieobecnych w części makroskopowej. Poprawka ta obliczana jest na podstawie widma jednocząstkowego potencjału fenomenologicznego zgodnie z przepisem Strutinskiego [27]. Składa się ona z dwóch części tj. poprawki powłokowej oraz pairingowej:

$$E_{micro}(Z,N,\beta_i) = E^{sh}_{corr}(Z,N,\beta_i) + E^{pair}_{corr}(Z,N,\beta_i). \tag{1.3}$$

Jako potencjał fenomenologiczny przyjmujemy zdeformowany potencjał Woodsa-Saxona

(WS):

$$V_{WS}(\vec{r},\beta_i) = -\frac{V}{1+e^{d(\vec{r},\beta_i)/a}}, \tag{1.4}$$

gdzie V wyznacza głębokość potencjału, a jest parametrem rozmycia powierzchni jądrowej, natomiast $d(\vec{r},\beta_i)$ jest odległością punktu $\vec{r}$ od powierzchni jądra (1.2), braną ze znakiem minus dla punktów znajdujących się wewnątrz jądra. Oprócz części centralnej uwzględnia się także oddziaływanie spin-orbita $V_{s.o.}$ oraz odpychanie kulombowskie V_C protonów tak więc pełen hamiltonian ma postać:

$$H_{WS} = T + V_{WS} + V_{s.o.} + (\frac{1}{2}+\tau_z)V_C, \tag{1.5}$$

gdzie T jest operatorem energii kinetycznej, zaś rzut izospinu τ_z jest równy $+1/2$ dla protonów i $-1/2$ dla neutronów. Hamiltonian ten diagonalizujemy w bazie zdeformowanego oscylatora harmonicznego. W tym celu brano $n_p = 450$ najniżej leżących stanów protonowych i $n_n = 550$ najniższych stanów neutronowych spośród $N_{max} = 19$ pierwszych powłok oscylatorowych. Otrzymane w ten sposób spektrum protonowych i neutronowych stanów jednocząstkowych wykorzystuje się do obliczenia energii mikroskopowej (1.3).

Występujące między nukleonami oddziaływanie pairing uwzględniamy na poziomie teorii BCS [28]. Zakładamy tutaj stałe dla danego jądra natężenie (tzn. elementy macierzowe G_p i G_n dla protonów i neutronów) oraz monopolowy charakter tego oddziaływania. Przy rozwiązywaniu równań BCS uwzględniamy Z par stanów protonowych i N par stanów neutronowych (gdzie para oznacza dany stan i jego odwróconego w czasie partnera). Otrzymane rozwiązania pozwalają na obliczenie poprawki pairingowej w (1.3).

Wszystkie parametry użyte w tej pracy określające potencjał jednocząstkowy, natężenie sił pairing i energię makroskopową są równe przyjętym w obliczeniach mas [29] oraz barier rozszczepieniowych [30, 31] w aktynowcach i jądrach superciężkich. W szczególności wzięto zestaw "uniwersalnych" parametrów opisujących potencjał jednocząstkowy i natężenie pairingu $G_n = (17.67 - 13.11 \cdot I)/A$ dla neutronów i $G_p = (13.40 + 44.89 \cdot I)/A$ dla protonów ($I = (N-Z)/A$).

Obliczenia przeprowadzono w 7-wymiarowej przestrzeni parametrów kształtu uwzględniając tradycyjne deformacje kwadrupolowe β i γ, gdzie $\beta_{20} = \beta\cos\gamma$ and $\beta_{22} = \beta\sin\gamma$, deformacje heksadekapolowe $\beta_{40}, \beta_{42}, \beta_{44}$ oraz parzyste, osiowe multipole β_{60} i β_{80}. Oznacza to wzięcie pod uwagę kształtów nieosiowych natomiast bez asymetrii masowej. Prezentowane w dalszej części rozdziału powierzchnie energetyczne jąder uzyskano wykonując obliczenia na sieci równo odległych punktów (β_{20}, β_{22}) stosując krok 0.05 w obu zmiennych i minimalizując energię po pozostałych pięciu deformacjach. Należy przy tym zaznaczyć, że bariery rozszczepieniowe odczytywane z map energetycznych otrzymanych w wyniku minimalizacji (jak to robiono w tej pracy) będą generalnie niższe w porównaniu z faktycznymi punktami

siodłowymi, które mogą zostać znalezione jedynie poprzez przeszukanie wielowymiarowej sieci w przestrzeni parametrów deformacji [32, 33]. To zastrzeżenie dotyczy także wyników otrzymanych przy użyciu omawianej dalej metody samozgodnej [34], która, z definicji, bazuje na procedurze minimalizacyjnej.

1.2.2. Metoda samozgodna Hartree-Focka

U podstaw metody Hartree-Focka leży zasada wariacyjna stwierdzająca, że stan podstawowy $\Phi_{g.s.}$ minimalizuje funkcjonał energii

$$E[\Phi] = \frac{\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle}, \tag{1.6}$$

tj. zachodzi $\delta E[\Phi_{g.s.}] = 0$ [35]. W praktycznych zastosowaniach tej zasady problem wariacyjny rozwiązuje się w pewnej klasie funkcji próbnych – jeżeli stan podstawowy do niej należy to otrzymane rozwiązanie jest dokładne, w przeciwnym razie otrzymuje się funkcję najlepiej przybliżającą stan podstawowy w obrębie danej klasy. Na poziomie metody Hartree-Focka rozwiązania dla układu N-ciał poszukuje się w postaci wyznaczników Slatera (antysymetryzowanych iloczynów funkcji jednocząstkowych), problem sprowadza się więc do znalezienia N orbitali jednocząstkowych. Przy założeniu, że hamiltonian $\hat{H}$ nie zawiera oddziaływań wyższych niż dwuciałowe, minimalizacja funkcjonału (1.6) prowadzi do równań Hartree-Focka na orbitale ϕ_k [35]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \Gamma_H(x)\right)\phi_k(x) + \int dx'\Gamma_{Ex}(x,x')\phi_k(x') = \epsilon_k\phi_k(x), \tag{1.7}$$

gdzie

$$\Gamma_H(x) = \int dx' v(x,x')\sum_{j=1}^{N}|\phi_j(x')|^2 \quad \Gamma_{Ex}(x,x') = -v(x,x')\sum_{j=1}^{N}\phi_j^*(x')\phi_j(x) \tag{1.8}$$

oznaczają odpowiednio potencjał Hartree oraz potencjał wymienny, zaś x jest zbiorem współrzędnych cząstki. Możemy powyższe równania zapisać w zwartej postaci

$$\hat{h}_{HF}[\{\phi_i(x)\}]\phi_k(x) = \epsilon_k\phi_k(x), \tag{1.9}$$

w której $\hat{h}_{HF}$ oznacza samozgodny hamiltonian pola średniego. Powyższa postać łudząco przypomina równanie Schrödingera, jednak tutaj hamiltonian samozgodny sam w skomplikowany sposób zależy od rozwiązań i jest przez nie generowany. W istocie, jak wynika z postaci (1.7), równania Hartree-Focka są nieliniowymi równaniami różniczkowo-całkowymi. Rozwiązuje się je zwykle iteracyjnie zakładając w pierwszym kroku rozsądne dla danego problemu funkcje

startowe. Procedurę znajdowania rozwiązania uznaje się za zakończoną, gdy w kolejnym kroku otrzymane funkcje i wynikłe z nich pole średnie różni się odpowiednio mało (wedle zadanej miary) od uzyskanych w kroku poprzednim - mówimy, że nastąpiło samouzgodnienie, stąd też nazwa metody.

Istotnym problemem jest kwestia doboru odpowiedniego oddziaływania dwuciałowego $v(x, x')$. Po pierwsze, w odróżnieniu od np. analogicznych obliczeń w chemii kwantowej, w fizyce jądrowej dokładna postać tego oddziaływania nie jest znana. Po drugie wiadomo, że dla malejących odległości między nukleonami (poniżej pewnej wartości) staje się ono silnie odpychające (innymi słowy posiada tzw. twardy rdzeń), co jest poważną przeszkodą w numerycznym obliczaniu całek występujących w równaniach (1.7). Eliminacja twardego rdzenia wymaga z kolei wprowadzenia sił trójciałowych [36], ich uwzględnienie prowadzi jednak do bardziej złożonych i trudniejszych do rozwiązywania równań. W praktyce więc stosuje się oddziaływania efektywne z fenomenologicznie dobranymi parametrami; do najpopularniejszych należą oddziaływania typu Skyrme'a i Gogny [35].

W tej pracy posługiwaliśmy się oddziaływaniem Skyrme'a SLy6 [37]. Standardowa postać tego oddziaływania pozwala zapisać energię jądra jako całkę z gęstości energii:

$$E = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \int H(x) dx. \tag{1.10}$$

$H(x)$ można z kolei przedstawić jako sumę przyczynków do energii pochodzących od członu kinetycznego i od poszczególnych części oddziaływania Skyrme'a:

$$H = K + H_0 + H_3 + H_{eff} + H_{fin} + H_{so} + H_{sg}\ (+H_{Coul}). \tag{1.11}$$

W powyższym wzorze $K = \frac{\hbar^2}{2m}\tau$ oznacza część kinetyczną, H_0 człon zerowego zasięgu, H_3 człon gęstościowy, H_{eff} człon związany z masą efektywną, H_{fin} człon skończonego zasięgu, H_{so} człon spin-orbitalny, H_{sg} człon sprzężenia spin-gradient. Dodatkowo należy też uwzględnić odpychanie kulombowskie protonów H_{Coul}. Wymienione wyżej człony dla jąder parzysto-parzystych dają się wyrazić poprzez trzy następujące wielkości:

— gęstość nukleonową:

$$\rho_q(x) = \sum_{i,s} |\phi_{iq}(x, s)|^2 n_{iq}, \tag{1.12}$$

— gęstość kinetyczną:

$$\tau_q(x) = \sum_{i,s} |\boldsymbol{\nabla} \phi_{iq}(x, s)|^2 n_{iq}, \tag{1.13}$$

— gęstość spin-orbitalną:

$$\mathbf{J}_q(x) = \sum_{i,s,s'} \phi^*_{iq}(x, s') \boldsymbol{\nabla} \phi_{iq}(x, s) \times \langle s' | \boldsymbol{\sigma} | s \rangle n_{iq}, \tag{1.14}$$

gdzie $\phi_{iq}(x,s)$ są orbitalami jednocząstkowymi numerowanymi indeksem i, s oznacza spin nukleonu, $q = n, p$ rozróżnia neutrony i protony, zaś n_{iq} jest obsadzeniem stanu ϕ_{iq}. Odpowiednie wkłady do gęstości energii $H(x)$ wyrażone poprzez (1.12) – (1.14) mają następującą postać [37]:

$$\begin{aligned}
H_0 &= \frac{1}{4}\,t_0[(2+x_0)\rho^2 - (2x_0+1)(\rho_n^2+\rho_p^2)],\\
H_3 &= \frac{1}{24}\,t_3\rho^\alpha\,[(2+x_3)\rho^2 - (2x_3+1)(\rho_n^2+\rho_p^2)],\\
H_{eff} &= \frac{1}{8}\,[t_1(2+x_1)+t_2(2+x_2)]\tau\rho\\
&+ \frac{1}{8}\,[t_2(2x_2+1)-t_1(2x_1+1)](\tau_n\rho_n+\tau_p\rho_p),\\
H_{fin} &= \frac{1}{32}\,[3t_1(2+x_1)-t_2(2+x_2)](\boldsymbol{\nabla}\rho)^2\\
&- \frac{1}{32}\,[3t_1(2x_1+1)+t_2(2x_2+1)]\left[(\boldsymbol{\nabla}\rho_n)^2+(\boldsymbol{\nabla}\rho_p)^2\right],\\
H_{so} &= \frac{1}{2}\,W_0\,[\mathbf{J}\cdot\boldsymbol{\nabla}\rho + \mathbf{J_n}\cdot\boldsymbol{\nabla}\rho_n + \mathbf{J_p}\cdot\boldsymbol{\nabla}\rho_p]\,,\\
H_{sg} &= -\frac{1}{16}(t_1x_1+t_2x_2)\mathbf{J}^2 + \frac{1}{16}(t_1-t_2)[\mathbf{J}_n^2+\mathbf{J}_p^2].
\end{aligned} \tag{1.15}$$

W powyższych wzorach $\rho = \rho_n + \rho_p$, $\tau = \tau_n + \tau_p$, $\mathbf{J} = \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p$, natomiast t_0, t_1, t_2, t_3, x_0, x_1, x_2, x_3 ,α ,W_0 są parametrami oddziaływania Skyrme'a dopasowywanymi do danych eksperymentalnych. Widać zatem, że energia jądra (1.10) jest funkcjonałem gęstości (1.12) – (1.14), które z kolei zależą od funkcji jednocząstkowych $\phi_{iq}(x,s)$. Warunek na zerowanie się wariacji energii przy narzuceniu więzu na normalizację orbitali:

$$\frac{\delta}{\delta\phi_{iq}^*}\Big(E[\rho_{q'},\tau_{q'},\mathbf{J}_{q'}] - \sum_{k,q'}\epsilon_{kq'}\langle\phi_{kq'}|\phi_{kq'}\rangle\Big) = 0, \tag{1.16}$$

prowadzi do samozgodnych równań Skyrme-Hartree-Focka na jednocząstkowe funkcje $\phi_{iq}(x,s)$ [37]. Należy jeszcze wspomnieć, że w części kinetycznej energii odjęta jest poprawka na ruch środka masy układu:

$$K - \frac{\mathbf{P}^2}{2mA} = K - \frac{(\sum_i \mathbf{p}_i)^2}{2mA} = K - \frac{1}{2mA}\left[\sum_i \mathbf{p}_i^2 + \sum_{i\neq j}\mathbf{p}_i\mathbf{p}_j\right]. \tag{1.17}$$

Zwykle bierze się pod uwagę tylko jednociałową część tej poprawki. W stosowanym przez nas oddziaływaniu SLy6 uwzględnia się także człon dwuciałowy, co obniża wysokość otrzymywanych barier rozszczepieniowych i polepsza ich zgodność z wynikami eksperymentalnymi.

Pairing w naszych obliczeniach uwzględnialiśmy na poziomie teorii BCS, stąd też na określenie pełnej metody wykorzystywanej do obliczeń będziemy używać skrótu HFBCS (Hartree-Fock plus BCS). Równania Hartree-Focka rozwiązywano na trójwymiarowej sieci

kartezjańskiej z nałożonymi dwiema płaszczyznami symetrii. Oznacza to, że możliwe deformacje jąder mogą być zarówno nieosiowe jak i masowo asymetryczne, tak więc klasa kształtów jąder jest tutaj szersza niż w przypadku metody mikro-makro. W obliczeniach uwzględniono 180 poziomów jednocząstkowych dla neutronów i 110 stanów protonowych. W kanale cząstka-cząstka posługiwaliśmy się zależnym od stanu pairingiem indukowanym przez oddziaływanie delta o natężeniu $V_n = 316$ MeV fm^3 dla neutronów oraz $V_p = 322$ MeV fm^3 dla protonów. Gładkie obcięcie energii jednocząstkowych stosowano przy rozwiązywaniu równań BCS [38]. Pozostałe szczegóły obliczeń w metodzie HFBCS można znaleźć w [39].

Dla uzyskania powierzchni energii potencjalnej jąder równania HFBCS rozwiązywano przy narzuceniu warunków dodatkowych na wartości oczekiwane momentów kwadrupolowych:

$$\begin{aligned} Q_{20} &= < 2z^2 - x^2 - y^2 >, \\ Q_{22} &= < x^2 - y^2 >; \end{aligned} \tag{1.18}$$

nawiasy oznaczają tu średnie dla funkcji wielocząstkowej. Momenty te w przybliżeniu wiążą się z deformacjami kwadrupolowymi β i γ poprzez zależności:

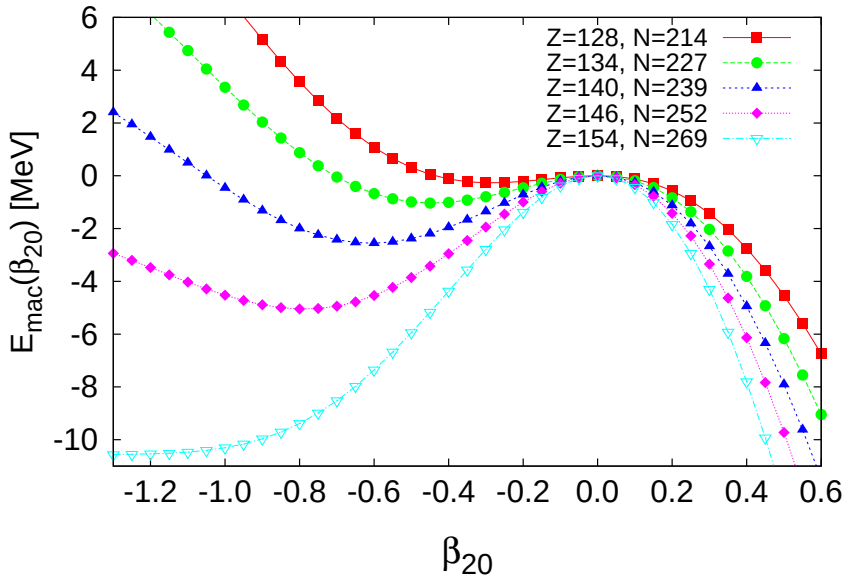
$$\begin{aligned} \beta &= \frac{\sqrt{5\pi}Q}{3r_0^2 A^{5/3}}, \\ \tan\gamma &= \frac{\sqrt{3}Q_{22}}{Q_{20}}, \end{aligned} \tag{1.19}$$

gdzie $Q = (Q_{20}^2 + 3Q_{22}^2)^{1/2}$ jest skalarnym momentem kwadrupolowym, A - liczbą masową danego układu, zaś r_0 jest parametrem związanym z promieniem jądra; będziemy przyjmować wartość $r_0 = 1.16$ fm.

1.3. Wyniki obliczeń i ich dyskusja

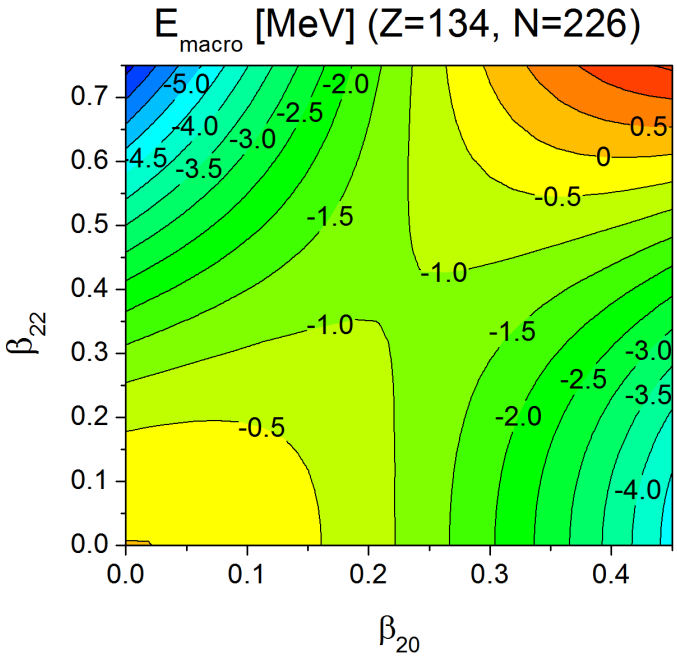
1.3.1. Energia makroskopowa

Omówimy wpierw zachowanie się części makroskopowej energii w modelu mikro-makro dla $Z > 126$. Na rysunku 1.1 pokazano przebiegi energii makroskopowej Yukawa plus exponential względem osiowo symetrycznej deformacji β_{20} dla szeregu jąder o wzrastającej liczbie atomowej Z. Liczba neutronów dla tych układów została wyznaczona z empirycznej formuły Greena $N - Z = 0.4 \cdot A^2/(A + 200)$ dla ścieżki stabilności względem rozpadu β [40]. Przede wszystkim widać, że odpychanie kulombowskie Z protonów niszczy stabilność układów superciężkich: dla dużych Z minimum sferyczne (spotykane dla lżejszych jąder) przechodzi w maksimum i to o wzrastającej stromiźnie zarówno po stronie kształtów wydłużonych jak i spłaszczonych wzdłuż osi symetrii. Przy wydłużeniu odpowiadającym $\beta_{20} = 0.6$, E_{mac} jest



Rysunek 1.1: Przebiegi energii makroskopowej $E_{mac}(\beta_{20})$ (liczonej względem wkładu makroskopowego dla sfery) dla kolejnych jąder o wzrastającej Z i wybranych tak, by leżały na linii stabilności β. [14]

mniejsza niż dla kształtu sferycznego o ok. 7 MeV dla układu $Z = 128$, $N = 214$, o ok. 9 MeV dla $Z = 134$, $N = 227$ i o ok. 11 MeV dla $Z = 140$, $N = 239$. Dla jądra $Z = 154$, $N = 269$, już przy $\beta_{20} = 0.4$ energia makroskopowa jest o 8 MeV niższa niż dla sfery. Tak silny spadek części makroskopowej ze wzrostem deformacji praktycznie wyklucza istnienie minimów w energii całkowitej dla mocno wydłużonych kształtów w tym modelu. Po stronie sferoid spłaszczonych minimum energii makroskopowej pojawia się w pobliżu $Z = 126$, jego położenie zmienia się w kierunku rosnącej deformacji wraz ze wzrostem Z, natomiast energia w tym punkcie się obniża. W okolicy $Z = 154$ następuje charakterystyczna zmiana w przebiegu tej zależności: zdeformowane minimum znika i energia staje się malejącą funkcją ze wzrostem spłaszczenia. Warto w tym miejscu wspomnieć, że podobną, jakościową zmianę w zależności całkowitej energii względem momentu kwadrupolowego mającą miejsce pomiędzy $Z = 132$ i 164 zaobserwowano również w rachunkach samozgodnych wykonanych dla siły Gogny D1S [22]. Tego typu zachowanie wskazuje, że występowanie minimów dla kształtów spłaszczonych jest raczej mało prawdopodobne przy większych Z. Co więcej, po uwzględnieniu w rachunku deformacji nieosiowej β_{22} okazuje się, że wspomniane minima są tak naprawdę punktami siodłowymi energii. Widać to na rysunku 1.2, gdzie pokazano mapę energetyczną $E_{mac}(\beta_{20}, \beta_{22})$ dla jądra $Z = 134$, $N = 226$ (oś $\gamma = 60^o$ odpowiada osiowo symetrycznym sferoidom spłaszczonym). Fakt ten sugeruje, że stabilność ewentualnych minimów w energii całkowitej będzie obniżona wskutek spadku energii makroskopowej z γ prowadzącego z kolei do obniżenia bariery rozszczepieniowej.



Rysunek 1.2: Powierzchnia energii makroskopowej liczona względem wkładu makroskopowego dla sfery $E_{mac}(\beta_{20}, \beta_{22}) - E_{mac}$(0,0) dla jądra $Z = 134$, $N = 226$. [14]

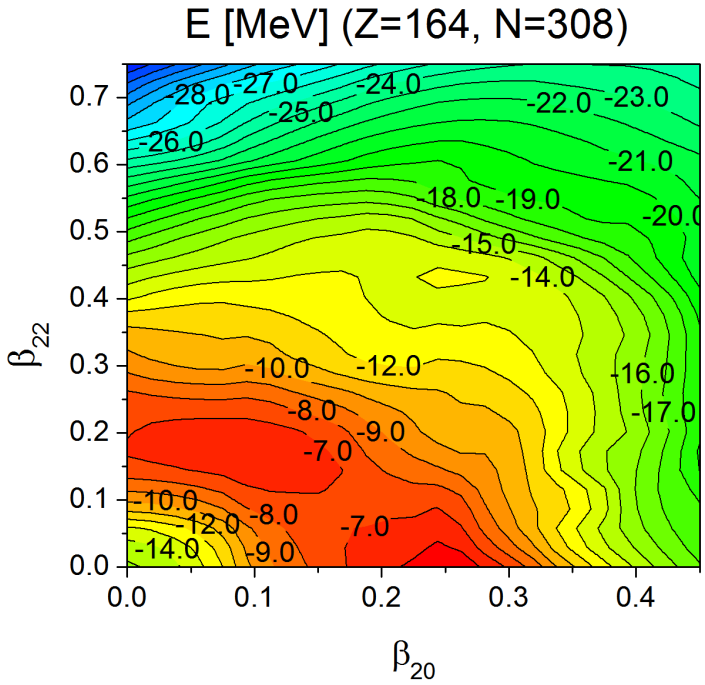
1.3.2. Poprawka powłokowa

Stabilność jądra superciężkiego będzie zależała od złożenia części makroskopowej i efektów powłokowych. Szansa na głębsze minimum pojawia się wówczas, gdy odpowiednio duża, ujemna poprawka powłokowa wystąpi w pobliżu punktu stacjonarnego energii makroskopowej tj. w sferze lub w minimum odpowiadającym kształtom spłaszczonym (rys. 1.1, 1.2). W modelu mikroskopowo-makroskopowym taka stabilizująca układ poprawka jest bezpośrednio związana z dużymi przerwami w jednocząstkowym widmie energetycznym. W przypadku potencjału Woodsa-Saxona poziomy neutronowe dla kształtu sferycznego układają się w następujący sposób: powyżej liczby magicznej $N = 184$ mamy 44 poziomy pochodzące z podpowłok $h_{11/2}$, $j_{13/2}$ i $k_{17/2}$, leżące w odległościach mniejszych od 1 MeV. Wyklucza to jakikolwiek wiążący efekt powłokowy w przedziale $N = 186 - 226$. Dopiero dla $N = 228$ pojawia się większa przerwa, > 2 MeV, dająca pewien stabilizujący efekt. Mniejsze przerwy, na poziomie ≈ 1 MeV, pojawiają się dla $N = 246$ i $N = 258$. Powyżej znów mamy kolejne trzy podpowłoki $i_{13/2}$, $l_{19/2}$ i $k_{15/2}$ (razem 50 stanów) o wysokiej gęstości poziomów, tak więc następna przerwa energetyczna wynosząca ≈ 3 MeV występuje przy $N = 308$. Wynika stąd, że dla pośrednich liczb neutronów nie należy się spodziewać głębokich minimów w energii, które zapewniałyby dostateczną stabilność układu dla kształtu sferycznego. W widmie protonowym sferycznego potencjału WS występuje ≈ 2 MeV przerwa energetyczna dla $Z = 114$, brak jest przerwy dla $Z = 126$, następnie niewielka przerwa ≈ 1 MeV jest widoczna przy $Z = 138$, a kolejna znacząca przerwa wynosząca ≈ 2.5 MeV pojawia się dla $Z = 164$.

Sferyczne spektrum dla średniego pola wynikającego z oddziaływania SLy6 [41] wykazuje podobną charakterystykę dla neutronów: widoczne są duże, ≈ 3 MeV przerwy energetyczne dla $N = 184$, 228 i 308 i mniejsza, ok. 1.4 MeV dla $N = 246$. W widmie protonowym ≈ 2 MeV przerwa występuje dla $Z = 126$ (nie ma jej w potencjale WS), a następnie dla 138 i 164. Choć w przypadku modeli samozgodnych przerwy energetyczne nie są tak bezpośrednio związane z występowaniem głębszych minimów w energii układu, to jednak powyższe obserwacje wskazują na możliwe konfiguracje protonowo-neutronowe, spośród których część może wykazywać zwiększoną stabilność.

Poprawki powłokowe dla kształtu sferycznego, które obliczyliśmy z potencjału Woodsa-Saxona dla układów o $Z \geq 128$ (podobne wyniki otrzymano w [42]) wykazują zbliżoną zależność od liczb Z i N, jak poprawki wyekstrahowane z rachunków samozgodnych dla siły SLy6 opublikowane w [41]. Największa, ujemna poprawka powłokowa występuje dla układu $Z = 164$, $N = 308$ (15.5 MeV) oraz dla $Z = 164$, $N = 228$ (12.6 MeV). W pierwszym przypadku za efekt powłokowy odpowiedzialna jest przede wszystkim liczba neutronowa $N = 308$: pomiędzy $Z = 126$ i $Z = 190$ poprawka wynosi powyżej 9 MeV, ale zanika już przy obniżeniu liczby neutronów do $N = 298$. Drugi z wymienionych układów jest niestabilny ze względu na emisję protonu: energia jednocząstkowa ostatniego zajętego orbitalu protonowego jest wysoka i wynosi 5.5 MeV. Należy się także spodziewać niestabilności takiego jądra ze względu na rozpad α: dla pobliskiego układu o $Z = 164$, $N = 246$ wyznaczona energia rozpadu Q_α wyniosła 22 MeV, co wg formuły Royera [43] oznacza czas życia ok. 10 ps. Poza dwoma wymienionymi przypadkami, wzrost efektu powłokowego osiągający 5 MeV zaobserwowano w obszarze wokół $Z = 128$ i $N = 246 - 258$, jądra takie leżą jednak daleko od linii stabilności β. Umiarkowana, ujemna poprawka wynosząca ok. 4 MeV widoczna jest także dla $N = 228 - 240$, $Z = 128 - 140$.

Powyższe wyniki dotyczące widm jednocząstkowych i poprawek powłokowych w obu modelach tj. mikro-makro z potencjałem WS oraz samozgodnym z oddziaływaniem SLy6 sugerują układ o $Z = 164$ i $N = 308$ jako kolejne, potencjalne jądro podwójnie magiczne, po $Z = 114$ (WS) lub $Z = 126$ (SLy6) i $N = 184$. Samozgodny rachunek powierzchni energetycznej dla tego jądra wymagałby wzięcia większej liczby funkcji falowych, niż używaliśmy w obliczeniach prezentowanych w tej pracy, poprzestajemy więc na pokazaniu mapy otrzymanej w modelu mikro-makro – rysunek 1.3. Widać tutaj, że bardzo duża, ujemna poprawka powłokowa (15.5 MeV) skutkuje powstaniem głębokiego na 8 MeV minimum sferycznego w powierzchni energii całkowitej. W kolejnym podrozdziale podamy oszacowania czasu życia ze względu na rozszczepienie spontaniczne i rozpad α dla tego jądra. Warto dodać, że niedawne rachunki wykonane w modelu relatywistycznym [23, 24] również wskazują na zwiększoną stabilność jąder w tym obszarze – dla jądra o $Z = 156$ i $N = 310$ stanowiącego centrum tej wyspy otrzymano minimum sferyczne głębokie na 11 MeV.



Rysunek 1.3: Mapa energetyczna dla jądra $^{472}164$ (liczona względem energii makroskopowej w sferze) uzyskana w modelu mikro-makro z potencjałem Woodsa-Saxona. [14]

1.3.3. Bariery rozszczepieniowe i oszacowania stabilności

Zanim przejdziemy do przedstawienia i dyskusji wyników uzyskanych dla interesującego nas obszaru $Z \geq 128$ warto wspomnieć, jakie rezultaty otrzymuje się dla jąder lżejszych tj. aktynowców i układów transfermowych. Systematyczne obliczenia wykonane w modelu mikro-makro z potencjałem WS prowadzą do dobrego odtworzenia barier w parzysto-parzystych aktynowcach (wyniki opublikowane w [30] dla pierwszych i w [31] dla drugich barier). W przypadku oddziaływania SLy6 rezultaty otrzymane w rachunku osiowo symetrycznym dla drugich barier w aktynowcach [44] okazują się przeszacowane o ok. 2-3 MeV (przy czym nie spodziewamy się, by nieosiowość grała tutaj istotną rolę). Po uwzględnieniu trójosiowości dla kilku izotopów uranu i plutonu otrzymuje się pierwsze bariery, które są wyższe o ≈ 2 MeV w stosunku do oszacowań eksperymentalnych. Podobne wyniki uzyskuje się dla oddziaływania SkM* również często używanego w obliczeniach barier rozszczepieniowych [45]. W obszarze jąder transfermowych siła SLy6 przy narzuceniu osiowej symetrii prowadzi do barier wyższych niż model z potencjałem WS, wiele z nich osiąga ok. 10 MeV [44]. Okazuje się, że uwzględnienie nieosiowości prowadzi do redukcji wysokości bariery o ok. 1.5-2.5 MeV. Porównanie rezultatów modelu WS (z właczoną nieosiowością) z wynikami dla siły SLy6 (bez i z nieosiowością) przedstawiono dla kilku wybranych jąder w tabeli 1.1. Widać tutaj, że uwzględnienie nieosiowości zredukowało rozbieżność między wynikiem WS i SLy6 do $\sim 2-3$ MeV. Największa różnica pojawia się w pobliżu $Z = 126$, gdzie bariery wynikające z modelu WS są wyraźnie mniejsze z powodu braku protonowej

Z	N	WS	SLy6(nax)	SLy6(ax)
114	178	6.34	6.7	8.6
118	178	6.04	7.8	10.4
126	180	3.38	6.2	10.7

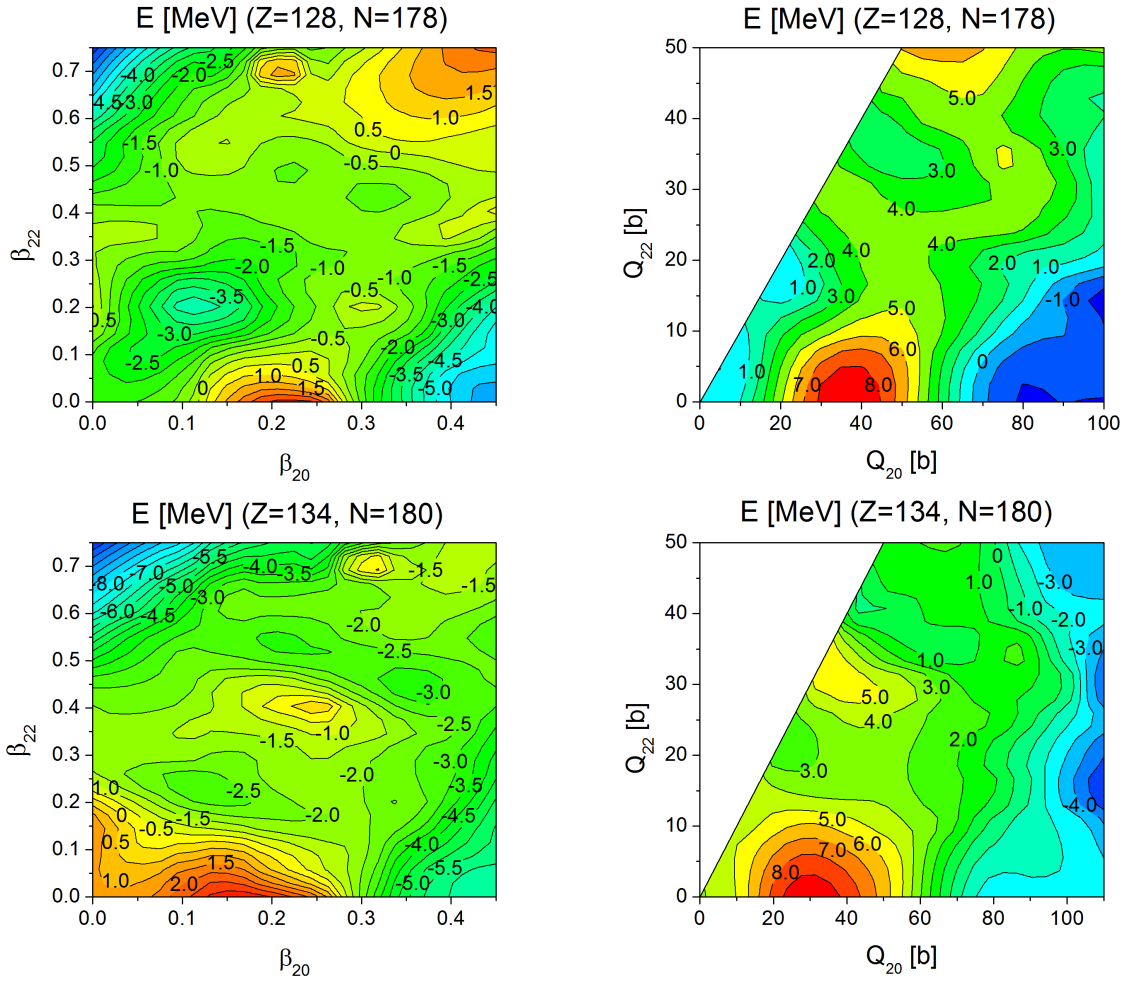
Tabela 1.1: Porównanie barier rozszczepieniowych (w MeV) obliczonych w modelach z potencjałem WS (rachunek nieosiowy) i z oddziaływaniem SLy6 w rachunku osiowym (ax) oraz nieosiowym (nax)). [14]

przerwy energetycznej. Warto też wspomnieć, że oszacowania eksperymentalne dolnej granicy na barierę dla jąder transfermowych [46] są nieco wyższe od otrzymanych w obliczeniach mikro-makro z potencjałem WS [30], co może oznaczać, że wyniki dawane w rachunkach z siłą SLy6 przybliżają się nieco do eksperymentalnych, w miarę przechodzenia z obszaru aktynowców do jąder o $Z > 100$.

W naszych obliczeniach wykonanych w modelu samozgodnym HFBCS z siłą SLy6 oraz mikro-makro z potencjałem WS uzyskano powierzchnie energetyczne dla 46 jąder w zakresie $Z = 128 - 148$ i $N = 174 - 256$, większość dla $Z = 128, 134, 138, 140, 142$. Jako że wiele spośród tych układów nie wykazuje śladów stabilności, nie wykonywaliśmy obliczeń dla każdego z nich. Wyboru interesujących jąder dokonywaliśmy na podstawie wysokości barier: rzadsze próbkowanie (co ok. 8-10 neutronów) wykonywano w obszarach gdzie bariery wynosiły < 2 MeV, zaś więcej jąder braliśmy do obliczeń w otoczeniu układów wykazujących bariery ≥ 2 MeV. Przez barierę w tej pracy rozumiemy różnicę energii między punktem siodłowym, a punktem minimum bez żadnych dodatkowych poprawek. Przykłady otrzymanych map energetycznych dla wybranych jąder pokazano na rysunkach 1.4, 1.5 i 1.6. Każdej powierzchni obliczonej metodą HFBCS z oddziaływaniem SLy6 towarzyszy jej odpowiednik uzyskany w modelu mikro-makro z potencjałem WS. W tabeli 1.2 zestawiono deformacje stanów podstawowych i wysokości barier interpolowane na podstawie uzyskanych map energetycznych.

Wyniki obliczeń HFBCS wskazują na istnienie umiarkowanych minimów w pobliżu liczby neutronów $N = 180$ oraz dla $N \gtrsim 228$. Pierwszy obszar jest kontynuacją tego, co zaobserwowano już dla jąder superciężkich o $Z \approx 120$, w szczególności widać tu wpływ liczby magicznej $N = 184$, co objawia się barierami wyższymi niż 2.5 MeV dla $N \leq 184$. Podobnie uwidacznia się wpływ zamknięcia powłoki protonowej dla $Z = 126$, przekroczenie tej liczby powoduje istotne obniżenie bariery, która przykładowo dla jądra $^{306}126$ wynosi 6.2 MeV, zaś dla jądra $^{308}128$ spada do 4.6 MeV. Drugi wspomniany region, dla $N \geq 228$, związany jest z występowaniem 3 MeV przerwy energetycznej w widmie neutronowym.

W modelu HFBCS dla jądra $^{306}128$ minima obecne są dla kształtów sferycznych, spłaszczonych ($Q \approx 40$ b) i mocno spłaszczonych ($Q \approx 80$ b, $\beta \approx 0.57$, *ang. superdeformed oblate* -



Rysunek 1.4: Mapy energetyczne jąder. *Po lewej:* powierzchnie uzyskane w modelu mikroskopowo-makroskopowym z potencjałem Woodsa-Saxona, liczone względem energii makroskopowej dla kształtu sferycznego (poziomice co 0.5 MeV). *Po prawej:* powierzchnie wyliczone w samozgodnym modelu HFBCS z siłą SLy6 względem energii stanu podstawowego (ewentualne wartości poniżej zera są skutkiem interpolacji) – poziomice co 1.0 MeV. [14]

SDO) – rys. 1.4. Podobne struktury widać na mapie dla jądra $^{314}134$, przy czym tutaj minimum SDO ($Q \approx 80$ b) staje się tym najgłębszym. Jak widać z otrzymanych powierzchni (rys. 1.4) bariery rozszczepieniowe w tym regionie zanikają dość szybko ze wzrostem Z: ich wysokość zmienia się od wartości 4.3 MeV dla sferycznego minimum dla $^{306}128$, do raptem 1 MeV dla minimum SDO w jądrze $^{314}134$. Wpływ nieosiowości w obu tych jądrach jest drastyczny: bariery wzdłuż osi prolate po uwzględnieniu kształtów trójosiowych zostają zredukowane o ≈ 5 MeV. Przykładowo, bez nieosiowości bariera w jądrze $^{306}128$ wynosiłaby niemal 10 MeV. Podobny wpływ tej deformacji obserwowano również w innych jądrach z tego regionu.

W wynikach uzyskanych z modelu mikro-makro nie występują minima sferyczne, niewielkie minima pojawiają się tylko przy kształtach osiowych, umiarkowanie spłaszczonych, są one jednak płytsze niż w modelu HFBCS z oddziaływaniem SLy6. Jest to następstwo nieobecności protonowej liczby magicznej $Z = 126$ w widmie potencjału WS. Z tego samego powodu już

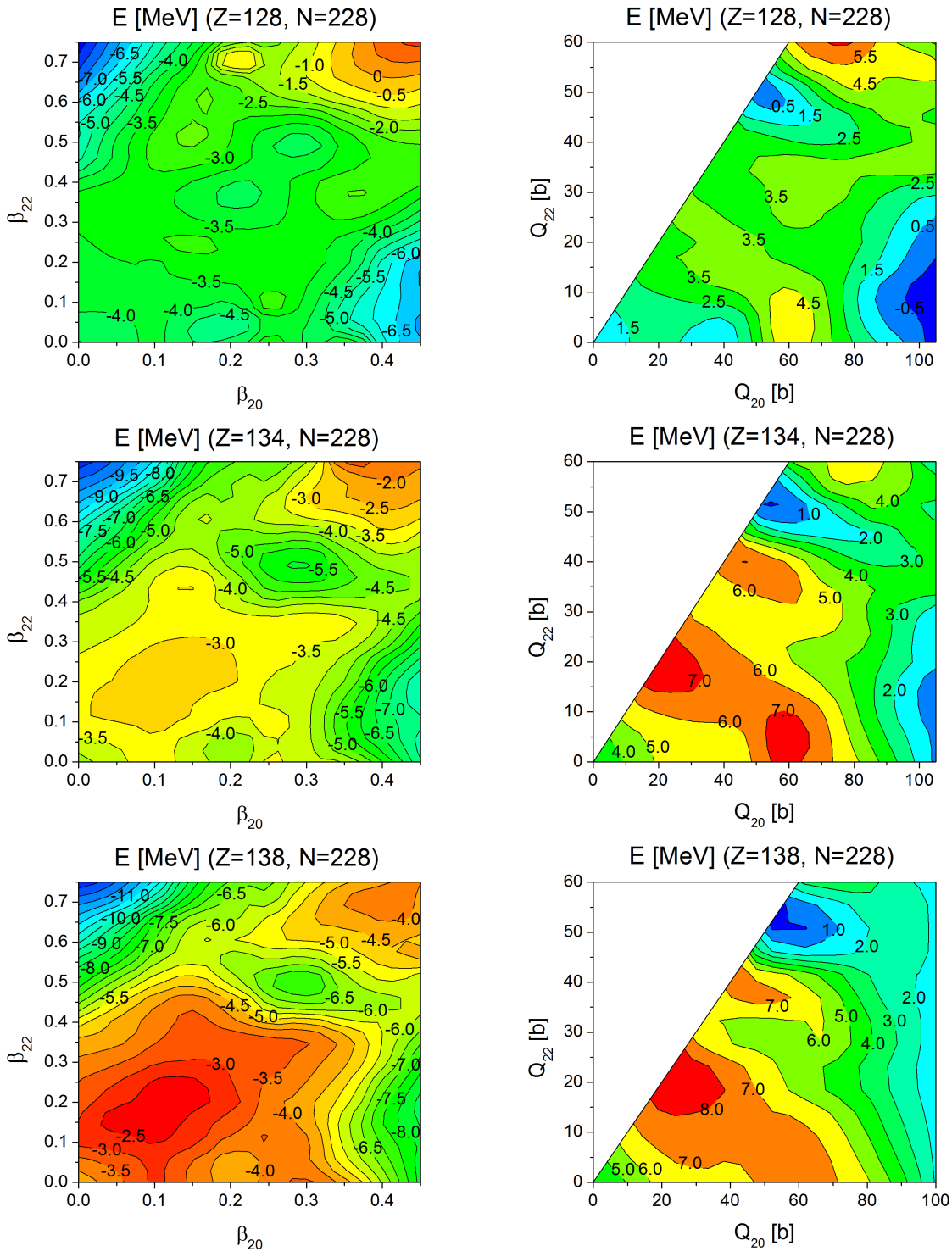
dla jąder o $Z \geq 120$ faworyzowane były kształty spłaszczone [19]. Spadek wysokości barier ze wzrostem Z jest tak samo wyraźny jak w rachunku samozgodnym: od 3.2 MeV w ^{306}128 do 1 MeV dla ^{314}134 (rys. 1.4).

Jądra z omawianego obszaru tj. $Z \geq 128$ i $N \approx 184$ są niestabilne ze względu na rozpad α. Energia rozpadu $Q_\alpha = 17.2$ MeV obliczona dla przejścia $^{310}130 \rightarrow ^{306}128$ (ze stanu podstawowego w stan podstawowy) oznacza wg [43] czas życia na poziomie $\log T_\alpha[s] = -10.08$. Należy się również spodziewać niestabilności ze względu na emisję protonową (energie ostatniego, zajętego orbitalu protonowego są w zakresie $2 - 3.5$ MeV), jednak wobec tak krótkich czasów T_α jest to drugorzędny kanał rozpadu. Bardzo szybki rozpad α czyni ten obszar jąder nieinteresującym z eksperymentalnego punktu widzenia.

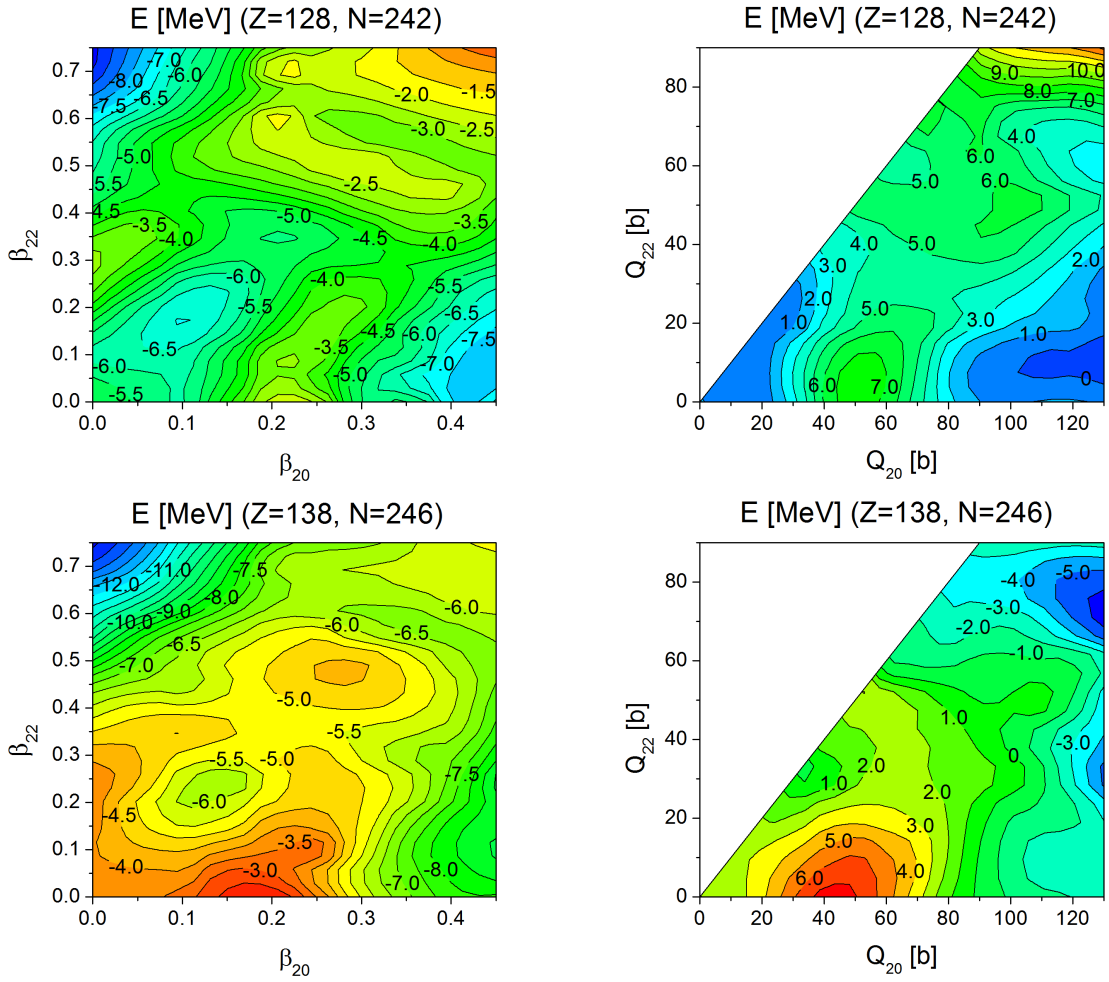
W drugim wspomnianym regionie (układy o $N \geq 228$), podwyższona stabilność względem rozszczepienia w rachunkach HFBCS jest związana z obecnością minimów sferycznych (lub lekko zdeformowanych) oraz SDO ($\beta \approx 0.55$) – rysunek 1.5. W niektórych przypadkach dla $N \approx 228$ studnia sferyczna jest względnie płaska rozciągając się w kierunku kształtów lekko wydłużonych, co prowadzi czasem do współistnienia tych dwóch stanów równowagowych, jak w przypadku układu ^{356}128. Minima oblate o $\beta \approx 0.32$ znaleziono dla jąder $Z = 134$, $N = 242$ i $Z = 138$, $N = 246$ – powierzchnię tego ostatniego pokazano na rysunku 1.6. Będą one jednak mniej stabilne ze względu na krótszą barierę. Należy podkreślić, że stan podstawowy wszystkich trzech jąder pokazanych na rysunku 1.5 ma deformację SDO, mimo że może on być mniej stabilny niż stan wzbudzony występujący w minimum sferycznym. Bariera dla minimum SDO w jądrach o $N = 228$ zmniejsza się dla większych Z: 3.7 MeV w ^{356}128 i 4.2 MeV w ^{362}134, 3.3 MeV w ^{366}138, natomiast w jądrze ^{370}142 pozostaje już tylko niewielki ślad po minimum. Z kolei minimum sferyczne wykazuje z grubsza stałą barierę o wysokości ≈ 3 MeV dla wszystkich tych jąder i nawet dla cięższego układu ^{374}146 wynosi ona wciąż 2.4 MeV. Jest to efekt przerwy energetycznej występującej dla $N = 228$.

Listę jąder z obliczonymi barierami wyższymi niż 2 MeV prezentuje tabela 1.2. Widać tutaj, że izotopy jąder pokazywanych na rysunku 1.5 o liczbie neutronowej $N = 226$ mają zbliżone lub lekko mniejsze bariery w porównaniu z jądrami o $N = 228$. Natomiast już dla liczby $N = 220$ otrzymane bariery miały wysokość poniżej 1.5 MeV. Z kolei dla $N > 228$, bariery wynoszące nieco ponad 4 MeV uzyskano w jądrach $Z = 128$, $N = 236$ i 242. Nie znaleziono natomiast śladów stabilności dla jeszcze cięższych układów: $Z = 142$, $N = 242$, $Z = 146, N = 252$ i $Z = 148, N = 256$.

W modelu mikroskopowo-makroskopowym z potencjałem WS otrzymane minima w obszarze $N \gtrsim 228$ są płytsze, ich głębokość nie przekracza 2.5 MeV. Odpowiadają one z grubsza tym samym deformacjom, co w przypadku modelu HFBCS, choć nie zawsze w dokładnie tych samych jądrach. Jak widać z rys. 1.5, w jądrze ^{356}128 minimum praktycznie nie istnieje, w ^{362}134 widoczne jest minimum SDO głębokie na 2.0 MeV, natomiast w układzie ^{366}138 obecne



Rysunek 1.5: Mapy energetyczne – kontynuacja rysunku 1.4; jądra o N=228. [14]



Rysunek 1.6: Mapy energetyczne – kontynuacja rysunku 1.4; jądra o $N > 228$. [14]

jest minimum SDO oraz sferyczne o głębokości odpowiednio 1.7 i 1.5 MeV. Podobieństwo w deformacjach minimów uzyskanych w modelu mikro-makro oraz samozgodnym HFBCS widać na rysunkach 1.5, 1.6 oraz w tabeli 1.2, gdzie porównano rezultaty dawane przez obie metody.

Otrzymane wyniki wskazują, że tylko model samozgodny z oddziaływaniem SLy6 przewiduje niewielki wzrost stabilności dla niektórych jąder w zbadanym przez nas obszarze $Z - N$. Ponieważ nie dysponujemy parametrem masowym dla tego modelu, w celu (bardzo zgrubnego) oszacowania czasów życia na rozszczepienie spontaniczne posłużymy sie parametrem cranking z modelu Woodsa-Saxona. Znając przebieg bariery energetycznej i parametr masowy wzdłuż trajektorii rozszczepienia, czas życia T_{sf} obliczamy wg formuł (2.11) i (2.15), przyjmując energię drgań zerowych $E_{zp} = 0.5$ MeV. Jako przykład wybraliśmy jądro $^{362}134$ (rys. 1.5). Dla minimum sferycznego policzono działanie wzdłuż osi β_{20} przycinając wierzchołek bariery osiowej do wysokości nieosiowego siodła i przyjmując stały parametr masowy $B_{eff} = 700\hbar^2$/MeV (wartość minimalna wyliczona wzdłuż trajektorii). W rezultacie otrzymuje się $\log T_{sf}$ [s]≈ -6. W przypadku minimum SDO można się spodziewać na podstawie powierzchni energetycznej, że rozszczepienie będzie przebiegało głównie wzdłuż ścieżki o z grubsza

Z	N	Q_{20}	Q_{22}	β	β_{20}	β_{22}	$B(SLy6)$	β_{20}^{WS}	β_{22}^{WS}	$B(WS)$
128	174	16.9	16.4	0.24	0.12	0.21	3.6	0.11	0.18	3.0
128	178	1.9	1.8	0.03	0.01	0.02	4.3	0.11	0.20	3.5
128	180	0.9	0.9	0.01	0.01	0.01	4.6	0.12	0.20	2.9
130	180	20.6	20.0	0.28	0.14	0.24	3.0	0.12	0.21	2.4
132	180	21.6	21.8	0.30	0.15	0.26	2.2			
128	182	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	4.7	0.12	0.20	2.2
128	184	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	4.2			
132	184	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	2.1			
128	186	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	2.4			
128	212	60.7	36.5	0.52	0.36	0.37	2.1			
128	224	50.5	49.2	0.55	0.28	0.48	2.5			
128	226	50.5	49.2	0.55	0.28	0.47	2.8			
132	226	52.5	50.9	0.56	0.29	0.48	3.5			
134	226	51.1	50.6	0.55	0.28	0.47	4.2			
128	228	51.1	50.6	0.56	0.28	0.48	3.7			
130	228	51.1	50.6	0.55	0.28	0.48	4.2			
132	228	52.0	51.6	0.56	0.28	0.48	4.3			
134	228	52.0	51.6	0.55	0.28	0.48	4.2	0.28	0.48	2.0
138	228	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	3.4^{*} (3.3^{obl})			
142	228	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	2.9			
146	228	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	2.4			
128	230	54.3	50.9	0.56	0.30	0.48	3.0^{*} ($2.7^{sph-prol}$)			
130	230	54.4	52.7	0.57	0.29	0.49	3.5			
128	236	18.8	0.0	0.10	0.10	0.00	4.1	0.08	0.13	2.3
134	236	9.4	0.0	0.05	0.05	0.00	2.5^{*} (1.9^{nax})			
138	236	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	3.0^{*} (2.0^{obl})			
142	236	0.0	0.0	0.00	0.00	0.00	2.8^{*} (2.0^{obl})			
128	242	17.0	16.5	0.17	0.09	0.15	4.4	0.10	0.17	2.5
134	242	32.0	31.2	0.31	0.16	0.27	3.0^{*} (0.9^{obl})			
138	246	33.9	33.1	0.32	0.16	0.28	2.4			

Tabela 1.2: Zestawienie wyników obliczeń. Dla jąder o danych Z i N, uporządkowanych wg wzrastającej liczby neutronowej podano kolejno: momenty kwadrupolowe Q_{20}, Q_{22} (w barnach) stanu podstawowego, wynikające z nich deformacje β, $\beta_{20} = \beta\cos\gamma$, $\beta_{22} = \beta\sin\gamma$ (wyznaczone z formuły (1.19)), bariery rozszczepieniowe $B(SLy6)$ [MeV] uzyskane w modelu HFBCS z siłą SLy6, a następnie deformacje β_{20}^{WS}, β_{22}^{WS} i bariery $B(WS)$ [MeV] wyliczone w modelu mikro-makro z potencjałem Woodsa-Saxona. Uwzględniono jedynie bariery $\geq$2 MeV. Gwiazdka (*) oznacza barierę dla minimum wzbudzonego, gdy jest ona wyższa od bariery stanu podstawowego (którą w takich przypadkach podano w nawiasach z oznaczeniem deformacji dla stanu podstawowego).[14]

stałym promieniu β (a więc poprzez kształty nieosiowe parametryzowane przez γ). Biorąc znów stały parametr masowy na poziomie 450 $\hbar^2$/MeV (mniejszy niż średnia wartość $B_{\gamma\gamma}$ na tej trajektorii), dostajemy $\log T_{sf}[s] \approx -7$. Uzyskane zgrubne oszacowania czasu życia na rozszczepienie na poziomie $T_{sf} = 1$ μs oraz brak znaczących barier rozszczepieniowych w całym badanym obszarze sugerują, że nie należy się tu spodziewać istnienia układów parzysto-parzystych żyjących dostatecznie długo z eksperymentalnego punktu widzenia.

Inne kanały rozpadu wydają się w tym kontekście mniej istotne dla jąder z okolic $N \approx 228$. Q_α na poziomie 9.5 MeV otrzymane dla przejścia $^{358}130 \rightarrow ^{354}128$ z minimum sferycznego do sferycznego (stan wzbudzony $\rightarrow$ stan wzbudzony) oraz $Q_\alpha = 11.9$ MeV dla $^{362}134 \rightarrow ^{358}132$ z minimum SDO do SDO (stan podst. $\rightarrow$ stan podst.) oznaczają wg formuły Royera [43] czasy życia odpowiednio $\log(T_\alpha[\mathrm{s}]) = 6.27$ i 0.38. Z kolei można się spodziewać, że rozpad α z minimum SDO w jądrze pierwotnym do sferycznego w jądrze-córce będzie silnie wzbroniony ze względu na dużą różnicę w konfiguracji obu stanów. Powyższe oszacowania, położenie tych jąder w pobliżu linii stabilności β oraz dodatnie energie separacji protonów i neutronów wskazują, że istotnie rozszczepienie spontaniczne jest tutaj głównym kanałem rozpadu.

W obszarze jąder $Z = 128 - 140$ o pośrednich liczbach neutronowych $N = 192 - 220$ nie znaleziono żadnych wyraźnych minimów – tylko dla jednego układu uzyskano w metodzie HFBCS barierę nieco ponad 2 MeV (tabela 1.2). Podobnie model z potencjałem Woodsa-Saxona nie przewiduje w tym zakresie żadnych układów o podwyższonej stabilności.

Dla porównania oceniliśmy też stabilność podwójnie magicznego (wg potencjału WS) układu $^{472}164$ wspomnianego w poprzedniej sekcji. Czas życia na rozszczepienie oszacowaliśmy po drodze wzdłuż β_{20}, ponownie ze stałym parametrem masowym $B_{eff} = 700\hbar^2$/MeV (wartość minimalna obliczona wzdłuż trajektorii) i redukując wysokość bariery osiowej do poziomu energii w nieosiowym punkcie siodłowym. W rezultacie otrzymano wartość $\log T_{sf}[s] \approx 7$, którą przy podanych założeniach można uważać za oszacowanie dolnego ograniczenia na rozszczepieniowy czas życia. Widać, że jest to czas istotnie dłuższy w porównaniu z rozważanymi przez nas lżejszymi układami. Dla rozpadu α z minimum sferycznego do minimum sferycznego w jądrze potomnym otrzymuje się $Q_\alpha = 14.3$ MeV, co poprzez formułę Royera [43] tłumaczy się na czas życia $\log T_\alpha[s] = 1.94$, skąd widać, że będzie to kanał rozpadu ograniczający stabilność tego jądra.

1.4. Wnioski i podsumowanie

Rezultaty przedstawionych obliczeń i wynikające z nich przewidywania dla jąder o $Z > 126$ można podsumować następująco:

1. Otrzymane powierzchnie energetyczne dla jąder z zakresu $128 \leq Z \leq 148$ w modelu HFBCS z oddziaływaniem Skyrma SLy6 oraz w modelu mikro-makro z potencjałem

Woodsa-Saxona wykazują spore podobieństwo co do obszarów występowania głębszych minimów oraz odpowiadających im kształtów: sferycznych, oblate i SDO. Jednak jedynie model samozgodny z siłą SLy6 przewiduje umiarkowany wzrost stabilności w dwóch rejonach: $Z = 128$, $N \approx 180$ oraz w $Z = 128$-142, $N \gtrsim 228$, dając bariery rozszczepieniowe sięgające odpowiednio $\approx$ 4.5 MeV i 4-4.5 MeV. Jądra z pierwszego obszaru są niestabilne ze względu na rozpad α. W obszarze drugim rozszczepienie spontaniczne jest najszybszym procesem ograniczającym stabilność jąder – zgrubne oszacowanie czasów życia daje ok. 1 μs dla jąder parzysto-parzystych.

2. Bariery otrzymane z oddziaływaniem SLy6 są do 2.5 MeV wyższe od barier wynikających z modelu mikro-makro i potencjału Woodsa-Saxona. Jest to różnica podobna jak dla lżejszych jąder tj. aktynowców i regionu transfermowego, gdzie, jak wiadomo, SLy6 przeszacowuje wysokości barier. Stąd też otrzymane tutaj wyniki z użyciem tego oddziaływania mogą być uważane za rodzaj górnego ograniczenia na stabilność rozważanych jąder.
3. Uwzględnienie kształtów nieosiowych jest kluczowe dla wiarygodnego oszacowania barier rozszczepieniowych w badanym zakresie $Z - N$; w niektórych przypadkach włączenie trójosiowości redukuje bariery o więcej niż połowę.
4. Oba używane w pracy modele nie przewidują stabilności dla jąder o pośrednich liczbach neutronowych $186 \leq N \leq 224$.
5. Zachowanie energii makroskopowej Yukawa-plus-exponential praktycznie wyklucza minima dla kształtów wydłużonych (prolate) w badanym obszarze oraz czyni mało prawdopodobnym występowanie minimów oblate dla $Z > 154$.
6. Sferyczne widma dla protonów i neutronów oraz poprawki powłokowe w obu modelach sugerują układ o $Z = 164$ i $N = 308$ jako kolejne jądro podwójnie magiczne. Oszacowane czasy życia na rozszczepienie spontaniczne i rozpad α wynoszą odpowiednio 10^7 i 100 s.

Jeśli przewidywania modelu z oddziaływaniem SLy6 są bliższe prawdzie dla najcięższych jąder (jeśli np. rzeczywiście istnieje protonowa przerwa energetyczna przy $Z = 126$), to niektóre z jąder o $N \gtrsim 228$ żyłyby na tyle długo, by mogły być obserwowane w eksperymencie. Niestety uzyskanie potrzebnej nadwyżki neutronów do protonów w takich jądrach dalece wykracza poza obecne możliwości eksperymentalne. Tym bardziej trudno myśleć o laboratoryjnej syntezie przewidywanego jądra podwójnie magicznego $^{472}164$ w kontekście doboru odpowiedniego pocisku i tarczy. Tak ciężkie układy, jeśli faktycznie wykazują podwyższoną stabilność, formują się prawdopodobnie jedynie w specyficznych scenariuszach kosmicznych takich jak zderzenia gwiazd neutronowych [13]. Stąd też generalny obraz wyłaniający się z przedstawionych tu rachunków dotyczący stabilności i możliwości eksperymentalnego uzyskania jąder o $Z > 126$ jest raczej pesymistyczny.

Warto podkreślić, że przedstawione tu obliczenia były pierwszymi uwzględniającymi w sposób systematyczny deformacje łamiące osiową symetrię w obszarze $Z > 126$ – wyniki

zostały opublikowane w [14]. Jak pokazują nasze rachunki, nieosiowe stopnie swobody są kluczowe dla wiarygodnego oszacowania wysokości barier rozszczepieniowych w badanym rejonie $Z - N$ i ich pominięcie będzie często skutkowało zawyżonymi barierami. Wcześniejsze obliczenia z użyciem oddziaływania Gogny [47] wykonane zostały w większości przy ograniczeniu się do osiowej symetrii i nieosiowość uwzględniono jedynie w kilku przypadkach. Autorzy [47] zwracają uwagę, że włączenie nieosiowości drastycznie redukuje bariery lub wręcz pokazuje, że minimum widoczne w rachunku osiowym jest tak naprawdę punktem siodłowym. W zakresie przewidywanych obszarów podwyższonej stabilności i deformacji stanu podstawowego wyniki dla oddziaływania Gogny są zbliżone do naszych. Pozostałe opublikowane wówczas obliczenia dla $Z > 126$ dotyczyły głównie przewidywań sferycznych poprawek powłokowych [41, 42] oraz stanów podstawowych [48] przy ograniczeniu się do uboższej klasy kształtów w porównaniu z przedstawionym tu rachunkiem. Wyniki badań dla najcięższych jąder przeprowadzone w ramach modelu relatywistycznego z funkcjonałem energii DD-PC1 opublikowano niedawno w [23, 24]. Przewidywania tego rachunku odnośnie występowania minimów, odpowiadających im kształtów i zachowania się barier w miarę wzrostu Z są zbliżone do naszych. Autorzy [23, 24] zastosowali szerszy zakres deformacji w rachunku osiowo symetrycznym uzyskując najgłębsze minima dla bardziej egzotycznych, toroidalnych kształtów (niebadanych w ramach niniejszej pracy) dla $Z \geq 130$ – jeśli byłyby one stabilne, to odpowiadałyby stanom podstawowym tych jąder. Wiarygodna ocena stabilności tego typu kształtów wymaga jednak wzięcia pod uwagę nieosiowych stopni swobody oraz dodatkowych kanałów rozpadu takich jak multifragmentacja.

Na koniec należy zaznaczyć, że powyższy rachunek ogranicza się do jąder parzysto-parzystych. Nieco wyższych barier rozszczepieniowych i czasów życia można się spodziewać dla układów nieparzystych/nieparzysto-nieparzystych, co oznacza, że przynajmniej niektóre jądra z obszaru $N \gtrsim 228$ mogłyby osiągać czasy życia powyżej progu detekcji obecnych eksperymentów (pozostaje oczywiście problem uzyskania w reakcji układu o tak wysokim izospinie). Oszacowania stabilności dla jąder z niesparowanymi nukleonami są jednak bardziej skomplikowane i obarczone dodatkowymi trudnościami – problemom tym poświęcona jest dalsza część pracy.

2. Teoretyczny opis procesu rozszczepienia spontanicznego – w tym jąder nieparzystych

2.1. Wstęp

Rozszczepienie spontaniczne jest w fizyce jądrowej jednym z podstawowych kanałów rozpadu ograniczającym stabilność jąder atomowych. Z punktu widzenia mechaniki kwantowej rozszczepienie spontaniczne ma charakter kolektywnego tunelowania kwantowego, tj. takiego, w którym biorą udział wszystkie nukleony tworzące jądro, stąd też można się spodziewać, że opis jego dynamiki powinien być możliwy przy pomocy odpowiednio dobranych współrzędnych kolektywnych $\{q_i\}$. Najprostszego opisu zjawiska dostarcza model kroplowy, w którym jądro traktujemy jako kroplę naładowanej cieczy. Jej początkowy kształt odpowiadający stanowi metastabilnemu jądra ulega stopniowej deformacji (co na poziomie kwantowomechanicznym związane jest z tunelowaniem przez barierę potencjału), aż w końcu kropla rozszczepia się na dwa niezależne fragmenty. Model ten sugeruje, że jako zmienne kolektywne można wybrać parametry opisujące kształt rozszczepiającego się jądra; może to być na przykład zbiór $\{\beta_{\mu\nu}\}$ zgodnie z przyjętą przez nas parametryzacją (1.2).

Na powyższym wyobrażeniu opiera się również obecnie stosowana, standardowa metoda oszacowywania stabilności jąder względem rozszczepienia spontanicznego. Stosując popularne modele, takie jak model mikroskopowo-makroskopowy czy samozgodny opisane w poprzednim rozdziale, oblicza się powierzchnię energii potencjalnej jądra w przestrzeni zmiennych $\{q_i\}$ określających jego deformację, co umożliwia ocenę wysokości i kształtu bariery rozszczepieniowej. W celu oszacowania czasów życia zakłada się, że proces zachodzi w sposób adiabatyczny, co pozwala na uzyskanie zależnego od $\{q_i\}$ parametru masowego i obliczenie całki działania, którą następnie należy zminimalizować po trajektoriach w przestrzeni zmiennych deformacyjnych (praktyczne techniki dotyczące minimalizacji działania opisano w [49, 50]). Przykładem zastosowania omówionej wyżej procedury jest rachunek dla jąder parzystych o $Z > 126$ dyskutowany w rozdziale 1 (przy czym oszacowania czasów życia wykonano tam bez ostatniego kroku tj. bez minimalizacji działania).

Omówione wyżej podejście, choć w wielu przypadkach daje zadowalające rezultaty (patrz np. [10]), nie jest pozbawione ułomności. Po pierwsze metoda ta nie dostarcza żadnej informacji na temat tego, *które* współrzędne kolektywne są istotne w procesie rozszczepienia i jak należy je wybrać. W efekcie wybór ten pozostaje arbitralny i musi opierać się na doświadczeniu i

intuicji fizycznej. Jednocześnie pominięcie w obliczeniach któregoś z ważnych stopni swobody może prowadzić do błędnych interpretacji (np. zidentyfikowania na powierzchni energetycznej minimum, które w rzeczywistości jest punktem siodłowym) i przeszacowania wysokości barier. Za przykład ponownie mogą posłużyć wyniki z rozdziału 1 – widzieliśmy wówczas, że przy ograniczeniu się do deformacji osiowo symetrycznych otrzymalibyśmy mocno zawyżone bariery w wielu badanych przypadkach.

Drugim ograniczeniem metody standardowej jest założenie, że proces rozszczepienia ma charakter adiabatyczny. Tymczasem dla układów takich jak jądra nieparzyste (i innych z niesparowanymi nukleonami) warunki stosowalności przybliżenia adiabatycznego przestają być spełnione ze względu na obecność pseudoprzecięć między poziomami na trajektorii rozszczepienia. W pobliżu takich obszarów efekty nieadiabatyczne przestają być zaniedbywalne i konieczne jest ich poprawne uwzględnienie w dynamice procesu rozszczepienia, co wykracza poza możliwości opisywanego modelu.

Ogólniejszej metody opisu rozszczepienia spontanicznego jąder dostarcza formalizm instantonowy tj. zależnych od czasu urojonego równań samozgodnych Hartree-Focka/Hartree-Focka-Bogolubowa. Podejście oparte na tych równaniach pozwala uwolnić się od problemu dowolności wyboru zmiennych kolektywnych – rozwiązanie instantonowe z definicji minimalizuje działanie i określa optymalną ścieżkę rozszczepieniową. Metoda ta umożliwia również wyjście poza przybliżenie adiabatyczne – informacja o tym, jak układ zachowuje się w pobliżu pseudoprzecięć i o ewentualnych przejściach nieadiabatycznych, zawarta jest w rozwiązaniu równań instantonowych. Niestety ceną za uzyskaną ogólność opisu jest znaczny stopień skomplikowania w porównaniu z metodą tradycyjną: zamiast szukania optymalnej trajektorii w przestrzeni kilku (zwykle 5-8) zmiennych kolektywnych opisujących deformację jądra konieczne jest znalezienie N jednocząstkowych orbitali zależnych od czasu urojonego i zmiennych położenia (gdzie N – liczba nukleonów w jądrze) minimalizujących działanie w przestrzeni wyznaczników Slatera. Nie można jednak wykluczyć, że to właśnie przebieg stanów jednocząstkowych (w szczególności pseudoprzecięcia między nimi) będzie miał istotny wpływ na proces rozszczepienia – taka sugestia pojawia się już w pracy Hilla i Wheelera z lat 50-tych [51].

W bieżącym rozdziale przypomnimy wpierw bardziej szczegółowo tradycyjne podejście oparte na przybliżeniu adiabatycznym wskazując na jego ograniczenia; w szczególności wyjaśnimy, dlaczego nie może być ono stosowane do jąder nieparzystych. Następnie omówimy formalizm czasu urojonego i jego zastosowanie do opisu rozszczepienia spontanicznego jądra. Równania, jakie otrzymuje się w tym formalizmie, odznaczają się wysokim stopniem złożoności, stąd też potraktujemy je jako motywację i punkt wyjścia dla sformułowania metody uproszczonej, którą przedstawimy w kolejnych podrozdziałach. Metoda ta z jednej strony stara się wykorzystać prostotę opisu w kategoriach zmiennych kolektywnych, z drugiej zaś stanowi

próbę wyjścia poza przybliżenie adiabatyczne, wzorując się na opisie instantonowym. Badania zaproponowanego przez nas podejścia będą stanowiły treść dalszej części pracy.

2.2. Przybliżenie adiabatyczne i jego niedostatki

Ruch kolektywny rozszczepiającego się jądra traktuje się zwykle jako *powolny* w porównaniu z jednocząstkowym ruchem poszczególnych nukleonów. Pozwala to na rozseparowanie obu tych ruchów i wprowadzenie tzw. przybliżenia adiabatycznego, w którym zakłada się, że szybkie nukleony dostosowują się do powolnych zmian kształtu jądra (a więc i średniego potencjału) opisywanych przez zmiany $\{q_i\}$. Warto w tym miejscu zauważyć, że analogiczne podejście stosuje się również w opisie innych układów, np. w chemii kwantowej, gdzie ze względu na dużą różnicę mas między jądrami atomowymi a elektronami tworzącymi cząsteczkę ruch jąder traktuje się jako powolny w stosunku do ruchu szybkich elektronów (przybliżenie Borna-Oppenheimera).

Obecnie przedyskutujemy bardziej szczegółowo ideę przybliżenia adiabatycznego zwracając szczególną uwagę na warunki jego stosowalności i wynikające stąd ograniczenia. Rozważmy w tym celu układ nukleonów opisany hamiltonianem zależnym od czasu poprzez zmienne kolektywne $\hat{H}(q(t))$ (w dalszej dyskusji dla uproszczenia ograniczymy się do jednego kolektywnego stopnia swobody, otrzymane wyniki przenoszą się wprost na przypadek wielu zmiennych). Równanie własne dla tego hamiltonianu

$$\hat{H}|\Phi_\mu(q(t))\rangle = E_\mu(q(t))|\Phi_\mu(q(t))\rangle \tag{2.1}$$

definiuje bazę adiabatyczną, której wektory i stowarzyszone z nimi energie zależą od czasu poprzez $q(t)$. Rozwiązanie zależnego od czasu równania Schrödingera

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{2.2}$$

możemy zapisać w bazie adiabatycznej jako:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_\mu c_\mu(t)e^{i\varphi(t)}|\Phi_\mu(q(t))\rangle, \tag{2.3}$$

gdzie $\varphi(t) = -\frac{i}{\hbar}\int^t E_\mu(t')dt'$. Wstawiając powyższe rozwinięcie do równania (2.2) i wymnażając przez $\langle\Phi_\nu|$ dostajemy układ równań różniczkowych na współczynniki rozwinięcia $c_\mu(t)$:

$$\dot{c}_\nu = -\dot{q}\sum_\mu \langle\Phi_\nu|\partial_q\Phi_\mu\rangle e^{i\varphi_{\mu\nu}}c_\mu, \tag{2.4}$$

gdzie $\varphi_{\mu\nu} = \varphi_\mu - \varphi_\nu$. Jak dotąd nie poczyniliśmy jeszcze żadnych przybliżeń i otrzymane

równania są dokładne. Biorąc teraz pod uwagę, że $\dot{q}$ jest małe (powolny ruch kolektywny) oraz że $\dot{c}_\nu \sim \dot{q}$, *zakładamy*, iż w trakcie całej ewolucji stan układu zdominowany jest przez adiabatyczny stan podstawowy, tj. $|c_0| \approx 1$, $|c_\nu| << 1$ dla $\nu \neq 0$. Wówczas równania (2.4) upraszczają się i dla $\nu > 0$ dostajemy:

$$\dot{c}_\nu = -\dot{q}\langle\Phi_\nu|\partial_q\Phi_0\rangle e^{i\varphi_{0\nu}}. \tag{2.5}$$

Zakładając dodatkowo, że iloczyn $\dot{q}\langle\Phi_\nu|\partial_q\Phi_0\rangle$ zmienia się znacznie wolniej w porównaniu do czynnika fazowego, możemy te równania scałkować otrzymując dla $\nu > 0$:

$$c_\nu = \frac{i\hbar\dot{q}}{E_\nu - E_0}\langle\Phi_\nu|\partial_q\Phi_0\rangle e^{i\varphi_{0\nu}}. \tag{2.6}$$

Ta forma całki bez wartości początkowej umożliwi otrzymanie parametrów masowych jako funkcji *wyłącznie* współrzędnych kolektywnych q; inne możliwe formy prowadzą do wyrażeń zawierających jawne funkcje czasu, które fizycznie oznaczać będą wzięcie pod uwagę dodatkowych efektów, np. dyssypacji [52]; patrz także niedawne prace [53].

Widzimy, że aby powyższe rozwiązania pozostawały w zgodzie z wyjściowym założeniem $|c_\nu| << 1$ dla $\nu \neq 0$, musi być spełniony **warunek adiabatyczności**:

$$\left|\frac{\hbar\dot{q}}{E_\nu - E_0}\langle\Phi_\nu|\partial_q\Phi_0\rangle\right| << 1. \tag{2.7}$$

Wynika stąd, że aby można było stosować przybliżenie adiabatyczne, energia związana z ruchem kolektywnym $\hbar\dot{q}$ musi być znacznie mniejsza od różnicy energii między stanem podstawowym, a stanami wzbudzonymi oraz sprzężenie tych stanów ($\langle\Phi_\nu|\partial_q\Phi_0\rangle$) musi być niewielkie. Tak nie będzie w obszarach (pseudo)przecięć poziomów, w których energie stanów stają się (prawie) zdegenerowane i zachodzi silne mieszanie się tych stanów (duża wartość elementu macierzowego w (2.7)). W takich sytuacjach uwzględnienie przejść nieadiabatyczych jest konieczne do poprawnego opisu dynamiki procesu.

Załóżmy jednak, że warunek (2.7) jest spełniony. Korzystając wówczas z otrzymanych rozwiązań oraz z warunku normalizacji: $|c_0|^2 = 1 - \sum_{\nu\neq 0}|c_\nu|^2$, możemy wyznaczyć wartość oczekiwaną energii w stanie $|\Psi(t)\rangle$:

$$\langle\Psi(t)|\hat{H}(q(t))|\Psi(t)\rangle = E_0 + \sum_{\nu\neq 0}(E_0 - E_\nu)\,|c_\nu|^2 = \frac{1}{2}B(q)\dot{q}^2 + V(q), \tag{2.8}$$

gdzie $V(q) = E_0 = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle$ natomiast dla występującego we wzorze parametru masowego

$B(q)$ otrzymujemy znaną w fizyce jądrowej **formułę cranking**:

$$B(q) = 2\hbar^2 \sum_{\nu \neq 0} \frac{|\langle \Phi_\nu | \partial_q \Phi_0 \rangle|^2}{E_\nu - E_0}. \tag{2.9}$$

Widać zatem, że przy założeniu adiabatyczności ewolucji kolektywnej dostaliśmy wyrażenie na energię układu będące sumą energii kinetycznej i potencjalnej we współrzędnych i prędkościach kolektywnych, z zależną od q masą. Przy przejściu do przypadku wielu zmiennych formuła cranking przybiera postać:

$$B_{ij} = 2\hbar^2 \sum_{\nu \neq 0} \frac{\langle \Phi_\nu | \partial_{q_i} \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | \partial_{q_j} \Phi_\nu \rangle}{E_\nu - E_0}. \tag{2.10}$$

Możemy teraz policzyć działanie w przestrzeni zmiennych kolektywnych związane z tunelowaniem przez barierę potencjału wzdłuż zadanej trajektorii L, przy energii $E_{g.s.}$:

$$S(\boldsymbol{q}_{ini}, \boldsymbol{q}_{fin}, L, E_{g.s}) = \int_{\boldsymbol{q}_{ini}}^{\boldsymbol{q}_{fin}} \sum_i p_i dq_i = \int_{\boldsymbol{q}_{ini}}^{\boldsymbol{q}_{fin}} \sqrt{2B_L(\boldsymbol{q}(s))[V(\boldsymbol{q}(s)) - (E_{g.s.} + E_{zp})]}\, ds \tag{2.11}$$

gdzie $p_i = B_{ij}\dot{q}_j$, $\boldsymbol{q}_{ini}$, $\boldsymbol{q}_{fin}$ oznaczają odpowiednio początek i koniec bariery, $E_{g.s.} = E(\boldsymbol{q_{ini}})$ – energia stanu podstawowego, E_{zp} – energia drgań zerowych, ds – element liniowy drogi oraz wprowadzono efektywny parametr masowy wzdłuż trajektorii L zdefiniowany jako:

$$B_L = \sum_{i,j} B_{ij} \frac{dq_i}{ds} \frac{dq_j}{ds}. \tag{2.12}$$

Aby oszacować czas życia T_{sf} ze względu na rozszczepienie spontaniczne jądra należy zminimalizować działanie (2.11) po trajektoriach i wyznaczyć wartość minimalną S_{min}. Czas życia wyliczamy z zależności:

$$T_{sf} = \frac{\ln 2}{\Gamma}, \tag{2.13}$$

gdzie Γ w przybliżeniu WKB wyraża się wzorem:

$$\Gamma = \frac{\omega_0}{2\pi} \left(1 + e^{\frac{2}{\hbar} S_{min}}\right)^{-1}. \tag{2.14}$$

Częstość ω_0 związana jest z energią drgań zerowych jądra w kierunku rozszczepienia: $E_{zp} = 0.5\,\hbar\omega_0$ i odpowiada liczbie uderzeń w barierę w jednostce czasu ($\omega_0/2\pi$). Korzystając z (2.13) i (2.14) oraz pomijając jedynkę w nawiasie w ostatnim wzorze dostajemy następującą, przybliżoną zależność:

$$\log_{10}(T_{sf}[s]) = -20.54 + 0.8686\,\frac{S_{min}}{\hbar} - \log_{10}\left(\frac{E_{zp}}{0.5\ MeV}\right). \tag{2.15}$$

Zastosujmy wzór cranking (2.10) dla przypadku jądra nieparzystego, którego stan podstawowy będziemy opisywać stanem BCS z nieparzystym nukleonem obsadzającym orbital ν_0:

$$|\Phi_0\rangle = a^+_{\nu_0} \prod_{\mu\neq\nu_0} (u_\mu + v_\mu a^+_\mu a^+_{\bar{\mu}})|0\rangle \tag{2.16}$$

gdzie $|0\rangle$ jest stanem próżniowym. Dłuższy rachunek prowadzi do następującej formuły na parametr masowy:

$$\begin{aligned} B_{ij} = 2\hbar^2 \Bigg[& \sum_{\mu,\nu\neq\nu_0} \frac{\langle\mu|\,\partial_{q_i}\hat{H}\,|\nu\rangle\,\langle\nu|\,\partial_{q_j}\hat{H}\,|\mu\rangle}{(E_\mu + E_\nu)^3} (u_\mu v_\nu + u_\nu v_\mu)^2 \\ & + \frac{1}{8}\sum_{\nu\neq\nu_0} \frac{(\tilde{\varepsilon}_\nu(\partial_{q_i}\Delta) - \Delta(\partial_{q_i}\tilde{\varepsilon}_\nu))\left(\tilde{\varepsilon}_\nu(\partial_{q_j}\Delta) - \Delta(\partial_{q_j}\tilde{\varepsilon}_\nu)\right)}{E_\nu^5} \Bigg] \\ & + 2\hbar^2 \sum_{\nu\neq\nu_0} \frac{\langle\nu|\,\partial_{q_i}\hat{H}\,|\nu_0\rangle\,\langle\nu_0|\,\partial_{q_j}\hat{H}\,|\nu\rangle}{(E_\nu - E_{\nu_0})^3} (u_\nu u_{\nu_0} - v_\nu v_{\nu_0})^2 \end{aligned} \tag{2.17}$$

gdzie $\tilde{\varepsilon}_\nu = \varepsilon_\nu - \lambda$, Δ, λ – przerwa energetyczna oraz poziom Fermiego wynikające z rozwiązań równań BCS, zaś $E_\nu = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\nu^2 + \Delta^2}$ oznacza energię kwaziczątkową. Przy wyprowadzeniu powyższej zależności założono, że te same parametry Δ i λ opisują zarówno stan podstawowy jak i jego dwukwaziczątkowe wzbudzenia (w tym te, w których nieparzysta cząstka blokuje stan $\nu \neq \nu_0$, a ν_0 jest sparowany). Pierwsze dwa człony w wyrażeniu (2.17) są (z dokładnością do wyłączenia ν_0 z sumowań) takie same jak w przypadku parametru masowego dla jądra parzysto-parzystego. Nowością jest wynikający z istnienia nieparzystej cząstki i efektu blokowania człon trzeci (zaznaczony na czerwono). Widać jednak, że człon ten jest problematyczny ze względu na występującą w mianowniku różnicę energii i wynikające stąd singularne zachowanie w okolicach pseudoprzecięć poziomów, gdzie wkład od tej części staje się dowolnie duży. Degeneracja energii kwaziczątkowych może pojawić się również dla orbitali znajdujących się po przeciwnych stronach powierzchni Fermiego. Dodatkową wadą jest fakt, że omawiany człon może dawać wkłady ujemne w sytuacji, gdy jakiś orbital ν znajdzie się energetycznie poniżej blokowanego stanu ν_0; w pobliżu pseudoprzecięć wkład ten może zdominować całe wyrażenie i skutkować ujemną wartością parametru masowego.

Opisane problemy wynikają wprost z załamywania się w takich sytuacjach przybliżenia adiabatycznego, w oparciu o które formuła (2.17) została wyprowadzona. Jest to następstwem faktu, że o ile w przypadku jąder parzysto-parzystych pairing zapewnia przerwę energetyczną wielkości minimum 2Δ między stanem podstawowym, a pierwszym wzbudzonym, o tyle w jądrach z nieparzystym nukleonem takiej przerwy nie ma. Jasno więc widać, że z uwagi na istnienie pseudoprzecięć parametr masowy cranking nie nadaje się do opisu dynamiki rozszczepieniowej jąder nieparzystych i konieczne jest poszukiwanie metody wychodzącej

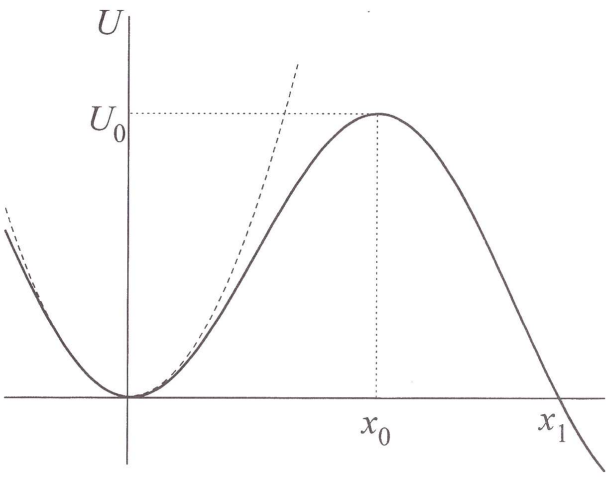
poza przybliżenie adiabatyczne. Stanowi to motywację dla badań i obliczeń przedstawionych w dalszej części niniejszej pracy.

2.3. Formalizm czasu urojonego

Przedstawimy obecnie główne elementy opisu tunelowania kwantowego w formalizmie czasu urojonego, który stanowić będzie podstawę dla dalszych rozważań. Poniższa dyskusja ściśle bazuje na omówieniu zawartym w [54].

Rozważmy układ znajdujący się początkowo w minimum potencjału $U(x)$ przedstawionego na rysunku 2.1 i znajdującego się w równowadze termodynamicznej z otoczeniem o temperaturze T. Stan ten jest metastabilny i z czasem będzie się rozpadał wskutek tunelowania kwantowego przez barierę o wysokości U_0 lub przejścia nad nią w wyniku wzbudzeń termicznych. W tym miejscu należy zaznaczyć co rozumiemy przez metastabilne stany energetyczne E_n, z których następuje rozpad. Równanie Schrödingera z potencjałem $U(x)$ nie ma stanów własnych zlokalizowanych po lewej stronie bariery (w otoczeniu minimum). Mówiąc więc o metastabilnych poziomach energetycznych zakładamy w praktyce przybliżenie, w którym studnia potencjału U jest niemal równoważna potencjałowi o nieskończonej barierze (np. parabolicznemu) zaznaczonemu na rysunku 2.1 linią przerywaną. Gdyby to przybliżenie było dokładne, to stany ψ_n odpowiadające poziomom energetycznym E_n miałyby charakter stacjonarny:

$$\psi_n \propto exp(-iE_n t/\hbar). \tag{2.18}$$



Rysunek 2.1: Potencjał ze stanem metastabilnym w minimum ulegającym rozpadowi poprzez efekt tunelowy [54].

Ze względu jednak na proces tunelowania stany te rozpadają się w miarę upływu czasu:

$$|\psi_n|^2 \propto exp(-\Gamma_n t), \tag{2.19}$$

gdzie Γ_n jest stałą rozpadu. Fakt ten można uwzględnić dodając niewielką, ujemną, urojoną część do energii poziomów postaci:

$$Im(E_n) = -\frac{1}{2}\hbar\Gamma_n. \tag{2.20}$$

Ponieważ układ na ogół jest w stanie mieszanym, który należy opisywać raczej macierzą gęstości niż pojedynczą funkcją falową, jego stałą rozpadu Γ dostaniemy biorąc średnią Boltzmanna po wszystkich poziomach energetycznych:

$$\Gamma = \frac{\sum_n \Gamma_n e^{-E_n/T}}{\sum_n e^{-E_n/T}} \tag{2.21}$$

(stosując jednostki, w których stała Boltzmanna $k_B = 1$). Można pokazać [54], że przy założeniu o małości Γ_n z (2.21) otrzymuje się następującą, ogólną zależność:

$$\Gamma = \frac{2T}{\hbar}\frac{Im(Z)}{Re(Z)}, \tag{2.22}$$

gdzie Z jest funkcją podziału:

$$Z = \sum_n e^{-E_n/T}. \tag{2.23}$$

W mechanice kwantowej mamy:

$$Z = Tr(\rho) \tag{2.24}$$

gdzie

$$\rho = exp\,(-H/T) \tag{2.25}$$

jest macierzą gęstości dla układu opisanego hamiltonianem H. Używając bazy własnej H dostajemy w przestrzeni położeniowej

$$\rho(x_f, x_i) = \sum_n \phi_n(x_f)\phi_n^*(x_i)\, e^{-E_n/T} \tag{2.26}$$

i wówczas

$$Z = \int dx\, \rho(x, x) \tag{2.27}$$

Przy obliczeniu powyższej całki korzysta się z podobieństwa między wyrażeniem (2.26), a

amplitudą przejścia w mechanice kwantowej:

$$\langle x_f|\, exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t_f-t_i)\right)|x_i\rangle = \sum_n \phi_n(x_f)\phi_n^*(x_i)\, exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t_f-t_i)\right). \tag{2.28}$$

Wiadomo, że tę ostatnią można obliczyć jako całkę po trajektoriach [55]:

$$\langle x_f|\, exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t_f-t_i)\right)|x_i\rangle = \int_{x_i}^{x_f} Dx(t)\, exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\, L(x,\dot{x})\right), \tag{2.29}$$

gdzie symbol $Dx(t)$ oznacza całkowanie po wszystkich trajektoriach zaczynających się w x_i i kończących w x_f, zaś $L(x,\dot{x}) = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - U(x)$ jest lagranżjanem dla rozważanego układu (przy założeniu jednostkowej masy). Zauważmy teraz, że dokonując w (2.28) podstawienia $\tau = it$ dostaniemy wyrażenie matematycznie identyczne ze wzorem (2.26), Wykorzystując tę analogię i przechodząc do czasu urojonego mamy:

$$\langle x_f|\, exp\left(-\frac{1}{\hbar}H(\tau_f-\tau_i)\right)|x_i\rangle = \int_{x_i}^{x_f} Dx(\tau)\, exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau(\frac{1}{2}\dot{x}_\tau^2 + U(x))\right] \tag{2.30}$$

co pozwala na zapisanie (2.26) jako:

$$\rho = \int_{x_i}^{x_f} Dx(\tau) exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar/T} d\tau(\frac{1}{2}\dot{x}_\tau^2 + U(x))\right]. \tag{2.31}$$

Wówczas funkcję podziału można zapisać w postaci:

$$Z = \oint Dx(\tau)\, exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\hbar/T} d\tau(\frac{1}{2}\dot{x}_\tau^2 + U(x))\right] = \oint Dx(\tau)\, exp\left[-\frac{1}{\hbar}S\right], \tag{2.32}$$

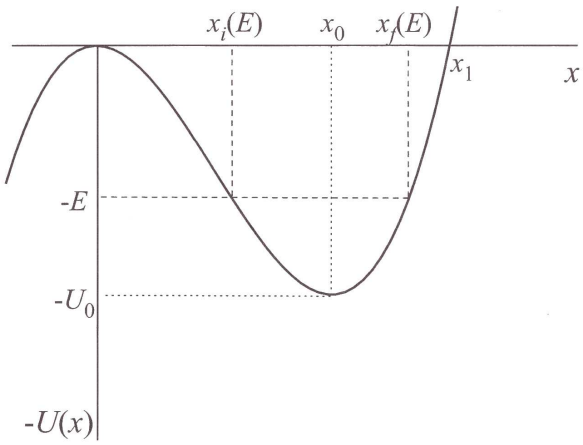
czyli jako całkę po trajektoriach periodycznych w czasie urojonym $x(0) = x(\tau_p)$ z okresem:

$$\tau_p = \hbar/T. \tag{2.33}$$

Wielkość $L_E = \frac{1}{2}\dot{x}_\tau^2 + U(x)$ nazywana jest lagranżjanem euklidesowym ze względu na odwrócony znak przy potencjale, zaś działanie $S = \int_0^{\hbar/T} L_E d\tau$.

Podsumowując dotychczasową dyskusję: transformacja do czasu urojonego τ pozwoliła nam na zapisanie funkcji podziału Z (niezbędnej do wyliczenia stałej rozpadu Γ) w postaci całki po trajektoriach periodycznych w τ z odwróconym potencjałem $U(x) \to -U(x)$.

W dalszej części omówienia pominiemy efekty temperaturowe przyjmując $T \to 0$. Okres (2.33) staje się wówczas nieskończony. Z uwagi na wykładniczą zależność od działania w równaniu (2.32) dominujący wkład wnosić będzie trajektoria minimalizująca S (oraz drogi jej



Rysunek 2.2: Odwrócony potencjał $-U(x)$ [54].

bliskie). Z warunku minimum działania dostajemy:

$$\ddot{x}_\tau = \frac{\partial U}{\partial x}. \tag{2.34}$$

Powyższe równanie odpowiada klasycznej dynamice w odwróconym potencjale $-U(x)$ (rysunek 2.2). Żądając spełnienia warunku periodyczności, dostajemy dwa trywialne rozwiązania tj. $x(\tau) = 0$ i $x(\tau) = x_0$ odpowiadające punktom stacjonarnym potencjału oraz interesujące nas nietrywialne rozwiązanie $x_{inst}(\tau)$, które nazywamy instantonem. Rozwiązanie to opisuje dynamikę układu, który w chwili początkowej $\tau = -\infty$ znajduje się w $x = 0$ odwróconego potencjału i zaczyna nieskończenie wolno staczać się w dół zbocza (rysunek 2.2) osiągając w $\tau = 0$ koniec odwróconej bariery $x = x_1$, gdzie ulega odbiciu i powraca do punktu początkowego w $\tau = +\infty$. Przebieg $x_{inst}(\tau)$ przedstawiono na rysunku 2.3. Korzystając z zasady zachowania energii

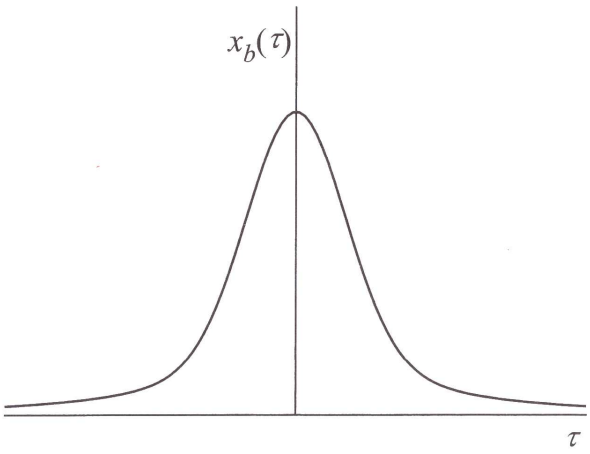
$$\frac{1}{2}\dot{x}^2_{inst} = U(x), \tag{2.35}$$

możemy obliczyć działanie odpowiadające instantonowi:

$$S_{inst} = \frac{1}{\hbar}\int d\tau(\frac{1}{2}\dot{x}^2_{inst} + U(x)) = \frac{2}{\hbar}\int dx(2U(x))^{1/2} \tag{2.36}$$

otrzymując wyrażenie identyczne z wykładnikiem występującym w przybliżeniu WKB (2.14) dla przypadku jednowymiarowego tunelowania przy energii $E_{g.s.} = 0$.

Zasadniczo należy również uwzględnić trajektorie bliskie rozwiązaniu instantonowemu tj. $x(\tau) = x_{inst}(\tau) + \delta x(\tau)$ (gdzie $\delta x(\tau) = \delta x(\tau + \tau_p)$), które mogą wnosić porównywalny wkład do całki po trajektoriach (2.32). Uwzględnienie tych trajektorii do drugiego rzędu w $\delta x(\tau)$ pozwala obliczyć odpowiednio część rzeczywistą i urojoną funkcji podziału Z (szczegółowy



Rysunek 2.3: Schematyczny przebieg typowego rozwiązania instantonowego $x_{inst}(\tau)$ [54].

rachunek można znaleźć w [54]) i ostatecznie, zgodnie ze wzorem (2.22) otrzymuje się:

$$\Gamma = \left(\frac{S_{inst}}{2\pi}\right)^{1/2} \left|\frac{det[-\partial_\tau^2 + \partial_x^2 U(x=0)]}{det'[-\partial_\tau^2 + \partial_x^2 U(x=x_{inst})]}\right|^{1/2} e^{-S_{inst}}. \tag{2.37}$$

Znak prim w dolnym wyznaczniku oznacza, że pominięta została wartość własna $\lambda = 0$ operatora $-\partial_\tau^2 + \partial_x^2 U(x = x_{inst})$. Widać, że powyższe wyrażenie składa się z występującego w wykładniku działania instantonowego oraz pewnego czynnika mnożącego o wymiarze s^{-1}, który wynika z wariacji δx wokół trajektorii instantonowej. Czynnik ten jest odpowiednikiem częstości drgań zerowych ω_0 w wyrażeniu (2.14). Z uwagi na różne przybliżenia i wynikające stąd ograniczenia modelu, którego używamy, w rachunkach prezentowanych w naszej pracy nie będziemy obliczać tego czynnika poprzestając na oszacowaniu S_{inst}, które ma główny wpływ na Γ i poprzez to na czasy życia T_{sf}.

2.4. Metoda instantonowa

Pierwsze zastosowania opisanego wyżej podejścia dotyczyły problemu rozpadu stanu fałszywej próżni w teorii pola [56]. W późniejszym czasie formalizm instantonowy zaadaptowany do opisu rozszczepienia spontanicznego w przybliżeniu pola średniego sformułowany został w pracach [57, 58, 59], zaś dalszą dyskusję tego podejścia przedstawia praca [60]. Sformułowanie przedstawione w tej ostatniej publikacji stanowi motywację dla metody, która zostanie zaproponowana w niniejszej pracy, stąd też obecnie przytoczymy potrzebne elementy zawartego w [60] formalizmu.

Punktem wyjścia są zależne od czasu równania Hartree-Focka (TDHF od ang.*Time Depen-*

dent Hartree-Fock):

$$i\hbar\partial_t\psi_k = \hat{h}(t)\psi_k(t), \tag{2.38}$$

gdzie $\hat{h}(t) = \hat{h}[\psi^*(t), \psi(t)]$ jest samozgodnym hamiltonianem wykazującym nieliniową zależność od poszukiwanych jednocząstkowych funkcji falowych ($\hat{h}[\psi^*(t), \psi(t)]\psi_k(t) = \delta\mathcal{H}/\delta\psi_k^*(t)$), zaś energia $\mathcal{H} = \langle\Psi(t)|\hat{H}|\Psi(t)\rangle$, przy czym $|\Psi(t)\rangle$ jest wyznacznikiem Slatera dla N cząstek zbudowanym z orbitali $\{\psi_k\}$. Równania TDHF mogą być stosowane do opisu rozszczepienia indukowanego (patrz [61], gdzie stosuje się ich uogólnioną wersję z pairingiem), natomiast ze względu na zachowywanie energii nie nadają się bezpośrednio do opisu tunelowania przez barierę potencjału (obszar klasycznie wzbroniony). Stąd też konieczna jest ich transformacja do czasu urojonego tj. przejście $t \to -i\tau$. Funkcje falowe przy tej transformacji zachowują się następująco: $\psi \to \psi(x, -i\tau) = \phi(x, \tau)$ oraz $\psi^* \to \psi^*(x, -i\tau) = \phi^*(x, -\tau)$ (co można łatwo pokazać rozwijając je w szereg), w efekcie iloczyny skalarne $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$ przechodzą w $\langle\phi(-\tau)|\phi(\tau)\rangle$. Przetransformowane równania mają postać:

$$\hbar\frac{\partial\phi_k(\tau)}{\partial\tau} = -\hat{h}(\tau)\phi_k(\tau). \tag{2.39}$$

Ponieważ interesują nas rozwiązania periodyczne $\phi_k(-T/2) = \phi_k(T/2)$, warunek okresowości należy narzucić na powyższe równania dodając człon $\zeta_k\phi_k$ i otrzymując ostatecznie:

$$\hbar\frac{\partial\phi_k(\tau)}{\partial\tau} = -(\hat{h}(\tau) - \zeta_k)\phi_k(\tau). \tag{2.40}$$

ζ_k są tu pewnymi stałymi o wymiarze energii, których interpretacja fizyczna zostanie podana za chwilę. Równania (2.40) są równaniami na poszukiwane stany instantonowe. Charakteryzują je pewne własności, które odróżniają je od równań TDHF w czasie rzeczywistym. Przede wszystkim występujący w nich samozgodny hamiltonian $\hat{h}(\tau) = \hat{h}[\phi^*(-\tau), \phi(\tau)]$ zależy zarówno od $\phi(\tau)$ jak i $\phi(-\tau)$, a więc jest nielokalny w czasie urojonym. Stanowi to istotną przeszkodę przy poszukiwaniu rozwiązań (2.40) w porównaniu z przypadkiem czasu rzeczywistego. Energia $\mathcal{H}(\tau)$ zachowywana przez te równania ma postać:

$$\mathcal{H}[\phi^*(-\tau), \phi(\tau)] = \int dx \sum_k \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\phi_k^*(-\tau)\nabla\phi_k(\tau) + \mathcal{V}[\phi^*(-\tau), \phi(\tau)]. \tag{2.41}$$

Oznacza to, że aby otrzymać $\mathcal{H}(\tau)$, należy wszędzie w funkcjonale energii zastąpić $\psi^*(t)$ przez $\phi_k^*(-\tau)$. Np. w stosowanym przez nas w pierwszej części pracy funkcjonale Skyrme'a SLy6 (1.15) wszystkie występujące tam gęstości będą nielokalne w czasie urojonym. Z hermitowskości hamiltonianu $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ wynika, że energia spełnia relację $\mathcal{H}(-\tau) = \mathcal{H}^*(\tau)$. Stąd zaś otrzymujemy, że hamiltonian samozgodny $\hat{h}(\tau)$, zdefiniowany jako $\hat{h}(\tau)\phi_k(\tau) = \delta\mathcal{H}/\delta\phi_k^*(-\tau)$, nie jest hermitowski (w odróżnieniu od przypadku czasu rzeczywistego), zamiast

tego spełnia on warunek $\hat{h}(-\tau) = \hat{h}^{\dagger}(\tau)$. Możemy go rozłożyć na część hermitowską i antyhermitowską: $\hat{h}(\tau) = \hat{h}_R(\tau) + \hat{h}_A(\tau)$, przy czym zachodzi: $\hat{h}_R(-\tau) = \hat{h}_R(\tau) = \hat{h}_R^{\dagger}(\tau)$ oraz $\hat{h}_A(-\tau) = -\hat{h}_A(\tau) = \hat{h}_A^{\dagger}(\tau)$. Antyhermitowska część pola średniego $\hat{h}_A$ jest nieparzysta w τ i pochodzi od τ-nieparzystych wkładów do gęstości w funkcjonale energii $\mathcal{H}(\tau)$.

Na przykład, taki wkład w problemie tunelowania pojawi się z gęstości prądu $\mathbf{j}$, która w czasie urojonym przyjmuje postać: $\mathbf{j}(\tau) = \sum_k [\phi_k(\tau)\nabla\phi_k^*(-\tau) - \phi_k^*(-\tau)\nabla\phi_k(\tau)]/2$, [60] i spełnia warunek $\mathbf{j}(-\tau) = -\mathbf{j}^*(\tau)$. Stąd widać, że $\hat{h}_A$ będzie związane z częścią rzeczywistą $\mathbf{j}(\tau)$, która staje się niezerowa, gdy tylko $\phi_k(\tau)$ zaczynają się różnić od $\phi_k(-\tau)$. Z powyższych uwag wynika, że nieparzyste w τ pole średnie $\hat{h}_A$ może być uważane za analog potencjału Thoulessa-Valatina występującego w równaniach ATDHF w czasie rzeczywistym [62].

Z uwagi na fakt, że poszukiwane przez nas rozwiązania mają opisywać rozpad ze stanu metastabilnego, w chwili początkowej (a więc i końcowej, co wynika z warunku okresowości) muszą one być tożsame z rozwiązaniami statycznych równań Hartree-Focka (HF) w minimum energetycznym tj. musi zachodzić $\phi_k(-T/2) = \phi_k(T/2) = \psi_k^{HF}$ gdzie $\mathcal{H}(\{\psi_k^{HF}\}) = E_{g.s.}$ (energia w stanie podstawowym). Z przedstawionej wcześniej dyskusji ogólnego zachowania się rozwiązań instantonowych wiemy, że w otoczeniu minimum (tj. dla $\tau \to \pm\infty$) ich ewolucja odbywa się nieskończenie wolno, a więc mamy wówczas $\partial\phi_k/\partial\tau = 0$ i równania (2.40) redukują się do statycznych równań HF. Widać stąd, że stałe ζ_k są równe energiom orbitali jednocząstkowych HF w stanie podstawowym.

Z równań (2.40) oraz ich odpowiedników dla $\phi^*(-\tau)$ dostajemy, że

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\langle\phi_i(-\tau)|\phi_j(\tau)\rangle = \frac{1}{\hbar}(\zeta_j - \zeta_i)\langle\phi_i(-\tau)|\phi_j(\tau)\rangle, \tag{2.42}$$

a zatem:

$$\langle\phi_i(-\tau)|\phi_j(\tau)\rangle = \langle\phi_i(-\tau_0)|\phi_j(\tau_0)\rangle e^{\frac{1}{\hbar}(\zeta_j-\zeta_i)(\tau-\tau_0)}. \tag{2.43}$$

Wynika stąd, że równania instantonowe zachowują diagonalne przekrycia stanów, natomiast prowadzą do wykładniczej zależności od czasu dla $i \neq j$. W szczególności widać tutaj niestabilność rozwiązań o $\zeta_j > \zeta_1$ (gdzie ζ_1 - najmniejsza otrzymana wartość ζ); jeśli tylko w jakiejś chwili τ_0 ich przekrycie ze stanami o niższych wartościach ζ nie jest ściśle równe zero, to ewolucja powoduje ich wykładnicze narastanie i w efekcie „psucie” rozwiązania wzrastającymi domieszkami ze stanów niższych. W naszym problemie szczególny warunek brzegowy $\phi_j(-T/2) = \phi_j(T/2) = \psi_j^{HF}$ (gdzie $\{\psi_j^{HF}\}$ – stany ortonormalne) gwarantuje ortonormalność rozwiązań, tj. zachodzi:

$$\langle\phi_i(-\tau)|\phi_j(\tau)\rangle = \delta_{ij}. \tag{2.44}$$

Znając rozwiązania instantonowe, możemy obliczyć odpowiadające im działanie:

$$S = \hbar \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \sum_{i=1}^{N} \left\langle \phi_i(-\tau) \middle| \partial_\tau \phi_i(\tau) \right\rangle = \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \sum_{i=1}^{N} \left\langle \phi_i(-\tau) \middle| \zeta_i - \hat{h}(\tau) \middle| \phi_i(\tau) \right\rangle . \quad (2.45)$$

Przedstawiliśmy powyżej główne elementy opisu kolektywnego tunelowania kwantowego w formalizmie instantonowym. Warto w tym miejscu wspomnieć, że formalizm ten stosuje się też w chemii kwantowej np. przy obliczaniu wielkości rozszczepienia tunelowego poziomów w cząsteczkach charakteryzujących się symetrycznym potencjałem z podwójnym dnem [63]. Zwróćmy jednak uwagę na istotną różnicę między opisem tego typu procesów w chemii, a rozszczepieniem spontanicznym jądra atomowego. W przypadku cząsteczki nie ma problemu z parametrami inercji - są one w pełni określone przez masy jąder wchodzących w jej skład oraz współczynniki związane ze zmiennymi opisującymi geometrię układu. W efekcie trajektorii instantonowej minimalizującej działanie poszukuje się w przestrzeni tych właśnie zmiennych (jej wymiar wynosi $3N - 6$ dla molekuły składającej się z N atomów)). W przypadku rozszczepiającego się jądra sytuacja jest inna, gdyż wychodząc poza przybliżenie adiabatyczne nie dysponujemy żadnym parametrem masowym i musimy się uciekać do przedstawionego wyżej opisu samozgodnego. Oznacza to, że działanie musimy minimalizować nie w przestrzeni pewnych współrzędnych kolektywnych, lecz w przestrzeni wyznaczników Slatera składających się z N funkcji jednocząstkowych ϕ_k, co stanowi problem o kilka klas trudniejszy w porównaniu z chemią. W nielicznych rachunkach rozwiązania tego problemu otrzymano jedynie dla prostych układów [59, 64].

Z uwagi na wspomniane trudności w stosowaniu podejścia samozgodnego i stopień złożoności wyjściowych równań (2.40) w naszym podejściu do problemu rozszczepienia spontanicznego, które obecnie opiszemy, traktujemy formalizm instantonowy jako motywację i punkt wyjścia, dokonując od początku pewnych uproszczeń. Przede wszystkim samozgodne pole średnie $\hat{h}$ w równaniach (2.40) zastępujemy fenomenologicznym hamiltonianem $\hat{h}_{WS}$ z potencjałem Woodsa-Saxona (1.4). Rezygnacja z samozgodności powoduje następujące konsekwencje:

1. Metodę należy uzupełnić o przepis na liczenie energii układu – w pracy stosujemy w tym celu podejście mikroskopowo-makroskopowe opisane w rozdziale 1.2
2. O ile rozwiązanie samozgodne z definicji odpowiada trajektorii o minimalnej wartości działania, o tyle w naszym podejściu próbną trajektorię rozszczepienia zadajemy w przestrzeni deformacji uwzględnionych w potencjale WS i dla niej szukamy rozwiązania instantonowego. Rozwiązanie to nie musi jednak odpowiadać minimalnej wartości działania (i w ogólności nie będzie), stąd też należałoby następnie przeprowadzić minimalizację działania po trajektoriach. Na poziomie badań i obliczeń przedstawionych w niniejszej pracy nie wykonujemy tego ostatniego kroku, poprzestając na wyborze jednej trajektorii w oparciu

o wyliczoną w modelu mikro-makro mapę energetyczną jądra.

3. Przebieg $q(\tau)$ wzdłuż zadanej trajektorii (a więc i prędkość kolektywną $\dot{q}$) należy także wprowadzić do modelu jako informację zewnętrzną – wyliczamy go z zależności:

$$B_{even}(q)\dot{q}^2 = 2(V(q) - E_{g.s.}), \tag{2.46}$$

gdzie $E_{g.s.}$ – energia stanu podstawowego, $V(q)$ – energia potencjalna obliczona w ramach modelu mikro-makro oraz $B_{even}(q)$ – parametr masowy cranking obliczony z uwzględnieniem pairingu dla sąsiedniego jądra parzysto-parzystego (o liczbie masowej $A-1$).

Opisane powyżej uproszczenia i wynikające z nich następstwa należy postrzegać jako próbę adaptacji istotnych elementów opisu samozgodnego do metody mikroskopowo-makroskopowej. Poza chęcią uczynienia problemu łatwiej rozwiązywalnym uproszczenia te wynikły też z nadziei, że taka adaptacja wskaże interpretację, która pozwoliłaby jakoś zredukować złożoność wariacji po wszystkich funkcjach falowych, tzn. wielkiej $10^5 - 10^6$ liczbie zmiennych, do tradycyjnej, o wiele prostszej, choć i tak skomplikowanej, wariacji po trajektoriach w 5 - 8 wymiarowej przestrzeni zmiennych kolektywnych opisujących deformację jądra.

Rozwiązując równania instantonowe ograniczamy się do podprzestrzeni $\mathcal{N}$ stanów adiabatycznych $\psi_\mu(q)$ tj. poszukujemy rozwiązania w postaci:

$$\phi_i(\tau) = \sum_\mu c_{\mu i}(\tau)\psi_\mu(q(\tau)), \tag{2.47}$$

gdzie

$$\hat{h}_{WS}\,\psi_\mu(q(\tau)) = \varepsilon_\mu(q(\tau))\,\psi_\mu(q(\tau)). \tag{2.48}$$

Wstawiając (2.47) do (2.40) otrzymujemy układ $\mathcal{N}$ równań na współczynniki $c_{\mu i}(\tau)$:

$$\hbar\frac{\partial c_{\mu i}}{\partial \tau} + \dot{q}\sum_\nu^{\mathcal{N}}\langle\psi_\mu(q(\tau)) \mid \frac{\partial \psi_\nu}{\partial q}(q(\tau))\rangle c_{\nu i} = [\zeta_i - \varepsilon_\mu(q(\tau))]c_{\mu i} \tag{2.49}$$

Rozwiązując powyższy układ otrzymujemy $\mathcal{N}$ jednocząstkowych stanów instantonowych $\phi_i(\tau)$, z których każdy dąży do orbitala $\psi_i(q_{min})$ w metastabilnym minimum ($\tau = \pm T/2$), gdy $T \to \infty$. Stałe ζ_i, znane w teorii równań różniczkowych o współczynnikach okresowych pod nazwą wykładników Floqueta, są w naszym przypadku równe odpowiednim energiom jednocząstkowym w minimum, tj. $\zeta_i = \varepsilon_i(q_{min})$, gdy $T \to \infty$. Ponieważ jednak w praktyce numerycznej posługujemy się skończonymi okresami T, to równość ta przestaje zachodzić i w efekcie wykładniki ζ_i należy znajdować równolegle z $\phi_i(\tau)$, tak aby zapewnić periodyczność otrzymanych rozwiązań. Problem ten omówiono bardziej szczegółowo w rozdziale 3 poświęconym numerycznym metodom rozwiązywania równań (2.49).

Zachowanie ortonormalności (2.44) prowadzi do następującego warunku na współczynniki $c_{\mu l}(\tau)$:

$$\sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} c^*_{\mu i}(-\tau)c_{\mu j}(\tau) = \delta_{ij}. \tag{2.50}$$

Oznacza to, że macierz $\mathbf{C}(\tau)$ zbudowana z tych współczynników posiada swoją odwrotność $\mathbf{C}^\dagger(-\tau)$ i stany adiabatyczne mogą zostać wyrażone poprzez stany instantonowe jako:

$$\psi_\mu(q(\tau)) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} c^*_{\mu i}(-\tau)\phi_i(\tau) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} c^*_{\mu i}(\tau)\phi_i(-\tau), \tag{2.51}$$

gdzie przy drugiej równości założono, że $q(\tau) = q(-\tau)$, co zachodzi dla każdej rzeczywistej obserwabli $q(\tau) = \sum_i \langle \phi_i(-\tau) \mid \hat{q} \mid \phi_i(\tau)\rangle = q^*(-\tau)$. Z ortonormalności ψ_μ w połączeniu z relacją (2.50) dostajemy:

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} c_{\mu i}(\tau)c^*_{\nu i}(-\tau) = \delta_{\mu\nu}. \tag{2.52}$$

Widać stąd, że wielkość $p_{\mu i}(\tau) = c^*_{\mu i}(-\tau)c_{\mu i}(\tau)$ można uważać za obsadzenie stanu adiabatycznego μ w rozwiązaniu instantonowym i ($\sum_\mu p_{\mu i}(\tau) = 1$) lub też obsadzenie stanu instantonowego i w stanie adiabatycznym μ ($\sum_i p_{\mu i}(\tau) = 1$) [1]. Ponieważ jednak, w odróżnieniu od mechaniki kwantowej czasu rzeczywistego, $p_{\mu i}$ nie są dodatnio określone (a w ogólności mogą być również zespolone), będziemy je nazywać pseudoobsadzeniami. W dalszej części pracy będziemy się nimi posługiwać przy prezentacji i dyskusji otrzymywanych rozwiązań instantonowych. Działanie pochodzące od jednocząstkowego, obsadzonego stanu instantonowego ϕ_i można zapisać przy pomocy pseudoobsadzeń jako:

$$S_i/\hbar = \frac{1}{\hbar}\int_{-T/2}^{T/2} d\tau \left\langle \phi_i(-\tau)\middle|\zeta_i - \hat{h}(\tau)\middle|\phi_i(\tau)\right\rangle = \frac{1}{\hbar}\int_{-T/2}^{T/2} d\tau \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} [\zeta_i - \varepsilon_\mu(q(\tau))]p_{\mu i}(\tau). \tag{2.53}$$

Całkowite działanie będzie sumą poszczególnych wkładów jednocząstkowych:

$$S_{tot} = \sum_{i,\ obs} S_i, \tag{2.54}$$

gdzie obs oznacza, że suma przebiega przez stany obsadzone. Z (2.53) i własności $p_{\mu i}$ wynika, że suma działań dla wszystkich poziomów, $\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} S_i$, jest całką po $d\tau$ z różnicy $\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \zeta_i - \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} \epsilon_\mu$. Można pokazać, że ta całka znika, a więc $\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} S_i = 0$. Stąd suma działań dla pewnej grupy stanów jest równa minus sumie działań dla pozostałych stanów.

[1] Suma po stanach obsadzonych wielkości $c^*_{\mu i}(-\tau)c_{\nu i}(\tau)$ jest elementem $\rho_{\mu\nu}(\tau)$ macierzy gęstości układu, zgodnie z definicją w następnym podrozdziale.

2.5. Metoda instantonowa z pairingiem - formalizm kwazicząstek

Opisany w poprzednim podrozdziale formalizm instantonowy można uogólnić na przypadek układu z oddziaływaniem pairing. Sytuacja jest analogiczna, jak w przypadku czasu rzeczywistego, gdzie uwzględnienie pairingu wymaga zastąpienia równań TDHF równaniami ogólniejszej teorii TDHFB (zależnej od czasu teorii Hartree-Focka-Bogolubowa). Transformację Bogolubowa od *niezależnych od czasu* operatorów kreacji cząstek $a^\dagger_\mu$ do *zależnych od czasu* operatorów kreacji kwazicząstek $\alpha^\dagger_i(t)$, po przejściu do czasu urojonego $t \to -i\tau$, można zapisać następująco [60]:

$$\begin{aligned} \alpha^\dagger_i(\tau) &= \sum_\mu (A_{\mu i}(\tau) a^\dagger_\mu + B_{\mu i}(\tau) a_\mu), \\ \alpha_i(-\tau) &= \sum_\mu (A^*_{\mu i}(-\tau) a_\mu + B^*_{\mu i}(-\tau) a^\dagger_\mu), \end{aligned} \tag{2.55}$$

gdzie, jak widać, współczynniki $A_{\mu i}(t)$ i $B_{\mu i}(t)$ stają się funkcjami τ, zaś ich sprzężenia zespolone $A^*_{\mu i}(t)$ i $B^*_{\mu i}(t)$ zależą teraz od $-\tau$. Wymóg unitarności transformacji Bogolubowa w czasie rzeczywistym skutkuje następującym warunkiem w czasie urojonym:

$$\begin{pmatrix} A^T(\tau), & B^T(\tau) \\ B^\dagger(-\tau), & A^\dagger(-\tau) \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A^*(-\tau), & B(\tau) \\ B^*(-\tau), & A(\tau) \end{pmatrix}, \tag{2.56}$$

gdzie A i B oznaczają macierze odpowiednich współczynników. Otrzymujemy stąd zależności:

$$\begin{aligned} \sum_i \left(B^*_{\mu i}(-\tau) B_{\nu i}(\tau) + A_{\mu i}(\tau) A^*_{\nu i}(-\tau) \right) &= \delta_{\mu\nu}, \\ \sum_\mu \left(B^*_{\mu i}(-\tau) B_{\mu j}(\tau) + A^*_{\mu i}(-\tau) A_{\mu j}(\tau) \right) &= \delta_{ij}, \\ (B^*(\tau) A^{*-1}(\tau))_{\mu\nu} &= -(B^*(\tau) A^{*-1}(\tau))_{\nu\mu}, \\ (B(-\tau) A^T(\tau))_{\mu\nu} &= -(B(-\tau) A^T(\tau))_{\nu\mu}. \end{aligned} \tag{2.57}$$

Relacje druga i czwarta są konsekwencją pierwszej i trzeciej. Transformacjami odwrotnymi do (2.55) są:

$$\begin{aligned} a^\dagger_\mu &= \sum_i (A^*_{\mu i}(-\tau) \alpha^\dagger_i(\tau) + B_{\mu i}(\tau) \alpha_i(-\tau)), \\ a_\mu &= \sum_i (B^*_{\mu i}(-\tau) \alpha^\dagger_i(\tau) + A_{\mu i}(\tau) \alpha_i(-\tau)). \end{aligned} \tag{2.58}$$

Równość (2.56) zapewnia spełnienie relacji antykomutacji dla operatorów kwazicząstkowych: $\{\alpha_i(-\tau), \alpha_j(-\tau)\} = \{\alpha^\dagger_i(\tau), \alpha^\dagger_j(\tau)\} = 0$, oraz $\{\alpha_i(-\tau), \alpha^\dagger_j(\tau)\} = \delta_{ij}$. Próżnią kwazicząstek w τ jest stan $\mid \Phi(\tau)\rangle$ taki, że dla wszystkich i: $\alpha_i(\tau) \mid \Phi(\tau)\rangle = 0$. A więc, z dokładnością do

stałej: $\mid \Phi(\tau)\rangle = (\prod_i \alpha_i(\tau)) \mid 0\rangle$, gdzie $\mid 0\rangle$ jest stanem próżni bez cząstek a iloczyn zawiera wszystkie operatory anihilacji kwazicząstek.

Dla celów dalszej dyskusji zdefiniujemy następujące kontrakcje:

$$\begin{aligned}
\frac{\langle\Phi(\tau) \mid a_\nu^\dagger a_\mu \mid \Phi(-\tau)\rangle}{\langle\Phi(\tau) \mid \Phi(-\tau)\rangle} &= \rho_{\mu\nu}(\tau) = \quad (B^*(-\tau)B^T(\tau))_{\mu\nu}, \\
\frac{\langle\Phi(\tau) \mid a_\nu a_\mu \mid \Phi(-\tau)\rangle}{\langle\Phi(\tau) \mid \Phi(-\tau)\rangle} &= \kappa_{\mu\nu}(\tau) = \quad (B^*(-\tau)A^T(\tau))_{\mu\nu}, \\
\frac{\langle\Phi(\tau) \mid a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger \mid \Phi(-\tau)\rangle}{\langle\Phi(\tau) \mid \Phi(-\tau)\rangle} &= \tilde{\kappa}_{\mu\nu}(\tau) = \quad (A^*(-\tau)B^T(\tau))_{\mu\nu}.
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Drugie z tych równości wynikają z użycia (2.58) oraz faktu, że tylko iloczyny typu $\alpha_i(-\tau)\alpha_j^\dagger(\tau)$ dają niezerowe wkłady do lewych stron: $\langle\Phi(\tau) \mid \alpha_i(-\tau)\alpha_j^\dagger(\tau) \mid \Phi(-\tau)\rangle = \delta_{ij}\langle\Phi(\tau) \mid \Phi(-\tau)\rangle$. Sumy po i występujące przy mnożeniu macierzy w powyższych wyrażeniach przebiegają po indeksach wszystkich operatorów anihilacji. Macierze gęstości zwykłej ρ i anomalnej κ mają własności wynikające z warunku (2.56), które w notacji macierzowej można zapisać następująco:

$$\begin{aligned}
\rho(-\tau) &= \rho^\dagger(\tau), \\
\kappa^T(\tau) &= -\kappa(\tau), \\
\tilde{\kappa}(\tau) &= \kappa^\dagger(-\tau).
\end{aligned} \tag{2.60}$$

W celu otrzymania równań TDHFB w czasie urojonym można wyjść od zasady wariacyjnej dającej równania TDHFB

$$\delta \int dt \langle\Psi(t) \mid i\hbar\partial_t - \hat{H} \mid \Psi(t)\rangle = 0, \tag{2.61}$$

gdzie ograniczamy klasę stanów $\Psi(t)$ do postaci HFB. Po przejściu $t \to -i\tau$ otrzymujemy:

$$\delta \int i \cdot d\tau \langle\Phi(\tau) \mid \hbar\partial_\tau + \hat{H} \mid \Phi(-\tau)\rangle = 0, \tag{2.62}$$

gdzie znaki argumentu czasowego τ w bra i ket wynikają z zależności stanu HFB $\mid \Psi(t)\rangle$ od macierzy współczynników A i B (por. dyskusja obsadzeń, przed (2.65)):

$$\mid \Psi(t)\rangle \sim \left(\prod_i \alpha_i(t)\right) \mid 0\rangle \sim \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{\mu\nu} \left(B^*(t)A^{*-1}(t)\right)_{\mu\nu} a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger\right) \mid 0\rangle. \tag{2.63}$$

Korzystając z opisanych wyżej zależności i postępując analogicznie, jak w przypadku wyprowadzania równań TDHFB, tzn. obliczając wariacje $\delta/\delta A_{\mu i}^*(-\tau)$ i $\delta/\delta B_{\mu i}^*(-\tau)$ wyrażenia (2.62) i przyrównując je do zera otrzymuje się ich odpowiednik w czasie urojonym (iTDHFB).

Dla amplitud A i B przyjmują one postać (tylko drugi indeks wypisano jawnie) [60]:

$$\hbar\partial_\tau \begin{pmatrix} A_k(\tau) \\ B_k(\tau) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{h}(\tau) - \lambda, & \hat{\Delta}(\tau) \\ -\hat{\Delta}^*(-\tau), & -(\hat{h}^*(-\tau) - \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_k(\tau) \\ B_k(\tau) \end{pmatrix} = \zeta_k \begin{pmatrix} A_k(\tau) \\ B_k(\tau) \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

gdzie $\hat{h}(\tau) = \hat{t} + \hat{\Gamma}(\tau)$ z samozgodnym potencjałem $\Gamma_{\mu\nu}(\tau) = \sum_{\gamma\delta}(v_{\mu\gamma\nu\delta} - v_{\mu\gamma\delta\nu})\rho_{\delta\gamma}(\tau)$, zaś $\Delta_{\mu\nu}(\tau) = \sum_{\gamma\delta} v_{\mu\nu\gamma\delta}\kappa_{\gamma\delta}(\tau)$. Dla wielkości tych zachodzi: $\hat{\Gamma}(-\tau) = \hat{\Gamma}^\dagger(\tau)$ i $\hat{\Delta}^T(\tau) = -\hat{\Delta}(\tau)$, stąd też samozgodny hamiltonian $\hat{h}$ spełnia równość $\hat{h}(-\tau) = \hat{h}^\dagger(\tau)$. W efekcie tę samą własność posiada również pełen hamiltonian HFB $\hat{\mathbf{h}}(\tau)$ dany przez macierz występującą w równaniach (2.64), tj. zachodzi $\hat{\mathbf{h}}(-\tau) = \hat{\mathbf{h}}^\dagger(\tau)$. Pojawiające się w równaniach człony ze stałymi ζ_k wynikają z narzucenia warunku periodyczności na poszukiwane rozwiązania instantonowe, analogicznie jak w przypadku TDHF. Z dyskusji przeprowadzonej w poprzednim podrozdziale wynika, że dla $\tau = \pm T/2$ stan $|\Phi(\tau)\rangle$ powinien odpowiadać metastabilnemu stanowi podstawowemu HFB $|\Phi_{gs}\rangle$, zaś stałe ζ_k będą równe odpowiednim energiom kwazicząstkowym w tym stanie. Równania (2.64) zachowują odpowiednik energii w czasie urojonym tj. $\langle\Phi(\tau) \mid \hat{H} \mid \Phi(-\tau)\rangle$. Rozwiązanie instantonowe będzie łączyć stan podstawowy $|\Phi_{gs}\rangle$ z pewnym stanem HFB $|\Phi(\tau = 0)\rangle$ o tej samej energii na końcu bariery.

Należy zwrócić uwagę, że w równaniach (2.64) pojawia się potencjał chemiczny λ (korekta w stosunku do równań podanych w [60]!). W przypadku rozwiązywania problemu z warunkiem początkowym, nie ma potrzeby wprowadzania λ ponieważ równania TDHFB (zarówno w czasie rzeczywistym jak i urojonym) zachowują średnią liczbę cząstek w trakcie ewolucji i tym samym jest ona zdeterminowana przez liczbę cząstek w stanie początkowym [65]. Tutaj sytuacja jest jednak inna, gdyż poszukujemy rozwiązania spełniającego periodyczny warunek brzegowy. Nieuwzględnienie potencjału chemicznego λ spowoduje, że w ogólności otrzymamy instanton dla złej średniej liczby cząstek (odpowiadającej $\lambda = 0$). Stąd też λ jest koniecznym parametrem równań narzucającym warunek na liczbę cząstek na brzegu rozwiązania, w $\tau = \pm T/2$. Ponieważ, jak dyskutowano wcześniej, $|\Phi(\pm T/2)\rangle$ odpowiada rozpadającemu się stanowi podstawowemu HFB, więc i λ będzie równa potencjałowi chemicznemu dla tego stanu.

Równania (2.64) mają tę własność, że gdy $(A_{\mu i}(\tau), B_{\mu i}(\tau))$ jest rozwiązaniem periodycznym z wykładnikiem Floqueta ζ_i, to $(B^*_{\mu i}(-\tau), A^*_{\mu i}(-\tau))$ jest też rozwiązaniem z wykładnikiem $-\zeta_i$ (co odpowiada analogicznej własności równań HFB). Zatem wystarczy znaleźć połowę rozwiązań.

Powyższa symetria pozwala wybierać stan $\mid \Phi(\tau)\rangle$ dowolnie, byle z każdej pary rozwiązań z ζ_i i $-\zeta_i$ tylko jedno występowało jako $\alpha_i(\tau)$. Dla stanów podstawowych jąder naturalny jest wybór $\alpha^\dagger_i(\tau)$ odpowiadających dodatnim ζ_i, a więc w granicy $\tau \to \pm T/2$ dodatnim energiom kwazicząstek. Wtedy $\mid \Phi(-\tau)\rangle$ jest utworzony z rozwiązań o ujemnych ζ_i, a we wzorach (2.59) na macierze gęstości $A_{\mu i}(\tau)$ i $B_{\mu i}(\tau)$ odpowiadają wszystkim dodatnim ζ_i.

Ponieważ warunek brzegowy ustala odpowiedniość ze stanem początkowym HFB, kon-

strukcja ρ i κ dla jąder nieparzystych musi być analogiczna jak w HFB: jedno z rozwiązań $A(\tau)$, $B(\tau)$ o dodatniej energii (ζ_i) należy zamienić na $B^*(-\tau)$, $A^*(-\tau)$ z $-\zeta_i$. Spowoduje to zmiany gęstości:

$$\begin{aligned} \rho^{odd}_{\mu\nu}(\tau) - \rho^{even}_{\mu\nu}(\tau) &= A_{\mu i}(\tau)A^*_{\nu i}(-\tau) - B^*_{\mu i}(-\tau)B_{\nu i}(\tau) \\ \kappa^{odd}_{\mu\nu}(\tau) - \kappa^{even}_{\mu\nu}(\tau) &= A_{\mu i}(\tau)B^*_{\nu i}(-\tau) - B^*_{\mu i}(-\tau)A_{\nu i}(\tau). \end{aligned} \tag{2.65}$$

Aby osiągnąć rozwiązanie trzeba zapewnić samozgodność potencjałów (zapewne iteracyjnie).

W analogii do przypadku rzeczywistego możemy zdefiniować macierz:

$$\mathcal{R}(\tau) = \begin{pmatrix} \rho(\tau), & \kappa(\tau) \\ -\kappa^*(-\tau), & I - \rho^*(-\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B^*(-\tau) \\ A^*(-\tau) \end{pmatrix} \left(B^T(\tau),\ A^T(\tau) \right), \tag{2.66}$$

która jest odpowiednikiem uogólnionej macierzy gęstości HFB w formalizmie czasu urojonego. Spełnia ona warunek $\mathcal{R}^2(\tau) = \mathcal{R}(\tau)$ (co wynika z zależności: $\rho(\tau)\kappa(\tau) = \kappa(\tau)\rho^*(-\tau)$ oraz $\rho^2(\tau) - \kappa(\tau)\kappa^*(-\tau) = \rho(\tau)$), natomiast nie jest to macierz hermitowska, nie może zatem reprezentować żadnej macierzy gęstości. Możemy jednak przy jej pomocy zapisać równania iTDHFB w zwarty sposób jako [60]:

$$\hbar\partial_\tau \mathcal{R}(\tau) + [\mathbf{h}(\tau), \mathcal{R}(\tau)] = 0, \tag{2.67}$$

lub w postaci rozwiniętej:

$$\begin{aligned} \hbar\partial_\tau \rho(\tau) &= \rho(\tau)\hat{h}(\tau) - \hat{h}(\tau)\rho(\tau) - \kappa(\tau)\hat{\Delta}^*(-\tau) + \hat{\Delta}(\tau)\kappa^*(-\tau), \\ \hbar\partial_\tau \kappa(\tau) &= \rho(\tau)\hat{\Delta}(\tau) + \hat{\Delta}(\tau)\rho^*(-\tau) - \hat{\Delta}(\tau) - \kappa(\tau)\hat{h}^*(-\tau) - \hat{h}(\tau)\kappa(\tau). \end{aligned} \tag{2.68}$$

Element macierzowy liczby cząstek, odpowiadający ich liczbie N_r dla rozwiązania iTDHFB, wynosi $\langle \Phi(\tau) \mid \sum_\mu a^\dagger_\mu a_\mu \mid \Phi(-\tau) \rangle = Tr\ \rho$. Z pierwszego z powyższych równań otrzymujemy szybkość jego zmiany [2]:

$$\begin{aligned} \hbar\partial_\tau Tr\ \rho(\tau) &= \sum_{\mu\nu} \left(-\kappa_{\mu\nu}(\tau)\Delta^*_{\nu\mu}(-\tau) + \Delta_{\mu\nu}(\tau)\kappa^*_{\nu\mu}(-\tau) \right) \\ &= \sum_{\mu\nu\gamma\delta} \left(-v^*_{\nu\mu\gamma\delta}\kappa^*_{\gamma\delta}(-\tau)\kappa_{\mu\nu}(\tau) + v_{\mu\nu\gamma\delta}\kappa_{\gamma\delta}(\tau)\kappa^*_{\nu\mu}(-\tau) \right) \\ &= \sum_{\mu\nu\gamma\delta} \left(v_{\gamma\delta\nu\mu}\kappa^*_{\gamma\delta}(-\tau)\kappa_{\nu\mu}(\tau) - v_{\mu\nu\gamma\delta}\kappa_{\gamma\delta}(\tau)\kappa^*_{\mu\nu}(-\tau) \right) = 0, \end{aligned} \tag{2.69}$$

gdzie wykorzystaliśmy antysymetrię κ, hermitowskość v oraz samozgodność potencjału par Δ. Tak więc liczba N_r, równa wartości oczekiwanej liczby cząstek dla początkowego (i

[2] $Tr\ [A, B] = 0$ dla dowolnych macierzy.

końcowego) stanu HFB, jest stała dla *samozgodnego rozwiązania* iTDHFB.

Działanie związane ze stanem $|\Phi(\tau)\rangle$ możemy zapisać przy pomocy macierzy amplitud A i B jako [60]:

$$\begin{aligned} S/\hbar &= \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \langle \Phi(\tau)|\partial_\tau \Phi(-\tau)\rangle \\ &= \frac{1}{2}\int_{-T/2}^{T/2} d\tau\, Tr[\partial_\tau A^\dagger(-\tau)A(\tau) + \partial_\tau B^\dagger(-\tau)B(\tau)] \\ &= -\frac{1}{2}\int_{-T/2}^{T/2} d\tau\, Tr[A^\dagger(-\tau)\partial_\tau A(\tau) + B^\dagger(-\tau)\partial_\tau B(\tau)]. \end{aligned} \tag{2.70}$$

Podstawiając $\partial_\tau A_{\mu i}(\tau)$ i $\partial_\tau B_{\mu i}(\tau)$ z równania iTDHFB (2.64) i wykorzystując warunki (2.57) otrzymujemy podcałkową działania:

$$-\sum_{i\ obs}\frac{\zeta_i}{2} - \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu}\left((h_{\mu\nu}(\tau) - \lambda\delta_{\mu\nu})(2\rho_{\nu\mu}(\tau) - \delta_{\mu\nu}) + \kappa_{\mu\nu}(\tau)\Delta^*_{\mu\nu}(-\tau) + \kappa^*_{\mu\nu}(-\tau)\Delta_{\mu\nu}(\tau)\right). \tag{2.71}$$

2.6. Model uproszczony z samozgodną $\Delta(\tau)$

W oparciu o omówiony wyżej formalizm iTDHFB możemy sformułować odpowiednik metody instantonowej opisanej w poprzednim podrozdziale, która będzie uwzględniała oddziaływanie pairing. W tym celu niezbędne jest dokonanie pewnych uproszczeń. Analogicznie, jak w przypadku bez pairingu, samozgodny hamiltonian $\hat{h}$ w równaniach (2.64) zastępujemy hamiltonianem $\hat{h}_{WS}$ ze zdeformowanym potencjałem Woodsa-Saxona. Rozwiązań będziemy poszukiwać w bazie adiabatycznej $\hat{h}_{WS}$ co oznacza konieczność wykonania kolejno dwóch transformacji: $a^\dagger_n \rightarrow b^\dagger_\mu \rightarrow \alpha^\dagger_i$ Pierwsza z nich służy do przejścia od bazy stałej $a^\dagger_n$ do bazy stanów własnych $b^\dagger_\mu$ zależnego od deformacji hamiltonianu $\hat{h}_{WS}$; zapiszemy ją następująco:

$$b^+_\mu(q) = \sum_n C_{n\mu}(q)a^+_n, \tag{2.72}$$

gdzie podkreślono zależność od deformacji q współczynników transformacji $C_{n\mu}(q)$ i wynikłej stąd bazy stanów $b^+_\mu(q)$. Druga transformacja jest właściwą transformacją Bogolubowa:

$$\alpha^+_i = \sum_\mu \left(A_{\mu i}(\tau)b^+_\mu(q(\tau)) + B_{\mu i}(\tau)b_\mu(q(\tau))\right). \tag{2.73}$$

Dla sił pairing czynimy typowe założenie, że w bazie adiabatycznej charakteryzują się one stałym natężeniem $G > 0$ i oddziałują jedynie między parami stanów $\mu\bar{\mu}$ (stan i stowarzyszony z nim stan odwrócony w czasie) tj. jedynymi niezerowymi elementami macierzowymi tego

oddziaływania są $v_{\mu\bar{\mu}\nu\bar{\nu}} = -\frac{G}{2}$ (i elementy powiązane z nimi poprzez antysymetrię).

Poczyniwszy opisane wyżej uproszczenia i mając na uwadze, że macierz C zależy od $q(\tau)$ (a więc podlega różniczkowaniu po τ) z równań iTDHFB (2.64) otrzymuje się następujące równania w bazie adiabatycznej:

$$\hbar\partial_\tau \begin{pmatrix} A_i(\tau) \\ B_i(\tau) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}(q) + \hat{D}, & \hat{\Delta}(\tau) \\ -\hat{\Delta}^*(-\tau), & -\hat{\epsilon}(q) + \hat{D}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i(\tau) \\ B_i(\tau) \end{pmatrix} = \zeta_i \begin{pmatrix} A_i(\tau) \\ B_i(\tau) \end{pmatrix}. \tag{2.74}$$

W powyższym zapisie $\hat{\epsilon}(q)$ jest macierzą diagonalną o elementach $\hat{\epsilon}_{\mu\nu}(q) = \delta_{\mu\nu}(\epsilon_\mu(q) - \lambda)$ (ϵ_μ są energiami jednocząstkowymi), $\hat{D}$ oznacza macierz przekryć pochodnych stanów adiabatycznych $D_{\mu\nu} = \hbar\langle\mu \mid \frac{\partial\nu}{\partial\tau}\rangle = \hbar\dot{q}\langle\mu \mid \frac{\partial\nu}{\partial q}\rangle$, natomiast jedynymi niezerowymi elementami macierzy $\hat{\Delta}$ są elementy postaci $\Delta_{\mu\bar{\mu}}(\tau) = -\Delta_{\bar{\mu}\mu}(\tau) = -\Delta(\tau)$, gdzie

$$\Delta(\tau) = G\sum_{\mu>0} \bar{\kappa}_{\mu\bar{\mu}} \tag{2.75}$$

($\bar{\kappa}$ oznacza gęstość pairingową w bazie adiabatycznej). Związek macierzy gęstości w bazie adiabatycznej, $\bar{\rho}$ i $\bar{\kappa}$, z tymi w bazie niezależnej od czasu, z indeksami m, n, wyraża się równaniami:

$$\begin{aligned} \rho_{nm}(\tau) &= \big(C(q(\tau))\bar{\rho}(\tau)C^\dagger(q(\tau))\big)_{nm}, \\ \kappa_{nm}(\tau) &= \big(C(q(\tau))\bar{\kappa}(\tau)C^T(q(\tau))\big)_{nm}. \end{aligned} \tag{2.76}$$

Wobec tego równania na macierze gęstości $\bar{\rho}(\tau)$ i $\bar{\kappa}(\tau)$, skonstruowane w bazie adiabatycznej analogicznie jak ρ i κ, są nieco inne niż (2.68):

$$\begin{aligned} \hbar\partial_\tau\bar{\rho}(\tau) &= \bar{\rho}(\tau)\hat{\epsilon}(\tau) - \hat{\epsilon}(\tau)\bar{\rho}(\tau) - \bar{\kappa}(\tau)\hat{\Delta}^*(-\tau) + \hat{\Delta}(\tau)\bar{\kappa}^*(-\tau) + [\bar{\rho}(\tau), \hat{D}], \\ \hbar\partial_\tau\bar{\kappa}(\tau) &= \bar{\rho}(\tau)\hat{\Delta}(\tau) + \hat{\Delta}(\tau)\bar{\rho}^*(-\tau) - \hat{\Delta}(\tau) - \bar{\kappa}(\tau)\hat{\epsilon}^*(-\tau) - \hat{\epsilon}(\tau)\bar{\kappa}(\tau) + \bar{\kappa}(\tau)\hat{D}^* - \hat{D}\bar{\kappa}(\tau). \end{aligned} \tag{2.77}$$

W powyższym równaniu $\hat{D} = \hat{D}(\tau)$. Dalej wykorzystamy degenerację Kramersa stanów średniego pola, co już zrobiliśmy przy określeniu pairingu. Jest to właściwe dla jąder parzystych. Nieparzysty nukleon generuje zaburzenie średniego pola łamiące symetrię względem odwrócenia czasu a więc i degenerację Kramersa. Teraz pominiemy ten efekt tak, jakby był on mały dla jąder nieparzystych. Zatem stany dzielą się na grupy μ i $\bar{\mu}$, z $\epsilon_\mu = \epsilon_{\bar{\mu}}$, $D_{\bar{\mu}\bar{\nu}} = D^*_{\mu\nu}$, a $\rho_{\mu\bar{\nu}} = \rho_{\bar{\mu}\nu} = \kappa_{\mu\nu} = \kappa_{\bar{\mu}\bar{\nu}} = 0$. Wobec tego (2.77) przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \hbar\partial_\tau\bar{\rho}_{\mu\nu}(\tau) &= (\epsilon_\nu(q) - \epsilon_\mu(q))\bar{\rho}_{\mu\nu}(\tau) - \bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}(\tau)\Delta^*(-\tau) - \Delta(\tau)\bar{\kappa}^*_{\bar{\mu}\nu}(-\tau) \\ &+ [\bar{\rho}(\tau), \hat{D}]_{\mu\nu}, \end{aligned} \tag{2.78}$$

$$\begin{aligned}\hbar\partial_\tau\bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}(\tau) &= \Delta(\tau)(\delta_{\mu\nu}-\bar{\rho}_{\mu\nu}(\tau)-\bar{\rho}^*_{\bar{\mu}\bar{\nu}}(-\tau))-(\epsilon_\nu(q)+\epsilon_\mu(q)-2\lambda)\bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}(\tau)\\ &+ (\bar{\kappa}(\tau)\hat{D}^*-\hat{D}\bar{\kappa}(\tau))_{\mu\bar{\nu}},\end{aligned}$$

gdzie: $[\bar{\rho}(\tau),\hat{D}]_{\mu\nu} = \sum_{\beta>0}\bar{\rho}_{\mu\beta}(\tau)D_{\beta\nu}(\tau) - D_{\mu\beta}(\tau)\bar{\rho}_{\beta\nu}(\tau))$, a: $(\bar{\kappa}(\tau)\hat{D}^* - \hat{D}\bar{\kappa}(\tau))_{\mu\bar{\nu}} = \sum_{\beta>0}(\bar{\kappa}_{\mu\bar{\beta}}(\tau)\hat{D}^*_{\bar{\beta}\bar{\nu}}(\tau) - D_{\mu\beta}(\tau)\bar{\kappa}_{\beta\bar{\nu}}(\tau))$. Analogicznie można napisać drugą połowę równań na $\bar{\rho}_{\bar{\mu}\bar{\nu}}$ oraz $\bar{\kappa}_{\bar{\mu}\nu} = -\bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}$.

W omawianym przypadku równanie (2.74) rozbija się na dwa niezależne z macierzami:

$$\begin{pmatrix}\hat{\epsilon}(q)+\hat{D}, & -\Delta(\tau)\cdot\hat{I}\\ -\Delta^*(-\tau)\cdot\hat{I}, & -\hat{\epsilon}(q)+\hat{D}\end{pmatrix} \text{ oraz : } \begin{pmatrix}\hat{\epsilon}(q)+\hat{D}^*, & \Delta(\tau)\cdot\hat{I}\\ \Delta^*(-\tau)\cdot\hat{I}, & -\hat{\epsilon}(q)+\hat{D}^*\end{pmatrix}. \tag{2.79}$$

Rozwiązaniami z $\zeta_i > 0$ niech będą dla pierwszego równanie amplitudy: $(A_{\mu i}(\tau), B_{\bar{\mu}i}(\tau))$ a dla drugiego: $(A_{\bar{\mu}\bar{i}}(\tau), B_{\mu\bar{i}}(\tau))$; wtedy rozwiązaniami z $\zeta_i < 0$ są: $(B^*_{\bar{\mu}i}(-\tau), A^*_{\mu i}(-\tau))$ – drugiego równania, a $(B^*_{\mu\bar{i}}(-\tau), A^*_{\bar{\mu}\bar{i}}(-\tau))$ – pierwszego.

Gdy $\hat{D} = \hat{D}^*$, co zachodzi np. dla średniego pola $\hat{h}$ o symetrii osiowej lub odbiciowej w trzech płaszczyznach prostopadłych [3], Δ również będzie rzeczywista i wtedy rozwiązaniem drugiego równania jest $(A_{\bar{\mu}\bar{i}}(\tau), B_{\mu\bar{i}}(\tau)) = (A_{\mu i}(\tau), -B_{\bar{\mu}i}(\tau))$. Dla takiego przypadku oba równania dają takie same zestawy ζ_i, zachodzi: $\bar{\rho}_{\bar{\mu}\bar{\nu}} = \bar{\rho}_{\mu\nu}$, $\bar{\kappa}_{\bar{\mu}\nu} = -\bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}$ i wystarcza połowa równań na gęstosci:

$$\begin{aligned}\hbar\partial_\tau\bar{\rho}_{\mu\nu}(\tau) &= (\epsilon_\nu(q)-\epsilon_\mu(q))\bar{\rho}_{\mu\nu}(\tau) - \bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}(\tau)\Delta(-\tau) + \Delta(\tau)\bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}(-\tau)\\ &+ [\bar{\rho}(\tau),\hat{D}]_{\mu\nu},\\ \hbar\partial_\tau\bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}(\tau) &= \Delta(\tau)(\delta_{\mu\nu}-\bar{\rho}_{\mu\nu}(\tau)-\bar{\rho}_{\nu\mu}(\tau))-(\epsilon_\nu(q)+\epsilon_\mu(q)-2\lambda)\bar{\kappa}_{\mu\bar{\nu}}(\tau)\\ &+ [\bar{\kappa}(\tau),\hat{D}]_{\mu\bar{\nu}}.\end{aligned} \tag{2.80}$$

Równania (2.74) stanowią odpowiednik równań (2.49) otrzymanych w metodzie instantonowej bez pairingu. Zauważmy, że w tym przypadku, pomimo poczynionych uproszczeń, nie udało się całkowicie uniknąć problemu nielokalności w czasie, bowiem macierz w równaniach (2.74) zależy zarówno od $\Delta(\tau)$ jak i od $\Delta(-\tau)$. Ponadto funkcja $\Delta(\tau)$ musi być wyznaczona w sposób samozgodny tj. powinna ona spełniać warunek (2.75).

Jak pokazują testy przeprowadzone dla omawianego modelu z pairingiem w przestrzeni stanów ograniczonej do kilku adiabatycznych poziomów potencjału Woodsa-Saxona, iteracyjne rozwiązywanie równań (2.74), równoważnych (2.80), prowadzi do eksponencjalnej zależności $\Delta(\tau)$, która jest duża na odcinku $[-T/2, 0]$ a mała na $[0, T/2]$, przy niewielkiej zmienności iloczynu $\Delta(\tau)\Delta(-\tau)$. Widać więc, że w porównaniu z przypadkiem bez pairingu równania (2.74) charakteryzuje wyższy stopień skomplikowania, a poszukiwanie ich rozwiązań obarczone jest dodatkowymi trudnościami. Z uwagi na te komplikacje, na poziomie niniejszej pracy

[3] Kształty o deformacjach: β, γ, β_{40}, $\beta_{42} = \beta_{4-2}$, $\beta_{44} = \beta_{4-4}$, itd.

ograniczymy się do badań rozwiązań instantonowych bez pairingu, pokazujemy tu jednak, że sformułowanie naszej metody w sposób uwzględniający korelację par jest możliwe i może stanowić punkt wyjścia dla dalszych studiów.

Uwagi poczynione w poprzednim podrozdziale dotyczące konsekwencji wynikających z rezygnacji z samozgodnego opisu problemu pozostają ważne również w przypadku metody instantonowej z pairingiem.

Zakładając, że rozwiązanie równań (2.74) zostało znalezione, możemy zapisać odpowiadające mu działanie (2.70) dla jądra parzystego, jako:

$$S = \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \left\{ -\sum_{i>0} \zeta_i - \sum_{\mu>0} \left((2\bar{\rho}_{\mu\mu}(\tau) - 1)(\epsilon_\mu(\tau) - \lambda) + \Delta(\tau)\bar{\kappa}^*_{\mu\bar{\mu}}(-\tau) + \bar{\kappa}_{\mu\bar{\mu}}(\tau)\Delta^*(-\tau) \right) \right\}$$

$$= \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \left\{ -\sum_{i>0} \zeta_i - \sum_{\mu>0} (2\bar{\rho}_{\mu\mu}(\tau) - 1)(\epsilon_\mu(\tau) - \lambda) + 2\frac{\Delta(\tau)\Delta^*(-\tau)}{G} \right\}, \quad (2.81)$$

gdzie sumowanie przebiega po połowie rozwiązań $i > 0$ i połowie poziomów $\mu > 0$, a ostatnia równość zachodzi dla rozwiązania samozgodnego. Dla jądra nieparzystego należy dokonać zmiany obsadzeń (2.65).

W granicy bez pairingu, dodatnimi wykładnikami Floqueta rozsprzężonych równań (2.74) będą: dla amplitud A: $\zeta_i^{NP} - \lambda$ dla stanów pustych, a dla B: $\lambda - \zeta_i^{NP}$ dla stanów zajętych, gdzie ζ_i^{NP} są wykładnikami Floqueta instantonów bez pairingu. Gęstość $\bar{\rho}_{\mu\mu}$ tworzą stany zajęte, a więc jest ona równa $\sum_{i>0,\zeta_i<\lambda} p_{\mu i}$ w terminach wielkości zdefiniowanych w poprzednim podrozdziale; dla stanów $i > 0$ zachodzi: $2\bar{\rho}_{\mu\mu} - 1 = \sum_{\zeta_i<\lambda} p_{\mu i} - \sum_{\zeta_i>\lambda} p_{\mu i}$ (bo $\sum_{i>0} p_{\mu i} = 1$). Wobec tego suma pod całką (2.81) jest różnicą sum: $\sum_{\zeta_i<\lambda} - \sum_{\zeta_i>\lambda}$ wyrażeń: $(\zeta_i^{NP} - \lambda) - \sum_{\mu>0} p_{\mu i}(\epsilon_\mu - \lambda)$. Człony z λ znikają przy sumowaniu wskutek: $\sum_{\mu>0} p_{\mu i} = 1$; zatem otrzymuje się różnicę sum działań bez pairingu dla instantonów $i > 0$ pod i nad powierzchnią Fermiego. W poprzednim podrozdziale podaliśmy, że te sumy dodane dają zero; otrzymujemy zatem $2\times$ sumę działań dla stanów zajętych $\mu > 0$, tzn. działanie bez pairingu dla wszystkich stanów (tzn. μ i $\bar{\mu}$) zajętych.

Podczas iteracyjnego znajdowania $\Delta(\tau)$ wartość założona w kolejnym kroku nie będzie na ogół równa wartości $\Delta_r(\tau)$ wynikającej ze scałkowania równania (2.74) w tym kroku. Korzystając z równań na ewolucję gęstości zwykłej i anomalnej otrzymamy:

$$\hbar\frac{\partial \Delta_r}{\partial \tau} = G\left[(N_r - \mathcal{N}) - 2\sum_{\mu>0} (\epsilon_\mu(\tau) - \lambda)\kappa_{\bar{\mu}\mu}(\tau) \right], \quad (2.82)$$

gdzie $N_r = 2\sum_{\mu>0} \rho_{\mu\mu}(\tau)$ jest wartością oczekiwaną liczby cząstek, niekoniecznie równą

założonej, a $\mathcal{N}$ - liczbą podwójnie zdegenerowanych poziomów. Z kolei:

$$\hbar\frac{\partial N_r}{\partial \tau} = \frac{2}{G}\left(\Delta_r(\tau)\Delta^*(-\tau) - \Delta(\tau)\Delta_r^*(-\tau)\right). \tag{2.83}$$

Ponownie widzimy stąd, że oczekiwana liczba cząstek jest stała dla rozwiązania samozgodnego $\Delta_r(\tau) = \Delta(\tau)$.

Podkreślmy na koniec, że w omawianym tu formalizmie dostajemy równanie opisujące zmienność $\Delta(\tau)$ w procesie rozszczepienia (2.82). Idee dotyczące traktowania parametru Δ jako dynamicznej zmiennej pojawiły się już w pracach [66, 67, 68]. Tam jednak parametr ten pełnił rolę dodatkowej, niezależnej zmiennej kolektywnej dołączanej do przestrzeni parametrów deformacji, w której następnie minimalizowano działanie; otrzymana trajektoria w tak rozszerzonej przestrzeni określała zmienność Δ w trakcie rozszczepienia. Tymczasem w naszej metodzie zmiany $\Delta(\tau)$ na ścieżce rozszczepieniowej, określone równaniem (2.82), wynikają wprost z dynamiki hamiltonowskiej.

3. Numeryczne rozwiązywanie równania instantonowego

3.1. Metoda fourierowska

Interesujące nas rozwiązania układu równań (2.49) powinny spełniać periodyczny warunek brzegowy: $c_i(-T/2) = c_i(T/2)$, gdzie T – okres. Spełnienie tego warunku możemy automatycznie zapewnić, poszukując rozwiązań w postaci szeregu Fouriera:

$$c_i(\tau) = \frac{a_{i0}}{2} + \sum_{n=1}^{N}(a_{in}\cos(n\omega\tau) + b_{in}\sin(n\omega\tau)), \tag{3.1}$$

gdzie $\omega = 2\pi/T$, N - liczba składowych harmonicznych wzięta do obliczeń. Analogicznie należy rozwinąć w szeregi Fouriera pozostałe wielkości występujące w równaniach (2.49) tj. energie jednocząstkowe oraz elementy macierzowe pochodnych stanów:

$$\varepsilon_j(q(\tau)) = \frac{e_0^j}{2} + \sum_{n=1}^{N}(e_{c,n}^j\cos(n\omega\tau) + e_{s,n}^j\sin(n\omega\tau)), \tag{3.2}$$

$$\dot{q}\langle\psi_j(q(\tau))|\partial_q\psi_i(q(\tau))\rangle = \frac{f_0^{ji}}{2} + \sum_{n=1}^{N}(f_{c,n}^{ji}\cos(n\omega\tau) + f_{s,n}^{ji}\sin(n\omega\tau)). \tag{3.3}$$

Powyższe rozwinięcia wstawiamy do wyjściowego układu równań i wykonujemy odpowiednie iloczyny zatrzymując wyrazy do N-tej harmonicznej włącznie. W efekcie każde z równań różniczkowych na c_j ($j = 1, .., K$) rozpada się na $2N + 1$ równań algebraicznych, zatem w sumie otrzymujemy układ $K(2N + 1)$ równań, które można zapisać w zwartej, macierzowej postaci jako:

$$\mathbf{F}\mathbf{X} = \zeta\mathbf{X}, \tag{3.4}$$

gdzie $\mathbf{F}$ jest macierzą o wymiarze $(K(2N+1)) \times (K(2N+1))$ zawierającą współczynniki Fouriera z szeregów (3.2) i (3.3), natomiast $\mathbf{X}$ jest kolumnowym wektorem zawierającym poszukiwane współczynniki rozkładu (3.1) tj. $(a_{10}, a_{11}, ..., a_{1N}, b_{11}, ..., b_{1N}, ..., a_{j0}, a_{j1}, ..., a_{jN}, b_{j1}, ..., b_{jN}, ..., a_{K0}, a_{K1}, ..., a_{KN}, b_{K1}, ..., b_{KN})$. Widzimy zatem, że problem znalezienia rozwiązania wyjściowego układu równań różniczkowych z periodycznym warunkiem brzegowym został sprowadzony do zagadnienia

własnego dla macierzy $\mathbf{F}$. Spośród otrzymanych wektorów własnych wybieramy K rozwiązań odpowiadających rzeczywistym wykładnikom Floqueta ζ (zgodnie z ich fizyczną interpretacją jako energii jednocząstkowych).

Przedstawiona powyżej procedura została zastosowana do pierwszych, podstawowych badań metody instantonowej w najprostszych przypadkach. Niestety w praktycznych obliczeniach dla fizycznie interesujących przypadków algorytm ten okazał się mało efektywny. Wynika to z faktu, że występujące w równaniach elementy sprzęgające $\langle\psi_j(q(\tau))|\partial_q\psi_i(q(\tau))\rangle$ mają przebieg, w którym występują wysokie, ostro zlokalizowane w q piki będące następstwem występowania ostrych pseudoprzecięć między poziomami energetycznymi potencjału jądrowego. Sytuację dodatkowo pogarsza fakt, że elementy te musimy rozłożyć na szereg Fouriera w funkcji czasu urojonego τ, nie zaś deformacji q. Przebieg $q(\tau)$, tak jak wspomniano w poprzednim rozdziale, charakteryzuje się asymptotycznym dążeniem do q_{ini} dla $T \to \pm\infty$ i główna zmiana q odbywa się tylko w pewnym przedziale czasu $\Delta\tau$, a stosunek $\Delta\tau/T$ staje się mały w miarę wydłużania okresu T. Efekt ten powoduje jeszcze silniejsze zlokalizowanie wspomnianych pików w przebiegu czasowym. Tego typu struktury są naturalnie trudne do odtworzenia przy pomocy nakładania kolejnych funkcji sinus i cosinus, co powoduje konieczność uwzględniania dalekich składowych harmonicznych w szeregu Fouriera (w praktyce $N > 1000$). To z kolei przekłada się na szybko rosnący wymiar macierzy $\mathbf{F}$ w miarę rozszerzania przestrzeni stanów adiabatycznych branych do obliczeń i, w konsekwencji, trudności w jej diagonalizacji w rozsądnym czasie obliczeniowym. Ponadto już z samej postaci równań (2.49) widać eksponencjalny charakter ich rozwiązań, zatem można podejrzewać, że do ich reprezentacji baza fourierowska nie będzie wyborem optymalnym.

Wskazane trudności w zastosowaniu powyższego algorytmu do praktycznych obliczeń spowodowały konieczność poszukiwania innej, bardziej efektywnej metody znajdowania rozwiązań równania instantonowego.

3.2. Metoda macierzy monodromii

Zauważmy, że wyjściowe równania (2.49) bez członu z ζ_i tj:

$$\hbar\frac{\partial c_{\mu i}}{\partial\tau} = -\varepsilon_\mu(q(\tau))c_{\mu i} - \dot{q}\sum_{\nu}^{\mathcal{N}}\langle\psi_\mu(q(\tau)) \mid \frac{\partial\psi_\nu}{\partial q}(q(\tau))\rangle c_{\nu i} \tag{3.5}$$

są postaci: $\dot{\mathbf{C}}_i = \mathbf{A}(\tau)\mathbf{C}_i$, gdzie macierz $\mathbf{A}(\tau)$ jest okresowa: $\mathbf{A}(-T/2) = \mathbf{A}(T/2)$, zaś $\mathbf{C}_i$ jest wektorem kolumnowym współczynników $c_{\mu i}$ odpowiadających i-temu rozwiązaniu. Do równań tego typu stosuje się twierdzenie Floqueta, zgodnie z którym liniowo niezależne rozwiązania można przedstawić w postaci:

$$\mathbf{C}_i(\tau) = \mathbf{P}_i(\tau)e^{-\zeta_i\tau}, \tag{3.6}$$

gdzie $\mathbf{P}_i(\tau)$ jest pewną funkcją okresową o okresie T natomiast ζ_i są pewnymi stałymi, zwanymi wykładnikami Floqueta, takimi że $e^{-\zeta_i T}$ są wartościami własnymi tzw. macierzy monodromii $\mathbf{M} = \mathbf{\Phi}^{-1}(-T/2)\mathbf{\Phi}(T/2)$ ($\mathbf{\Phi}(\tau)$ oznacza macierz fundamentalną układu). Dla celów rozwiązania naszego równania będziemy zakładać warunki początkowe postaci $\mathbf{\Phi}(-T/2) = \mathbf{I}$ (macierz jednostkowa), zatem $\mathbf{M} = \mathbf{\Phi}(T/2)$. Podstawiając tę postać (3.6) do równania (3.5) otrzymujemy równanie spełniane przez nieznane funkcje periodyczne:

$$\dot{\mathbf{P}}_i = (\mathbf{I}\zeta_i - \mathbf{A})\mathbf{P}_i(\tau) \tag{3.7}$$

z warunkiem brzegowym $P_{ki}(-T/2) = P_{ki}(T/2) = v_{ki}$, gdzie v_{ki} oznacza k-tą składową, i-tego wektora własnego macierzy $\mathbf{M}$. Widzimy, że otrzymaliśmy w ten sposób równania o takiej samej postaci jak równania instantonowe (2.49), przy czym wykładnik Floqueta i warunki brzegowe dane są odpowiednio przez wartości i wektory własne macierzy monodromii.

Bazując na powyższych rozważaniach algorytm rozwiązywania równania instantonowego z użyciem macierzy monodromii możemy sformułować następująco:

1. Wyliczamy macierz fundamentalną rozwiązań $\mathbf{\Phi}(T/2)$ równania (3.5) całkując je w przód krok po kroku w przedziale $\tau \in \langle -T/2, T/2\rangle$ z warunkiem startowym $\mathbf{\Phi}(-T/2) = \mathbf{I}$. Otrzymujemy w ten sposób macierz monodromii $\mathbf{M} = \mathbf{\Phi}(T/2)$.
2. Wyliczamy wektory i wartości własne macierzy $\mathbf{M}$.
3. Wstawiając kolejne wartości własne jako ζ całkujemy numerycznie równanie instantonowe przyjmując za warunek początkowy odpowiednie wektory własne (w punkcie końcowym $\tau = T/2$, zgodnie z periodycznym warunkiem brzegowym, powinniśmy odtworzyć wartości startowe). Dostajemy w ten sposób $\mathcal{N}$ liniowo niezależnych rozwiązań instantonowych.

W pracy przy rozwiązywaniu równania przyjęto, że macierz $\mathbf{A}$ jest w obrębie danego kroku całkowania stała i przyjmuje wartość środkową w tym przedziale. Pozwala to wyznaczyć rozwiązanie na tym odcinku jako:

$$\mathbf{C}(\tau_{i+1}) = e^{(\mathbf{A}(\tau_{i+1}-\tau_i))}\mathbf{C}(\tau_i) = \mathbf{G}(\tau_{i+1}, \tau_i)\mathbf{C}(\tau_i). \tag{3.8}$$

Przedstawiony powyżej schemat znajdowania rozwiązań instantonowych uzupełnimy obecnie o dyskusję problemów numerycznych związanych ze skończoną precyzją obliczeń komputerowych i wskazując użyte w pracy techniki służące do pokonania tych trudności.

Zauważmy przede wszystkim, że postać wyjściowych równań (3.5) wskazuje na wykładnicze zachowanie ich rozwiązań, można je zapisać w postaci z wydzielonym czynnikiem wykładniczym jako:

$$c_i(\tau) = \tilde{c}_i(\tau)e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-T/2}^{\tau}\varepsilon_i(q(\tau))d\tau'} \tag{3.9}$$

Czynnik ten jest odpowiednikiem fazy w mechanice kwantowej czasu rzeczywistego. W miarę

ewolucji prowadzi on do eksponencjalnej rozbieżności poszczególnych współczynników c_i i wzmacniania (w sensie wielkości) współczynnika stanu o najniższej energii względem stanów wyższych. Widać więc, że w rozwiązywanym problemie mamy do czynienia z różnymi skalami wielkości, tak więc proste wymnażanie kolejnych macierzy propagacji $\mathbf{G}(\tau_{i+1}, \tau_i)$ (równanie 3.8) będzie prowadziło do operacji na liczbach różniących się rzędami wielkości (mieszania różnych skal) i, w konsekwencji ograniczonej precyzji numerycznej, do utraty informacji. Należy więc w trakcie kolejnych kroków całkowania konsekwentnie separować skale wielkości. Odpowiednia technika wykorzystująca rozkład macierzy według wartości osobliwych (SVD od ang. *Singular Value Decomposition*) została szczegółowo opisana w [69], poniżej podany zostanie krótki opis tej procedury w wersji zastosowanej w niniejszej pracy:

1. Dokonujemy rozkładu SVD macierzy propagacji wyznaczonej w pierwszym kroku całkowania: $\mathbf{G}(\tau_1, -T/2) = \mathbf{U}_1\mathbf{\Sigma}_1\mathbf{V}_1$, gdzie $\mathbf{U}_1$ i $\mathbf{V}_1$ są macierzami ortogonalnymi, zaś macierz $\mathbf{\Sigma}_1$ jest diagonalną macierzą z wartościami osobliwymi na głównej przekątnej, w których zawarta jest informacja o skalach wielkości występujących w problemie.
2. Dla kolejnych kroków całkowania wykonujemy następujące operacje:
   a) wyliczamy macierz propagacji na i-tym odcinku: $\mathbf{G}(\tau_i, \tau_{i-1}) = exp(\mathbf{A}(\tau_i - \tau_{i-1}))$
   b) wymnażamy macierze w kolejności wyznaczonej przez nawiasy w wyrażeniu: $[(\mathbf{G}(\tau_i, \tau_{i-1})\mathbf{U}_{i-1})\,\mathbf{\Sigma}_{i-1}] = \mathbf{S}_i$,
   c) dokonujemy rozkładu SVD otrzymanej macierzy $\mathbf{S}_i$: $\mathbf{S}_i = \mathbf{U}_i\mathbf{\Sigma}_i\widetilde{\mathbf{V}}_i$,
   d) wymnażamy macierze $\mathbf{V}$: $\mathbf{S}_i\mathbf{V}_{i-1} = \mathbf{U}_i\mathbf{\Sigma}_i(\widetilde{\mathbf{V}}_i\mathbf{V}_{i-1}) = \mathbf{U}_i\mathbf{\Sigma}_i\mathbf{V}_i$ otrzymując w ten sposób rozkład SVD macierzy propagacji na odcinku $(-T/2, \tau_i)$ z rozseparowanymi skalami wielkości przechowywanymi na diagonali macierzy $\mathbf{\Sigma}_i$.
3. Kroki opisane w poprzednim punkcie wykonujemy wzdłuż całego przedziału całkowania ($i = 1, \ldots, N$) otrzymując ostatecznie macierz monodromii w postaci: $\mathbf{M} = \mathbf{G}(T/2, -T/2) = \mathbf{U}_N\mathbf{\Sigma}_N\mathbf{V}_N$

Jako że macierz monodromii jest macierzą hermitowską i dodatnio określoną (co zostanie pokazane za chwilę), to otrzymany rozkład SVD jest jednocześnie poszukiwanym rozkładem na wartości własne, które są tożsame z wartościami osobliwymi: $\mathbf{U}_N\mathbf{\Sigma}_N\mathbf{V}_N = \mathbf{WDW}^\dagger$.

Zapiszmy teraz macierz monodromii w postaci: $\mathbf{M} = \mathbf{G}(T/2, -T/2) = \mathbf{G}(T/2, 0)\mathbf{G}(0, -T/2)$. Można łatwo pokazać, że spełniony jest warunek $\mathbf{G}(T/2, 0) = \mathbf{G}^\dagger(0, -T/2)$ – wynika on wprost z własności $\mathbf{A}(\tau) = \mathbf{A}^\dagger(-\tau)$ spełnianej przez macierz równania różniczkowego. Zatem $\mathbf{M} = \mathbf{G}^\dagger(0, -T/2)\mathbf{G}(0, -T/2)$ skąd już widać, że macierz $\mathbf{M}$ jest hermitowska i dodatnio określona. Z powyższego przedstawienia wynika również, że wystarczy równanie scałkować na połówce okresu, w przedziale $(-T/2, 0)$, by znaleźć macierz monodromii. Mając na uwadze wykładniczy charakter rozwiązań (3.9), własność ta została wykorzystana w napisanych kodach numerycznych celem uniknięcia wielkości wykraczających poza minimalną/maksymalną liczbę możliwą do reprezentacji w pamięci komputera (w

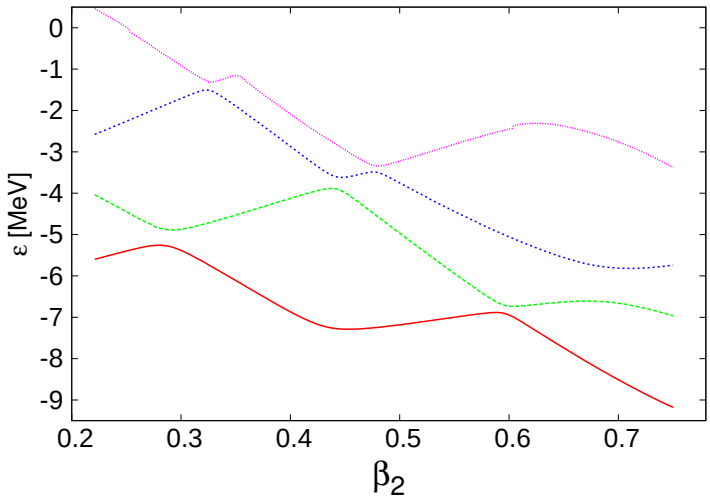
stosowanej w obliczeniach podwójnej precyzji zakres ten wynosi: $(10^{-308}, 10^{308})$).

Drugim problemem wymagającym specjalnego potraktowania jest niestabilność rozwiązań instantonowych odpowiadających wykładnikom Floqueta o wartościach $\zeta_i > \zeta_1$ (gdzie ζ_1 jest najmniejszą otrzymaną wartością), o której wspomniano w rozdziale 2.4. Z równania (2.43) wynika, że jeśli przekrycia tych stanów ze stanami o niższych ζ w chwili początkowej są niezerowe, to w miarę upływu czasu będą narastać wykładniczo. W praktyce numerycznej oznacza to, że wynikający z ograniczonej precyzji błąd w przekryciach stanów będzie wzmacniany eksponencjalnie prowadząc do rosnącej domieszki stanów niższych i tym samym uniemożliwiając uzyskanie poprawnego rozwiązania. Celem eliminacji wpływu tego typu niedokładności przy rozwiązywaniu równania dla danego ζ_k wprowadzono dodatkowo ortogonalizację względem rozwiązań o $\zeta_i < \zeta_k$ po każdym kroku całkowania. Do ortogonalizacji zastosowano standardową metodę Grama-Schmidta.

3.3. Testy poprawności uzyskiwanych rozwiązań

Celem sprawdzenia poprawności napisanych kodów numerycznych dokonano porównania wyników dawanych przez program stosujący algorytm fourierowski z programem wykorzystującym metodę macierzy monodromii. Obliczenia testowe przeprowadzono na wybranym przypadku czterech poziomów neutronowych $1/2^+$ potencjału Woodsa-Saxona dla ^{272}Mt wziętych wzdłuż osiowej ścieżki rozszczepieniowej sparametryzowanej przez β_2 – ich przebieg przedstawia rysunek 3.1 Wyniki uzyskanych działań zestawiono w tabeli 3.1. Z porównania wartości działań widać, że różnice wyników dawanych przez obie metody nie przekraczają 3% (z wyjątkiem przypadku, gdzie S jest bliskie 0), co można uznać za zadowalającą zgodność. Drobne rozbieżności mogą wynikać m.in. z faktu, że inaczej traktujemy przebiegi energii poziomów i ich przekryć w obu przypadkach: w podejściu fourierowskim przybliżamy je odpowiednim szeregiem (a więc funkcją ciągłą), zaś w metodzie monodromii przybliżamy je odpowiednio gęstą siatką dyskretnych punktów i traktujemy jako odcinkami stałe przy całkowaniu równania. Dodatkowo przeprowadzono następujące testy:

1. Wykonanie obliczeń dla wybranych przypadków w modelu dwupoziomowym (rozdział 4.1) w obu bazach tj. adiabatycznej i diabatycznej. Działanie, będąc wielkością skalarną, nie powinno zależeć od wyboru bazy i w istocie otrzymano zgodne wyniki w obu reprezentacjach.
2. Sprawdzenie stabilności działania względem gęstości próbkowania danych wejściowych potencjału WS tj. sprawdzenie, że począwszy od pewnego kroku $\Delta\beta_{20}$ dalsze zagęszczanie danych nie wpływało na wynik. W rachunkach osiowo symetrycznych wystarczający okazał się krok rzędu $\Delta\beta_{20} \sim 10^{-4}$, natomiast rachunki nieosiowe są pod tym względem znacznie trudniejsze (patrz: rozdział 5).



Rysunek 3.1: Poziomy neutronowe $1/2^+$ potencjału Woodsa-Saxona wzdłuż scieżki rozszczepieniowej w przestrzeni deformacyjnej β_2, β_4 dla jądra Z=109, N=183.

Rozwiązanie	$S_f/\hbar$	$S_m/\hbar$	$\frac{\lvert S_f - S_m \rvert}{\lvert S_m \rvert} * 100\%$
1	2,4895	2,4347	2,3%
2	0,0143	0,0123	16,2%
3	16,6305	16,2764	2,2%
4	-18,9982	-18,7133	1,5%

Tabela 3.1: Porównanie wartości działań otrzymanych programem fourierowskim (S_f) i metodą macierzy monodromii (S_m) dla kolejnych rozwiązań instantonowych odpowiadających układowi poziomów przedstawionych na rysunku 3.1.

3. Sprawdzenie spełnienia warunku $\sum_i^{\mathcal{N}} S_i = 0$ (gdzie $\mathcal{N}$ jest wymiarem bazy wziętej do obliczeń – patrz rozdz. 2.4). Odstępstwa otrzymywanych wyników od tej równości były maksymalnie rzędu $\sim 10^{-3}$.
4. Kontrolne obliczenia dla wybranego przypadku w poczwórnej precyzji numerycznej. Otrzymano rezultaty zgodne z wartościami obliczonymi w podwójnej precyzji.

4. Rozwiązania instantonowe i ich własności

Omówimy teraz zachowanie się rozwiązań równań instantonowych (2.49) i wynikających z nich działań na wybranych przykładach. Zaczniemy od prostego modelu dwupoziomowego, gdzie pokażemy zależność rozwiązań i otrzymywanych działań S od parametrów opisujących przebieg poziomów energetycznych. Poświęcimy tu szczególną uwagę przypadkom ostrych pseudoprzecięć oraz granicy adiabatycznej. W dalszej części przejdziemy do bardziej realistycznego przypadku stanów zdeformowanego potencjału Woodsa-Saxona (1.4).

4.1. Model dwupoziomowy

4.1.1. Analiza zależności działania od parametrów modelu

Rozważmy układ dwupoziomowy opisany hamiltonianem:

$$\hat{H}(q(\tau)) = \begin{pmatrix} E_1(q(\tau)) & V \\ V^* & E_2(q(\tau)) \end{pmatrix}, \tag{4.1}$$

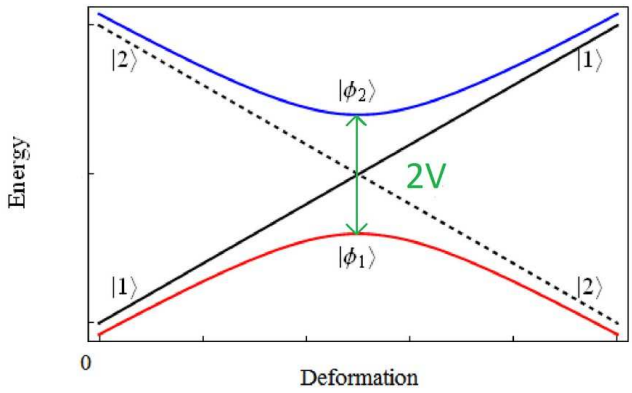
gdzie $q(\tau)$ jest pewnym, zależnym od czasu urojonego parametrem układu, który może reprezentować np. deformację jądra. Przyjmiemy, że $E_{1,2} = \pm E(q - q_0) + E_0$, a więc że energie będące elementami diagonalnymi hamiltonianu zmieniają się liniowo z q i przecinają się w punkcie q_0. W dalszych rozważaniach będziemy dla uproszczenia zakładać $E_0 = 0$ oraz że oddziaływanie między poziomami jest rzeczywiste tj. $V = V^*$. Bazę stanów $\left(|\chi_1\rangle = (1,0)^T, |\chi_2\rangle = (0,1)^T\right)$, w której hamiltonian ma powyższą postać, nazywać będziemy **bazą diabatyczną** w odróżnieniu od jego bazy własnej zwanej, jak wiemy, **bazą adiabatyczną**. Tak sformułowany model jest bliskim analogiem modelu dwupoziomowego rozważanego przez Landaua i Zenera [70, 71] w mechanice kwantowej czasu rzeczywistego.

Hamiltonian (4.1) możemy zdiagonalizować otrzymując jego energie własne w postaci:

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{2}\left[(E_1 - E_2) \mp \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4V^2}\right] \tag{4.2}$$

oraz odpowiadające im wektory własne:

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \tag{4.3}$$



Rysunek 4.1: Schematyczne przedstawienie stanów adiabatycznych $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ oraz diabatycznych $|\chi_1\rangle, |\chi_1\rangle$ (na rysunku oznaczonych jako $|1\rangle, |2\rangle$) w modelu dwupoziomowym.

gdzie $\tan\theta = \frac{2V}{E_1 - E_2}$. Z powyższych zależności widać, że daleko „na lewo" od pseudoprzecięcia (tj. dla $q < q_0$), kąt mieszania $\theta \to 0$ i w konsekwencji stany adiabatyczne dążą do stanów diabatycznych $|\phi_{1,2}\rangle \to |\chi_{1,2}\rangle$. W punkcie pseudoprzecięcia q_0, $\theta = -\pi/2$ i mieszanie się stanów jest maksymalne. Energie diabatyczne przecinają się w tym punkcie $E_1 = E_2$, natomiast energie stanów adiabatycznych wskutek istnienia niezerowego oddziaływania V nie przecinają się, a jedynie zbliżają na minimalną odległość $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = 2V$. Z kolei daleko „na prawo" ($q > q_0$) kąt $\theta \to -\pi$ i w efekcie $|\phi_1\rangle \to -|\chi_2\rangle$ (zmiana znaku!) $|\phi_2\rangle \to |\chi_1\rangle$, a więc po przejściu przez obszar pseudoprzecięcia nastąpiła wymiana charakterystyk stanów adiabatycznych. Sytuacja ta i odpowiednie zachowanie się energii własnych oraz diabatycznych zostały zilustrowane na rysunku 4.1.

Korzystając ze wzorów (4.3) znajdujemy występujące w równaniach instantonowych sprzężenie między poziomami:

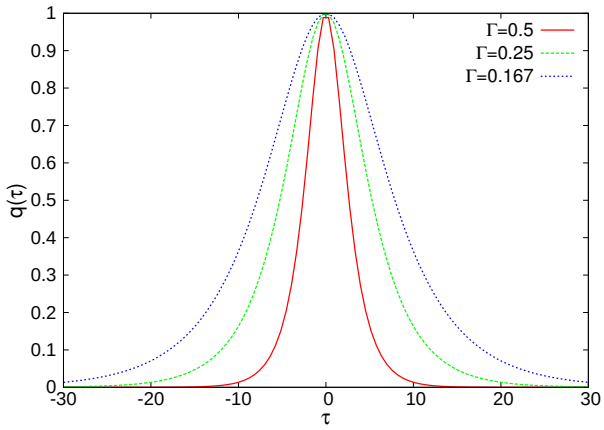
$$\left\langle \phi_1 \middle| \frac{d\phi_2}{dq} \right\rangle = -\frac{1}{2}\frac{d\theta}{dq} = \frac{1}{2}\frac{EV}{E^2(q-q_0)^2 + V^2} = \frac{1}{2}\frac{\alpha}{(q-q_0)^2 + \alpha^2}, \tag{4.4}$$

gdzie wprowadziliśmy parametr $\alpha = V/E$. Z powyższego wzoru widać, że sprzężenie między poziomami opisywane jest rozkładem Lorentza z maksimum w q_0 oraz szerokością i wysokością regulowaną przez α. W granicy oddziaływania dążącego do zera tj. $\alpha \to 0$ element sprzęgający dąży do δ-Diraca.

W celu pełnego określenia modelu należy jeszcze zadać zależność $q(\tau)$ i wynikający z niej przebieg prędkości kolektywnej $\dot{q}(\tau)$. W rachunkach, których wyniki zostaną przedstawione w dalszej części rozdziału, przyjęto następującą postać tej zależności:

$$q(\tau) = \frac{q_{fin} - q_{ini}}{\cosh(\Gamma\tau)} + q_{ini}, \tag{4.5}$$

gdzie $q_{ini},\ q_{fin}$ oznaczają odpowiednio wartość początkową i końcową współrzędnej kolektyw-



Rysunek 4.2: Przebieg $q(\tau)$ dla różnych wartości parametru Γ.

nej (początek i koniec bariery energetycznej). Tak zdefiniowane $q(\tau)$, ma typowy dla instantonu „impulsowy" przebieg (rys. 4.2), o którym była mowa w rozdziale 2.3, tj. ruch odbywa się głównie w skończonym zakresie czasu wokół $\tau = 0$, zaś w obszarze asymptotycznym $q(\tau \to \pm\infty) = q_{ini}$, zgodnie z żądaniem okresowości ruchu.

Równania (2.49) bez członu z ζ mają dla naszego dwupoziomowego układu następującą postać:

$$\hbar\dot{c}_1 = -\varepsilon_1 c_1 - \hbar\dot{q}\langle\phi_1|\partial_q\phi_2\rangle c_2, \tag{4.6}$$

$$\hbar\dot{c}_2 = -\varepsilon_2 c_2 + \hbar\dot{q}\langle\phi_1|\partial_q\phi_2\rangle c_1. \tag{4.7}$$

Korzystając z przyjętych w modelu zależności (4.2), (4.4), (4.5) możemy sprowadzić np. pierwsze z powyższych równań do postaci:

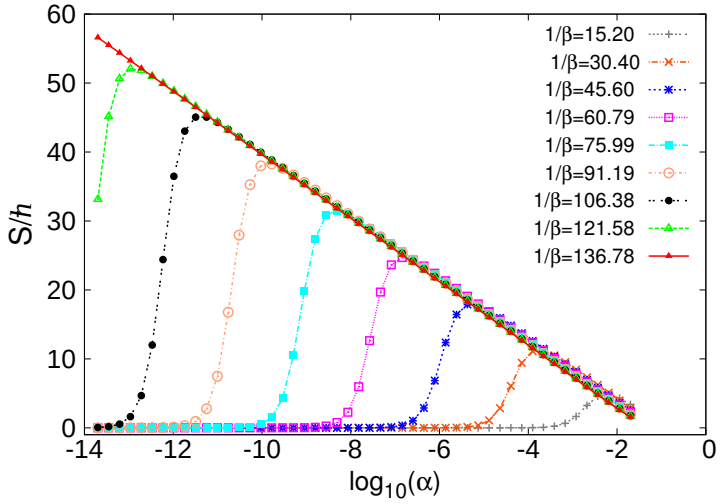
$$\frac{\hbar}{|E|}\dot{c}_1 = \sqrt{(q-q_0)^2+\alpha^2}\,c_1 + \frac{1}{2}\frac{\hbar\Gamma}{|E|}\tanh(\Gamma\tau)\,(q-q_{ini})\,\frac{\alpha}{(q-q_0)^2+\alpha^2}\,c_2. \tag{4.8}$$

Wprowadzając bezwymiarowy parametr czasowy $z = \tau\frac{|E|}{\hbar}$ otrzymujemy ostatecznie:

$$\frac{d}{dz}\tilde{c}_1 = \sqrt{(q-q_0)^2+\alpha^2}\,\tilde{c}_1 + \frac{1}{2}\beta\tanh(\beta z)\,(q-q_{ini})\,\frac{\alpha}{(q-q_0)^2+\alpha^2}\,\tilde{c}_2, \tag{4.9}$$

$$\frac{d}{dz}\tilde{c}_2 = -\sqrt{(q-q_0)^2+\alpha^2}\,\tilde{c}_2 - \frac{1}{2}\beta\tanh(\beta z)\,(q-q_{ini})\,\frac{\alpha}{(q-q_0)^2+\alpha^2}\,\tilde{c}_1, \tag{4.10}$$

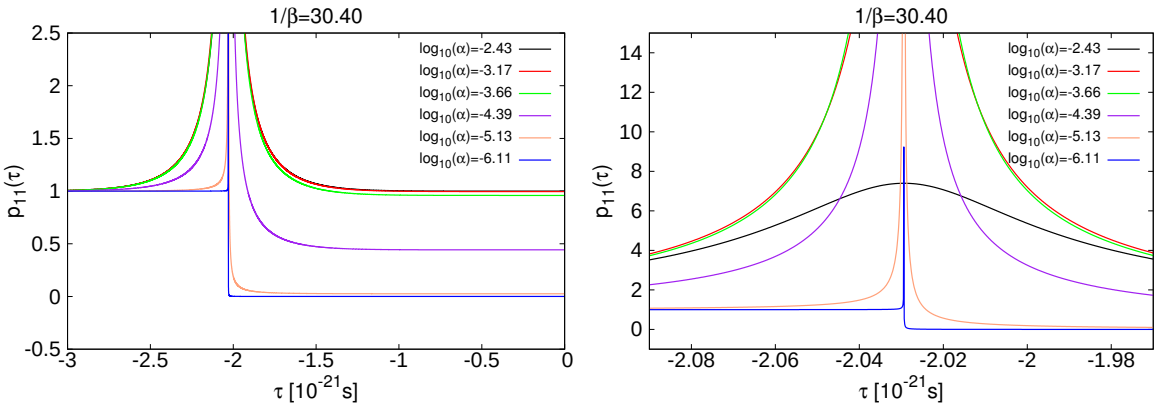
gdzie $\tilde{c}_i(z) = c_i(\tau)$ oraz $\beta = \hbar\Gamma/|E|$. Z powyższej postaci widzimy, że przy ustalonej drodze (q_{ini}, q_{fin}) oraz ustalonym punkcie przecięcia q_0 rozwiązania tych równań, a więc także występująca w (2.49) stała ζ zapewniająca periodyczność rozwiązań, będą zależeć od dwóch parametrów, α i β będących stosunkami energetycznymi odpowiednich wielkości charakteryzujących model dwupoziomowy. Stąd należy oczekiwać, że również działanie będzie funkcją tych dwóch parametrów, tj. $S = S(\alpha, \beta)$. W celu zbadania tej zależności ustalono



Rysunek 4.3: Przebiegi działań S w funkcji α dla kolejnych wartości parametru $1/\beta$.

parametry drogi i punkt przecięcia poziomów, a następnie numerycznie rozwiązano powyższy model dla szeregu parametrów α i β. Jako rozwiązania otrzymano dwa stany dążące w granicy $\tau \to \pm T/2$ do dolnego i górnego stanu adiabatycznego w q_{ini} – stąd będziemy mówili odpowiednio o dolnym i górnym stanie instantonowym. Zakładamy, że dolny stan instantonowy jest obsadzony i dla niego obliczamy odpowiadające mu działanie – wyniki tych obliczeń i ich dyskusję prezentujemy poniżej.

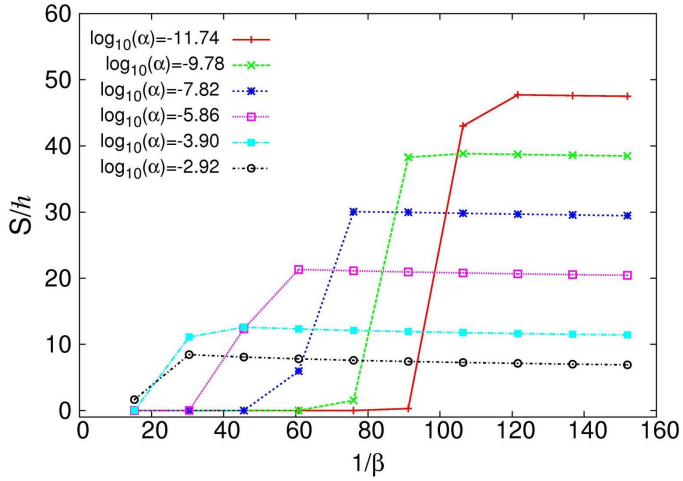
Przyjrzyjmy się wpierw przebiegom działania w funkcji α dla ustalonych wartości β. Parametr α będąc proporcjonalnym do V zdaje sprawę z wielkości oddziaływania między poziomami. Rozpatrzmy dwie skrajne sytuacje. Jeżeli oddziaływanie staje się bardzo duże, to poziomy są mocno odepchnięte od siebie i przejścia między nimi w trakcie ewolucji układu przestają zachodzić — należy się wówczas spodziewać zerowego działania. Z drugiej strony, gdy $V \to 0$ poziomy przestają ze sobą oddziaływać i w tej sytuacji przejścia między nimi również nie zachodzą, co pociąga $S = 0$. Z powyższego rozumowania wynika, że niezerowych działań można się spodziewać dla pośrednich wartości parametru α i że gdzieś po drodze musi wystąpić (przynajmniej jedno) maksimum S. Obliczone przebiegi $S(\alpha)$ przy ustalonym β przedstawiono na rysunku 4.3. Widać, że istotnie funkcja ta wykazuje maksimum dla pewnego α_{max} , zaś dla odpowiednio większych oraz mniejszych wartości α działanie dąży do zera. Wyniki obliczeń pokazują również, że położenie maksimum oraz obu obszarów granicznych (w których $S \approx 0$) zależy od wartości parametru β. Dla lepszej ilustracji i zrozumienia uzyskanego wyniku na rysunku 4.4 przedstawiony został wykres pseudoobsadzeń dolnego poziomu adiabatycznego $p_{11}(\tau)$ dla jednego, wybranego przebiegu z rysunku 4.3 odpowiadającego $1/\beta = 30.40$. Widzimy tutaj, że dla α większych od wartości α_{max} ($\log_{10}(\alpha_{max}) \approx -3.95$) rozwiązanie pozostaje przez większość czasu na dolnym stanie adiabatycznym, jedynie w okolicy pseudoprzecięcia poziomów następuje lokalne wzbudzenie do wyższego stanu, po czym



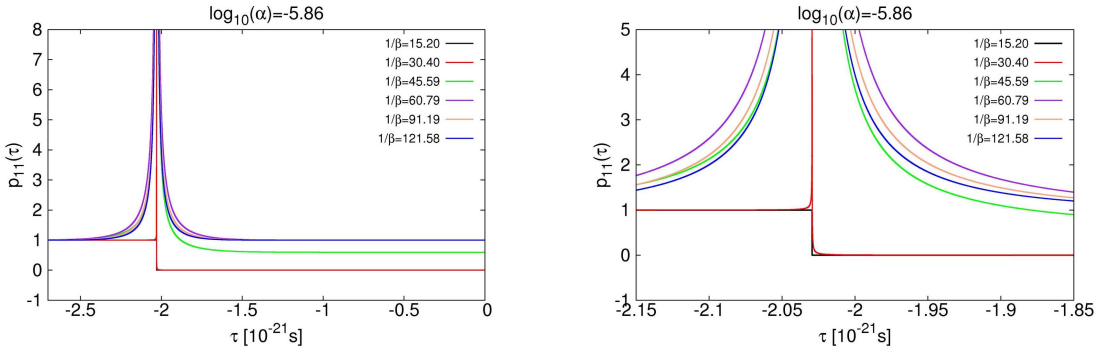
Rysunek 4.4: *Na lewo:* Pseudoobsadzenia dolnego stanu adiabatycznego w dolnych rozwiązaniach instantonowych dla kolejnych wartości parametru α przy ustalonej wartości $1/\beta = 30.40$. Odpowiadający tej sytuacji przebieg działania $S(\alpha)$ pokazano na rysunku 4.3. Punkt pseudoprzecięcia poziomów odpowiada $\tau_c \approx -2.03$. *Na prawo:* Ten sam wykres, zachowanie się p_{11} w otoczeniu punktu τ_c.

układ wraca do stanu niższego ($p_{11}(\tau = 0) = 1$). Sytuacja ta zmienia się, gdy zbliżamy się w okolice maksimum działania – dla $\log_{10}(\alpha) = -4.39$ układ po przejściu przez przecięcie pozostaje już częściowo wzbudzony do wyższego stanu ($0 < p_{11}(\tau = 0) < 1$). Wreszcie dla jeszcze mniejszych wartości α (na lewo od maksimum) przy przecięciu poziomów następuje całkowite przejście do stanu górnego, który pozostaje w pełni obsadzony za przecięciem, aż do końca bariery ($p_{11}(\tau = 0) = 0$; $p_{12}(\tau = 0) = 1$). Z punktu widzenia dynamiki takie pseudoprzecięcie staje się ostre (zachowuje się jak prawdziwe przecięcie), poziomy przestają efektywnie oddziaływać, a układ w trakcie swej ewolucji opisywany jest przez stan diabatyczny.

Spójrzmy z kolei na zależność wartości działania od parametru β przy ustalonym α co oznacza ustalony przebieg elementu sprzęgającego $\langle\phi_1|\partial_q\phi_2\rangle$. Zależność $S(1/\beta)$ dla różnych wartości α przedstawiono na rysunku 4.5. Widać tutaj, że zachowanie się tej funkcji ma charakter skokowy: dla odpowiednio małych wartości $1/\beta$ działanie jest praktycznie zerowe, po czym w miarę wzrostu $1/\beta$ w pewnym przedziale następuje gwałtowny wzrost do wartości maksymalnej i dalej S pozostaje znów niemal stałe. Skok ten jest tym większy i ostrzejszy, im mniejsza wartość α, a więc im ostrzejsze jest pseudoprzecięcie między poziomami. Pamiętając, że $1/\beta \sim 1/\Gamma$ oraz że większe Γ oznaczają wyższe, maksymalne wartości prędkości kolektywnej $\dot{q}$, możemy powyższy wynik zinterpretować nastepująco: im większa prędkość, tym silniejsze jest dynamiczne sprzężenie między stanami adiabatycznymi, zatem dla odpowiednio dużych $\dot{q}$ (małego $1/\beta$) należy się spodziewać diabatycznej kontynuacji (przejścia na górny poziom adiabatyczny) przy przechodzeniu przez pseudoprzecięcie i, w efekcie, zerowego działania. Następnie, w miarę obniżania prędkości dochodzimy do przypadku pośredniego: układ po przejściu przez pseudoprzecięcie częściowo pozostaje na dolnym stanie i jego stan opisywany jest mieszanką obu stanów adiabatycznych – w rezultacie działanie staje się niezerowe. Dla jeszcze niższych wartości $\dot{q}$ wzbudzenia do wyższego stanu występują



Rysunek 4.5: Przebiegi działań S w funkcji $1/\beta$ dla kolejnych wartości parametru α.



Rysunek 4.6: *Na lewo:* Zachowanie się pseudoobsadzenia dolnego stanu adiabatycznego w rozwiązaniach instantonowych otrzymanych dla kolejnych wartości parametru $1/\beta$ przy ustalonej wartości $1\log_{10}(\alpha) = -5.86$. Odpowiadający tej sytuacji przebieg działania $S(1/\beta)$ pokazano na rysunku 4.5. Punkt pseudoprzecięcia poziomów, jak poprzednio, odpowiada $\tau_p \approx -2.03$. *Na prawo:* Ten sam wykres, zachowanie się p_{11} w otoczeniu punktu τ_p.

lokalnie tj. w okolicy pseudoprzecięcia, po przejściu przez które układ wraca do stanu dolnego, zaś działanie S pozostaje niemal stałe. Interpretację tę potwierdza przebieg pseudoobsadzeń dolnego poziomu adiabatycznego przedstawiony na rysunku 4.6 dla wybranej wartości α – widać tutaj przypadek diabatyczny (ostra zmiana p_{11} z 1 na 0 przy przejściu przez przecięcie – linia czarna i czerwona), przypadek pośredni (linia zielona, $0 < p_{11} < 1$ za przecięciem) oraz adiabatyczny (pozostałe linie: poza lokalnym wzbudzeniem do górnego stanu mamy $p_{11} = 1$). Zauważmy jeszcze, że z rysunku 4.5 wynika, iż mniejsze α oznaczają większą tendencję układu do zachowania diabatycznego tj. w miarę malenia α przedział, w którym następuje przejście z obszaru diabatycznego w adiabatyczny, przesuwa się w kierunku coraz mniejszych prędkości (większych $1/\beta$).

Zaprezentowane powyżej wyniki pokazują, że rozwiązania instantonowe dostarczają odpowiedzi na pytanie, jak zachowuje się układ w okolicy pseudoprzecięć i po przejściu przez nie: czy mamy do czynienia z kontynuacją adiabatyczną, diabatyczną, czy też z sytuacją pośrednią. Jednocześnie już na przykładzie prostego modelu dwupoziomowego widać, że odpowiedź na to pytanie jest złożona: to, kiedy oddziaływanie V możemy uznać za zaniedbywalne (tj. kiedy stan będzie się kontynuował diabatycznie) zależy zarówno od nachylenia poziomów E (bowiem $\alpha = V/E$), jak i parametru β powiązanego z prędkością kolektywną. Z rysunku 4.3 widać, że w pewnych sytuacjach nawet przy bardzo małych wartościach V możemy otrzymać istotne wartości działań. Należy się spodziewać zależności wyniku także od lokalizacji pseudoprzecięcia (q_0). W realistycznym przypadku wielu oddziałujących ze sobą poziomów sytuacja będzie naturalnie jeszcze bardziej skomplikowana. Trudno zatem z góry ocenić wpływ poszczególnych pseudoprzecięć poziomów na ostateczny wynik działania i wydaje się, że stosowanie równań uwzględniających dynamikę układu jest w takich przypadkach konieczne.

4.1.2. Granica adiabatyczna

Zbadamy teraz, jak rozwiązania instantonowe zachowują się w granicy małych prędkości $\dot{q}$ tj. sprawdzimy, czy działanie otrzymane z rozwiązania instantonowego (S_{inst}) zbiega w kierunku działania wyliczanego wg formuły adiabatycznej:

$$S_{adiab} = 2\hbar^2 \int_{-T/2}^{T/2} d\tau \, \dot{q}^2 \frac{|\langle \phi_2 | \partial_q \phi_1 \rangle|^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}. \tag{4.11}$$

Celem odpowiedzi na to pytanie przeprowadzono obliczenia w modelu dwupoziomowym dla różnych wartości parametrów regulujących maksymalną prędkość $\dot{q}_{max}$ oraz siłę oddziaływania V między poziomami. Należy oczekiwać, że $S_{insta} \to S_{adiab}$, gdy spełniony będzie warunek adiabatyczności:

$$\frac{\hbar \dot{q}_{max}}{2V} << 1, \tag{4.12}$$

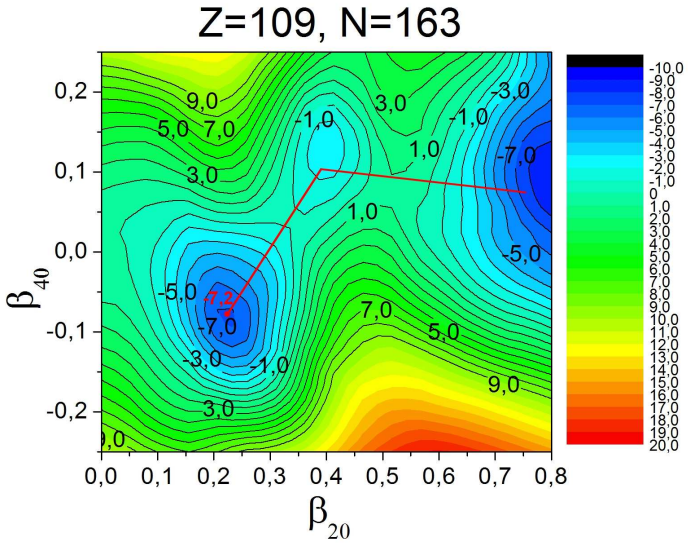
gdzie $2V$ jest równe minimalnej odległości, na jaką mogą się zbliżyć do siebie poziomy energetyczne. Porównanie otrzymanych wartości działań przedstawiono w tabeli 4.1 [72]. Wyniki te pokazują, że formuła adiabatyczna generalnie przeszacowuje wartość działania w stosunku do wyliczanej z rozwiązania instantonowego, natomiast w miarę malenia prędkości $\dot{q}$ (a więc lepszego spełnienia warunku 4.12) oba wyniki zbiegają do siebie, tak jak oczekiwano. Dla silniejszego oddziaływania V (mniejszego sprzężenia $\langle \phi_2 | \partial_q \phi_1 \rangle$) zbieżność ta jest jeszcze szybsza. Widać zatem, że w granicy małych prędkości rozwiązania instantonowe istotnie odtwarzają znany rezultat wynikający z przybliżenia adiabatycznego. Jednocześnie rozwiązania te pozwalają na poprawne uwzględnienie obszarów pseudoprzecięć poziomów adiabatycznych, gdzie warunek (4.12) przestaje obowiązywać i wartości S_{adiab} stają się nierealistyczne.

$\hbar\dot{q}_{max}/(2V)$	0.16	0.08	0.05	0.08	0.04	0.025
$V[MeV]$	0.5			1.0		
$S_{inst}/\hbar$	1.183	0.770	0.569	0.398	0.218	0.149
$S_{adiab}/\hbar$	2.015	1.007	0.672	0.459	0.229	0.152

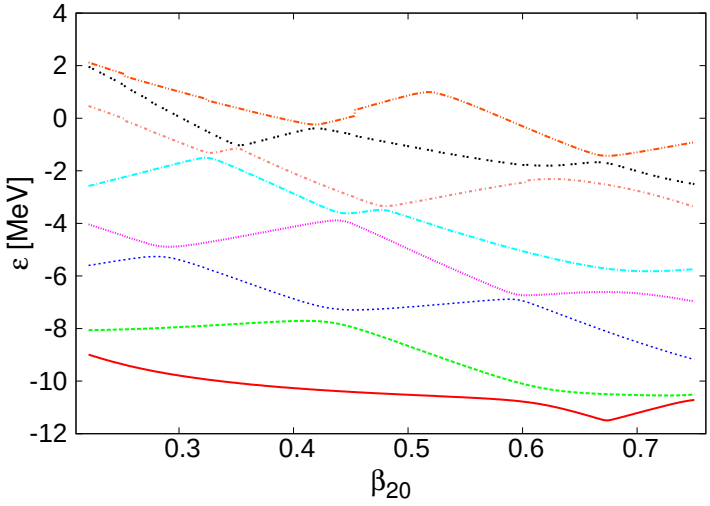
Tabela 4.1: Porównanie wartości działań instantonowych S_{insta} z adiabatycznymi S_{adiab} wyliczonymi dla kolejnych wartości prędkości $\dot{q}$ przy dwóch różnych wielkościach oddziaływania V. W tabeli podano wartości stosunku (4.12), który w granicy adiabatycznej powinien być odpowiednio mały. [72].

4.2. Zachowanie się działań S oraz stałych ζ przy rosnącym okresie T

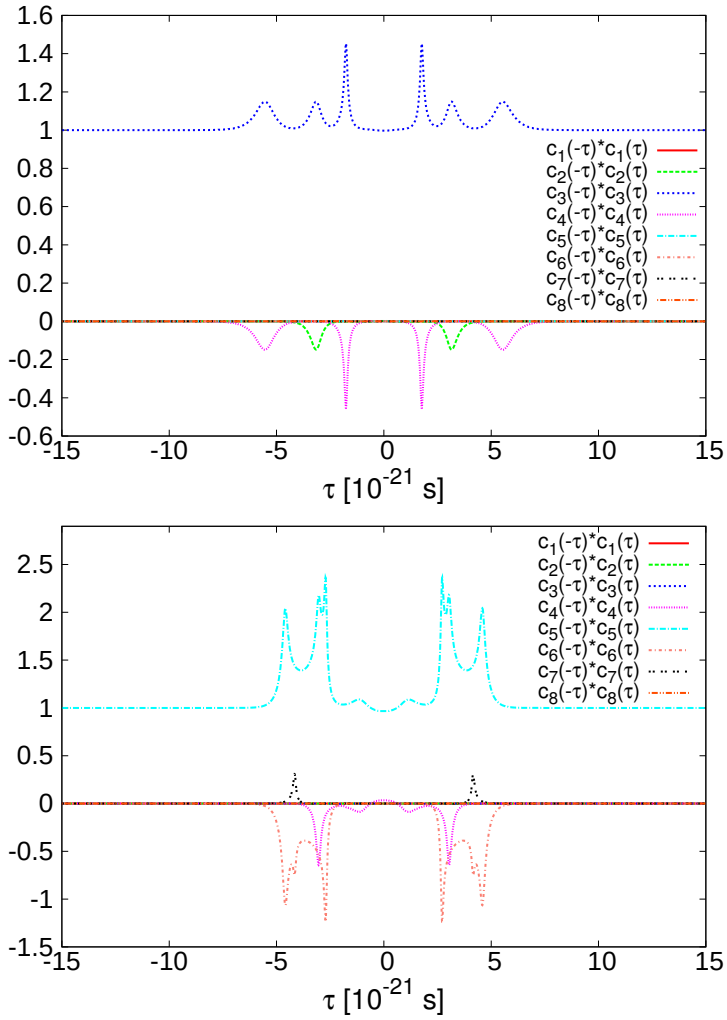
Rozważmy obecnie przypadek ośmiu stanów neutronowych $\Omega^\pi = 1/2^+$ potencjału Woodsa-Saxona dla jądra ^{272}Mt wziętych wzdłuż osiowo-symetrycznej ścieżki rozszczepieniowej pokazanej na rysunku 4.7 wraz z odpowiednią mapą energetyczną dla tego nuklidu. Mapę tę wyliczono dla deformacji β_{20}, β_{40} z minimalizacją po β_{60}, β_{80}, przy czym nieparzysty proton i neutron w każdym punkcie deformacji obsadzały stan dający najniższą energię, tj. bez zachowywania Ω^π stanu podstawowego. Otrzymana mapa jest więc powierzchnią adiabatyczną. Deformacje β_{60}, β_{80} zadano wzdłuż ścieżki tak, aby zmieniały się w sposób ciągły z β_{20} i jednocześnie dobrze odtwarzały energię jądra (odstępstwa od zminimalizowanej energii nie przekraczały 200-300 keV). Stany neutronowe wybrano w ten sposób, że dolna połowa jest obsadzona w stanie podstawowym, zaś górna połowa leży nad poziomem Fermiego – ich przebieg wzdłuż zadanej ścieżki parametryzowanej przez β_{20} przedstawiono na rysunku 4.8.



Rysunek 4.7: Mapa energetyczna dla jądra ^{272}Mt. Na czerwono zaznaczono zadaną ścieżkę rozszczepieniową.



Rysunek 4.8: Przebieg poziomów neutronowych $1/2^+$ wzdłuż ścieżki pokazanej na rysunku 4.7.



Rysunek 4.9: Przebiegi pseudoobsadzeń stanów adiabatycznych w otrzymanych rozwiązaniach instantonowych. *U góry:* Stan instantonowy ϕ_3. *Na dole:* Stan instantonowy ϕ_5. Poszczególne kolory odpowiadają poziomom z rysunku 4.8.

Nr	T=20	T=25	T=30	T=35	T=40	T=45
1	0.2893	0.2953	0.2970	0.2976	0.2978	0.2983
2	0.6306	0.6368	0.6399	0.6399	0.6401	0.6402
3	1.5633	1.5813	1.5854	1.5870	1.5874	1.5875
4	-0.0210	-0.0093	-0.0051	-0.0038	-0.0034	-0.0033

Tabela 4.2: Wartości działań (w jedn. $\hbar$) wyliczonych dla czterech obsadzonych, jednocząstkowych stanów instantonowych, dla kolejnych wartości okresu T [10^{-21} s].

Nr	T=20	T=25	T=30	T=35	T=40	T=45	$\zeta_{\mathbf{T}\to\infty}$	$\varepsilon_{\mathbf{g.s}}$
1	-9.906	-9.750	-9.631	-9.544	-9.477	-9.424	**-9.044**	**-8.990**
2	-8.514	-8.424	-8.363	-8.319	-8.287	-8.262	**-8.059**	**-8.061**
3	-6.288	-6.148	-6.054	-5.988	-5.938	-5.900	**-5.588**	**-5.600**
4	-4.930	-4.776	-4.660	-4.576	-4.511	-4.460	**-4.089**	**-4.037**

Tabela 4.3: Zestawienie wartości wykładników Floqueta ζ [MeV] dla czterech obsadzonych, jednocząstkowych stanów instantonowych, dla kolejnych wartości okresu T [10^{-21} s] wraz z graniczną wartością $\zeta_{T\to\infty}$ [MeV] oszacowaną ze wzoru (4.13) oraz energią jednocząstkową $\varepsilon_{g.s}$ [MeV] w stanie podstawowym.

W przestrzeni tych ośmiu poziomów adiabatycznych rozwiązano równania (2.49) otrzymując osiem stanów instantonowych. W obliczeniach przyjęto okres $T = 30 \times 10^{-21}$ s. Wybrane rozwiązania zilustrowano na rysunku 4.9 pokazując przebiegi odpowiednich pseudoobsadzeń. Widać, że dla $\tau = \pm T/2$ czyli w stanie początkowym, z którego następuje rozszczepienie, instantony są praktycznie równe odpowiednim stanom adiabatycznym tj. mamy $p_{\mu i} \cong \delta_{\mu i}$. Równość nie zachodzi ściśle, gdyż $T < \infty$. W trakcie ewolucji rozwiązania ϕ_i pozostają bliskie odpowiadającym im stanom adiabatycznym ψ_i z wyjątkiem obszarów pseudoprzecięć, w okolicy których następuje częściowe wzbudzenie do sąsiedniego stanu. Dopóki pseudoprzecięcia te pozostają izolowane (żaden inny stan nie podchodzi blisko w ich otoczeniu) wzbudzenia do pozostałych stanów są zaniedbywalne. Gdy natomiast kolejne pseudoprzecięcia następują blisko siebie, może dojść do przejść na dalsze stany, co widać na przykładzie rozwiązania ϕ_5, które lokalnie przechodzi częściowo wpierw do stanów ψ_6 i ψ_7, a następnie do ψ_4 i ψ_6.

Na powyższym przykładzie zbadano następnie, jak zachowują się działania S_i oraz wykładniki Floqueta ζ_i odpowiadające rozwiązaniom jednocząstkowym ϕ_i w miarę zwiększania okresu T. Z rozdziału 2.3 wiemy, że $T = \infty$, który w obliczeniach numerycznych zastępujemy wartością skończoną. Istotne jest zatem sprawdzenie, czy takie przybliżenie jest wystarczające. Aby tak było działanie, począwszy od pewnej wartości T, powinno wykazywać stabilność względem dalszego zwiększania okresu. Z kolei stałe ζ dla $T \to \infty$ powinny dążyć w kierunku

odpowiednich energii jednocząstkowych w stanie podstawowym.

W tabeli 4.2 przedstawiono wartości działań dla czterech dolnych (tj. obsadzonych) rozwiązań instantonowych, dla kolejnych wartości T. Widać, że w miarę rozciągania okresu działania S stabilizują się, szybko dążąc do określonej wartości, zatem możliwe jest ograniczenie się do skończonego T dla uzyskania wiarygodnych oszacowań wartości działań.

Zachowanie się stałych ζ dla rosnących T pokazano w tabeli 4.3. Rezultaty te wskazują, że rzeczywiście stałe te dążą w kierunku energii jednocząstkowych w minimum. Dodatkowo do otrzymanych wyników dopasowano metodą najmniejszych kwadratów formułę asymptotyczną postaci:

$$\zeta(T) = A + \frac{B}{T}, \tag{4.13}$$

z której wynika graniczna wartość $\zeta_{T\to\infty} = A$ również uwzględniona w tabeli 4.3. Widać, że wartość ta jest bliska odpowiednim energiom jednocząstkowym.

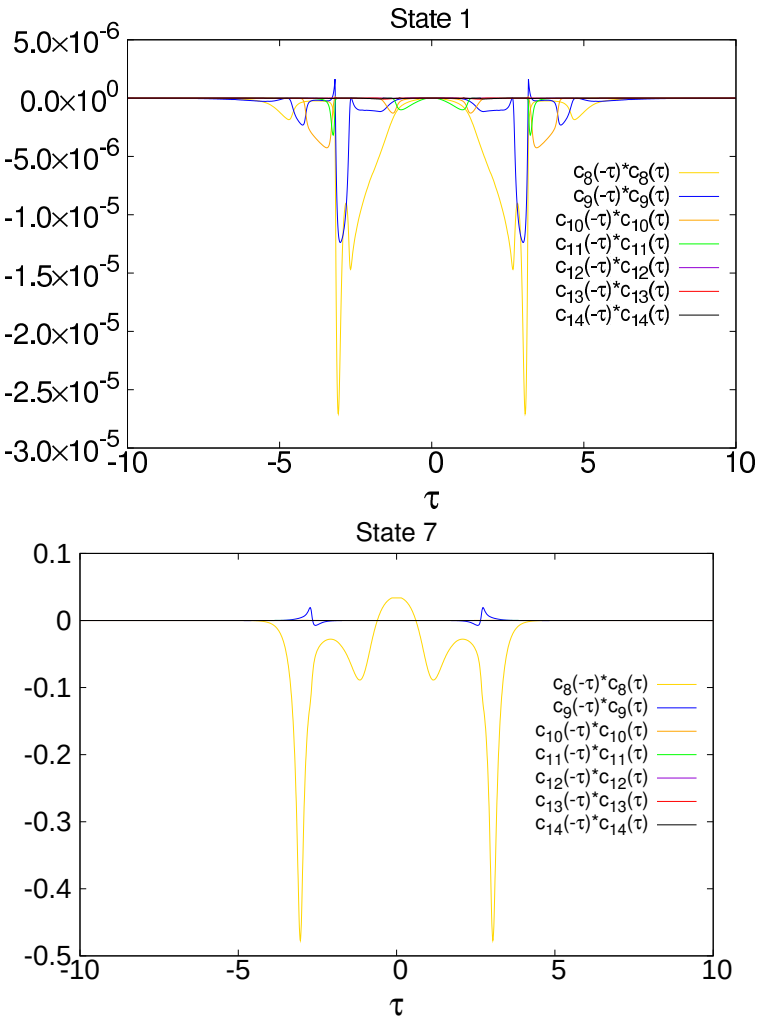
4.3. Zależność działania od wymiaru bazy $\mathcal{N}$

Kolejnym testem było sprawdzenie na ile zmienia się wartość całkowitego działania S_{tot} (wzór (2.54)) przy zwiększaniu wymiaru bazy $\mathcal{N}$ wziętej do obliczeń. Intuicja fizyczna wskazywałaby, że główny wkład do działania powinien pochodzić od stanów leżących blisko poziomu Fermiego (analogicznie jak przy wyliczaniu parametru masowego cranking). Sprawdzenia dokonano dla przypadku opisanego w poprzednim podrozdziale, zaczynając od $\mathcal{N} = 8$ stanów adiabatycznych, a następnie stopniowo zwiększając wymiar bazy. Podprzestrzeń tę rozszerzano w sposób symetryczny względem poziomu Fermiego ε_F tj. dodawano kolejne (coraz odleglejsze) stany leżące powyżej i poniżej energii ε_F w taki sposób, aby zawsze obsadzona była dolna połowa stanów. Wyniki przedstawiono w tabeli 4.4. Widzimy, że wartość działania zmienia się nieznacznie przy zwiększaniu liczby stanów wziętych do obliczeń i stabilizuje się przy większych $\mathcal{N}$. Dodatkowo dla przypadku $\mathcal{N} = 14$ pokazano na rysunku 4.10 pseudoobsadzenia stanów adiabatycznych o $\varepsilon > \varepsilon_F$ w najniższym, zajętym stanie instantonowym ϕ_1. Widać tutaj, że występujące w tym rozwiązaniu wzbudzenia do poziomów leżących

$\mathcal{N}$	$S_{tot} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}/2} S_i$ [$\hbar$]
8	2.5172
10	2.5388
12	2.5657
14	2.5779

Tabela 4.4: Wartość całkowitego działania S_{tot} w zależności od wymiaru bazy adiabatycznej $\mathcal{N}$ wziętej do obliczeń.

powyżej poziomu Fermiego są marginalne i będą wnosić znikomy przyczynek do działania. Na rysunku 4.10 przedstawiono również pseudoobsadzenia stanów o $\varepsilon > \varepsilon_F$ w ostatnim zajętym stanie instantonowym ϕ_7 – widać, że przejścia zachodzą głównie do najbliższych energetycznie stanów adiabatycznych. Wyniki te pokazują, że istotnie główny wpływ na działanie mają stany leżące w pewnym oknie energetycznym wokół poziomu Fermiego i w wyborze bazy do obliczeń wystarczy się do nich ograniczyć dla uzyskania wiarygodnego oszacowania wartości S_{tot}.



Rysunek 4.10: Pseudoobsadzenia stanów górnych w pierwszym (*u góry*) i ostatnim (*na dole*) obsadzonym rozwiązaniu instantonowym, przy $\mathcal{N} = 14$.

4.4. Zależność działania od prędkości kolektywnej $\dot{q}$

Rozwiązania instantonowe i wynikające z nich działanie są zależne od założonej prędkości kolektywnej występującej w równaniach (2.49). W naszym podejściu prędkość kolektywna powiązana jest, poprzez wzór (2.46), z założonym parametrem masowym cranking oraz z wysokością i kształtem bariery potencjału. Przedstawimy obecnie wyniki rachunku, którego celem było zbadanie, jak zmienia się wartość działania ze zmianą prędkości. Obliczenia

wykonano dla przypadku jądra ^{272}Mt wzdłuż ścieżki przedstawionej na rysunku 4.7 dla stanów neutronowych o kolejnych wartościach Ω i parzystości dodatniej. Punktem wyjścia była prędkość kolektywna wyliczona w oparciu o wzór (2.46), którą następnie przeskalowywano o pewien czynnik. Wyniki podsumowuje tabela 4.5. Widać tutaj, że wraz ze wzrostem $\dot{q}$ rośnie wartość sumarycznego działania. Pozostaje to w zgodzie z oczekiwaniem, gdyż większa prędkość wiąże się (przy ustalonym parametrze masowym) z wyższą barierą potencjału, co powinno prowadzić do większej wartości działania. Należy jednak zaznaczyć, że na działanie w naszej metodzie wpływa zarówno prędkość kolektywna jak i przebieg adiabatycznych poziomów jednocząstkowych (zwłaszcza obszary pseudoprzecięć w pobliżu powierzchni Fermiego) - wartość S to wynik złożenia obu tych czynników. Zgodnie z równaniami (2.49) człony sprzęgające stany adiabatyczne i powodujące pojawianie się przejść do innych poziomów są postaci $\dot{q}\langle\psi_i|\partial_q\psi_j\rangle$, zatem główny wpływ na działanie będą miały te obszary, gdzie wysoka wartość $\dot{q}$ zbiega się z występowaniem pseudoprzecięć. Z podobną zależnością mamy do czynienia przy obliczaniu działania w przybliżeniu adiabatycznym (wzór (2.11)): o wkładzie do działania decyduje nie tylko wysokość bariery w danym punkcie, ale również wartość zależnego od położenia parametru masowego, który może być mały lub duży, zależnie od przebiegu stanów adiabatycznych i ich oddziaływania w pobliżu powierzchni Fermiego.

Prędkość	$S_{tot} = \sum_{\Omega^+} S_{\Omega^+}$ $[\hbar]$
$\dot{q}$	21.3465
$1.3\,\dot{q}$	24.6362
$1.6\,\dot{q}$	28.6790

Tabela 4.5: Zestawienie wartości sumarycznego działania S_{tot} dla stanów neutronowych o parzystości dodatniej w zależności od założonej prędkości kolektywnej. Wartość $\dot{q}$ odpowiada tutaj prędkości wyliczonej z zależności (2.46) dla ścieżki z rysunku 4.7.

4.5. Dyskusja przebiegu funkcji podcałkowych działania i problemu parametru masowego w metodzie instantonowej

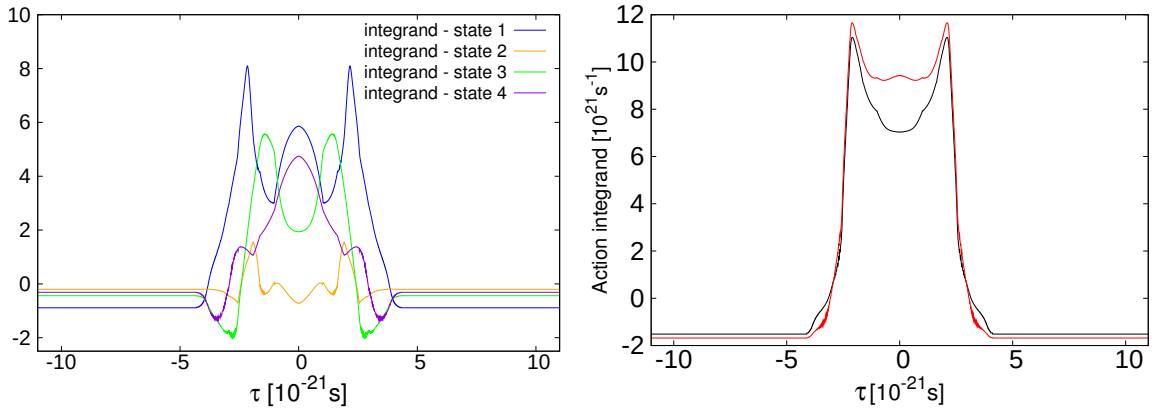
Celem przeanalizowania zachowania się działania w metodzie instantonowej na rysunku 4.11 przedstawiono funkcje podcałkowe wkładów (2.53) do działania od poszczególnych jednocząstkowych instantonów oraz wynikającą z nich sumaryczną funkcję podcałkową (zgodnie z (2.54)) dla przypadku parzystej i nieparzystej liczby cząstek. Obliczenia te wykonano dla jądra ^{272}Mt, dla ścieżki z rysunku 4.7. Widać, że o ile jednocząstkowe podcałkowe wykazują mniej lub bardziej skomplikowany przebieg wynikający z występujących po drodze wzbudzeń do innych stanów, o tyle całkowita podcałkowa ma raczej spokojne i regularne zachowanie.

Można to zrozumieć w ten sposób, że wzbudzenia w obrębie stanów obsadzonych znoszą się przy dodawaniu kolejnych wkładów jednocząstkowych i istotne są tylko przejścia nad powierzchnię Fermiego. Ponadto nie ma tu drastycznych różnic między przypadkiem parzystym a nieparzystym – w naszym podejściu wkład od nieparzystej cząstki to po prostu wkład od ostatniego, jednokrotnie obsadzonego stanu instantonowego (w ogólności może on być dodatni lub ujemny). Zachowanie to pozostaje w kontraście do podejścia cranking, gdzie dla przypadku nieparzystego parametr masowy (2.17) i w konsekwencji podcałkowa działania (2.11) będą wykazywać ostre piki w pobliżu pseudoprzecięć niesparowanego stanu z innymi, co, jak już dyskutowano, jest następstwem niespełnienia przybliżenia adiabatycznego leżącego u podstaw tej metody.

Zaletą podejścia bazującego na adiabatyczności dynamiki procesu rozszczepienia była możliwość wyznaczenia zależnego od położenia parametru masowego $B(q)$ i zapisanie energii układu w zmiennych kolektywnych (wzór (2.8)). Można postawić pytanie, czy parametr taki da się również zdefiniować w metodzie instantonowej, np. poprzez zapisanie podcałkowej działania jako dwukrotności kolektywnej energii kinetycznej:

$$\sum_{i,obs}\sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}}[\zeta_i - \varepsilon_\mu(q(\tau))]p_{\mu i}(\tau) = B\dot{q}^2. \tag{4.14}$$

Warunkiem koniecznym na to, aby taka definicja miała sens, jest to, by funkcja podcałkowa była τ-parzysta (co pozwoliłoby ją zapisać jako funkcję q) i dodatnio określona. Pierwsza własność jest spełniona (zarówno energie jednocząstkowe jak i pseudoobsadzenia są τ-parzyste) natomiast własność druga, jak widać na rysunku 4.11, nie zachodzi. Przeanalizowano pod tym kątem również inne, równoważne formy podcałkowej przedstawione w pracy [60] i żadna z nich nie spełniała warunku dodatniej określoności. Zauważmy jednak, że ujemność tej funkcji w obszarze asymptotycznym jest efektem różnicy między stałymi ζ_i a odpowiednimi energiami jednocząstkowymi w minimum, co, jak wspomniano w rozdziale 2.4, wynika ze stosowania skończonego okresu T, a zatem jest sztucznym artefaktem tego przybliżenia. Można by więc mieć nadzieję, że wyeliminowanie tego efektu pozwoliłoby na uzyskanie funkcji podcałkowej dodatniej w całym zakresie τ (z rysunku 4.11 widzimy, że przyjmuje ona wartości ujemne tylko w obszarze asymptotycznym). Jednak nawet gdyby udało się zapewnić tę własność, pozostają wciąż inne problemy z tak zdefiniowanym parametrem masowym. Po pierwsze funkcja podcałkowa zależy (wskutek wyjścia poza przybliżenie adiabatyczne) nie tylko od $\dot{q}^2$, ale i od wyższych, parzystych potęg, co w konsekwencji będzie powodowało zależność B od prędkości kolektywnej. Po drugie parametr taki zależy nie tylko lokalnie od położenia w przestrzeni współrzędnych kolektywnych, ale od całej, zadanej trajektorii rozszczepienia; dla innej drogi przechodzącej przez dany punkt rozwiązania instantonowe dadzą w ogólności inną wartość parametru masowego w tym punkcie. Podsumowując powyższą dyskusję: na poziomie



Rysunek 4.11: *Po lewej:* Wkłady do funkcji podcałkowej od jednocząstkowych stanów instantonowych. *Po prawej:* Sumaryczna funkcja podcałkowa dla przypadku sześciu (czarna linia) i siedmiu (czerwona linia) neutronów [72].

badań i wyników uzyskanych w niniejszej pracy, wydaje się, że w metodzie instantonowej nie jest możliwe wprowadzenie zadowalającej definicji parametru masowego.

5. Nieosiowe deformacje jąder w metodzie instantonowej i trudności z nimi związane

5.1. Problem ostrych pseudoprzecięć w rachunkach nieosiowych

Uwzględnienie nieosiowych konfiguracji jądra w trakcie procesu rozszczepienia jest w wielu przypadkach niezbędne dla rozsądnej oceny czasów życia. Widać to choćby na przykładach omawianych w rozdziale 1.3, gdzie włączenie nieosiowej deformacji β_{22} obniża wysokość i długość bariery rozszczepieniowej. W metodzie instantonowej nie ma żadnych formalnych przeszkód dla włączenia wszelkich istotnych stopni swobody i poszukiwania rozwiązania równań (2.49) dla dowolnie zadanej trajektorii. W praktyce jednak uwzględnienie nieosiowych kształtów prowadzi do dodatkowych komplikacji obliczeniowych. Trudności te wiążą się z faktem, że po złamaniu osiowej symetrii wszystkie poziomy o danej parzystości mogą oddziaływać, co znacznie komplikuje ich przebieg (przykład pokazano na rysunku 5.2 w następnej sekcji). Co więcej te oddziaływania mają często bardzo małą wartość (w obserwowanych przypadkach zdarza się, że $V \sim 10^{-5} - 10^{-6}$ MeV). W efekcie, w widmie energetycznym widać bardzo ostre pseudoprzecięcia między poziomami. W granicy $V \to 0$ poziomy przecinają się i mamy do czynienia z kontynuacją diabatyczną stanu. Jednakże już wyniki prostego modelu dwupoziomowego (rozdzial 4.1) pokazują, że granica ta ma dość skomplikowany charakter i to, kiedy możemy uznać, że $V \approx 0$ (tj. stan kontynuuje się diabatycznie), zależy od pozostałych parametrów modelu. Widać zatem, że naiwne przybliżanie ostrych pseudoprzecięć przez kontynuację diabatyczną przy zaniedbaniu sprzężeń między stanami może prowadzić do błędnych wyników i problem wymaga dokładniejszego potraktowania. Konsekwencją ostrych pseudoprzecięć między poziomami jest obecność bardzo wąskich i wysokich pików w przebiegu sprzężenia między odpowiednimi stanami. Przykład takiego piku przedstawia rysunek 5.1. Z oczywistych względów poprawne scałkowanie tego typu struktur przy rozwiązywaniu układu równań różniczkowych jest trudne i wymaga szczególnej uwagi.

Przede wszystkim jednak, obecność ostrych pseudoprzecięć i związana z nimi bardzo gwałtowna zmienność stanów własnych wskazuje na ograniczenia w stosowaniu bazy adiabatycznej do opisu tego typu przypadków. Narzuca się więc pytanie o inną, lepszą bazę, w której sprzężenia między stanami byłyby mniejsze i wykazywały większą regularność. W obliczeniach chemii kwantowej często stosuje się podejście polegające na poszukiwaniu (różnymi metodami) odpowiedniej bazy (kwazi)diabatycznej, która spełniałaby taki warunek

i ułatwiła obliczenia [73, 74, 75]. W naszym przypadku naturalną kandydatką wydaje się tutaj baza diabatyczna $\{|\chi_i\rangle\}$ zdefiniowana tak, jak w przypadku modelu dwupoziomowego, opisanego w rozdziale 4.1. Obie bazy są tam powiązane przez kąt obrotu θ zależny od parametru $\alpha = V/E$ oraz różnicy między wybranym punktem w deformacji, a punktem przecięcia: $q - q_0$. Można ten opis zaadaptować do przypadku wielopoziomowego dopasowując lokalnie do każdego kolejnego przecięcia dwóch poziomów wspomniane parametry modelowe, a następnie poprzez wyznaczony kąt θ dokonać transformacji do nowej bazy, przy czym pozostałe stany (nieuczestniczące w przecięciu) pozostają bez zmian. Oczywiście jest to podejście przybliżone, stąd też otrzymana baza nie jest stricte diabatyczna (dla której $\langle\chi_i|\partial_q\chi_j\rangle = 0$), lecz kwazidiabatyczna ($\langle\chi_i|\partial_q\chi_j\rangle << \langle\phi_i|\partial_q\phi_j\rangle$). Można zresztą pokazać [76], że w ogólnym przypadku wielu zmiennych q_i i wielu poziomów baza stricte diabatyczna nie istnieje (poza trywialnym przypadkiem stanów niezależnych od q_i).

W toku prac zmierzających do obliczenia wartości działania wzdłuż zadanej, nieosiowej drogi rozszczepieniowej wykonano testowe rachunki kierując się opisaną wyżej filozofią tj. wyznaczając bazę kwazidiabatyczną, a następnie rozwiązując równania i obliczając działanie w oparciu o rozwiązanie znalezione w tejże bazie. Rezultaty tych testów pokazały jednak, że w praktyce obliczeniowej stosowanie tej bazy nie przynosi istotnych korzyści w porównaniu z bazą adiabatyczną. Przyczyny tego są następujące:

1. Aby uzyskać zadowalająco dobre dopasowanie parametrów modelu do przecięcia należy i tak odpowiednio gęsto wyliczyć przebieg i zachowanie się sprzężeń między stanami adiabatycznymi potencjału WS;
2. Ze względu na przybliżony charakter metody przebieg sprzężenia w otrzymanej bazie kwazidiabatycznej wykazuje swoją strukturę, która również musi być odpowiednio wiernie uwzględniona jako informacja wejściowa (a więc gęsto popróbkowana w q podobnie jak piki w bazie adiabatycznej). Zaniedbanie szczegółów tej struktury (przybliżanie przez prostsze przebiegi) prowadzi, jak pokazały testy, do istotnej zmiany w otrzymywanych wartościach działań.

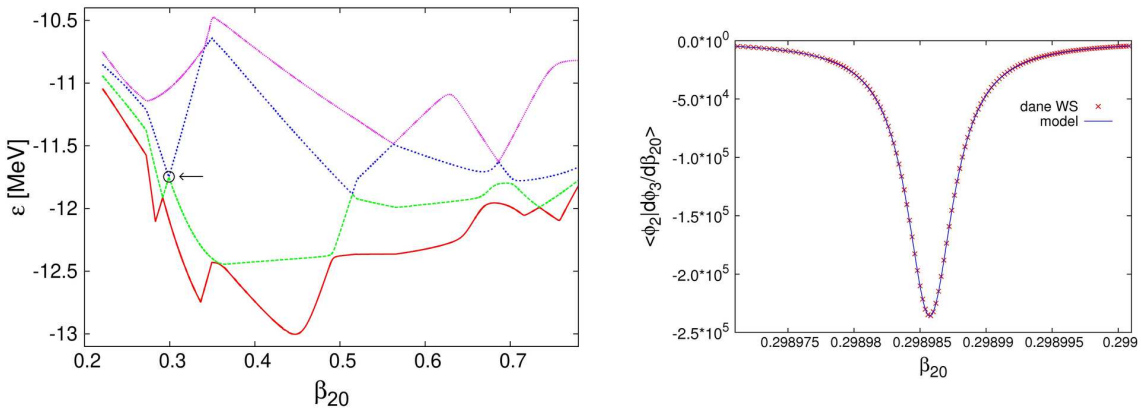
Innym możliwym podejściem byłoby poszukiwanie rozwiązania instantonowego w rozsądnie wybranej, modelowej bazie, pozbawionej problemu ostrych przecięć i związanych z nimi pików w sprzężeniach między stanami własnymi. Taką naturalną bazą, często stosowaną w fizyce jądrowej, jest baza trójwymiarowego oscylatora harmonicznego ze zmiennymi częstościami (w naszych obliczeniach używana na etapie diagonalizacji hamiltonianu z potencjałem Woodsa Saxona). Jednak korzystanie z bazy oscylatorowej ma też szereg istotnych wad:

1. Konieczne jest wzięcie dużej liczby stanów bazowych, aby dobrze odtworzyć potencjał WS w każdym punkcie ścieżki rozszczepieniowej, co skutkuje takim samym wzrostem liczby sprzężonych równań różniczkowych do rozwiązania;
2. W takiej bazie znajdować się będą stany o wysokich energiach, które, ze względu

na wykładniczy charakter ewolucji w czasie urojonym, będą prowadzić do problemów opisanych w rozdziale 3 tj. do pojawiania się wielkości wykraczających poza maksymalna liczbę możliwą do zapisu w pamięci komputera;

3. Tracimy prostotę interpretacyjną w porównaniu z rozwiązaniem otrzymanym w bazie adiabatycznej.

Z tego też względu uznano, że baza adiabatyczna, mimo swych niedoskonałości, pozostaje najbardziej optymalnym wyborem na potrzeby obliczeń w naszym modelu. Aby poradzić sobie z problemem ostrych pików w tej bazie, zastosowano zmienny krok przy wyliczaniu danych wejściowych z Woodsa-Saxona (tj. energii adiabatycznych i sprzężeń między stanami) wzdłuż zadanej ścieżki . Krok był zmniejszany w przypadku wykrycia silnych zmian sprzężeń tak, by kolejne wartości nie różniły się o więcej niż 10% przy jednoczesnym nałożeniu warunku na minimalną wartość kroku na poziomie $\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$ (β_{20} parametryzuje przebieg ścieżki). Pozwoliło to na odtworzenie większości pików z gęstością punktów wystarczającą do poprawnego scałkowania danego przypadku. Otrzymane dane były następnie przeglądane w poszukiwaniu ewentualnych bardzo ostrych pików wciąż niedostatecznie dobrze odtworzonych przy najmniejszym stosowanym kroku. W takich przypadkach do punktów pików dopasowywano metodą najmniejszych kwadratów krzywą modelową (4.4) (parametryzowaną przez α i q_0). W kolejnym kroku dla każdego takiego pseudoprzecięcia wyliczano, w oparciu o dopasowany model, macierz przejścia 2×2 przez odpowiadający mu pik dla układu dwupoziomowego przecinających się stanów $\mathbf{G}(\tau_{fin}, \tau_{ini})$ (zdefiniowaną poprzez równanie 3.8), gdzie τ_{ini}, τ_{fin} oznaczają początek i koniec piku. Scałkowanie takiego wymodelowanego piku jest oczywiście łatwiejsze, bowiem mając jego postać analityczną zdecydowanie prościej wyznaczyć kolejne punkty z odpowiednią do całkowania gęstością, aniżeli dla tej samej gęstości



Rysunek 5.1: *Na lewo:* energie stanów potencjału Woodsa-Saxona wzdłuż ścieżki nieosiowej (parametryzowanej przez β_{20}, rys. 5.2) wzięte do obliczeń w dyskutowanym w tekście przypadku wraz z zaznaczonym strzałką ostrym pseudoprzecięciem, na którym wykonano opisane testy. *Na prawo:* przebieg odpowiedniego sprzężenia między poziomami w okolicy przecięcia wraz z dopasowaną krzywą modelową (4.4)

numerycznie rozwiązywać problem potencjału WS punkt po punkcie. Następnie macierz propagacji $\widetilde{\mathbf{G}}(\tau_{fin}, \tau_{ini})$ dla pełnego układu K stanów bazowych tworzona jest następująco: propagację dla pozostałych $K-2$ poziomów nieuczestniczących w przecięciu wylicza się niezależnie, całkując w standardowy sposób, natomiast w miejsce odpowiadające poziomom przecinającym się podstawiana jest macierz $\mathbf{G}$ wyliczona na podstawie dopasowanego modelu. Oznaczając przez i indeks dolnego przecinającego się poziomu, można macierz $\widetilde{\mathbf{G}}$ zapisać schematycznie w następujący sposób:

$$
\begin{array}{c}
 \\
1 \\
2 \\
\vdots \\
i \\
i+1 \\
\vdots \\
K
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccccccc} 1 & 2 & \dots & i & i+1 & \dots & K \end{array} \\
\begin{pmatrix}
\widetilde{G}_{11} & \widetilde{G}_{12} & \dots & 0 & 0 & \dots & \widetilde{G}_{1K} \\
\widetilde{G}_{21} & \widetilde{G}_{22} & \dots & 0 & 0 & \dots & \widetilde{G}_{2K} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \dots & G_{11} & G_{12} & \dots & 0 \\
0 & 0 & \dots & G_{21} & G_{22} & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\widetilde{G}_{K1} & \widetilde{G}_{K2} & \dots & 0 & 0 & \dots & \widetilde{G}_{KK}
\end{pmatrix}
\end{array}
\tag{5.1}
$$

Jak widać, zaniedbujemy tu elementy „krzyżowe” tj. przyjmujemy $\widetilde{\mathbf{G}}_{\alpha l} = \widetilde{\mathbf{G}}_{l\alpha} = 0$, gdzie $\alpha \neq i,\ i+1$ oraz $l = i,\ i+1$. Fizycznie odpowiada to przybliżeniu izolowanego dwupoziomowego pseudoprzecięcia: ewolucja c_i, c_{i+1} jest zdominowana przez sprzężenie między tymi stanami $\langle \phi_i | \partial_q \phi_{i+1} \rangle$, natomiast ich wpływ na rozwój w czasie pozostałych $c_{\alpha \neq i, i+1}$ jest na odcinku występowania piku zaniedbywalny.

Opisana powyżej procedura została przetestowana na wybranych przypadkach. W tabeli 5.1 przedstawiono wyniki dla przykładu czterech poziomów (rys. 5.1) wzdłuż zadanej, nieosiowej ścieżki z występującym ostrym pseudoprzecięciem. Stowarzyszony z nim pik, jakkolwiek bardzo wąski i wysoki, jest wciąż jeszcze wystarczająco dobrze odtwarzany przy istniejącej gęstości punktów w danych wejściowych otrzymanych z programu WS. Pozwala to traktować wartości S_{ref}^{WS} wyliczone na podstawie tych danych wejściowych jako wystarczająco dokładne i referencyjne względem stosowanych następnie przybliżeń. W kolumnie trzeciej tabeli 5.1 zestawiono wartości działań otrzymanych przy zastosowaniu przybliżenia izolowanego 2-poziomowego przecięcia (wyłączenie sprzężeń „krzyżowych”) Porównując te wyniki z wartościami z kolumny drugiej widzimy, że przybliżenie to działa dobrze - błąd z niego wynikający jest niewielki i można go zaniedbać w naszych rachunkach. W kolejnej, czwartej kolumnie tabeli zamieszczono wyniki otrzymane po zastąpieniu piku jego modelowym odpowiednikiem tj. dopasowaną krzywą (4.4). Niestety, mimo całkiem dobrego dopasowania do danych (różnice między modelem, a punktami z WS nie przekraczały 4 %) rozbieżności w wynikach działania są istotne. Stąd też postanowiono wzbogacić model wprowadzając

Rozw.	$S^{WS}_{ref}/\hbar$	$S^{WS}/\hbar$	$S^{1}_{fit}/\hbar$	$S^{2}_{fit}/\hbar$
1	1.4517	1.4563	1.4978	1.4565
2	2.8109	2.8166	3.3224	2.8164
3	0.0706	0.0436	0.2452	0.0443
4	-4.3328	-4.3086	-5.0571	-4.3089

Tabela 5.1: Zestawienie wyników testu dla przypadku 4-poziomowego pokazanego na rysunku 5.1. S^{WS}_{ref} - referencyjne wartości obliczone metodą zwykłego całkowania równań krok po kroku (tj. bez stosowania procedury opisanej w bieżącym rozdziale) z użyciem odpowiednio gęsto wyliczonych danych wejściowych dla potencjału WS, S^{WS} - działania dla przypadku, w którym w obszarze piku wyłączyliśmy sprzężenia „krzyżowe” (tj. między poziomami przecinającymi się, a pozostałymi stanami), S^{1}_{fit} - wartości wyliczone z zastosowaniem podstawianej macierzy propagacji, w oparciu o dopasowanie piku do formuły (4.4), S^{2}_{fit} - wartości wyliczone z zastosowaniem podstawianej macierzy propagacji, w oparciu o dopasowanie piku do formuły (5.2)

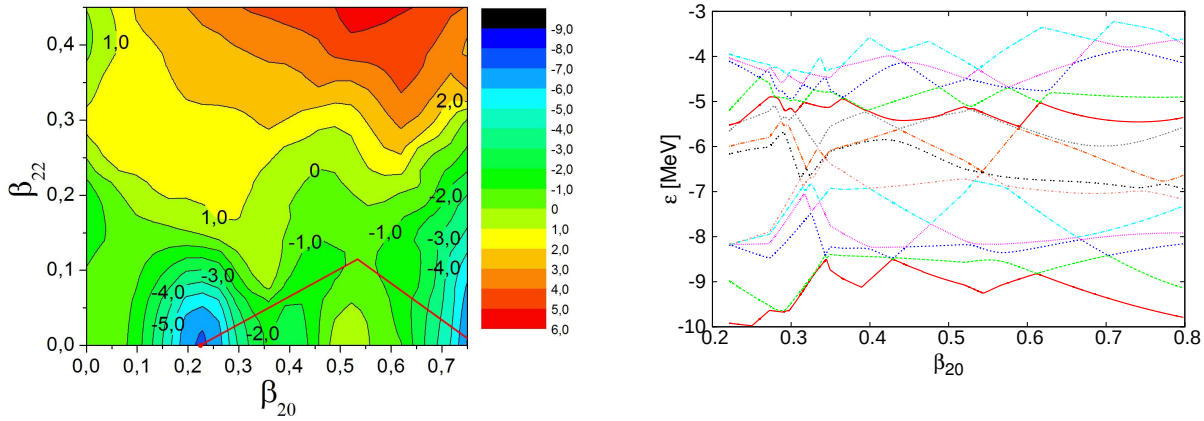
dodatkowy parametr σ i stosując funkcję postaci:

$$\left\langle \phi_1 \middle| \frac{d\phi_2}{dq} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{(q-q_0)^2+\sigma^2}, \tag{5.2}$$

Pozwoliło to na uniezależnienie maksymalnej wysokości piku od jego szerokości połówkowej (w funkcji (4.4) determinowanych przez parametr α). Wyniki uzyskane dla tak rozszerzonego modelu (ostatnia kolumna w tabeli) pokazują, że z dobrą dokładnością odtwarza on wartości referencyjne. Dlatego też, choć w innych testowanych przypadkach stosowanie funkcji (4.4) okazywało się wystarczające dla dobrego odtworzenia wartości działań, w ostatecznych przybliżeniach stosowano funkcję (5.2) w dopasowaniach do przebiegu sprzężeń między poziomami.

5.2. Wyniki obliczeń dla stanów neutronowych ^{272}Mt

Obliczenia po ścieżce nieosiowej (rysunek 5.2) wykonano dla $\mathcal{N} = 32$ stanów neutronowych o parzystości dodatniej, dla jądra ^{272}Mt. W pierwszej wersji rachunku użyto danych wejściowych potencjału WS wyliczonych wzdłuż ścieżki ze zmiennym krokiem przy nałożeniu warunku na minimalną wartość kroku na poziomie $\Delta\beta_{20} = 10^{-6}$. W drugiej wersji zmniejszono tę wartość do $\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$. Wreszcie w trzecim przypadku zastosowano pełną procedurę opisaną w poprzednim paragrafie tj. minimalny krok $\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$, a dla pików wciąż niedostatecznie dobrze odtworzonych przy tej gęstości punktów dopasowywano modelowy przebieg (5.2). Wyniki działań dla dolnej (obsadzonej) połowy intantonowych stanów oraz sumaryczne działania zestawiono w tabeli 5.2. Przede wszystkim z porównania jednocząstkowych działań otrzymanych w pierwszej i drugiej wersji rachunku widać, że gęstość punktów na poziomie



Rysunek 5.2: *Na lewo:* Mapa energetyczna jądra ^{272}Mt w zmiennych $\beta_{20} - \beta_{22}$ z minimalizacją po $\beta_{40}, \beta_{60}, \beta_{80}$ wraz z zadaną trajektorią rozszczepieniową (zaznaczoną na czerwono). *Na prawo:* Przebieg 14-stu środkowych poziomów neutronowych o dodatniej parzystości wzdłuż zadanej ścieżki (siódmy stan jest ostatnim poziomem obsadzonym).

$\Delta\beta_{20} = 10^{-6}$ okazała się niewystarczająca dla dobrego odtworzenia niektórych pików w danych wejściowych – w efekcie dla części stanów otrzymano kompletnie inne wartości działań przy dalszym zagęszczaniu danych i przejściu do kroku $\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$. Potwierdziła to wizualna inspekcja danych. Godnym uwagi jest jednak fakt, że choć te indywidualne wkłady do działania różnią się istotnie, a w niektórych przypadkach wręcz drastycznie, to dla całkowitego działania otrzymuje się zbliżoną wartość. Wynik ten stanowi kolejne potwierdzenie tego, że S_{tot} zależy głównie od stanów instantonowych leżących w pobliżu powierzchni Fermiego, o czym wspominano już przy omawianiu przypadku osiowo-symetrycznego. Widać zatem, że w pewnych sytuacjach niedostatecznie gęsta reprezentacja danych wejściowych i wynikające stąd zafałszowane wzbudzenia otrzymanych rozwiązań instantonowych mają niewielki wpływ na ostateczne działanie. Będzie tak, gdy problem ogranicza się do stanów leżących odpowiednio głęboko pod powierzchnią Fermiego (z tabeli 5.2 widać, że w tym przypadku największe różnice występują dla takich właśnie stanów).

Z przeglądu danych WS wynikało, że przy warunku na minimalny krok na poziomie $\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$ niektóre sprzężenia wciąż nie były odtworzone z dostateczną dokładnością, dlatego też, celem sprawdzenia wyniku, w trzecim podejściu wykonano obliczenia z zastąpieniem tych pików przez dopasowaną zależność modelową (5.2). Wyniki zestawiono w ostatniej kolumnie tabeli 5.2. Można zauważyć, że rezultaty zarówno dla jednocząstkowych wkładów jak i sumarycznego działania są w tym przypadku zbliżone do wyników bez modelowania pików. Brak istotnych różnic wynika prawdopodobnie z faktu, że problematyczne sprzężenia poddane procedurze dopasowywania występowały akurat dla takich q, gdzie $\dot{q} \approx 0$, a więc efektywnie były i tak tłumione w równaniach instantonowych (2.49). W ogólności jednak stosowanie pełnej procedury opisanej w poprzednim podrozdziale wydaje się niezbędne

Nr	$\Delta\beta_{20} = 10^{-6}$	$\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$	$\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$ plus fit
1	3.2143	3.2057	3.1936
2	0.9453	8.0320	8.0555
3	3.2931	6.9294	6.9118
4	3.2790	-8.7864	-8.7867
5	-0.0346	2.1493	2.1684
6	-1.7771	-2.3285	-2.3531
7	0.9953	1.1126	1.1129
8	8.8511	9.1817	9.1458
9	4.1217	-1.3617	-1.4455
10	5.5588	9.6487	9.8299
11	-2.9214	-2.3793	-2.3817
12	-4.5752	-4.5158	-4.5660
13	-0.4160	-0.3668	-0.3788
14	6.7950	6.4864	6.4848
15	6.6443	6.4057	6.4033
16	2.8743	2.8123	2.8128
$\mathbf{S_{tot}}/\hbar$	**36.8479**	**36.2254**	**36.2069**

Tabela 5.2: Zestawienie wyników działań dla kolejnych, obsadzonych instantonów jednocząstkowych wraz z sumarycznym działaniem. *Pierwsza kolumna wynikowa:* obliczenia z danymi wejściowymi próbkowanymi z minimalnym krokiem $\Delta\beta_{20} = 10^{-6}$. *Druga kolumna wynikowa:* obliczenia z danymi wejściowymi próbkowanymi z minimalnym krokiem $\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$. *Trzecia kolumna wynikowa:* obliczenia z danymi wejściowymi próbkowanymi z minimalnym krokiem $\Delta\beta_{20} = 10^{-7}$ uzupełniona o procedurę modelowania najostrzejszych pików formułą (5.2).

dla otrzymania wiarygodnej wartości działania w przypadku trajektorii rozszczepieniowych przebiegających przez nieosiowe deformacje. Konieczność ta poważnie utrudnia uwzględnienie nieosiowych stopni swobody w praktycznych obliczeniach, stąd też w pozostałych rachunkach przedstawianych w tej pracy ograniczono się do osiowo-symetrycznych kształtów.

Dodatkowo dla potwierdzenia wyniku wykonano również test dotyczący zmian działania, przy rozszerzaniu wymiaru bazy adiabatycznej $\mathcal{N}$ w zakresie od 14 do docelowych 32 stanów (w sposób analogiczny jak w rozdziale 4.3 dla przypadku osiowego). Rezultaty przedstawia tabela 5.3. Widać również tutaj, że dominujący wpływ na całkowite działanie mają stany instantonowe leżące w pobliżu powierzchni Fermiego, co pozostaje w zgodzie ze wcześniejszymi wnioskami dla dróg osiowych.

Na koniec porównano wynik dla trajektorii nieosiowej z rezultatem otrzymanym dla ścieżki osiowej (rys. 4.7) – w obu przypadkach wzięto tę samą grupę stanów neutronowych

$\mathcal{N}$	$S_{tot} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}/2} S_i$ [$\hbar$]
16	27.0313
20	35.8289
24	35.9705
28	36.1187
32	36.2069

Tabela 5.3: Wartość całkowitego działania S_{tot} w zależności od liczby stanów adiabatycznych $\mathcal{N}$ wziętych do obliczeń.

Ścieżka	B_f [MeV]	$S_{tot}/\hbar$
osiowa	8.4	21.35
nieosiowa	6.5	36.21

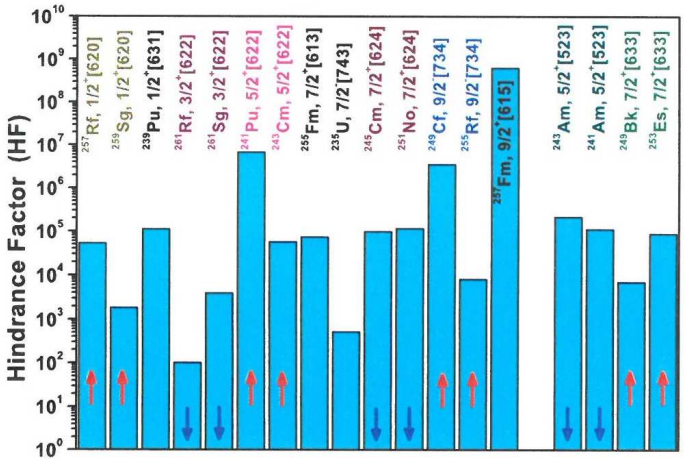
Tabela 5.4: Porównanie wyników działań dla stanów neutronowych o parzystości dodatniej otrzymanych dla trajektorii osiowej (rys. 4.7) oraz nieosiowej (rys. 5.2) dla jądra ^{272}Mt. Podano również wartości odpowiednich barier rozszczepieniowych B_f.

o dodatniej parzystości, więc takie porównanie jest możliwe. Wartości działań dla obu dróg przedstawiono w tabeli 5.4. Okazuje się, że choć z map energetycznych wynika, iż uwzględnienie nieosiowości obniża barierę o ok. 2 MeV, to jednak rozwiązania instantonowe faworyzują ścieżkę osiowo-symetryczną. Rezultat ten przestaje dziwić, jeśli weźmiemy pod uwagę, że trajektoria nieosiowa, choć obniża barierę, to jest geometrycznie dłuższa i bardziej skomplikowana, tymczasem np. obliczenia dynamicznych trajektorii rozszczepieniowych dla jąder parzysto-parzystych w przybliżeniu cranking [10] wskazują, że często krótsze i prostsze drogi dają niższe działanie mimo wzrostu bariery. Ponadto wyjście w kierunku niezerowych deformacji nieosiowych powoduje znaczne skomplikowanie przebiegu poziomów jednocząstkowych i pojawienie się wielu, często ostrych pseudoprzecięć, na które metoda instantonowa i wynikające z niej działanie są wrażliwe, a które przy osiowej symetrii nie występują. W efekcie ścieżka nieosiowa może dawać wyższe działania. Należy jednak zaznaczyć, że w powyższym przykładzie uwzględniono jedynie podstawową deformację nieosiową β_{22} – w ogólności nie można wykluczyć sytuacji, w której włączenie dalszych deformacji nieosiowych obniży barierę na tyle, że ścieżka nieosiowa będzie faworyzowana.

6. Rozszczepienie spontaniczne jąder nieparzystych – wyniki obliczeń

6.1. Spowolnienie rozszczepienia w jądrach nieparzystych – wprowadzenie

Jest eksperymentalnym faktem, że czasy życia jąder nieparzystych ze względu na spontaniczne rozszczepienie są na ogół dłuższe niż dla ich parzysto-parzystych sąsiadów [77, 11]. Na wykresie 6.1 pokazano czynniki wzbronienia HF (*ang. hindrance factor*) zdefiniowane jako stosunek czasu życia danego jądra nieparzystego do uśrednionego czasu życia sąsiednich układów parzysto-parzystych. Widać, że efekt jest drastyczny: w większości przypadków dodanie do układu niesparowanego nukleonu powoduje wzrost czasów życia o 3-5 rzędów wielkości. Warto w tym miejscu wspomnieć, że jądra atomowe nie są pod tym względem wyjątkiem – istotny wpływ nieparzystej cząstki na zachowanie układu obserwuje się również w innych układach fermionowych o mezoskopowych rozmiarach. Przykładem może być zależność nadprzewodnictwa w nanometrowych ziarnach metalicznych od parzystości liczby elektronów [78, 79], czy wzbronienie tunelowania dla niektórych wartości spinów w ziarnach

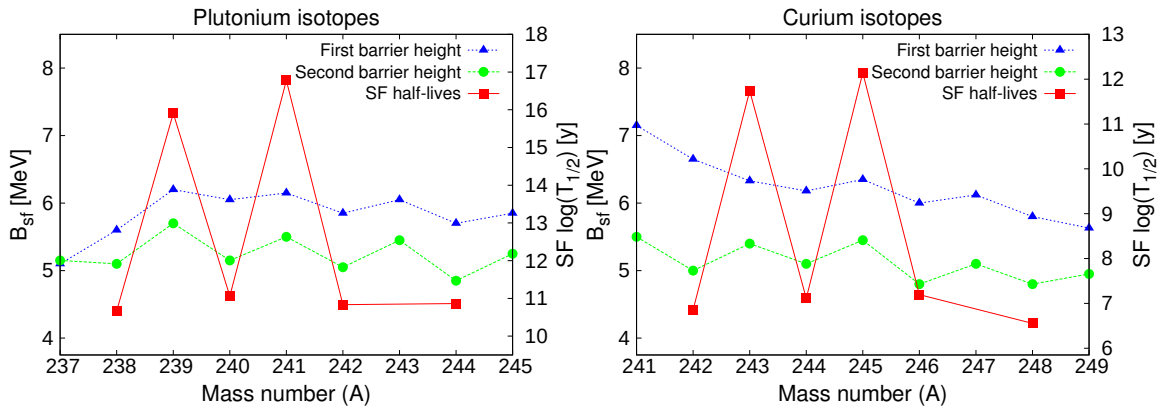


Rysunek 6.1: (rys. 17 z pracy [11]) Wielkość czynnika wzbronienia HF dla szeregu jąder nieparzystych, zdefiniowanego jako stosunek T^o_{sf}/T^{ee}_{sf}, gdzie T^o_{sf} jest czasem życia na rozszczepienie danego jądra nieparzystego, a T^{ee}_{sf} średnią geometryczną czasów życia sąsiednich jąder parzystych. Podano również eksperymentalnie przypisaną konfigurację tj spin i parzystość rozpadającego się stanu. Warto zwrócić uwagę, że czynnik HF nie rośnie ze spinem.

magnetycznych [54, 80].

Spowolnienie rozszczepienia spontanicznego obserwuje się także dla konfiguracji izomerycznych jąder parzysto-parzystych (w stosunku do ich stanów podstawowych). Z konfiguracjami tego typu mamy do czynienia, gdy jedna lub więcej par nukleonów zostaje rozerwana i w efekcie nukleony te uszeregowują swoje momenty pędu tworząc tzw. izomer K (gdzie K oznacza rzut całkowitego momentu pędu). Dostępne dane eksperymentalne dla kilku znanych przypadków izomerów K w jądrach superciężkich (patrz: tabela 1 w pracy [72] i referencje tamże) wskazują, że możliwe są czynniki wzbronienia $T_{sf}(iso)/T_{sf}(g.s) > 10$ (gdzie $T_{sf}(iso)$ i $T_{sf}(g.s)$ oznaczają rozszczepieniowe czasy życia odpowiednio dla izomeru i stanu podstawowego). W przypadku parzysto-parzystych aktynowców, jeśli interpretować obserwowane izomery rozszczepieniowe jako konfiguracje o wysokim K w drugim minimum energetycznym, otrzymuje się czynniki wzbronienia rzędu $1 - 10$ dla izotopów plutonu i $10^3 - 10^4$ dla kiuru [72]. Rachunki dotyczące stabilności stanów izomerycznych można znaleźć w pracach [81, 82].

Na gruncie obecnej teorii przyjmuje się, że zwiększona stabilność jąder nieparzystych oraz stanów izomerycznych w jądrach parzysto-parzystych związana jest z mechanizmem blokowania pairingu: przez nieparzysty proton/neutron (jądra nieparzyste) lub kilka niesparowanych nukleonów (izomery). Wynikające stąd osłabienie pairingu powoduje wzrost bariery rozszczepieniowej. Zwykle dyskutuje się w tym kontekście również zmianę parametru masowego cranking [83], jednak, jak wspomniano w rozdziale 2.2 posługiwanie się tego typu parametrem w przypadku jąder nieparzystych jest ułomne ze względu na niespełnienie leżącego u jego podstaw przybliżenia adiabatycznego. Nie jest natomiast jasne, czy układ w trakcie procesu rozszczepienia może zmieniać swoją konfigurację, tj. liczbę K i inne liczby kwantowe, czy też powinien ją zachowywać. Zachowanie konfiguracji będzie prowadziło do dodatkowego podwyższenia bariery rozszczepieniowej. Wzrost ten będzie zależał od Ω (rzutu momentu pędu na oś symetrii) niesparowanego nukleonu/ów decydującego o całkowitym rzucie spinu K jądra ze względu na mniejszą gęstość poziomów jednocząstkowych dla większych Ω. Stąd też efekt ten byłby szczególnie silny dla jąder o stanach podstawowych z dużym K, dla których trzymanie konfiguracji w obliczeniach prowadzi często do niemal dwukrotnego wzrostu bariery (oraz jej wydłużenia) w stosunku do bariery obliczanej bez narzucania więzu na konfigurację. Przykładem może być nieparzysto-nieparzysty izotop ^{272}Mt: bariera obliczona przy trzymaniu przewidywanej konfiguracji stanu podstawowego $K^\pi = 12^-$ jest istotnie dłuższa i wyższa o ok. 6 MeV w stosunku do bariery adiabatycznej (tj. otrzymywanej przy konfiguracjach minimalizujących energię układu) [84]. Równie wyraźny wzrost wysokości i długości bariery widoczny jest dla super-zdeformowaniego stanu izomerycznego w jądrze ^{242}Cm o $K^\pi = 10^-$, jeśliby założyć zachowanie tej konfiguracji przy rozszczepieniu [72]. Dane eksperymentalne dla jąder nieparzystych (rys. 6.1) wskazują jednak, że efekty zachowania konfiguracji nie mogą



Rysunek 6.2: Wysokość eksperymentalnie wyznaczonej pierwszej (niebieskie trójkąty) i drugiej (zielone kółka) bariery oraz wynikające z eksperymentów czasy życia na rozszczepienie spontaniczne (czerwone kwadraty). *Po lewej:* Izotopy plutonu. *Po prawej:* Izotopy kiuru. Dane za [85, 11].

być tak drastyczne – czynnik HF nie wykazuje wyraźnego wzrostu ze spinem rozpadającego się układu. Należy się spodziewać, że wzrost bariery, a więc i wielkość wzbronienia HF, będą zależne zarówno od symetrii jądra wzdłuż trajektorii rozszczepienia, jak i prawdopodobieństwa przejść nieadiabatycznych w procesie tunelowania.

Na rysunku 6.2 pokazano wysokości eksperymentalnie wyznaczonej pierwszej i drugiej bariery dla izotopów plutonu i kiuru. Widać tutaj marginalny wzrost pierwszej bariery i niewielki wzrost drugiej bariery dla jąder nieparzystych w stosunku do parzysto-parzystych izotopów sąsiednich (tzw. staggering). Wydaje się on zbyt mały by wyjaśnić obserwowaną różnicę w rozszczepieniowych czasach życia, również pokazanych na rysunku 6.2, jeśliby przyjąć, że parametry masowe dla sąsiednich jąder są podobne. Należy podkreślić, że bariera rozszczepieniowa nie jest obserwablą i w eksperymencie wyznacza się ją pośrednio z reakcji rozszczepienia indukowanego. W efekcie wyniki te są prawdopodobnie pozbawione efektu zamrożenia konfiguracji i odpowiadają raczej barierom adiabatycznym obliczanym z zastosowaniem minimalizacji energii jądra po różnych konfiguracjach jednocząstkowych.

Z uwagi na obserwowane czynniki wzbronienia HF można oczekiwać, że jądra z nieparzystą cząstką oraz stany izomeryczne o dużym K mogą być kandydatami na bardziej trwałe formy najcięższych układów jądrowych [84] (oczywiście, czynnikiem niezbędnym jest jednoczesne wzbronienie rozpadu α – głównego kanału rozpadu dla tych jąder). Jest to dodatkowy powód by starać się lepiej zrozumieć mechanizm spowolnienia rozszczepienia przez niesparowany nukleon/nukleony i stanowi motywację dla obliczeń, których wyniki przedstawimy w kolejnych podrozdziałach.

Ze względu na konieczność wprowadzenia wielu przybliżeń skupimy się przy tym nie tyle na precyzyjnym odtworzeniu bezwzględnych wartości eksperymentalnych czasów życia (choć będziemy je przy okazji również podawać), co raczej na uchwyceniu omówionego tu efektu nieparzysto-parzystego tj. wzrostu czasu życia jąder z nieparzystą cząstką względem

sąsiednich układów parzystych. Stąd też, na potrzeby dyskusji wyników, będziemy posługiwać się czynnikiem wzbronienia HF, który dla naszych celów zdefiniujemy jako:

$$HF = \frac{T^o_{sf}}{T^e_{sf}}, \tag{6.1}$$

gdzie T^o_{sf} i T^e_{sf} oznaczają rozszczepieniowe czasy życia odpowiednio dla jądra nieparzystego o liczbie masowej A i dla jego parzysto-parzystego sąsiada mającego $A-1$ nukleonów. Obliczenia wykonano dla wybranych jąder superciężkich, gdyż dla aktynowców byłyby one o wiele trudniejsze numerycznie i mniej przejrzyste ze względu na konieczność uwzględnienia większej liczby parametrów deformacji i łamanie różnych symetrii na różnych odcinkach długiej bariery rozszczepieniowej.

6.2. Metoda instantonowa w zastosowaniu do jądra ^{257}Rf

Omówioną w rozdziale 2.4 metodę instantonową zastosowano na przykładzie jądra nieparzystego ^{257}Rf. Układ ten ma znany eksperymentalnie czas życia ze względu na rozszczepienie spontaniczne dla konfiguracji $I^\pi = 1/2^+$ (odpowiadającej w modelu micro-macro stanowi podstawowemu $K^\pi = \Omega^\pi = 1/2^+$) i wynosi on $T^{odd}_{sf} = 423$ s [11]. Znane jest także dolne ograniczenie na czas życia dla stanu $I^\pi = 11/2^-$, utożsamianego z konfiguracją $K^\pi = 11/2^-$, wynoszące $T^{odd}_{sf} > 490$ s [11] – w naszym modelu micro-macro odpowiada ona stanowi wzbudzonemu o ok. 300 keV w stosunku do stanu podstawowego. Czas życia dla parzysto-parzystego sąsiada ^{256}Rf jest równy $T^{even}_{sf} = 6.4$ ms [11], co daje czynniki wzbronienia: $HF = 6.6 \times 10^4$ (dla konfiguracji $K^\pi = 1/2^+$) i $HF > 7.6 \times 10^4$ (dla $K^\pi = 11/2^-$).

W celu zastosowania metody instantonowej obliczono wpierw odpowiednie powierzchnie energii potencjalnej. Ograniczono się do deformacji osiowo-symetrycznych bez asymetrii masowej: dla każdego punktu w płaszczyźnie $\beta_{20} - \beta_{40}$ energię minimalizowano po β_{60}, β_{80}. Zastosowano krok $\Delta\beta_{20} = 0.05$ i $\Delta\beta_{40} = 0.025$. Mapy zostały obliczone przy narzuceniu więzu na K^π tj. przy trzymaniu konfiguracji stanu rozpadającego się (odpowiednio $K^\pi = 1/2^+$ i $K^\pi = 11/2^-$). W praktyce odpowiada to konsekwentnej kontynuacji stanu adiabatycznego o zadanych Ω^π obsadzanego przez nieparzysty neutron w minimum energetycznym, gdyż to on decyduje o wartościach rzutu momentu pędu na oś symetrii i parzystości całego jądra. Wyniki obliczeń pokazano na rysunku 6.3. Analogiczne obliczenie wykonano dla parzysto-parzystego izotopu ^{256}Rf. Z map tych widać, że trzymanie konfiguracji w jądrze nieparzystym powoduje istotny wzrost i wydłużenie bariery rozszczepieniowej, przy czym efekt jest drastyczny dla wysokospinowej konfiguracji $K^\pi = 11/2^-$.

Kierując się otrzymanymi mapami energetycznymi zadano trajektorię rozszczepieniową

Jądro (K^π)	^{257}Rf $(1/2^+)$		^{257}Rf $(11/2^-)$		^{256}Rf	
Działanie [$\hbar$]	S_{inst}	S_{adiab}	S_{inst}	S_{adiab}	S_{inst}	S_{adiab}
Neutrony $(+)$	27.29	86.40	31.23	68.41	19.52	32.11
Neutrony $(-)$	73.71	1378.97	82.06	1539.65	65.53	1172.65
Protony $(+)$	46.19	9530.25	50.46	9754.98	46.09	9393.87
Protony $(-)$	15.34	21.76	19.11	46.94	12.87	16.39
Suma	**162.53**	**11017.38**	**182.86**	**11409.98**	**144.01**	**10615.02**

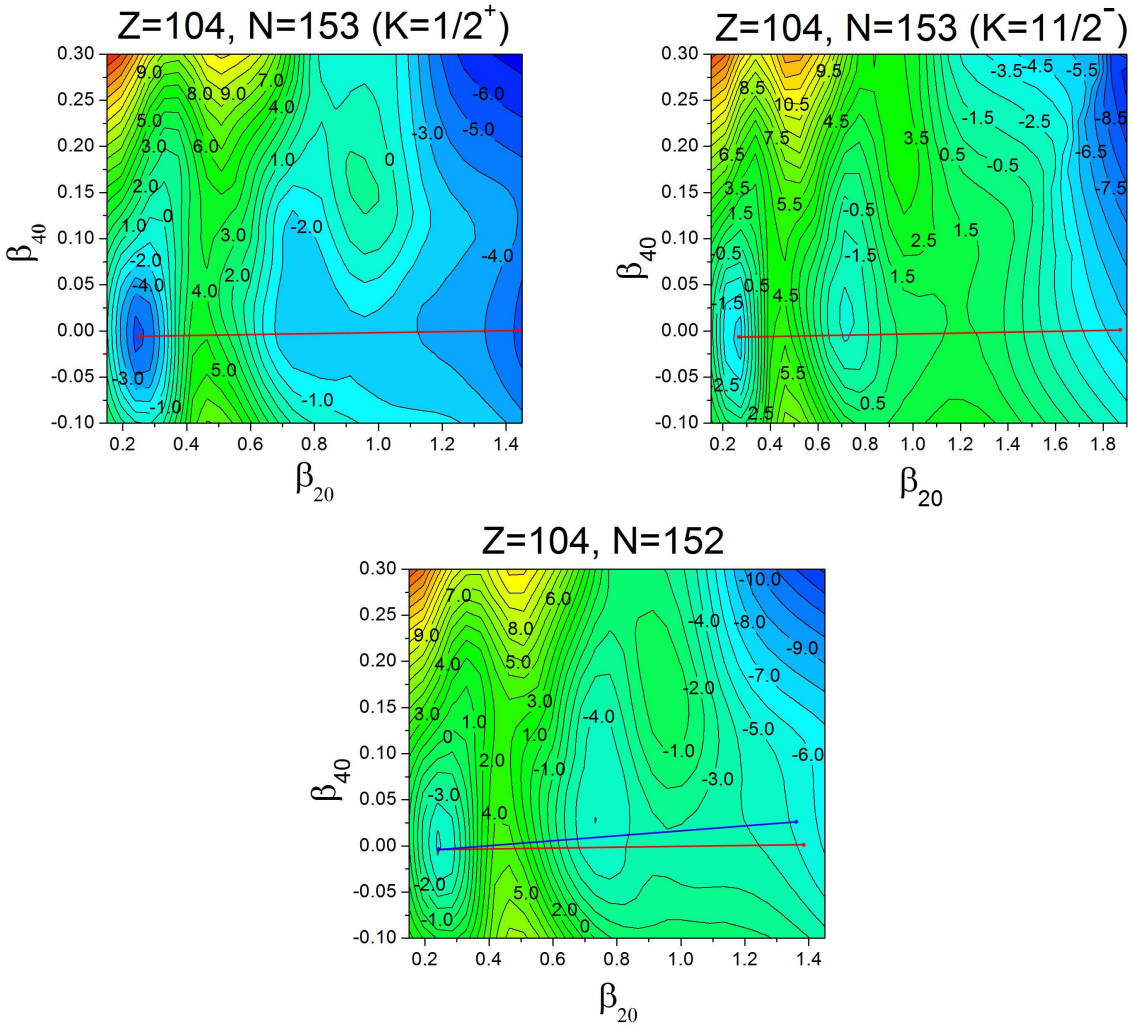
Tabela 6.1: Zestawienie wyników działań (w jedn. $\hbar$) obliczonych dla ^{257}Rf (obie konfiguracje) i ^{256}Rf. W tabeli podano działania obliczone w oparciu o rozwiązania instantonowe (S_{inst}) oraz, dla porównania, wartości otrzymane w przybliżeniu adiabatycznym (S_{adiab}) z *tą samą* prędkością $\dot{q}_P$ (patrz tekst), wzdłuż trajektorii pokazanej na rysunku 6.3. Wyszczególniono wkłady od neutronów i protonów w nawiasach podając parzystość danej grupy stanów.

parametryzowaną przez β_{20} i zaznaczoną na rysunku 6.3 linią czerwoną (w zmiennych β_{60}, β_{80} wyznaczono ją tak, aby była odcinkami prosta i jednocześnie aby otrzymane energie były bliskie energiom uzyskanym z minimalizacji). Konieczność dobrego odtworzenia szczegółów przebiegu sprzężeń między stanami potencjału Woodsa-Saxona wymagała zastosowania wysokiej rozdzielczości w obliczaniu danych wejściowych wzdłuż ścieżki. Stosowaliśmy tutaj krok $\Delta\beta_{20}\ 10^{-4}$, co oznacza o ok. 2 rzędy większą dokładność (gęstsze próbkowanie) w porównaniu z typowymi rachunkami z parametrem masowym.

Dla wybranej w wyżej opisany sposób ścieżki obliczono działanie instantonowe, z prędkością kolektywną $\dot{q}_P = \sqrt{2(V(q) - E_{m.s.})/B_P(q)}$, gdzie $V(q) - E_{m.s.}$ jest energią deformacji względem konfiguracji metastabilnej obliczoną dla każdej z obu konfiguracji w jądrze nieparzystym oraz dla parzysto-parzystego jądra sąsiedniego, a $B_P(q)$ jest parametrem masowym cranking jądra parzystego obliczonym *z uwzględnieniem pairingu*. Wartości działań zebrano w tabeli 6.1. Dla porównania pokazano również działania obliczone z tymi samymi $\dot{q}_P(\tau)$ i z parametrem masowym cranking $B_{NP}(q)$, obliczonym *bez uwzględnienia pairingu* dla każdego z jąder (tzn. także dla jądra nieparzystego):

$$S_{adiab} = \int_{-T/2}^{T/2} d\tau\, B_{NP}(q)\, \dot{q}_P^2. \tag{6.2}$$

Jak można się było spodziewać, adiabatyczne wartości działań są absurdalnie duże, prawie dwa rzędy wielkości większe od działań otrzymywanych z rozwiązań instantonowych. Za tę różnicę odpowiedzialne są głównie liczne pseudoprzecięcia poziomów jednocząstkowych, przy których warunek adiabatyczności przestaje być spełniony. Rozbieżność między sumarycznym S_{inst}, a S_{adiab} pokazuje w istocie, jak daleko od granicy adiabatycznej jesteśmy wziąwszy realistyczny potencjał jądrowy i realistyczną prędkość $\dot{q}$ dla jądra parzystego.



Rysunek 6.3: *U góry:* mapy energetyczne jądra ^{257}Rf zminimalizowane względem β_{60}, β_{80} przy trzymanej konfiguracji $K^\pi = 1/2^+$ (po lewej) oraz $K^\pi = 11/2^-$ (po prawej). *Na dole:* mapa energetyczna sąsiedniego jądra ^{256}Rf Czerwoną linią zaznaczono założoną trajektorię rozszczepienia. Dla jądra parzystego ciemnoniebieską linią zaznaczono również ścieżkę porównawczą dyskutowaną w tekście. Należy zwrócić uwagę na różne zakresy β_{20} na mapach.

Można zapytać, jakie byłoby działanie adiabatyczne (6.2), gdyby zamiast $\dot{q}_P$ przyjąć prędkość kolektywną $\dot{q}_{NP}$ wynikającą z parametru cranking *bez pairingu* dla danego jądra, tj. obliczoną ze wzoru (2.46) przy zastąpieniu $B_P \to B_{NP}$. Przeprowadzając odpowiednie obliczenia otrzymano wartość działania $199.28\,\hbar$ dla układu parzystego ^{256}Rf oraz $222.48\,\hbar$ dla jądra ^{257}Rf ($K^\pi = 1/2^+$). Widać, że tak obliczone działania są znacznie mniejsze od S_{adiab} pokazanych w tabeli 6.1. Wynik ten można zrozumieć następująco: parametr masowy bez pairingu silnie reaguje na wszelkie pseudoprzecięcia między poziomami w pobliżu energii Fermiego doznając gwałtownego wzrostu w tych obszarach. Drastyczny wzrost inercji będzie z kolei skutkował silnym spadkiem prędkości kolektywnej $\dot{q}_{NP}$ w pobliżu pseudoprzecięć, co oznacza, że ruch układu w ich otoczeniu odbywa się powoli i dzięki temu warunek adiabatyczności jest lepiej spełniony (w porównaniu do przypadku z $\dot{q}_P$). Zatem, choć punktem

wyjścia był nierealistyczny parametr masowy, to wyznaczona z niego (również nierealistyczna) prędkość kolektywna zapewnia, że mamy tutaj sytuację bliższą granicy adiabatycznej, stąd też wynikłe działanie nie jest tak absurdalnie wysokie, jak w poprzednim przypadku.

Działania otrzymane w oparciu o pełne, numeryczne rozwiązania równań instantonowych bez pairingu (2.49) (i bez uciekania się do dodatkowych przybliżeń) są wciąż o wiele za duże, by mogły odtwarzać eksperymentalne czasy życia rozważanych jąder (formuła (2.15)), nawet w przypadku parzysto-parzystego układu ^{256}Rf.

Interesująca jest analiza różnicy działań $\Delta S_{odd-even}$ między jądrem z nieparzystym nukleonem, a jego parzysto-parzystym sąsiadem. Zgodnie z wzorem (2.15) czynnik wzbronienia HF będzie bezpośrednio zależał od tej różnicy. W metodzie instantonowej $\Delta S_{odd-even}$ jest złożonym efektem wpływu następujących czynników:

1. wkład jednocząstkowy wnoszony do całkowitego działania przez stan instantonowy obsadzany przez nieparzysty nukleon;
2. wkład kolektywny wynikający z różnicy energii deformacji pomiędzy jądrem parzystym a nieparzystym; bierze się on z: A) innej prędkości kolektywnej dla układu parzystego i nieparzystego oraz B) innej długości ścieżek rozszczepieniowych (co wpływa na wartości działań wszystkich stanów jednocząstkowych jądra);

Oprócz tego występuje też różnica w potencjale WS między jądrami parzystym i nieparzystym tj. różniącymi się liczbą nukleonów o 1. Choć dla ciężkich i superciężkich układów różnica jednego nukleonu skutkuje jedynie drobną zmianą potencjału, to jednak może mieć ona wpływ na szczegóły pseudoprzecięć między jednocząstkowymi poziomami (w szczególności na stopień ich odpychania), na które rozwiązania instantonowe są wrażliwe (zwłaszcza przy słabych oddziaływaniach między stanami, o czym wspominano już uprzednio). Ten efekt omówimy dalej.

Teraz założymy, że trajektoria rozszczepienia dla jądra parzystego i nieparzystego ma taki sam przebieg i inna jest tylko jej długość, co wydaje się rozsądnym przybliżeniem patrząc na odpowiednie powierzchnie energii potencjalnej (czerwone linie, rysunek 6.3) [1].

Z tabeli 6.1 wynikają różnice działania $\Delta S_{odd-even} = 18.52\ \hbar$ dla konfiguracji ^{257}Rf $K^\pi = 1/2^+$ oraz $\Delta S_{odd-even} = 38.85\ \hbar$ dla $K^\pi = 11/2^-$. Widać, że wartości te są zdecydowanie za duże, by odtworzyć eksperymentalny czynnik wzbronienia HF [2]. Domyślamy się, że otrzymana rozbieżność z danymi eksperymentalnymi wynika z pominięcia wpływu sił pairing na efektywny parametr masowy (prędkość $\dot{q}_P$ ten wpływ zawiera) przez co otrzymane działania są za wysokie. Poza tym, prędkość kolektywna $\dot{q}$ stosowana w obliczeniach dla jądra ^{257}Rf wyznaczana jest z energii układu obliczanej przy zablokowaniu konfiguracji K^π wzdłuż

[1] W ogólności jednak ścieżki rozszczepieniowe dla obu układów nie będą identyczne, co dodatkowo wpłynie na wymienione wyżej wkłady do różnicy w działaniu.

[2] Wprawdzie dla konfiguracji $K^\pi = 11/2^-$ znamy jedynie dolne ograniczenie na HF to jednak wielkość wzbronienia ($\approx 5.5 \times 10^{33}$) wynikająca z otrzymanej różnicy w działaniu jest nierealistycznie wysoka.

całej trajektorii, co powoduje dużą różnicę w $\dot{q}_P$ w stosunku do ^{256}Rf. Jak wspomniano na początku rozdziału, narzucanie więzu na K^π jądra w trakcie rozszczepienia może być zbyt silnym ograniczeniem nieodpowiadającym fizycznej sytuacji. Spoglądając na powierzchnie energetyczne na rysunku 6.3 widzimy drastyczną różnicę między konfiguracjami $K^\pi = 1/2^+$ i $K^\pi = 11/2^-$ – trzymanie tej drugiej skutkuje znacznie wyższą i dłuższą barierą, co z kolei powoduje różnicę działań instantonowych między tymi dwoma przypadkami o $20.33\ \hbar$. Tymczasem dane eksperymentalne (rys. 6.1) nie potwierdzają tak silnej zależności czynnika wzbronienia HF od konfiguracji K^π rozszczepiającego się stanu. To sugeruje, że w trakcie procesu może dochodzić do (przynajmniej częściowego) niezachowania tych liczb kwantowych. Do dyskusji tego problemu powrócimy jeszcze w dalszej części pracy.

W celach porównawczych dla jądra parzystego ^{256}Rf obliczono również działanie instantonowe dla drugiej, geometrycznie zbliżonej trajektorii (ciemnoniebieska linia na rys. 6.3). Wyniki zestawiono w tabeli 6.2. Widać znaczącą różnicę w działaniach między obiema drogami wynoszącą $23\ \hbar$. Ścieżki te są geometrycznie zbliżone do siebie, ich długość również, a obie trajektorie mają zbliżone przebiegi $\dot{q}$. Różnią się natomiast szczegółami przebiegu poziomów jednocząstkowych – te niewielkie różnice w okolicach pseudoprzecięć przenoszą się na znaczącą różnicę w wartości działań. Manifestuje się tutaj wrażliwość metody instantonowej na szczegóły pseudoprzecięć. Ten niekorzystny efekt wynika z braku pairingu, który łagodziłby ich wpływ, tak jak to się dzieje w przypadku obliczania parametru masowego dla jądra parzystego (wzór (2.17)) bez ostatniego członu) i działania z jego pomocą (wzór (2.11)). Mając na uwadze, że ścieżka rozszczepieniowa powinna minimalizować działanie, można podejrzewać, że optymalna droga będzie unikać ostrych pseudoprzecięć.

Wnioski z przedstawionych obliczeń można podsumować następująco:

– Metoda instantonowa bez pairingu w wersji zaproponowanej w rozdziale 2.4 wykazuje silną zależność od przebiegu poziomów jednocząstkowych wzdłuż trajektorii rozszczepienia. Hipoteza, że przebieg ten będzie miał istotny wpływ na dynamikę procesu rozszczepienia spontanicznego, a tym samym na czasy życia, pojawiła się już w latach 50-tych ubiegłego wieku

	ścieżka czerwona	ścieżka niebieska
Neutrony $(+)$	19.52	21.12
Neutrony $(-)$	65.53	69.65
Protony $(+)$	46.09	59.95
Protony $(-)$	12.87	16.29
Suma	**144.01**	**167.01**

Tabela 6.2: Zestawienie wyników działań instantonowych S_{inst} (w jedn. $\hbar$) dla jądra parzystego ^{256}Rf, dla dwóch bliskich sobie ścieżek rozszczepieniowych (patrz, rys. 6.3).

w pracy [51]. Stwiedzona tu czułość działania na zachowanie się stanów jednocząstkowych (w szczególności na zbliżenia między nimi) jest na tyle duża, że utrudniałaby bardzo jego minimalizację po trajektoriach.

– Działania obliczone z prędkością $\dot{q}_P$, wynikającą z parametru masowego cranking z uwzględnieniem pairingu dla sąsiedniego jądra parzystego, są zawyżone a czasy życia bardzo przeszacowane.

– Za duże (w porównaniu z eksperymentem) są również obliczone czynniki wzbronienia spowodowanego obecnością niesparowanego nukleonu. Jednym z powodów tego może być utrzymywanie liczb kwantowych K^π rozpadającego się stanu w przypadku jądra nieparzystego, czyli za wysokiej i zbyt długiej bariery potencjału.

Zauważmy tutaj, że w metodzie instantonowej bez pairingu efekt nieparzysto-parzysty w czasach życia bierze się właśnie z różnicy w długości i wysokości bariery rozszczepieniowej. Gdyby te różnice nie występowały, to działanie dla jądra nieparzystego o liczbie masowej A miałoby wartość mieszczącą się zawsze w przedziale między działaniami dla sąsiednich jąder parzysto-parzystych o $A-1$ i $A+1$ nukleonach. Wynika to wprost z faktu, że całkowite działanie jest sumą kolejnych wkładów jednocząstkowych, zgodnie ze wzorem (2.54). Dopiero wzrost i wydłużenie bariery (wyższe $\dot{q}$) powodują, że te wkłady dla jądra nieparzystego są inne i prowadzą do wyższego sumarycznego działania (a więc i czasu życia) w stosunku do obu parzysto-parzystych sąsiadów.

Badaniu wpływu różnic w barierze na wielkość czynnika wzbronienia HF poświęcone są kolejne podrozdziały.

6.3. Obliczenia z parametrem masowym jądra parzystego oraz uwzględnieniem przyczynku instantonowego dla wybranych jąder

Rezultaty poprzedniego podrozdziału wskazują, że wzrost bariery jądra nieparzystego (względem sąsiedniego parzystego) na skutek blokowania jest efektem o pierwszorzędnym znaczeniu. W celu zbadania go w bardziej realistycznym modelu z uwzględnieniem oddziaływania pairing, użyto modyfikacji działania adiabatycznego dla jąder nieparzystych – wyniki dla wybranych jąder zaprezentowane są w dalszej części rozdziału.

Przyjęto następujący schemat obliczeniowy: działania dla jąder parzysto-parzystych zostały oszacowane wprost z formuły (2.11) dla trajektorii zadanej na podstawie obliczonej mapy energetycznej. W przypadku jąder nieparzystych sytuacja się komplikuje, bowiem (jak dyskutowano w rozdziale 2.2) przybliżenie adiabatyczne na ogół nie jest tu spełnione i nie powinno się stosować wynikającego z niego parametru masowego (2.17). Mając na uwadze to, a także trudności w rozwiązywaniu równań instantonowych z pairingiem, postanowiono **przyjąć przybliżenie**, w którym jądro nieparzyste traktujemy jako parzysto-parzysty rdzeń plus

niesparowany nukleon. W efekcie działanie dla takiego układu zapisujemy jako sumę dwóch części:

$$S_{odd} = S_{crank} + S^{inst}_{s.p.} \ . \tag{6.3}$$

W powyższej formule S_{crank} oznacza wkład od parzysto-parzystego rdzenia, zaś $S^{inst}_{s.p.}$ jest jednocząstkową poprawką pochodzącą od nieparzystego nukleonu. S_{crank} obliczamy wg (2.11), gdzie przyjmujemy parametr masowy z pairingiem dla sąsiedniego, parzystego układu (o liczbie masowej $A-1$), natomiast bariera energetyczna odpowiada danemu jądru nieparzystemu. Za takim wyborem parametru masowego i, w konsekwencji, prędkości kolektywnej $\dot{q}$ przemawia następujące rozumowanie: odrzucone jako nieprawomocne dla jąder nieparzystych przybliżenie adiabatyczne daje wielki parametr masowy w pobliżu pseudoprzecięć poziomów; oznacza to, że prędkość kolektywna jest tam znikoma. Poza takimi odcinkami parametr ten będzie podobny jak w sąsiednim jądrze parzysto-parzystym (co wynika ze wzoru (2.17)). Zatem $\dot{q}$ otrzymane z parametru cranking jądra nieparzystego wykazuje szaloną zmienność z deformacją. Jeśli więc kwestionujemy zasadność teorii adiabatycznej dla jąder nieparzystych, to mamy prawo spodziewać się o wiele bardziej umiarkowanej zmienności $\dot{q}(q)$. Innymi słowy przyjmujemy założenie, że parametry masowe mają charakter kolektywny i w związku z tym dla sąsiednich jąder będą one podobne, zaś efekt wzbronienia bierze się przede wszystkim z różnicy w barierze rozszczepieniowej. To zaś, czego brakuje w przyjętym parametrze masowym jądra parzystego i wynikającym zeń działaniu S_{crank}, modelujemy poprzez dodanie wkładu instantonowego od nieparzystej cząstki $S^{inst}_{s.p.}$. Dodatek ten możemy przyjąć jako różnicę działań instantonowych między jądrem nieparzystym, a parzystym pochodzącą od grupy stanów o Ω^{π}, w której znajduje się nieparzysty nukleon (jeśli, przykładowo, nieparzystą cząstką jest neutron w stanie $9/2^{-}$ to liczymy wkłady od tej grupy stanów dla jądra nieparzystego i parzystego zgodnie z metodą instantonową, a jako $S^{inst}_{s.p.}$ bierzemy ich różnicę).

Przyjmując opisane wyżej podejście widać, że na różnicę w działaniu między układem nieparzystym i parzystym (a więc i czynnik wzbronienia HF) będą miały wpływ dwa czynniki:

1. różnica w wysokości i kształcie bariery potencjalnej,
2. wkład $S^{inst}_{s.p.}$ od niesparowanej cząstki.

Istotne jest zatem to, jak liczymy energię deformacji jądra, tzn. czy na trajektorii rozszczepieniowej trzymamy konfigurację K^{π} stanu podstawowego, czy też nie. Otrzymane w poprzednim podrozdziale wyniki dla jądra ^{257}Rf sugerują, że narzucanie więzu na konfigurację stanowi silne ograniczenie prowadzące do nierealistycznie dużego wzrostu wysokości i długości barier rozszczepieniowych. Stąd też mapy energetyczne dla wszystkich badanych układów obliczono na dwa sposoby. W pierwszej wersji blokowano konfigurację K^{π} na całej mapie. W drugiej wersji obliczano powierzchnię adiabatyczną tj. w każdym punkcie deformacji obsadzano nieparzystą cząstką ten orbital, który dawał najniższą energię jądra, bez przejmowania się jego charakterystykami kwantowymi. W kolejnych podrozdziałach przedstawimy porównanie i

dyskusję wyników tych dwóch skrajnych scenariuszy.

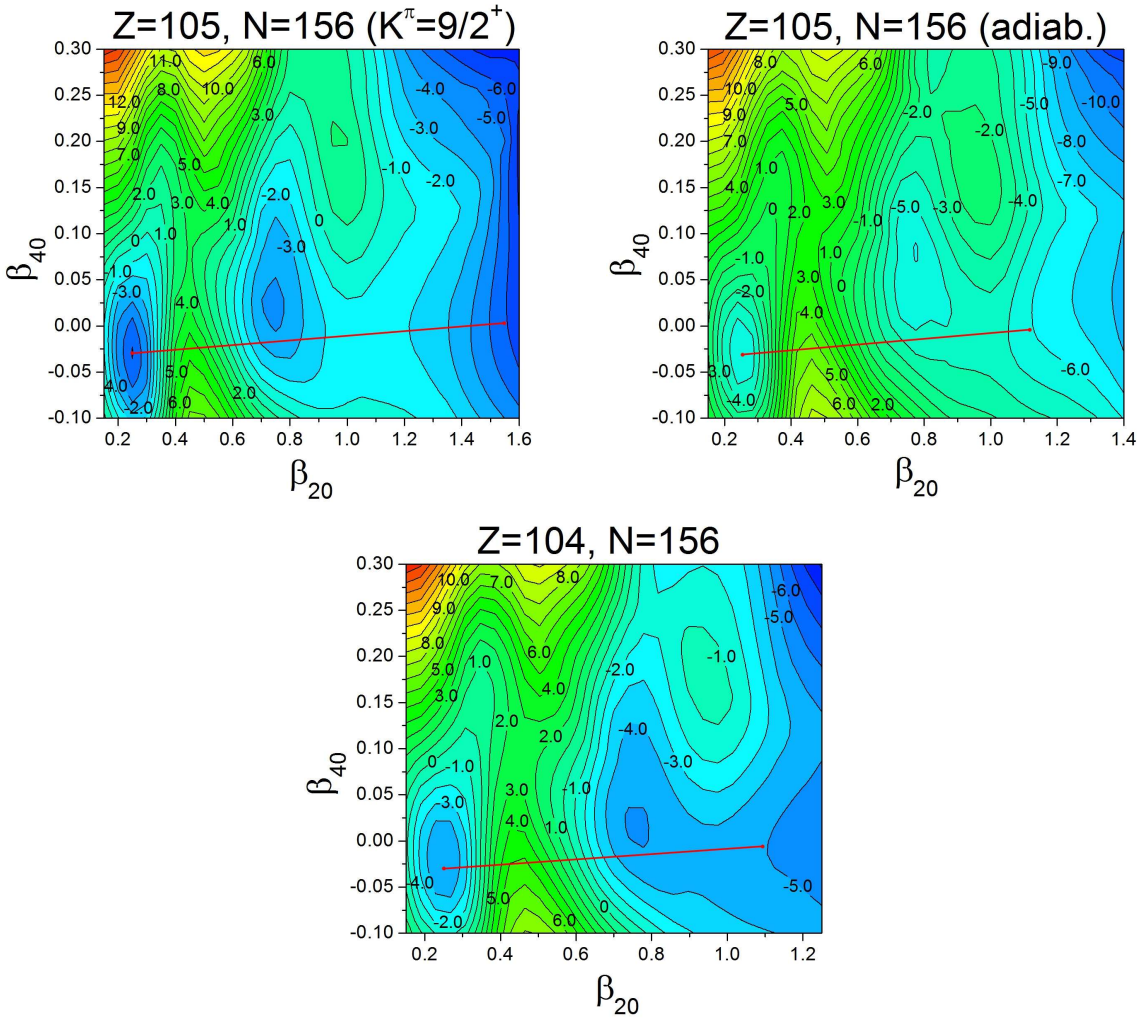
Przestrzeń parametrów deformacji, w której obliczano powierzchnie energii potencjalnej oraz sposób wyznaczania trajektorii rozszczepieniowych są analogiczne, jak to opisano dla przypadku ^{257}Rf w poprzedniej sekcji. Do obliczeń wybrano jądra z obszaru $Z = 103-112$, dla których znane są rozszczepieniowe czasy życia, tak dla jąder nieparzystych, jak i ich parzystych sąsiadów, co umożliwia określenie eksperymentalnego stopnia wzbronienia powodowanego przez nieparzystą cząstkę. Większość wybranych jąder z niesparowanym nukleonem posiada również eksperymentalnie przypisaną konfigurację K^π, co ułatwia porównanie doświadczalnych danych z teoretycznymi oszacowaniami czasów życia dla przypadków o dużym i małym momencie pędu.

6.3.1. Wyniki obliczeń czasów życia i HF przy $E_{zp} = 0.5$ MeV

Przedstawimy teraz wyniki obliczeń dla wybranych układów jądrowych. Przy obliczaniu działania wg (2.11) przyjęto typową wartość energii drgań zerowych $E_{zp} = 0.5$ MeV.

Na rysunkach 6.4, 6.5 pokazano mapy energetyczne dla dwóch wybranych jąder: ^{261}Db oraz ^{259}Sg. Pierwsze z nich odznacza się spinem stanu podstawowego $K^\pi = 9/2^+$ drugie zaś konfiguracją niskospinową $K^\pi = 1/2^+$. Pokazane zostały zarówno powierzchnie obliczone przy trzymaniu charakterystyk kwantowych rozpadającego się stanu, jak i powierzchnie adiabatyczne wraz z zadanymi trajektoriami rozszczepieniowymi. Uwzględniono także mapy sąsiednich jąder parzystych. Widzimy, że bariera rozszczepieniowa ma w większości przypadków przebieg dwugarbny, przy czym drugi garb jest zwykle znacznie niższy. Podobny przebieg obserwowano w pozostałych jądrach. Stąd też przy omawianiu wyników będziemy mówili o pierwszej i drugiej barierze. Wyraźna jest różnica między mapami obliczonymi z trzymaniem konfiguracji K^π, a powierzchniami adiabatycznymi. W przypadku „wysokospinowego" stanu jądra ^{261}Db widać wyraźnie, że narzucanie więzu na K^π powoduje istotny wzrost i wydłużenie drugiej bariery w stosunku do blokowania adiabatycznego, co w oczywisty sposób prowadzi do znacznie większych wartości działań. Dla stanu $1/2^+$ w ^{259}Sg różnica między tymi przypadkami jest mniejsza. Zmianę w wysokości i długości bariery w zależności od wielkości spinu trzymanego stanu widać było także w omawianym wcześniej przypadku ^{257}Rf (rys. 6.3).

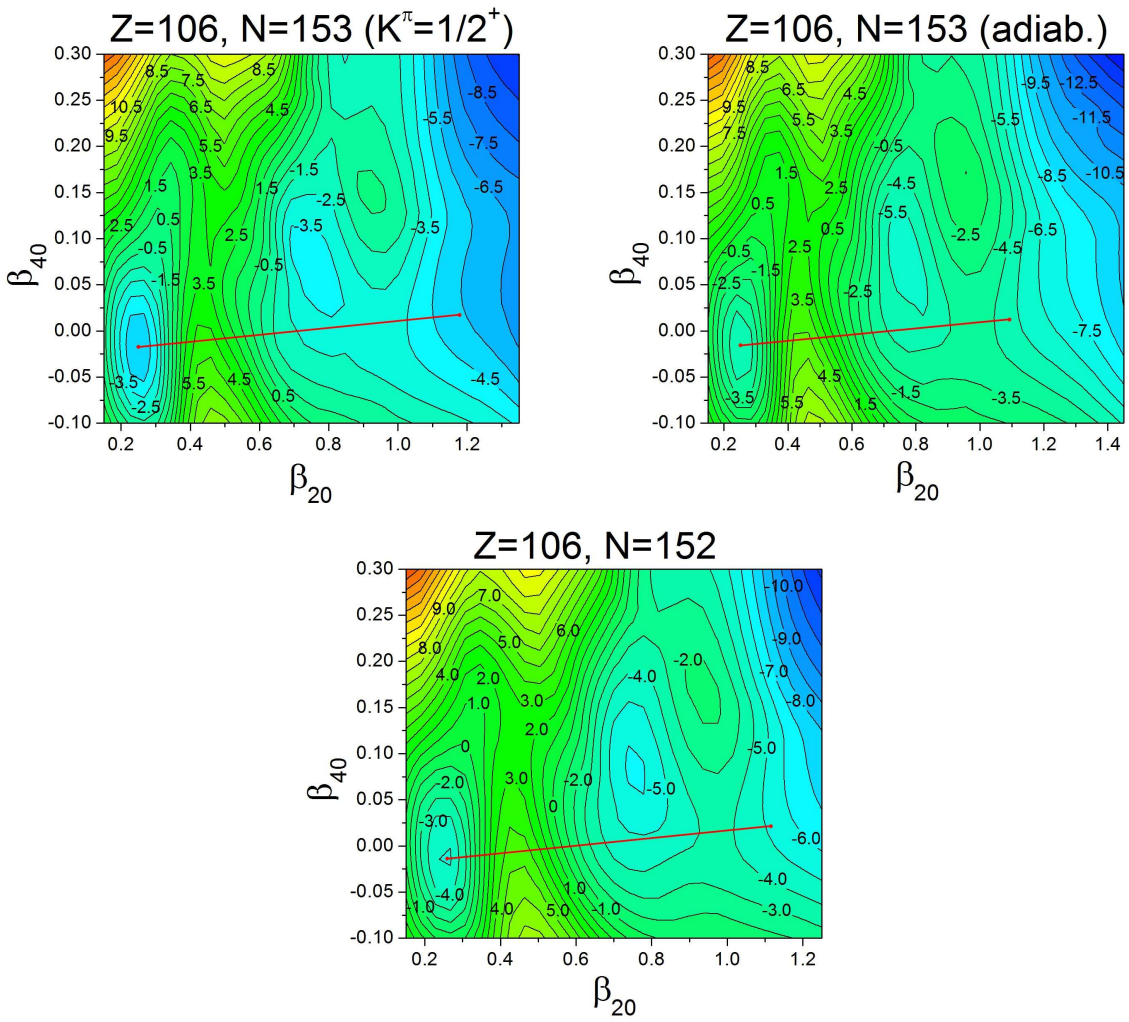
W tabeli 6.3 zebrano rezultaty dla jąder parzysto-parzystych będących punktem odniesienia do obliczenia wielkości wzbronienia na rozszczepienie dla odpowiednich układów nieparzystych. Widać, że otrzymujemy zbyt duże działania (choć znacznie mniejsze niż w metodzie instantonowej bez pairingu), co przekłada się na czasy życia o wiele rzędów wyższe w stosunku do wartości doświadczalnych. Powodem tej rozbieżności może być za małe natężenie sił pairing wzięte w obliczeniach oraz zbyt mała przestrzeń parametrów deformacji tj. nieuwzględnienie nieosiowości oraz asymetrii masowej mogących prowadzić do obniżenia i skrócenia bariery (wpływ tych deformacji skomentujemy krótko pod koniec



Rysunek 6.4: *U góry:* mapy energetyczne jądra ^{261}Db zminimalizowane względem β_{60}, β_{80} przy trzymanej konfiguracji $K^\pi = 9/2^+$ (po lewej) oraz przy blokowaniu adiabatycznym (po prawej). *Na dole:* mapa energetyczna sąsiedniego jądra ^{260}Rf. Czerwoną linią zaznaczono założoną trajektorię rozszczepienia. Należy zwrócić uwagę na różne zakresy β_{20} na mapach.

podrozdziału). Sprawdzono to na przykładzie izotopu ^{256}Rf: rachunek kontrolny wykonano dla silniejszego oddziaływania pairing i $E_{zp} = 0.7$ MeV stosowanych w pracy [10] oraz ograniczając się (tak jak w cytowanej publikacji) do pierwszej bariery (tj. zakładając, że drugi garb zostałby zniwelowany po uwzględnieniu wspomnianych deformacji). Otrzymano wówczas dobrą zgodność z eksperymentalnym czasem życia.

W tabeli 6.4 przedstawiono wyniki dla jąder nieparzystych: porównanie działań obliczonych dla trzymanej konfiguracji K^π stanu podstawowego i przy blokowaniu adiabatycznym, z podziałem na wkłady od pierwszej i drugiej bariery. Różnice między tymi dwoma przypadkami są znaczące; największe otrzymuje się dla konfiguracji o dużym K. Wynika to z faktu, że gęstość stanów jednocząstkowych o dużym Ω (rzut całkowitego spinu na oś symetrii jądra) jest znacznie mniejsza niż dla stanów o małym Ω – w efekcie poziomy te mogą się wznosić wysoko w energii nie mając w pobliżu sąsiadów, z którymi mogłyby oddziaływać. Stąd też



Rysunek 6.5: *U góry:* mapy energetyczne jądra ^{259}Sg zminimalizowane względem β_{60}, β_{80} przy trzymanej konfiguracji $K^\pi = 1/2^+$ (po lewej) oraz przy blokowaniu adiabatycznym (po prawej). *Na dole:* mapa energetyczna sąsiedniego jądra ^{258}Sg. Czerwoną linią zaznaczono założoną trajektorię rozszczepienia. Należy zwrócić uwagę na różne zakresy β_{20} na mapach.

trzymanie niesparowanego nukleonu na takim stanie (odpowiadającym za K^π całego jądra) wzdłuż drogi rozszczepienia powoduje podwyższenie i rozciągnięcie bariery energetycznej. Z tabeli 6.4 widać, że efekt ten uwidacznia się przede wszystkim na drugiej barierze. Na wybranych przypadkach sprawdzono, że w obrębie pierwszej bariery stany jednocząstkowe odpowiadające zadanej konfiguracji leżą energetycznie blisko stanów minimalizujących energię jądra przy danych deformacjach, stąd też różnice we wkładach do działań pochodzących od tej części drogi są niewielkie.

W tabeli 6.5 pokazano, jak te wyniki przekładają się na czasy życia i czynniki wzbronienia. W obu scenariuszach otrzymuje się mocno przeszacowane czasy życia w stosunku do wartości eksperymentalnych (przy czym są one znacznie większe w przypadku trzymania konfiguracji). To nie jest dziwne, bo także dla sąsiednich jąder parzysto-parzystych otrzymano mocno zawyżone wartości, co może wynikać ze wspomnianych wcześniej przyczyn.

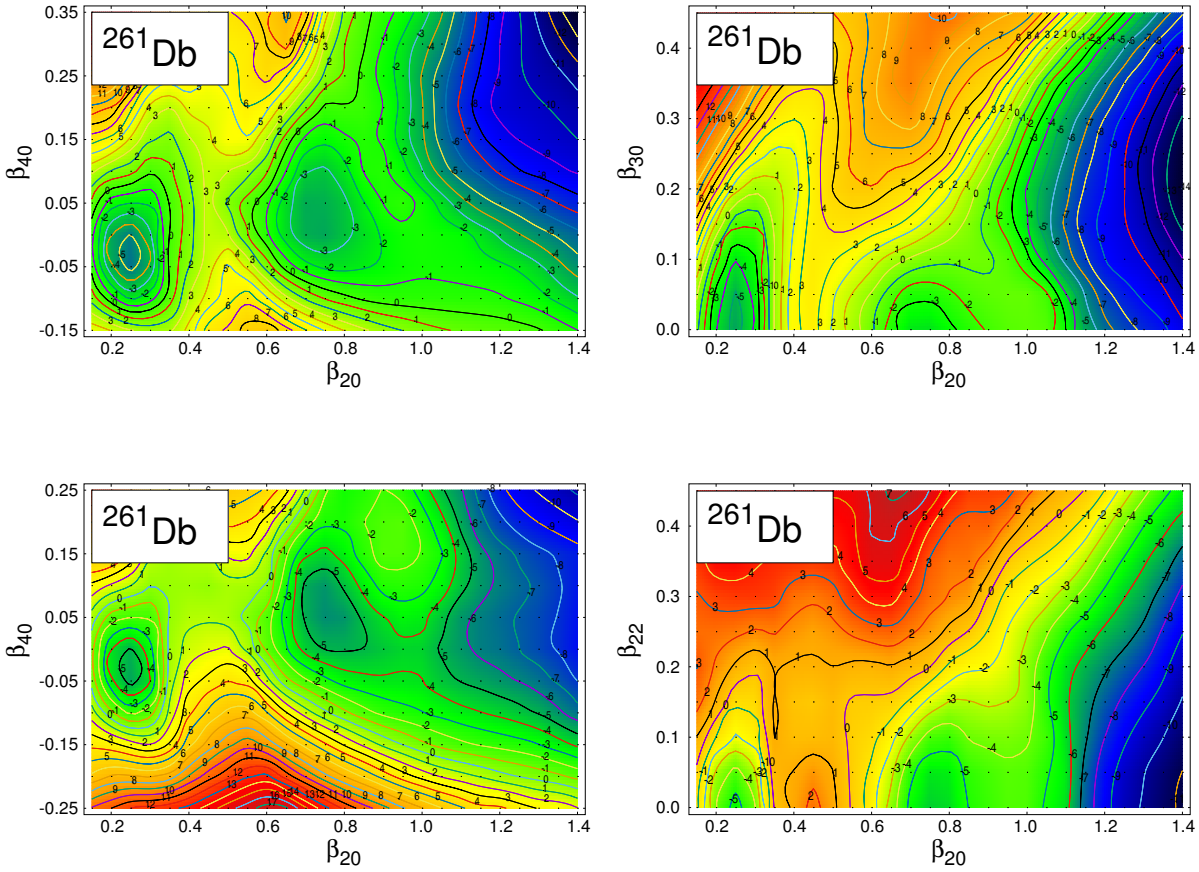
Jądro	$S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$	T^{exp}_{sf} [s] ([11])	T^{calc}_{sf} [s]
^{258}No	31.14	7.97	39.11	1.2E-03	2.7E+13
^{254}Rf	26.26	9.90	36.16	2.3E-05	7.4E+10
^{256}Rf	30.73	11.88	42.61	6.4E-03	3.0E+16
^{260}Rf	32.28	4.87	37.15	2.2E-02	5.4E+11
^{258}Sg	31.85	7.10	38.95	2.6E-03	2.0E+13
^{260}Sg	33.55	5.95	39.50	7.0E-03	5.9E+13
^{282}Cn	8.28	21.36	29.64	9.1E-04	1.6E+05

Tabela 6.3: Zestawienie wyników dla jąder parzysto-parzystych. $S^{(1)}_{crank}$, $S^{(2)}_{crank}$, $S^{(1+2)}_{crank}$ oznaczają odpowiednio wkład do działania od pierwszej i drugiej bariery oraz sumaryczne działanie. Podano również czasy życia: eksperymentalny T^{exp}_{sf} oraz T^{calc}_{sf} obliczony z działania $S^{(1+2)}_{crank}$.

Bardziej interesujące jest spojrzenie na wielkość względną tj. na czynnik wzbronienia HF pokazujący efekt wprowadzenia niesparowanej cząstki. Widać, że rachunek z trzymaniem konfiguracji daje tu generalnie wartości o wiele rzędów wyższe w porównaniu z wynikiem eksperymentalnym (z wyjątkiem najcięższego jądra ^{283}Cn) przy czym największa różnica występuje dla konfiguracji z dużym K (co jest konsekwencją największej różnicy w działaniach dla tych właśnie jąder). Z kolei w rachunku z blokowaniem adiabatycznym otrzymuje się w większości przypadków zaniżone wartości HF w stosunku do danych eksperymentalnych. Rozbieżność z doświadczeniem jest tutaj mniejsza i wynosi kilka rzędów wielkości. W szczególności dla jąder o dużym K^{π} w stanie podstawowym następuje wyraźna poprawa w porównaniu z przypadkiem trzymania konfiguracji. W tabeli 6.5 podano także poprawkę jednocząstkową dla nieparzystej cząstki obliczoną metodą instantonową – modyfikację przez nią wprowadzoną omówimy w kolejnym podrozdziale.

Otrzymane wyniki sugerują, że scenariusz z trzymaniem konfiguracji w trakcie procesu rozszczepienia jest niefizyczny prowadząc do wzbronienia znacznie wyższego od wyznaczonego eksperymentalnie. Ponadto w rachunku tym wielkość wzbronienia HF silnie zależy od konfiguracji rozpadającego się stanu, tymczasem dane eksperymentalne nie wskazują na istnienie takiej zależności – dla większości przypadków różnica wynosi 3-5 rzędów wielkości (rys. 6.1). Z kolei przyjęcie scenariusza adiabatycznego, w którym w ogóle nie uwzględniamy energii specyfikacji i całe wzbronienie bierze się z efektu blokowania poziomu przez niesparowaną cząstkę, daje zwykle zaniżone wyniki w stosunku do eksperymentu. Prowadzi to do wniosku, że żaden z tych skrajnych scenariuszy nie odpowiada fizycznej sytuacji i w rzeczywistości proces rozszczepienia spontanicznego jądra nieparzystego może mieć charakter pośredni między tymi dwoma granicznymi przypadkami.

W przytoczonych wyżej obliczeniach ograniczyliśmy się do czterech deformacji: β_{20},



Rysunek 6.6: *U góry:* Powierzchnie energetyczne jądra ^{261}Db obliczone na sieci w przestrzeni $\beta_{20}, \beta_{30}, \beta_{40}, \beta_{50}, \beta_{60}, \beta_{70}, \beta_{80}$ przy trzymanej konfiguracji $K = 9/2$ – pokazano rzut na płaszczyznę $\beta_{20} - \beta_{40}$ (po lewej) i na płaszczyznę $\beta_{20} - \beta_{30}$ (po prawej) *Na dole:* Powierzchnie energetyczne jądra ^{261}Db obliczone na sieci w przestrzeni $\beta_{20}, \beta_{22}, \beta_{40}, \beta_{60}, \beta_{80}$ – pokazano rzut na płaszczyznę $\beta_{20} - \beta_{40}$ (po lewej) i na płaszczyznę $\beta_{20} - \beta_{22}$ (po prawej). [86]

β_{40}, β_{60}, β_{80}. Wiadomo, że deformacje łamiące symetrię osiową (β_{22} i dalsze) mogą istotnie obniżać barierę energetyczną (co pokazują choćby wyniki z rozdziału 1.3). Podobny efekt może mieć także uwzględnienie deformacji wprowadzającej asymetrię masową (β_{30} i wyższe, nieparzyste multipole). Celem odpowiedzi na pytanie, jak te dodatkowe stopnie swobody modyfikują powierzchnie energetyczne w rozważanym przez nas zakresie Z i N, na rysunku 6.6 przedstawiono mapy energetyczne dla przypadku ^{261}Db wykonane z uwzględnieniem odpowiednio i nieosiowej deformacji β_{22} i asymetrii masowej β_{30} (z minimalizacją po wyższych multipolach). Obliczenia wykonał dr Piotr Jachimowicz z Uniwersytetu Zielonogórskiego – wyniki prezentujemy tu dzięki jego uprzejmości. Widać z nich, że nieosiowość ma wpływ jedynie na pierwszą barierę obniżając ją o ok. 1-2 MeV, jednak odbywa się to kosztem istotnego wydłużenia drogi rozszczepienia, stąd też nie wydaje się, by β_{22} mogła dawać znaczące obniżenie wartości działania. Z kolei asymetria masowa zaczyna być istotna dla dużych deformacji β_{20} w obszarze drugiej bariery obniżając ją nieco i skracając. Efekt ten

		Trzymanie konfiguracji			Blokowanie adiabatyczne			Różnice		
Jądro	K^π	$S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$	$\Delta S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$\Delta S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$\Delta S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$
^{259}Lr	7/2-	35.51	16.53	52.04	32.44	8.02	40.46	3.07	8.51	11.58
^{255}Rf	9/2-	31.83	39.2	71.03	31.04	15.09	46.13	0.79	24.11	24.9
^{257}Rf	1/2+	35.79	16.03	51.82	31.74	10.77	42.51	4.05	5.26	9.31
^{257}Rf (m)	11/2-	33.76	31.69	65.45	31.74	10.77	42.51	2.02	20.92	22.94
^{261}Db	9/2+	35.54	21.14	56.68	35.74	7.58	43.32	-0.2	13.56	13.36
^{259}Sg	1/2+	36.24	11.98	48.22	33.05	6.95	40	3.19	5.03	8.22
^{261}Sg	3/2+	36.79	9.61	46.4	34.92	5.71	40.63	1.87	3.9	5.77
^{283}Cn	5/2+	12.19	22.5	34.69	10.07	22.07	32.14	2.12	0.43	2.55

Tabela 6.4: Porównanie wyników działań obliczanych w przybliżeniu cranking (wzór (2.11)) w przypadku trzymania konfiguracji jądra K^π wzdłuż trajektorii rozszczepienia z wynikami dla ścieżki adiabatycznej. $S^{(1)}_{crank}$, $S^{(2)}_{crank}$, $S^{(1+2)}_{crank}$ - oznaczają odpowiednio wkład do działania od pierwszej i drugiej bariery oraz wartość sumaryczną. W trzeciej części tabeli zestawiono odpowiednie różnice.

Dane jądra				Trzymanie konfiguracji					Blokowanie adiabatyczne				
^{A}X	K^{π}	T_{sf}^{exp} [s]	HF_{exp}	$S_{crank}/\hbar$	$S_{s.p.}^{inst}/\hbar$	$\Delta S_{crank}^{o-e}/\hbar$	T_{sf}^{calc} [s]	HF_{calc}	$S_{crank}/\hbar$	$S_{s.p.}^{inst}/\hbar$	$\Delta S_{crank}^{o-e}/\hbar$	T_{sf}^{calc} [s]	HF_{calc}
^{259}Lr	7/2-	27.4	2.3E+04	52.04	2.08	12.93	4.6E+24	1.7E+11	40.46	1.02	1.35	4.0E+14	1.5E+01
^{255}Rf	9/2-	3.15	1.4E+05	71.03	-2.08	34.87	1.4E+41	1.9E+30	46.13	-1.37	9.97	3.4E+19	4.6E+08
^{257}Rf	1/2+	423	6.6E+04	51.82	4.32	9.21	3.0E+24	1.0E+08	42.51	2.43	-0.10	2.4E+16	8.2E-01
^{257}Rf (m)	11/2-	> 490	> 76562.5	65.45	0.68	22.84	2.0E+36	6.9E+19	42.51	0.03	-0.10	2.4E+16	8.2E-01
^{261}Db	9/2+	5.6	2.5E+02	56.68	0.35	19.53	4.9E+28	9.2E+16	43.32	0.04	6.17	1.2E+17	2.3E+05
^{259}Sg	1/2+	8	3.1E+03	48.22	3.75	9.27	2.2E+21	1.1E+08	40.00	1.85	1.05	1.6E+14	8.2E+00
^{261}Sg	3/2+	31	4.4E+03	46.40	1.57	6.90	5.8E+19	9.8E+05	40.63	0.61	1.13	5.6E+14	9.6E+00
^{283}Cn	5/2+ (*)	24	2.6E+04	34.69	2.86	5.05	3.9E+09	2.4E+04	32.14	2.76	2.50	2.4E+07	1.5E+02

Tabela 6.5: Zestawienie wyników dla jąder nieparzystych. W pierwszej części tabeli podano dane eksperymentalne jąder (za [11]) tj. rozszczepieniowy czas życia T_{sf}^{exp} i czynnik wzbronienia HF_{exp} oraz konfigurację stanu podstawowego K^{π} (gwiazdką (*) oznaczono przypadki, gdzie brak eksperymentalnego przypisania konfiguracji, wówczas jest to wielkość odpowiadająca nieparzystemu nukleonowi w potencjale Woodsa-Saxona, (m) - oznacza konfigurację wzbudzoną). Druga i trzecia część tabeli to wyniki numeryczne uzyskane odpowiednio przy trzymaniu konfiguracji oraz przy blokowaniu adiabatycznym. Podano tu działanie cranking $S_{crank}/\hbar$, poprawkę instantonową $S_{s.p.}^{inst}$, różnicę w działaniu w stosunku do sąsiedniego jądra parzystego ΔS_{crank}^{o-e} oraz wynikające stąd czasy życia T_{sf}^{calc} i czynniki wzbronienia HF_{calc}.

jest szczególnie widoczny w przypadku trzymania wysokospinowej konfiguracji. Jednak nawet w tak poszerzonej przestrzeni deformacji należy spodziewać się wciąż zbyt wysokich działań przekładających się na przeszacowane czasy życia – z tabeli 6.3 i 6.4 widać, że już sam wkład od pierwszej bariery (dla której zgodnie z rysunkiem 6.6 asymetria masowa nie ma znaczenia) jest zbyt duży.

6.3.2. Wyniki obliczeń czasów życia i HF przy dopasowywanym E_{zp}

Czasy życia otrzymane w poprzedniej sekcji mocno odbiegały od wartości eksperymentalnych, także dla układów parzysto-parzystych stanowiących punkt odniesienia dla obliczania wzbronienia powodowanego przez niesparowana cząstkę. Stąd też postanowiono dopasować parametr E_{zp}, tj. energię drgań zerowych, do czasów życia jąder parzysto-parzystych. W wyniku tego otrzymano $E_{zp} = 2.03$ MeV. Podniesienie wartości E_{zp} powoduje efektywne obniżenie i skrócenie bariery energetycznej. Można więc powiedzieć, że w uproszczony sposób pozwala to częściowo skorygować wyniki o efekt zbyt słabego pairingu i braku asymetrii masowej w naszych rachunkach – jak wspomniano wcześniej, oba te czynniki powinny prowadzić do redukcji bariery. Dzięki temu możemy skupić uwagę na interesującym nas efekcie wzbronienia powodowanego przez nieparzystą cząstkę.

Wyniki dla jąder parzystych przedstawia tabela 6.6. Widać, że po dopasowaniu E_{zp} uzyskano czasy życia mieszczące się w prawidłowym zakresie tj. w obrębie tego samego rzędu wielkości, co wartości eksperymentalne (z wyjątkiem jądra ^{260}Sg). Jednocześnie widać, że w obszarze $Z = 102 - 106$ dopasowanie energii drgań zerowych do danych efektywnie zniwelowało wpływ drugiej bariery – całe działanie pochodzi od pierwszego garbu. Wynik ten jest jakościowo podobny do otrzymanego w pracy [10], gdzie również bariera jest jednogarbna, a obliczone działania związane z tunelowaniem przez nią prowadzą do dobrego odtworzenia wyników doświadczalnych.

W tabeli 6.7 ponownie porównano rezultaty otrzymane przy trzymaniu konfiguracji i przy blokowaniu adiabatycznym. Różnice w działaniach między tymi dwoma scenariuszami pozostają duże i są zbliżone do różnic otrzymanych dla $E_{zp} = 0.5$ MeV (por. tabela 6.4). Podobnie jak w przypadku jąder parzystych, dla trajektorii poprowadzonej na powierzchni adiabatycznej podniesienie wartości E_{zp} efektywnie wycina wkład do działania pochodzący od drugiej bariery. Z kolei przy narzuconym więzie na K^π wpływ drugiej bariery pozostaje istotny i, tak jak wspomniano w poprzedniej sekcji, silnie zależy od wielkości Ω blokowanego stanu.

Wyniki dotyczące czasów życia jąder nieparzystych i czynników wzbronienia zestawiono w tabeli 6.8. Okazuje się, że rachunek z trzymaniem K^π wciąż daje drastyczne przeszacowanie tych wielkości w niemal wszystkich przypadkach (wyjątkiem jest ^{283}Cn), przy czym największe rozbieżności występują dla stanów o dużym K. Z kolei wyniki otrzymane przy blokowaniu

Jądro	$S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$	T^{exp}_{sf} [s] ([11])	T^{calc}_{sf} [s]
^{258}No	21.60	0.00	21.60	1.2E-03	4.1E-03
^{254}Rf	18.46	0.00	18.46	2.3E-05	7.8E-06
^{256}Rf	21.72	0.19	21.91	6.4E-03	7.6E-03
^{260}Rf	22.97	0.00	22.97	2.2E-02	6.4E-02
^{258}Sg	21.92	0.00	21.92	2.6E-03	7.7E-03
^{260}Sg	23.62	0.00	23.62	7.0E-03	2.4E-01
^{282}Cn	4.34	14.48	18.82	9.1E-04	1.6E-05

Tabela 6.6: Zestawienie wyników dla jąder parzysto-parzystych po dopasowaniu energii drgań zerowych E_{zp} do eksperymentalnych czasów życia. Oznaczenia analogiczne jak w tabeli 6.3.

adiabatycznym są bliższe rzeczywistości, na ogół jednak nie odtwarzają w pełni obserwowanego wzbronienia, dając HF niższe od wartości eksperymentalnych.

Interesujące jest sprawdzenie, jak otrzymane wyniki modyfikuje dodanie do działania poprawki instantonowej związanej z niesparowaną cząstką (zgodnie ze wzorem (6.3)). W ostatniej części tabeli 6.8 zestawiono czynniki wzbronienia HF obliczone bez tej poprawki, a następnie po dodaniu $S^{inst}_{s.p.}$. Widać tutaj, że jej uwzględnienie przybliża HF do wyników eksperymentalnych natomiast jej efekt jest zbyt mały, by te wyniki zadowalająco odtworzyć.

Podsumowując rezultaty obliczeń zaprezentowane w ostatnich dwóch podrozdziałach, w których przyjęliśmy efektywny parametr masowy jądra nieparzystego za równy temu dla sąsiedniego jądra parzystego, można sformułować następujące wnioski:

1. Trzymanie konfiguracji K^{π} rozpadającego się stanu w trakcie procesu rozszczepienia prowadzi do niefizycznie wysokich czynników HF, o wiele rzędów przekraczających wartości eksperymentalne.
2. Całkowita swoboda zmian konfiguracji, tj. trzymanie się adiabatycznej powierzchni energii (minimalizacja po konfiguracjach w każdym punkcie trajektorii rozszczepienia) prowadzi z kolei (z jednym wyjątkiem) do na ogół zbyt małych czynników wzbronienia i nie odtwarza w pełni obserwowanego efektu nieparzystej cząstki na wzrost czasów życia. Otrzymane wartości HF są jednak o wiele bliższe eksperymentalnym niż te z punktu poprzedniego.
3. Poprawka instantonowa obliczana dla blokowanego stanu w sposób przedstawiony wyżej przybliża na średnio obliczone czynniki wzbronień do wartości eksperymentalnych (w stosunku do rezultatów samego blokowania adiabatycznego), a w dwóch przypadkach przypadkach nawet je lekko przeszacowuje. Jednak, w sensie średniego odstępstwa od eksperymentu, wciąż pozostają one zbyt małe.

Można zauważyć, że zwiększenie siły oddziaływania pairing poprawiłoby na średnio zgodność czynników HF obliczonych z energiami adiabatycznymi z danymi empirycznymi

– wzrost bariery dla jąder nieparzystych wskutek blokowania byłby większy. Jednak nie zmniejszyłoby to rozrzutu uzyskanych wartości HF, podczas gdy rozrzut eksperymentalnych wartości jest niewielki.

Omówione rezultaty wskazują, że sam efekt blokowania przez niesparowaną cząstkę nie jest wystarczający do wyjaśnienia wartości HF a rozszczepienie spontaniczne jąder nieparzystych ma charakter pośredni między dwoma badanymi tutaj skrajnymi scenariuszami. Może dochodzić do częściowego złamania charakterystyk kwantowych K^{π}, jak np. poprzez dopuszczenie deformacji łamiących symetrię osiową w trakcie procesu.

Problem rozrzutu wartości HF wskazuje, że przedstawiony model nie oddaje dostatecznie dobrze fizycznego mechanizmu prowadzącego do wzbronienia.

		Trzymanie konfiguracji			Blokowanie adiabatyczne			Różnice		
Jądro	K^π	$S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$	$\Delta S^{(1)}_{crank}/\hbar$	$\Delta S^{(2)}_{crank}/\hbar$	$\Delta S^{(1+2)}_{crank}/\hbar$
^{259}Lr	7/2-	26.42	6.90	33.32	23.44	0.00	23.44	2.98	6.90	9.88
^{255}Rf	9/2-	24.37	29.86	54.23	20.92	2.30	23.22	3.45	27.56	31.01
^{257}Rf	1/2+	26.26	5.36	31.62	21.77	0.00	21.77	4.49	5.36	9.85
^{257}Rf (m)	11/2-	24.93	21.78	46.71	21.77	0.00	21.77	3.16	21.78	24.94
^{261}Db	9/2+	26.46	11.96	38.42	25.72	0.00	25.72	0.74	11.96	12.7
^{259}Sg	1/2+	27.00	2.98	29.98	22.39	0.00	22.39	4.61	2.98	7.59
^{261}Sg	3/2+	29.17	1.58	30.75	25.30	0.00	25.30	3.87	1.58	5.45
^{283}Cn	5/2+	7.87	16.65	24.52	6.75	14.81	21.56	1.12	1.84	2.96

Tabela 6.7: Porównanie wyników działań obliczanych w przybliżeniu cranking (wzór (2.11)) w przypadku trzymania konfiguracji jądra K^π wzdłuż trajektorii rozszczepienia z wynikami dla ścieżki adiabatycznej - rachunek z E_{zp} dopasowanym do jąder parzystych. Oznaczenia analogiczne jak w tabeli 6.4.

Dane jądra				Trzymanie konfiguracji					Blokowanie adiabatyczne					
^{A}X	K^{π}	T_{sf}^{exp} [s]	HF_{exp}	$S_{crank}/\hbar$	$S_{s.p.}^{inst}/\hbar$	$\Delta S_{crank}^{o-e}/\hbar$	T_{sf}^{calc} [s]	HF_{calc}	$S_{crank}/\hbar$	$S_{s.p.}^{inst}/\hbar$	$\Delta S_{crank}^{o-e}/\hbar$	T_{sf}^{calc} [s]	HF_{calc}^{cr}	$HF_{calc}^{cr+inst}$
^{259}Lr	7/2-	27.4	2.3E+04	33.32	2.08	11.72	6.2E+07	1.5E+10	23.44	1.02	1.84	0.16	4.0E+01	3.1E+02
^{255}Rf	9/2-	3.15	1.4E+05	54.23	-2.08	37.60	3.5E+27	4.6E+32	23.22	-1.37	6.85	6.85	8.9E+05	5.7E+04
^{257}Rf	1/2+	423	6.6E+04	31.62	4.32	12.41	4.6E+08	6.0E+10	21.77	2.43	0.67	0.03	3.8E+00	4.9E+02
^{257}Rf (m)	11/2-	> 490	> 76562.5	46.71	0.68	26.98	2.1E+21	2.7E+23	21.77	0.03	0.67	0.03	3.8E+00	4.1E+00
^{261}Db	9/2+	5.6	2.5E+02	38.42	0.35	17.82	1.9E+14	3.0E+15	25.72	0.04	3.68	99.92	1.6E+03	1.7E+03
^{259}Sg	1/2+	8	3.1E+03	29.98	3.75	10.52	1.1E+07	1.4E+09	22.39	1.85	1.31	0.11	1.4E+01	5.6E+02
^{261}Sg	3/2+	31	4.4E+03	30.75	1.57	7.13	3.6E+05	1.6E+06	25.30	0.61	1.68	6.72	2.9E+01	9.7E+01
^{283}Cn	5/2+ (*)	24	2.6E+04	24.52	2.86	5.70	1.4E+00	8.9E+04	21.56	2.76	2.74	0.004	2.4E+02	6.0E+04

Tabela 6.8: Zestawienie wyników dla jąder nieparzystych, przy E_{zp} dopasowanym do czasów życia jąder parzystych. HF_{calc}^{cr} i $HF_{calc}^{cr+inst}$ (ostatnie kolumny tabeli) oznaczają odpowiednio czynnik wzbronienia wynikający wyłącznie z ΔS_{crank}^{o-e} oraz z uwzględnieniem poprawki instantonowej tj. z $\Delta S_{crank} + S_{s.p.}^{inst}$. Pozostałe oznaczenia analogiczne jak w tabeli 6.5.

Podsumowanie

Praca poświęcona jest problematyce stabilności najcięższych jąder atomowych, w obrębie której skoncentrowano się na dwóch, wybranych zagadnieniach. W pierwszej części pracy stawiamy pytanie o stabilność układów parzysto-parzystych o $Z > 126$. Obszar ten wykracza poza możliwości obecnie prowadzonych eksperymentów; odpowiedzi można więc poszukiwać jedynie na gruncie przewidywań teoretycznych. Druga część rozprawy skupia się na badaniach zaproponowanej w pracy metody opisu rozszczepienia spontanicznego wychodzącej poza zwykle stosowane przybliżenie adiabatyczne. Proces rozszczepienia, obok emisji α, jest głównym kanałem rozpadu ograniczającym stabilność układów superciężkich. Motywacją dla tych badań była w szczególności próba zrozumienia zwiększonej stabilności na rozszczepienie spontaniczne jąder nieparzystych względem ich parzysto-parzystych sąsiadów; jak pokazujemy w pracy wiarygodne oszacowanie rozszczepieniowych czasów życia układów nieparzystych wymaga poprawnego uwzględnienia efektów nieadiabatycznych.

Do badanie stabilności jąder o $Z > 126$ użyto w pracy dwóch modeli: mikroskopowo-makroskopowego (mikro-makro) z potencjałem Woodsa-Saxona oraz samozgodnego (Hartree-Fock-BCS) z oddziaływaniem Skyrme'a SLy6 – jednego z dwóch, obok SkM*, dającego bardziej realistyczne wysokości barier rozszczepieniowych. Otrzymano powierzchnie energetyczne dla 46 jąder w zakresie $Z = 128 - 148$ i $N = 174 - 256$, przy czym wszystkie obliczenia wykonano dopuszczając nieosiowe kształty jądra. Na ile autorowi pracy wiadomo, był to pierwszy, systematyczny rachunek dla jąder o $Z > 126$ uwzględniający deformacje łamiące symetrię osiową. Jak pokazują nasze obliczenia, uwzględnienie deformacji nieosiowych jest niezbędne dla wiarygodnego oszacowania barier na rozszczepienie spontaniczne i tym samym czasów życia. Wyniki badań prowadzą do następujących wniosków:

– Mapy (powierzchnie) energii w modelu mikro-makro i samozgodnym wykazują spore podobieństwo co do obszarów $Z - N$, w których pojawiają się głębsze minima oraz co do odpowiadających im konfiguracji: sferycznych, oblate i super zdeformowanych oblate (SDO) – wyniki podsumowuje tabela 1.2.

– Jednak tyko model samozgodny przewiduje bariery dające nadzieję na mierzalne czasy życia ze względu na rozszczepienie spontaniczne w dwóch rejonach: $Z = 128$, $N \approx 180$ oraz w $Z = 128$-142, $N \gtrsim 228$.

– Pierwszy obszar jest niestabilny ze względu na rozpad α. W obszarze drugim rozszczepienie

pienie spontaniczne jest najszybszym kanałem rozpadu – zgrubne oszacowanie czasów życia daje ok. 1 μs dla jąder parzysto-parzystych.

– Przewidywania wynikające z naszego rachunku są więc dość pesymistyczne - rezultaty obliczeń nie wskazują na istnienie jakiejkolwiek wyspy o istotnie podwyższonej stabilności (tzn. czasach życia rzędu sekund i więcej) w badanym obszarze mapy nuklidów.

– Ciekawostką teoretyczną jest natomiast układ o $Z = 164$ i $N = 308$, dla którego w modelu z potencjałem Woodsa-Saxona otrzymano minimum sferyczne, głębokie na 8 MeV. Przerwy energetyczne w sferycznych widmach protonowych i neutronowych (widoczne również w średnim polu dla oddziaływania SLy6) oraz poprawki powłokowe, sugerują ten układ jako kolejne jądro podwójnie magiczne. Ze zgrubnego oszacowania wynika, że dominującym kanałem rozpadu dla tego jądra jest rozpad α, a czas życia wynosi 100 s. Późniejsze rachunki wykonane w modelach relatywistycznych [23, 24] również wskazują na podwyższoną stabilność w tym regionie – jego centrum stanowi jądro o $Z = 156$ i $N = 310$. Niestety tak wysokie Z i N oraz tak duża nadwyżka neutronów są daleko poza zasięgiem współczesnych eksperymentów.

W drugiej części pracy skupiamy się na badaniach metody oszacowywania rozszczepieniowych czasów życia, która wychodząc poza przybliżenie adiabatyczne, jest ogólniejsza od zwykle stosowanej metody cranking. Badania te miały na celu w szczególności próbę lepszego zrozumienia wpływu nieparzystego nukleonu na proces rozszczepienia spontanicznego i mechanizmu stojącego za obserwowanym wzbronieniem. Wg danych eksperymentalnych wzbronienie to wynosi 3-5 rzędów wielkości w czasach życia względem parzysto-parzystych jąder sąsiednich. Próby teoretycznego uzasadnienia tego faktu oparte na metodzie cranking są ułomne wskutek załamywania się w przypadku jąder z niesparowaną cząstką przybliżenia adiabatycznego leżącego u podstaw tej metody. Stąd też dla zbadania interesującego nas efektu nieparzysto-parzystego konieczne było podejście pozbawione tej ułomności.

W pracy zastosowana została metoda instantonowa bazująca na opisie tunelowania kwantowego w formalizmie czasu urojonego. Ze względu na wysoki stopień złożoności wyjściowych równań, w naszym podejściu dokonaliśmy pewnych uproszczeń, rezygnując z pełnego, samozgodnego opisu i uzupełniając metodę o elementy modelu mikroskopowo-makroskopowego. Badania wykonane w tej części pracy obejmowały:

– Sformułowanie metody instantonowej z ustaloną trajektorią oraz prędkością kolektywną $\dot{q}$ jako parametrem zewnętrznym dla przypadku z pairingiem i bez.

– Opracowanie metody umożliwiającej wyznaczanie rozwiązań równań instantonowych i w oparciu o nią napisanie kodu numerycznego, który dla danych wejściowych tj. przebiegu poziomów jednocząstkowych potencjału Woodsa-Saxona i sprzężeń między nimi wzdłuż zadanej trajektorii rozszczepieniowej w przestrzeni parametrów deformacji rozwiązuje równania

instantonowe (bez pairingu) i pozwala obliczyć działanie dla tej ścieżki.

– Przeprowadzenie testów dotyczących poprawności otrzymywanych rozwiązań oraz stabilności wyniku na działanie, których szczegóły omówiono w tekście rozprawy.

– Zbadanie zależności działania instantonowego od parametrów fizycznych takich jak wielkość oddziaływania między stanami jednocząstkowymi oraz założona prędkość kolektywna charakteryzująca tunelowanie przez barierę potencjału.

Wyniki tych badań wskazują na pewne obiecujące cechy metody instantonowej. Przede wszystkim nie załamuje się ona w obszarach pseudoprzecięć poziomów jednocząstkowych (gdzie warunek adiabatyczności ruchu przestaje być spełniony), co pozwala na poprawne uwzględnienie takich obszarów w procesie rozszczepienia. Ponadto w granicy adiabatycznej odtwarza ona wynik dawany w metodzie cranking, jak należałoby oczekiwać.

Metodę zastosowano następnie do obliczenia instantonowych działań bez pairingu dla ^{257}Rf i jego parzysto-parzystego sąsiada ^{256}Rf. Otrzymane wyniki są (jak można się było spodziewać) zdecydowanie zbyt duże, by mogły odtwarzać eksperymentalne czasy życia. Wynika to z ostrych pseudoprzecięć poziomów jednocząstkowych, przy braku wygładzającego efektu pairingu. Przeszacowany jest też czynnik wzbronienia (stosunek czasu życia jądra nieparzystego, do jego parzystego sąsiada). To z kolei może częściowo wynikać z założonego zachowywania konfiguracji K^π (rzutu całkowitego momentu pędu i parzystości) rozpadającego się stanu jądra nieparzystego, co powoduje istotny wzrost bariery potencjału.

Badania wpływu zachowania konfiguracji K^π (co może być zbyt restrykcyjnym założeniem) na działania i wynikających zeń czasów życia oraz czynników wzbronienia przeprowadzono w ostatniej części pracy. Ponieważ rozwiązywanie równania instantonowego z pairingiem, ze względu na konieczność samozgodnego wyznaczenia funkcji $\Delta(\tau)$, jest dużo trudniejsze niż bez pairingu, do zbadania kilku hipotez dotyczących zachowania konfiguracji podczas tunelowania użyliśmy modelu hybrydowego, opisanego poniżej.

Dla szeregu wybranych jąder nieparzystych o znanych eksperymentalnych czasach życia i czynnikach wzbronienia wykonano obliczenia w dwóch skrajnych scenariuszach: 1) trzymając konfigurację rozpadającego się stanu podstawowego, 2) minimalizując energię po konfiguracjach w każdym punkcie ścieżki rozszczepieniowej (tj. bez narzucania więzu na K^π). Rachunek przeprowadzono traktując jądro nieparzyste jako złożenie parzysto-parzystego rdzenia, którego wkład do działania oszacowano metodą cranking, i niesparowanego nukleonu, od którego poprawkę do działania wyliczono metodą instantonową. Przy założeniu, że parametr inercji nie zmienia się znacząco między sąsiednimi jądrami, wpływ nieparzystej cząstki przejawia się w barierze energetycznej oraz w dodatku instantonowym do całkowitego działania.

Otrzymane rezultaty (tabela 6.8) wskazują, że trzymanie konfiguracji prowadzi do mocno zawyżonych czynników wzbronienia, a do tego silnie zależnych od wartości liczby K – zależność ta nie znajduje potwierdzenia w danych eksperymentalnych. Prowadzi to do

wniosku, że scenariusz taki (przy założeniu podobnych prędkości kolektywnych sąsiednich jąder) jest nierealistyczny i w trakcie procesu rozszczepienia musi dochodzić do (przynajmniej częściowego) niezachowywania konfiguracji. Z kolei rachunki wykonane przy całkowitym zaniedbaniu energii specjalizacji prowadzą do zbyt małych czynników wzbronienia, choć są one znacznie bliższe wartościom eksperymentalnym w porównaniu z poprzednim przypadkiem. Dodanie wkładu instantonowego od nieparzystego nukleonu na ogół poprawia czynniki wzbronienia, ale wciąż pozostają one zbyt małe. Wynika stąd, że efekty uwzględnione w takim podejściu są niewystarczające do wyjaśnienia obserwowanych różnic w czasach życia.

Podsumowując, mechanizm wzbronienia rozszczepienia spontanicznego w jądrach nieparzystych pozostaje wciąż nie w pełni zrozumianym zjawiskiem. Uwzględnienie wyłącznie wpływu nieparzystej cząstki na pairing daje zbyt mały efekt, z kolei energia specjalizacji wynikająca z zachowywania konfiguracji prowadzi do mocno przeszacowanych wartości czynników wzbronienia. Jedną z możliwości, być może wartą zbadania w przyszłości, jest ewentualny wpływ fazy topologicznej – nasuwa się tutaj analogia do ziaren magnetycznych, gdzie właśnie obecność tej fazy powoduje całkowite wzbronienie tunelowania dla układów z nieparzystą liczbą cząstek [80].

Rozwijana w pracy metoda instantonowa ze względu na to, że uwzględnia efekty nieadiabatyczne, których należy się spodziewać w procesie rozszczepienia jąder nieparzystych, wydaje się obiecującym narzędziem do dalszych studiów zagadnienia zwiększonej stabilności tych układów. Warto tu podkreślić, że badania tej metody i oparte na niej rachunki dla realistycznego potencjału jądrowego są pierwszymi tego typu. Stanowią one podstawę dla dalszego rozwoju podejścia instantonowego w kierunku uwzględnienia pairingu.

Bibliografia

[1] N. Bohr and J.A. Wheeler Phys. Rev. 56 (1939) 426

[2] W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Report UCRL (1965) 11980, W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Nucl. Phys. 81 (1966) 1

[3] A. Sobiczewski, F. A. Gareev, B.N. Kalinkin, Phys. Lett. 22 (1966) 500

[4] Yu. Ts. Oganessian et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3154 (1999), Yu. Ts. Oganessian et al., Nature (London) 400 (1999) 242, Yu. Ts. Oganessian et al., Phys. Rev. C 62 (2000) 041604, Yu. Ts. Oganessian et al., Phys. Rev. C 63 (2001) 011301(R), Yu. Ts. Oganessian et al., Phys. Rev. C 69 (2004) 054607, Yu. Ts. Oganessian et al., Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 142502, Yu. Ts. Oganessian et al., Phys. Rev. C 74 (2006) 044602 , Yu. Ts. Oganessian et al., Phys. Rev. C 79 (2009) 024603 , Yu. Ts. Oganessian et al., Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 162501

[5] S. Hofmann et al., Eur. Phys. J. A 48 (2012) 62

[6] K. Morita et al. J. Phys. Soc. Jpn 73 (2004) 2593, K. Morita et al., J. Phys. Soc. Jpn 81 (2012) 103201

[7] S. Hofmann et al. Pure Appl. Chem. 90(11) (2018) 1773

[8] R. Smolanczuk, A. Sobiczewski. Proceedings of the XV. Nuclear Physics Divisional Conference on Low Energy Nuclear Dynamics, St. Petersburg, Russia (1995). Yu. Ts. Oganessian, R. Kalpakchieva, W. von Oertzen (Eds.). World Scientific, Singapore (1995).

[9] R. Smolanczuk. Phys. Rev. C 56 (1997) 812

[10] R. Smolańczuk, J. Skalski and A. Sobiczewski, Phys. Rev. C 52 (1995) 1871

[11] F. P. Hessberger, Eur. Phys. J. A 53 (2017) 75

[12] P. Jachimowicz, M. Kowal, J.Skalski, Phys. Rev. C. 98 (2018) 014320

[13] B.P. Abbott, et al., Phys. Rev. Lett. 119 (2017) 161101

[14] W. Brodziński and J. Skalski, Phys. Rev. C 88 (2013) 044307

[15] H. Abusara, A.V. Afanasjev, P. Ring, Phys. Rev. C 85 (2012) 024314, Phys. Rev. C 82 (2010) 044303

[16] A. Staszczak, A. Baran, W. Nazarewicz, Phys. Rev. C 87 (2013) 024320

[17] P. Möller et al., Phys. Rev. C 91 (2015) 024310

[18] P. Jachimowicz, M. Kowal, J. Skalski, Phys. Rev. C 95 (2017) 014303

[19] P. Jachimowicz, M. Kowal and J. Skalski, Phys. Rev. C 83 (2011) 054302

[20] K. Dietrich and K. Pomorski, Nucl. Phys. A 627 (1997) 175; Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 37

[21] J. Decharge, J.-F. Berger, K. Dietrich and M.S. Weiss, Phys. Lett. B 451 (1999) 275; J. Decharge, J.-F. Berger, K. Dietrich and M.S. Weiss, Nucl. Phys. A 716 (2003) 55

[22] M. Warda, Int. J. Mod. Phys. E 16 (2007) 452

[23] A.V. Afanasjev, S.E. Agbemava, A. Gyawali, Phys. Lett. B 782 (2018) 533
[24] S.E. Agbemava, A.V. Afanasjev, A. Taninah and A. Gyawali Phys. Rev. C 99 (2019) 034316
[25] S. Ćwiok, J. Dudek, W. Nazarewicz, J. Skalski and T. Werner, Comput. Phys. Commun. 46 (1987) 379
[26] H. J. Krappe, J. R. Nix and A. J. Sierk, Phys. Rev. C 20 (1979) 992
[27] V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A 95 (1967) 420; Nucl. Phys. A 122 (1968) 1.
[28] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 108 (1957) 1175
[29] I. Muntian, Z. Patyk and A. Sobiczewski, Acta Phys. Pol. B 32 (2001) 691
[30] M. Kowal, P. Jachimowicz, A. Sobiczewski, Phys. Rev. C 82 (2010) 014303
[31] P. Jachimowicz, M. Kowal and J. Skalski, Phys. Rev. C 85 (2012) 034305
[32] P. Möller and A. Iwamoto, Phys. Rev. C 61 (2000) 047602
[33] P.Möller, et al., Phys. Rev. C 79 (2009) 064304
[34] N.Dubray, D.Regnier, Comput. Phys. Commun. 183 (2012) 2035
[35] P. Ring, P. Schuck "The Nuclear Many Body Problem", Springer-Verlag 1980
[36] S.K. Bogner, R.J. Furnstahl, A.Schwenk, Progr. Part. Nuclear Phys. 65 (2010) 94
[37] E. Chabanat et al. Nucl. Phys. A 635 (1998) 231
[38] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard and J. A. Maruhn, Eur. Phys. J. A 8 (2000) 59
[39] J. Skalski, Phys. Rev. C 76 (2007) 044603
[40] A. E. S. Green and N. A. Engler, Phys. Rev. 91 (1953) 40
[41] M. Bender, W. Nazarewicz and P.-G. Reinhard, Phys. Lett. B 515 (2001) 42
[42] V. Yu. Denisov, Physics of Atomic Nuclei 68 (2005) 1133 [przetłumaczone z Yad. Fiz. 68 (2005) 1179]
[43] G. Royer, K. Zbiri and C. Bonilla, Nucl. Phys. A 730 (2004), 355
[44] T. Bürvenich, M. Bender, J. A. Maruhn and P.-G. Reinhard, Phys. Rev. C 69 (2004) 014307
[45] L. Bonneau, P. Quentin and D. Samsoen, Eur. Phys. J. A 21 (2004) 391
[46] M.G. Itkis, Yu.Ts. Oganessian and V.I. Zagrebaev, Phys. Rev. C 65 (2002) 044602
[47] J.-F. Berger, L. Bitaud, J. Decharge, M. Girod and K. Dietrich, Nucl. Phys. A 685 (2001) 1
[48] P. Möller, J.R. Nix, W.D. Myers and W.J. Swiatecki, Atomic Data and Nuclear Data 59 (1995) 185
[49] A.Baran, Phys. Lett. B 76 (1978) 8
[50] A.Baran, K.Pomorski, A. Łukasiak, A.Sobiczewski, Nucl. Phys. A 361 (1981) 83
[51] D.L. Hill, J.A Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102
[52] S.E. Koonin, R.L. Hatch and J.Randrup, Nucl. Phys A 238 (1977) 87
[53] D. Rouvel, praca doktorska, University of Strasbourg, 2014, D. Rouvel, J. Dudek, Phys. Rev. C 99 (2019) 041303(R)
[54] E.M. Chudnovsky and J. Tejada "Macroscopic Quantum Tunneling of the Magnetic Moment", Cambridge University Press 1998
[55] R.P. Feynman and A.R. Hibbs "Quantum Mechanics and Path Integrals", McGraw-Hill 1965
[56] S. Coleman, Phys. Rev. D 15 (1977) 2929, C.G. Callan and S, Coleman, Phys. Rev. D 16 (1977) 1762
[57] S. Levit, J.W. Negele and Z. Paltiel, Phys. Rev. C 22 (1980) 1979

[58] J.W. Negele, H. Orland "Quantum Many-Particle Systems", Addison-Wesley 1988
[59] J.W. Negele, Nucl. Phys. A 502 (1989) 371
[60] J. Skalski, Phys. Rev. C 77 (2008) 064610
[61] A. Bulgac, P. Magierski, K.J. Roche, I. Stetcu, Phys. Rev. Lett. 116 (2016) 122504
[62] D.J. Thouless, J.G. Valatin, Nucl. Phys. 31 (1962) 211
[63] G.M. Mil'nikov, H. Nakamura J. Chem. Phys. 115, 15 (2001), 6881
[64] G. Puddu, J.W. Negele, Phys. Rev. C 35 (1987) 1007
[65] A. Bulgac, Phys Rev. C 41 (1990), 2333
[66] L.G. Moretto, R.P. Babinet, Phys. Lett. B 49 (1974) 147
[67] A. Staszczak, A. Baran, K. Pomorski, K. Böning, Phys. Lett. B 161 (1985) 227
[68] Y.A. Lazarev, Phys. Scripta 35 (1987) 255, Y.A. Lazarev et al., Phys. Scripta 39 (1989) 422
[69] S.E. Koonin, D.J. Dean, and K. Langanke, Phys. Rep. 278, 1-77 (1997)
[70] L. Landau, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion. (1932), 2: 46–51
[71] C. Zener, Proceedings of the Royal Society of London A (1932), 137 (6): 696–702
[72] W. Brodziński, P. Jachimowicz, M. Kowal, J. Skalski, Acta Phys. Pol. B Vol. 49 No 3 (2018) 621
[73] M. Baer, Chem. Phys. Lett. 35 (1975) 112
[74] J. Q. Sun and C. D. Lin, J. Phys. B 25 (1991) 1363
[75] T. Pacher, L.S. Cederbaum, H.Köppel. J. Chem. Phys. 89 (1988) 7367
[76] C. A. Mead and D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 77 (1982) 6090
[77] C. Wagemans, "The Nuclear Fission Process", CRC Press 1991
[78] J. von Delft, D.C. Ralph, Phys. Rep. 345 (2001) 61
[79] F. Braun, J. von Delft, Phys. Rev. B 59 (1999) 9257
[80] D. Loss, D.P. DeVincenzo, G.Grinstein, Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 3232; J. von Delft, C.L. Henley, ibid., s. 3236
[81] A. Baran, Z. Łojewski, Phys. Lett B 176 (1986) 7
[82] A. Baran, Z. Łojewski, Nucl. Phys. A 475 (1987) 327
[83] Z. Łojewski, A. Baran, Z. Phys. A 322 (1985) 695
[84] P. Jachimowicz, M. Kowal, J.Skalski, Phys. Rev. C. 92 (2015) 044306
[85] G.N. Smirenkin, IAEA Report No. INDC(CCP)-359, Vienna, 1993, http://www-nds.iaea.org/RIPL-3/
[86] P.Jachimowicz, Uniwersytet Zielonogórski - prywatna komunikacja