Analiza korelacija u relativističkom modelu srednjeg polja

Markulin, Ines

Master's thesis / Diplomski rad

2017

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:530752

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2024-03-29**

Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Ines Markulin

ANALIZA KORELACIJA U RELATIVISTIČKOM MODELU SREDNJEG POLJA

Diplomski rad

Zagreb, 2017.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: ISTRAŽIVAČKI SMJER FIZIKE

Ines Markulin

Diplomski rad

Analiza korelacija u relativističkom modelu srednjeg polja

Voditelj diplomskog rada: doc. dr. sc. Tomislav Marketin

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2017.

Zahvaljujem se mentoru doc. dr. sc. Tomislavu Marketinu na pruženoj prilici i uloženom znanju, strpljenju i podršci u izradi ovoga rada.

Zahvaljujem izv. prof. dr. sc. Tamari Nikšić na ukazanoj pomoći oko izrade grafičkog prikaza rezultata.

Zahvaljujem se i svim profesorima i asistentima koji su sudjelovali u ovom djelu moje životne pustolovine prepune iznenađenja, preokreta i novih spoznaja.

Posebno se zahvaljujem svojim roditeljima na ukazanom razumijevanju, strpljenju, te moralnoj i financijskoj potpori tijekom čitavog mog školovanja.

Sažetak

Teorijska predviđanja nepreciznosti rezultata dobivenih nekim modelom postaju značajna u procjeni njihove valjanosti u slučaju nedostatka eksperimentalnih podataka kojim bi se provjerila uspješnost modela. No, često su te procjene nepreciznosti velike i potrebno ih je smanjiti poboljšanjem modela korelacijskom analizom. Zato se u ovom radu fokusiramo na teoriju funkcionala gustoće i standarni postupak za određivanje parametra modela pomoću χ^2-minimizacije. Ona se temelji na odabiru skupa precizno izmjerenih opservabli osnovnog stanja, te određivanju razlika između tih opservabli i vrijednosti za koje model predviđa minimizaciju. Dijagonalizacijom matrice drugih derivacija dobivamo korelacijske koeficijente koji nam pružaju mnoštvo informacija o korištenim parametrima i opservablama koje drugim pristupima nisu dostupne. Također, pronalaze opservable koje mogu pomoći u smanjivanju predviđenih nepreciznosti rezultata.

Correlation analysis in a relativistic mean-field model

Abstract

Theoretical uncertainties in the predictions of some models become necessary due to the lack of experimental data which are needed to verify the performance of the model. However, this theoretical errors are often large, so we have to reduce them using correlation analysis to improve model. Therefore, in this paper we focus on the density functional theory and standard procedure for determining the parameters of the model using the χ^2 -minimization. It is based on the selection of a set of precisely measured observables in ground state, and determining the difference between these observables and the values for which the model predicts minimization. Diagonalization matrix of second derivation gain correlation coefficients that are providing us with a wealth of information on the parameters and observables that other approaches don‘t have. Also, a theoretical estimate uncertainties become significant in assessing the validity of the results obtained from the model.

Sadržaj

1 Uvod **1**

2 Teorijski formalizam **3**

2.1 Relativistička teorija srednjeg polja 3

2.2 Gustoća lagranžijana i jednadžba polja 4

2.3 Stacionarne jednadžbe gibanja 8

2.4 Parametrizacija snage mezon-nukleon vezanja 9

2.5 Relativistički Hartree-Bogoljubov model 10

2.6 Optimizacija i analiza kovarijance 12

3 Rezultati **17**

3.1 Minimizacija funkcije χ^2 17

3.2 Usporedba matrica drugih derivacija 19

3.3 Svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori 21

3.4 Osjetljivost svojstvenih vrijednosti na zamijenu matričnih elemenata . 28

3.5 Korelacije među parametrima 29

3.6 Korelacije među opservablama 31

4 Zaključak **35**

Literatura **38**

1 Uvod

Cilj nuklearne fizike niskih energija je razumijevanje atomske jezgre i njenih reakcija. Snažan razvoj eksperimentalnih pristupa i izgradnja naprednih postrojenja je rezultirala bogatstvom podataka iz egzotičnih područja karte nuklida. Dostupnost novih podataka predstavlja dvostruki izazov za teorijske modele: nužno je objasniti postojeća mjerenja, a istovremeno postoji potreba za kvantitativnim opisom jezgara na samoj granici vezanja koje su bitne u astrofizičkim scenarijima. Stoga se javlja velika potreba za novim mikroskopskim modelima izgrađenim na konzinstentnom teorijskom okviru koji bi se mogli nositi sa spomenutima izazovima nuklearne fizike. Teorija funkcionala gustoće (DFT) je jedini mikroskopski pristup primjenjiv na čitavu nuklearnu kartu. Glavna komponenta DFT-a je energijski funkcional gustoće (EDF) koji u funkcional izgrađen iz nukleonskih gustoća i struja uključuje kompleksne korelacije više tijela. Trenutno postoje tri glavne verzije nuklearnog DFT; Skyrme interakcija, Gogny interakcija i relativistički modeli srednjeg polja. Spomenuti Skyrme je nerelativistička vrsta funkcionala, gdje nukleoni međudjeluju pomoću efektivnih potencijala ovisnih o gustoći. S druge strane, kod relativističkog modela srednjeg polja (RMF) nukleoni međudjeluju razmjenom različitih mezona. Prednost teorije DFT-a je njena mogućnost prijelaza sa kompliciranе valne funkcije više tijela na mnogo jednostavniju gustoću jednog tijela. Pokazalo se da se gustoća jednog tijela može dobiti iz varijacijskog problema koji se ograničava na rješenja skupa jednadžbi srednjeg polja poznatih kao Kohn-Sham. [1] Oblik Kohn-Sham potencijala sliči osnovnom NN potencijalu. Međutim, konstante koje parametriziraju spomenuti potencijal su prilagođene u skladu sa opservablama više tijela (kao što su masa i radijus naboja), što znači da nema prilagodbe na podatke za dva tijela. Na taj način se kompliciranа dinamika iz efekata izmjena i korelacija zapisuje u empirijske konstante. [2]

U prošlosti se korelacijska analiza pogrešaka zanemarivala prilikom optimizacije nuklearnih DFT modela.Tada bi se parametri podešavali na neki skup opservabli bez potvrde da je takav skup opservabli optimalan za taj model. Našao bi se njihov minimum i izračunale vrijednosti traženih opservabli zajedno sa velikim pocjenama nepreciznosti tih vrijednosti. Međutim, sada kada se od teorijskih modela zahtjeva da daju rezultate sa što manjim procjenama nepreciznosti, korelacijska analiza postaje važan korak za kvalitetno određivanje pogrešaka modela. Više nije dovoljno gledati

sam minimum, već okolinu oko minimuma u parametarskom prostoru kako bi se dobilo više informacija o modelu. Na taj način modeli će se moći primjenjivati na jezgre za koje nemamo podatke i dobit ćemo povratnu informaciju jesmo li odabrali dobar skup opservabli na koje podešavamo parametre.

U ovom radu provedena je korelacijska analiza u relativističkom modelu srednjeg polja koja započinje opisanom optimizacijom parametara modela postupkom minimizacije kaznene funkcije. Za minimizaciju uzeto je ponašanje funkcije χ^2 oko minimuma. Pomaci oko minimuma, kao u svakom problemu malih oscilacija, opisani su pomoću simetrične matrice drugih derivacija iz kojih su onda određeni korelacijski koeficijenti između opservabli. Matrice drugih derivacija izračunate su na dva načina, iz drugih derivacija kaznene funkcije χ^2 i prvih derivacija opservabli po parametrima kako bi se iz njihove relativne razlike vidio utjecaj aproksimacije korištene u određivanju druge matrice. Zatim se dijagonalizira matrica drugih derivacija i iz nje se dobiju svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori. Pomoću njih se određuju parametri sa najvećim i najmanjim nepreciznostima u modelu gledajući koje komponente svojstvenih vektora dominiraju za pojedinu svojstvenu vrijednost. Zatim se dijagonalizira bezdimenzionalna matrica derivacija χ^2 kako bi se dobila matrica kovarijanci parametara iz čijeg se grafičkog prikaza analiziraju korelacije parametara. Na kraju se računaju korelacijski koeficijenti za opservable nuklerane materije i odabrane jezgre, te promotre njihove međusobne povezanosti.

Rad je organiziran na sljedeći način: u prvom dijelu rada dani su teorijski temelji relativističke teorije srednjeg polja i raspisna je gustoća lagranžijana sa jednadžbom gibanja. Na raspisane stacionarne jednadžbe gibanja nastavlja se opis parametrizacije snage mezon-nukleon vezanja i relativistički Hartree-Bogoljubov model. Zatim slijedi objašnjenje postupka optimizacije i korelacijske analize. Drugi dio rada započinje minimizacijom kaznene funkcije nakon koje slijedi usporedba dviju matrica, njihovih svojstvenih vrijednosti i vektora, te ispitivanje osjetljivosti svojstvenih vrijednosti na promijenu matričnih elemenata. Na kraju imamo korelacijsku analiza za parametre i opervable, te zaključak.

2 Teorijski formalizam

2.1 Relativistička teorija srednjeg polja

Atomsku jezgru, koja je polazište svakog modela, definiramo kao kvantni sustav u kojem nukleone opisujemo kao Diracove čestice koje međudjeluju izmjenom virtualnih mezona i elektromagnetskih polja. Prilikom tih međudjelovanja zanemarujemo njihovu podstrukturu. Ovakav opis jezgre proizlazi iz relativističke teorije srednjeg polja (RMFT). Prvi stupanj slobode modela sadrži slobodne nukleone mase m u obliku Diracovih spinora ψ, uz koje je uključeno i elektromagnetsko polje koje omogućava kulonsko međudjelovanje pozitivno nabijenih čestica, tj. protona. Za drugi stupanj slobode, u model ulazi vektorsko polje fotona γ koje karakterizira $m_\gamma = 0$ i $J^\pi = 1^-$. Mezoni imaju tri kvantna obilježja: spin (J), izospin (T) i paritet (Π), te ih možemo kvalificirati kao skalarne $(J = 0)$ ili vektorske $(J = 1)$, odnosno izoskalarne $(T = 0)$ ili izovektorske $(T = 1)$ mezone. Klasifikacija se temelji na spoznaji da prilikom interakcija dominiraju mezoni s najnižim vrijednostima J i T . Budući da u prirodi nije opaženo narušavanje pariteta, zadržavaju se samo mezoni sa paritetom $\Pi = (-1)^J$ jer su nam potrebna polja koja će sačuvati paritetnu simetriju. Opisanim modelom proučavamo parno-parne jezgare koje uvijek imaju pozitivno osnovno stanje iz čega slijedi da polje negativnog pariteta ne može doprinositi što opravdava isključivanje piona. Spomenuto polje negativnog pariteta zaslužno je za dio dugodosežne nuklearne interakcije ($r > 2$fm) u mikroskopskoj slici. U tablici 2.1 zapisan je minimalni skup koji čini mezonska polja, te se radi o tzv. jednostavnom $(\sigma, \omega, \rho, \gamma)$ modelu. [9]

mezon	(J^π, T)	polje	napomena
σ	$(0^+, 0)$	izoskalarno skalarno	srednjedosežno privlačenja
ω	$(1^-, 0)$	izoskalarno vektorsko	kratkodosežno odbijanje
ρ	$(1^-, 1)$	izovektorsko vektorsko	izospinski dio nuklearne sile
δ	$(0^+, 1)$	izovektorsko skalarno	ne poboljšava model
π	$(0^-, 1)$	izovektorsko skalarno	neodgovarajući paritet

Tablica 2.1: Potencijalni kandidati za mezonske stupnjeve slobode.

Metodu za rješavanje nuklearnog problema više tijela koja je ekvivalentna RMFT nalazimo u kovarijantnoj teoriji funkcionala gustoće (DFT) kod koje se zanemaruju potencijali korelacije lokalne izmjene. Za određivanje egzaktnog osnovnog stanja nuklearnog sustava koristi se Kohn-Shamov pristup minimizacije funkcionala ener-

gije. Funkcional energije opisuje dinamiku nuklearnog sustava, a izvodi se iz efektivnog lagranžijana. Teorija je fenomenološka što znači da se u sklopu lagranžijana pojavljuju efektivni parametri (mase mezona i konstante njihovih vezanja na nukleone) koji se prilagođavaju tako da reproduciraju globalna svojstva nuklearne materije te nekoliko konačnih jezgara u njihovom osnovnom stanju. Jednom kada se slobodni parametri pravilno prilagode, model se na kvantitativnoj razini može koristiti i za različite tipove pobuđenja. [9] Modeli temeljeni na RMFT postižu pouzdanost koja je usporediva s neratvističkim Hartree-Fock-Bogoljubovim okvirom koji se temelji na efektivnim interakcijama Skyrme i Gogny. Jezgra se opisuje pomoću polja slobodnih nukleona, mezona i fotona te interakcije u obliku vezanja mezona na nukleone, a fotona na protone.

2.2 Gustoća lagranžijana i jednadžba polja

U relativističkim modelima započinje se gustoćom lagranžijana umjesto ekvivalentnog funkcionala energije. Prednost lagranžijana je i primjena različitih aproksimacija, pa se tako aproksimacija srednjeg polja koristi za primjenu lagranžijana na nuklearnu materiju i konačne jezgre. Ovakvim pristupom vlastite energije nukleona u nuklearnoj materiji postaju jednostavne funkcije različitih gustoća nukleona.

Izraz za gustoće lagranžijana je

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left[\bar{\psi}\Gamma_\mu i D^\mu \psi + \overline{(iD^\mu\psi)}\Gamma_\mu\psi\right] - \bar{\psi}\Gamma M^*\psi + \mathcal{L}_m \tag{2.1}$$

sa nuklearnim polje ψ, kovarijantnom derivacijom

$$iD_\mu \;=\; i\partial_\mu - \Gamma_\omega\omega_\mu - \Gamma_\rho\vec{\tau}\cdot\rho_\mu - \Gamma_\gamma\frac{1+\tau_3}{2}A_\mu \tag{2.2}$$

i operatorom mase

$$M^* \;=\; m - \Gamma_\sigma\sigma - \Gamma_\delta\vec{\tau}\cdot\vec{\delta} \tag{2.3}$$

Polja mezona su zapisana kao σ, ω_μ, $\vec{\delta}$ i $\vec{\rho}_\mu$, a polje fotona kao A_μ. Kod mezona uključene su sve četri kombinacije skalar-vektor i izoskalar-izovektor. Snaga vezanja mezona i fotona s pojedinim nukleonima zapisuje se preko konstanti vezanja Γ_σ,

Γ_ω, Γ_δ, Γ_ρ i Γ_γ, a vektor $\vec{\tau}$ koji se uz njih pojavljuje definira se matricom izospina. Doprinos slobodnih mezona gustoći lagranžijana odgovara izrazu

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_m = \tfrac{1}{2}\left[\partial^\mu\sigma\partial_\mu\sigma - m_\sigma^2\sigma^2 + \partial^\mu\vec{\delta}\cdot\partial_\mu\vec{\delta} - m_\delta^2\vec{\delta}\cdot\delta - \tfrac{1}{2}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\right] \\ +\tfrac{1}{2}\left[-\tfrac{1}{2}G^{\mu\nu}G_{\mu\nu} + m_\omega^2\omega^\mu\omega_\mu - \tfrac{1}{2}\vec{H}^{\mu\nu}\cdot\vec{H}_{\mu\nu} + m_\rho^2\vec{\rho}^\mu\cdot\vec{\rho}_\mu\right]\end{aligned} \tag{2.4}$$

sa masama mezona m_σ, m_ω, m_δ i m_ρ i tenzorskim poljem fotona

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \tag{2.5}$$

$$G_{\mu\nu} = \partial_\mu\omega_\nu - \partial_\nu\omega_\mu \tag{2.6}$$

i

$$\vec{H}_{\mu\nu} \;=\; \partial_\mu\vec{\rho}_\nu - \partial_\nu\vec{\rho}_\mu \tag{2.7}$$

U standarnim relativističkim modelima veličine Γ_μ i Γ iz (2.1) su Diracova γ_μ i jedinična matrica. U ovom pristupu one su dane kao

$$\Gamma_\mu = \gamma^\nu g_{\mu\nu} + \gamma^\nu Y_{\mu\nu} - g_{\mu\nu}Z^\nu \tag{2.8}$$

$$\Gamma = 1 + \gamma_\mu u_\nu Y^{\mu\nu} - u_\mu Z^\mu \tag{2.9}$$

zajedno sa veličinama koje ovise o izoskalarnim poljima σ i ω mezona

$$Y^{\mu\nu} = \frac{\Gamma_V}{m^4}m_\omega^2\omega^\mu\omega^\nu \tag{2.10}$$

$$Z^\mu = \frac{\Gamma_S}{m^2}\omega^\mu\sigma \tag{2.11}$$

Lorentzova struktura zahtjeva posebnu ovisnost o polju mezona kako bi mogla generirati linearnu ovisnost energije o skalarnim i vektorskim vlastitim energijama. Za $Y^{\mu\nu}$ i Z^μ izabran je kvadratični oblik o mezonskim poljima kako bi ovisnost gustoće o ovisnosti energije bila slična za obje vlastite energije. Veličine Γ_V i Γ_S predstavljaju dva dodatna vezanja D^3C modela koja mogu ovisiti o nukleonskom polju kao što i veličine Γ_σ, Γ_ω, Γ_δ, Γ_ρ ovise o minimalnom vezanja nukleonskog polja sa mezonskim poljem. U jednadžbama (2.8) i (2.9) imamo metrični tenzor $g_{\mu\nu} = diag\,(1,-1,-1,-1)$ i četverovektor brzine $u_\mu = j_\mu/\varrho_v$ ovisne o vektorskoj

gustoći struje $j_\mu = \bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ sa vektorskom gustoćom $\varrho_v = \sqrt{j_\mu j^\mu}$. Kao što u standarnim relativističkim modelima postoji vezanje ovisno o gustoći, tako i ovdje pretpostavljamo da Γ_σ, Γ_ω, Γ_δ, Γ_δ, Γ_ρ, Γ_V i Γ_S ovise o vektorskoj gustoći ϱ_v. Diracova jednadžba, tj. Kohn-Sham jednadžba, za nukleone u D^3C modelu

$$\gamma^\mu \left(i\partial_\mu - \Sigma_\mu\right)\psi - \left(m - \Sigma\right)\psi \;\; = \;\; 0 \tag{2.12}$$

ima standarni oblik relativističkih modela sa vektorskom Σ_μ i skalararnom Σ vlastitom energijom

$$\Sigma_\mu = \nu_\mu - Y_{\mu\nu}\left(iD^\nu - M^* u^\nu\right) + \Sigma_\mu^R \tag{2.13}$$

$$\Sigma = s - Z^\mu\left(iD_\mu - M * u_\mu\right) \tag{2.14}$$

gdje su

$$\nu_\mu = \Gamma_\omega\omega_\mu + \Gamma_\rho\vec{\tau}\cdot\vec{\rho}_\mu + \Gamma_\gamma\frac{1+\tau_3}{2}A_\mu - \frac{i}{2}\partial^\lambda Y_{\mu\lambda} \tag{2.15}$$

$$s = \Gamma_\sigma\sigma + \Gamma_\delta\vec{\tau}\cdot\vec{\delta} - \frac{1}{2}\partial^\mu Z_\mu \tag{2.16}$$

Vlastita energija u D^3C modelu je diferencijalni operator koji djeluje na polje nukleona ψ. Ovisnost o impulsu ulazi preko doprinosa proporcionalnih sa $iD_\mu - M^*u_\mu$. Vremenska komponenta oponaša kinetičku energiju $E - m$ kada se primjeni na ravni val u odsutnosti polja mezona. Doprinos preuređivanja također je sadržan u vektorskoj vlastitoj energiji kao

$$\begin{aligned}\Sigma_\lambda^R = u_\lambda\Big[\Gamma'_\omega\omega_\mu\cdot\vec{J}^\mu - \Gamma'_\sigma\sigma P_s - \Gamma'_\delta\vec{\delta}\cdot\vec{P}_s - \left(t^D_{\nu\mu} - u_\nu j^{M^*}_\mu\right)\tfrac{\Gamma'_V}{\Gamma_V}Y^{\mu\nu} + \left(j^D_\mu - u_\mu\varrho^{M^*}_s\right)\tfrac{\Gamma'_S}{\Gamma_S}Z^\mu\Big] \\ + \left(j^{M^*}_\mu Y^{\mu\nu} - \varrho^{M^*}_s Z^\nu\right)\tfrac{g_{v\mu}-u_\nu u\lambda}{\varrho_v}\end{aligned} \tag{2.17}$$

sa derivacijama $\Gamma'_i = d\Gamma_i/d\varrho_v$ $(i = \sigma, \omega, \delta, \rho, V, S)$ i gustoćama koje zamjenjuju uobičajene vektorske i skalarne gustoće.

$$\begin{aligned} J_\mu &= \bar{\psi}\Gamma_\mu\psi \quad \vec{J}_\mu = \bar{\psi}\Gamma_\mu\vec{\tau}\psi \\ P_s &= \bar{\psi}\Gamma\psi \quad\;\; \vec{P}_s = \bar{\psi}\Gamma\vec{\tau}\psi \end{aligned} \tag{2.18}$$

Dodatno, u doprinosu preuređenja (2.18) se pojavljuju sljedeće gustoće

$$t^D_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\left[\bar{\psi}\gamma_\mu iD_v\psi + \overline{(iD_v\psi)}\gamma_\mu\psi\right] \tag{2.19}$$

$$j^D_\mu = \frac{1}{2}\left[\bar{\psi}iD_\mu\psi + \overline{(iD_\mu\psi)}\psi\right] \tag{2.20}$$

te

$$j^{M*}_\mu = \bar{\psi}\gamma_\mu M^*\psi \tag{2.21}$$

$$\varrho^{M*}_s = \bar{\psi}M^*\psi \tag{2.22}$$

što ovaj model čini nijansu kompliciranijim od standarnog modela ovisnosti gustoće (DD) jer dovodi do pojavljivanja članova sa $Y_{\mu v}$ i Z_μ. Iz Diracove jednadžbe (2.12) izvedene su jednadžbe kontinuuiteta za koje vrijedi

$$\partial^\mu J_\mu = 0 \tag{2.23}$$

$$\partial^\mu \vec{J}_\mu = 0 \quad . \tag{2.24}$$

Sukladno tome, veličine J_0 i $\vec{J}_0$ su očuvane izoskalarne i izovektorske barionske gustoće kao zamjena za veličine $j_0 = \varrho_v$ i $\vec{j_0} = \bar{\psi}\gamma_0\vec{\tau}\psi$ koje se pojavljuju u standarnim RMF modelima. Jednadžbe polja mezona u D^3C modelu odgovaraju izrazima

$$\partial_\mu\partial^\mu\sigma + m^2_\sigma\sigma + \tilde{C}_\mu\omega^\mu = \Gamma_\sigma P_s \tag{2.25}$$

$$\partial^v G_{v\mu} + m^2_\omega\omega^v C_{\mu v} - \tilde{C}_\mu\sigma = \Gamma_\omega J_\mu \quad . \tag{2.26}$$

i

$$\partial_\mu\partial^\mu\vec{\delta} + m^2_\delta\vec{\delta} = \Gamma_\delta\vec{P}_s \tag{2.27}$$

$$\partial^\mu\vec{H_{\nu\mu}} + m^2_\rho\vec{\varrho_\mu} = \Gamma_\mu\vec{J}_\mu \quad . \tag{2.28}$$

sa

$$C_{\mu\nu} = g_{\mu\nu} + \frac{\Gamma_V}{m^4}\left(t^D_{\mu v} + t^D_{v\mu} - u_v j^{M*}_\mu - u_\mu j^{M*}_v\right) \tag{2.29}$$

$$\tilde{C_\mu} = \frac{\Gamma_S}{m^2}\left(j^D_\mu - u_\mu\varrho^{M*}_S\right). \tag{2.30}$$

Članovi iz kojih proizlaze mezonska polja u Klein-Gordonovoj jednadžbi, rezultat su jednostavnog množenja funkcija vezanja ovisnih o gustoći Γ_σ, Γ_ω, Γ_δ, Γ_ρ sa gustoćama iz jednadžbi (2.18). U slučaju $\Gamma_S \neq 0$ postoji vezanje jednadžbi za polja σ i ω. Samo u jednadžbama za polje ω pojavljuje se član Γ_V kao posljedica postojanja člana $C_{\mu v}$. Jednadžba polja fotona

$$\partial^v F_{v\mu} \;=\; \Gamma_\gamma J_{\gamma\mu} \tag{2.31}$$

ima uobičajeni oblik sa očuvanom gustoćom struje naboja $J_{\gamma\mu} = \left[J_\mu + \left(\vec{J}_\mu\right)_3\right]/2$.

2.3 Stacionarne jednadžbe gibanja

Nuklearni sistemi sa određenim simetrijama, npr. stacionarni sistem u kojem su polja mezona neovisna o vremenu, imaju značajno pojednostavljene jednadžbe gibanja za polja nukleona, mezona i fotona. Kod nuklearne materije i konačnih jezgri dovoljno je gledati samo vremensku komponentu za sva četiri vektora i treću komponentu vektora izospina. Očuvana gustoća bariona

$$\varrho \;=\; J_0 = j_0\left(1 + Y_{00}\right) - \varrho_s Z_0 \tag{2.32}$$

ovisi samo o uobičajenoj vektorskoj gustoći $j_0 = \varrho_v$ i standarnoj skalarnoj gustoći ϱ_s. Generalizirana skalarna gustoća je kombinacija

$$P_s \;=\; \varrho_s\left(1 - Z_0\right) + j_0 Y_{00} \tag{2.33}$$

sa veličinama

$$Y_{00} = \frac{\Gamma_V}{m^4} m_\omega^2 \omega_0^2 \tag{2.34}$$

$$Z_0 = \frac{\Gamma_S}{m^2}\omega_0\sigma. \tag{2.35}$$

Kod odgovarajućih jednadžbi za izovektorsku gustoću vrijedi $\vec{\varrho} = \vec{J}_0$ i $\vec{P}_s$. Preko Diracovih jednadžbi izvede se izraz za vlastite energije

$$\Sigma_0 = V_0 - Y_{00} i\partial^0 \tag{2.36}$$

$$\Sigma = S - Z_0 i\partial^0 \tag{2.37}$$

sa

$$V_0 = \nu_0 + Y_{00}\left(\nu_0 + m - s\right) + \Sigma_0^R \tag{2.38}$$

$$S = s + Z_0\left(\nu_0 + m - s\right) \tag{2.39}$$

gdje imamo

$$\nu_0 = \Gamma_\omega \omega_0 + \Gamma_\rho \vec{\tau} \cdot \vec{\rho_0} + \Gamma_\gamma \frac{1+\tau_3}{2} A_0 \tag{2.40}$$

$$s = \Gamma_\sigma \sigma + \Gamma_\delta \vec{\tau} \cdot \vec{\delta} \tag{2.41}$$

sa doprinosom preuređenja kao

$$\Sigma_0^R = \left[\Gamma'_\omega \omega_0 J^0 + \Gamma'_\rho \cdot \vec{J^0} - \Gamma'_\sigma \sigma P_s - \Gamma'_\delta \vec{\delta} \cdot \vec{P_s} - \left(t_{00}^D - j_0^{M*}\right) \frac{\Gamma'_V}{\Gamma_V} Y_{00} + \left(j_0^D - \varrho_s^{M^*}\right) \frac{\Gamma'_S}{\Gamma_S} Z_0\right] \tag{2.42}$$

Parcijalna derivacija u izrazima (2.36) i (2.37) djeluje na jednočestična stanja nuklearne materije ili konačne jezgre i daje jednočestičnu energiju E, što znači da imamo linearnu ovisnost o energiji. Potencijali ν_0, s, V_0 i S, te vlastite energije Σ_0 i Σ se razlikuju za protone i neutrone.

2.4 Parametrizacija snage mezon-nukleon vezanja

Ovisnost funkcije vezanja o gustoći dana je izrazom

$$\Gamma_i\left(\varrho_\nu\right) = \Gamma_i\left(\varrho_{ref}\right) f_i\left(x\right) \tag{2.43}$$

sa konstantom vezanja $\Gamma_i\left(\varrho_{ref}\right)$ za referentnu gustoću ϱ_{ref} i odgovarajuću funkciju f_i koja ovisi o omjeru

$$x = \frac{\varrho_\nu}{\varrho_{ref}} \tag{2.44}$$

sa vektorskom gustoćom ϱ_ν koja u D^3C modelu nije identična barionskoj gustoći ϱ. U DD modelu referentna gustoća je samo gustoća saturacije simetrične nuklearne materije ϱ_{sat}, dok u D^3C se ona razlikuje od saturacijske gustoće ϱ_{sat} ali odgovara vektorskoj gustoći ϱ_ν dobivenoj iz saturacije simetrične nuklearne materije. Ovisnost

gustoće o σ i ω mezonima dana je izrazom

$$f_i(x) = a_i \frac{1 + b_i (x + d_i)^2}{1 + c_i (x + d_i)^2} \tag{2.45}$$

sa konstantama a_i, b_i, c_i i d_i. Kako bi se smanjio broj slobodnih parametara zahtjevamo da funkcije f_σ i f_ω poštuju nekoliko uvjeta, $f_\sigma(1) = f_\omega(1) = 1$, $f'_\sigma(0) = f'_\omega(0) = 0$, i $f''_0(1) = f''_0(1)$. Za zapis funkcije za ρ mezone iskoristimo izraz sa

$$f_\rho(x) = \exp[-a_\rho(x - 1)] \tag{2.46}$$

uz pretpostavku da je a_ρ slobodan parametar. U D^3C modelu veličine Y_{00} i Z_0 su odgovorne za energetsku ovisnost vlastite energije. Pretpostavimo da konstante vezanja Γ_V i Γ_S, za obje veličine Y_{00} i Z_0, pokazuju aproksimativnu ovisnost o ϱ^2 za male gustoće ϱ. To nas upućuje na uvođenje zakona snage

$$f_i(x) = x^{-a_i} \tag{2.47}$$

u funkcijalnom obliku koji može proizvoljno prilagoditi ovisnost gustoće o energijskoj ovisnosti. [11]

2.5 Relativistički Hartree-Bogoljubov model

Hartree-Fock-Bogoljubova (HFB) teorija daje jedinstven opis ph- i pp-korelacija u jezgri i, formulacijom samosuglasne HFB jednadžbe u koordinatnom prostoru, omogućava utjecaj efekata kontinuuma na jezgru u prisustvu vezanja. U okviru HFB-a uzimaju se u obzir dva prosječna potencijala: samopostojuće Hartree-Fock polje Γ koje obuhvaća sve ph korelacije i polje vezanja $\hat{\triangle}$ koje sumira efekte pp-interakcija. Osnovno stanje jezgre opisuje generalizirana Slaterova determinanta $\mid \Phi >$ koja prema jednadžbi $\hat{\alpha}_k \mid \Phi >= 0$ predstavlja vakuum s obzirom na neovisne kvazičestice. Kvazičestični operatori se izražavaju jedinstvenom Bogoljubovom transformacijom jednočestičnih operatora stvaranja i poništenja:

$$\alpha_k^\dagger = \sum_l U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l, \tag{2.48}$$

gdje su U_{lk} i V_{lk} jedno-kvazičestične valne funkcije koje zadovoljavaju HFB jednadžbe. Indeks l odnosi se na proizvoljnu bazu, npr. za stanja harmoničkog oscilatora. U koordinatnom prostoru imamo reprezentaciju $l = (r, \sigma, \tau)$, sa indeksom spina σ i izospina τ. HFB valna funkcija određuje hermitsku jednočestičnu matricu gustoće kao

$$\hat{\rho}_{ll'} = \left\langle \Phi \left| c_{l'}^{+} c_l \right| \Phi \right\rangle = \left(V^* V^T \right)_{ll'} \tag{2.49}$$

i asimetrični tenzor vezanja

$$\hat{\rho}_{ll'} = \left\langle \Phi \left| c_{l'} c_l \right| \Phi \right\rangle = \left(V^* U^T \right)_{ll'} \tag{2.50}$$

U DFT pristupu vezanje funkcionala energije ne ovisi samo o matrici gustoće i mezonskim poljima, već i o dodatnom tenzoru vezanja koji odgovara izrazu

$$E_{RHB}\left[\hat{\rho},\hat{k},\phi\right] = E_{RMF}\left[\hat{\rho},\phi\right] + E_{par}\left[\hat{\kappa}\right] \tag{2.51}$$

$$E_{RHB}\left[\hat{\rho},\hat{k},\phi\right] = E_{RHB}\left[R,\phi\right] \tag{2.52}$$

gdje je $\mathcal{R}$ generalizirana matrica gustoće. Veličina $E_{RMF}\left[\hat{\rho},\phi\right]$ definirana je kao u Kohn-Sham teoriji, samo što je gustoća $\hat{\rho}$ zamjenjena s $\mathcal{R}$, a energija sparivanja je dana s

$$E_{par}\left[\hat{k}\right] = \frac{1}{4} Tr\left[\hat{\kappa}^* V^{pp} \hat{\kappa}\right] \tag{2.53}$$

Efektivna sila sparivanja V^{pp} je fenomenološka pp-interakcija u kanalu sparivanja. Najjedostavniji pristup sili sparivanja je monopolna sila što vodi na BCS teoriju koja zahtijeva dodatni parametar. U blizini doline beta stabilnosti ovakav pristup donosi dobre rezultate, ali udaljavanjem od stabilnih jezgara Fermijeva ploha se približava kontinuumu stanja i opis raspršenih parova iz vezanih stanja u kontinuumu pomoću BCS teorije više nije ispravan. Iz tog razloga se u ovom radu koristi dio Gogny interakcije koji opisuje sparivanja

$$V^{pp}\left(1,2\right) = \sum_{i=1,2} e^{-\frac{r_1 - r_2}{\mu_i}} \left(W_i + B_i P^{\sigma} - H_i P^{\tau} - M_i P^{\sigma} P^{\tau}\right). \tag{2.54}$$

Slobodni parametri μ_i, W_i, B_i, H_i i M_i su pažljivo podešeni na karakteristike sparivanja konačnih jezgara preko cijelog periodnog sustava. Koristi se D1S parametrizacija, a vrijednosti parametara se nalaze u tablici 2.2.

i	$\mu_i[fm]$	W_i	B_i	H_i	$M_i[MeV]$
1	0.7	-1720.3	1300.0	-1813.53	1397.60
2	1.2	103.69	-163.483	162.812	-223.934

Tablica 2.2: Vrijednosti parametara D1S Gogny interakcije sparivanja.

Preko varijacijskog principa raspisuju se vremenski ovisne HB jednadžbe gibanja:

$$i\partial_t \quad \mathcal{R} = \quad [\mathcal{H}(\mathcal{R})\,\mathcal{R}] \tag{2.55}$$

Generalizirani hamiltonijan $\mathcal{H}$ se dobije kao derivacija funkcionala energije s obzirom na generaliziranu gustoću $\mathcal{R}$ što se u bazi operatora $c_l c_l^\dagger$ piše kao:

$$\mathcal{H} \quad = \quad \frac{\delta E_{RHB}}{\delta \mathcal{R}} = \begin{pmatrix} \hat{h}_D - m - \lambda & \hat{\Delta} \\ -\hat{\triangle}^* & -\hat{h}_D + m + \lambda \end{pmatrix} \tag{2.56}$$

Zatim se postupak varijacije ponavlja, samo s obzirom na usrednjene potencijale. Osnovno stanje $|\,\Phi>$ se određuje HB jednadžbama koje su statički limes vremenski ovisne jednadžbe (2.52) čime se problem svodi na dijagonalizaciju hamiltonijana:

$$\begin{pmatrix} \hat{h}_D - m - \lambda & \hat{\triangle} \\ -\hat{\triangle}^+ & -\hat{h}_D + m + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k(r) \\ V_k(r) \end{pmatrix} \quad = \quad E_k \begin{pmatrix} U_k(r) \\ V_k(r) \end{pmatrix} \tag{2.57}$$

Svojstvene vrijednosti E_k su kvazičestične energije, dok su svojstveni vektori U_k i V_k kvazičestične valne funkcije. Dimenzija RHB matrične jednadžbe je dvostruko veća od odgovarajuće Diracove, pa za svako svojstveno stanje pozitivne energije postoji stanje negativne energije istog iznosa. Uslijed fermionske prirode kvazičestičnih operatora – istovremeno se može popuniti samo jedno stanje, a bira se ono s $E_k > 0$.

2.6 Optimizacija i analiza kovarijance

Optimizacija započinje definiranjem kaznene funkcije, koju minimiziramo s obzirom na parametre p koji predstavljaju točke u parametarskom prostoru i zatim konstru-

iramo matricu kovarijance parametara. Parametri modela definiraju se kao p=$(p_1, ..., p_F)$ gdje F predstavlja ukupan broj parametara modela. Korišteni model se prilagođava na dobro definiran skup svojstava za opis osnovnog stanja konačne jezgre (kao što su mase i polumjeri raspodjele naboja) koja su nadopunjena sa nekoliko glavnih svojstava nuklearne materije (npr. energija vezanja, kompresibilnost i gustoća saturacije nuklearne materije). Jednom kada se izabere parametrizacija modela i grupa opservabli, optimalni skup parametara određuje se postupkom minimizacjie kaznene funkcije χ^2. Najčešće korištena kaznena funkcija χ^2 je objektivna funkcija koja je definirana za parametre prilagodbe kao

$$\chi^2(p) = \sum_{n=1}^{N} \frac{\left(O_n^{(th)}(p) - O_n^{(exp)}\right)^2}{\triangle O_n^2} \tag{2.58}$$

gdje $O_n^{(th)}(p)$ označava teorijska predviđanja, $O_n^{(exp)}$ eksperimentalne vrijednosti n-te opservable (od ukupno N). Svaka opservabla je otežana sa faktorom $(\triangle O_n)^{-1}$ povezanim sa preciznošću samog mjerenja. Međutim, često izabrani eksperimentalni podaci nisu dovoljni kako bi se parametri modela mogli značajnije ograničiti, kao što je to u slučaju kod slabo ograničenog izovektorskog dijela efektivne interakcije. Problem bi se mogao rješiti uključivanjem nuklearnih kolektivnih pobuđenja, kao što su izoskalarno-monopolne i izovektorsko-dipolne rezonancije, u proces optimizacije. U praksi, takav postupak postavlja zahtjevne izračune, te se zato zaobilazi uključivanjem pažljivo odabranog skupa "pseudopodataka" koji se odnose na beskonačnu nuklearnu materiju, te su jako ograničeni sa nuklearnim kolektivnim modovima (kompresibilnost i nagib energije simetrije). Znajući da takav skup opservabli svojstava nuklearne materije nije jednak eksperimentalnim opservablama, ključno je priključiti pseudopodacima odgovarajuće teorijske pogreške. Neke optimizacije uključuju dodatni skup svojstava osnovnog stanja za normalne i egzotične jezgre. U slučaju stabilnih jezgara ta svojstva su izmjerena sa velikom preciznošću, dok kod egzotičnih jezgara takva svojstva su izvedena iz sistematike energije vezanja i nabojnog radijusa. Takve opservable imaju velike teorijske pogreške, ali to nam nije značajno za nastavak numeričkog postupka. [2] Optimalni skup parametara $p_0 = (p_1, ..., p_F)$

zadovoljava uvjet:

$$\frac{\partial \chi^2(p)}{\partial p_i} \mid_{p=p_0} \equiv \partial_i \chi^2(p_0) = 0 \qquad (za\ i = 1, ..., F). \tag{2.59}$$

S ciljem pojednostavljenja samog pristupa i računa primijenjujemo gaussijansku aproksimaciju, odnosno analitički pristup u kojem se u istraživanju parametarskog prostora zadržavamo u neposrednoj okolici minimuma χ^2. Gaussijanska aproksimacija sastoji se od istraživanja malih, kvadratičnih oscilacija oko χ^2 minimuma:

$$\chi^2(p) \approx \chi^2(p_0) + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{F}(p-p_0)_i (p-p_0)_j \left(\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial p_i \partial p_j}\right)_0. \tag{2.60}$$

Odstupanja od minimuma dobro je izraziti preko bezdimenzionalnih, skaliranih varijabli:

$$x_i \equiv \frac{(p-p_0)_i}{(p_0)_i}. \tag{2.61}$$

Gaussijanska aproksimacija (2.60) sada poprima kompaktniji oblik:

$$\chi^2(p) = \chi_0^2 + x^T \hat{\mathcal{M}} x \tag{2.62}$$

gdje je x vektor stupac dimenzije F, x^T transponirani vektor (redak), a $\hat{\mathcal{M}}$ Hessijan, tj. simetrična matrica drugih derivacija dimenzije $F \times F$. Pomoću matrice zakljivljenosti $\hat{\mathcal{M}}_0$ određuje se ponašanje funkcije χ^2 oko minimuma, a sami matrični elementi se određuju iz druge derivacije u točki minimuma.

$$(\mathcal{M}_0)_{ij} \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial x_i \partial x_j}\right)_0 \tag{2.63}$$

Minimizacija objektivne funkcije je definirana preko fizikalnih opservabli kao što je prikazano u izrazu (2.57), što omogućava zapis matrice zakrivljenosti, značajne i za optimizaciju i za samu matricu zakrivljenosti, kao:

$$\mathcal{M}_{ij} = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{\triangle \mathcal{O}_n^2}\left[\left(\frac{\partial \mathcal{O}_n^{(th)}}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial \mathcal{O}_n^{(th)}}{\partial x_j}\right) + \left(\mathcal{O}_n^{(th)} - \mathcal{O}_n^{(exp)}\right)\left(\frac{\partial^2 \mathcal{O}_n^{(th)}}{\partial x_i \partial x_j}\right)\right] \tag{2.64}$$

Razlika između eksperimentalne vrijednosti i teorijskog predviđanja dane opservable zapisana je kao $\left(\mathcal{O}_n^{(th)} - \mathcal{O}_n^{(exp)}\right)$ i ona bi trebala biti mala uz pretpostavku da je model dovoljno bogat da može opisati niz opservabli uključenih u prilagodbi. Osim što bi razlika trebala biti mala, ima i različite predznake zbog čega će se doprinosi iz drugog člana u izrazu (2.64) međusobno poništiti te bi se matrica zakrivljenosti trebala izračunati bez računanja drugih derivacija od $\mathcal{O}_n^{(th)}$. U skladu sa prethodno navedenim, izraz za matricu zakrivljenosti je [12]

$$\mathcal{M}_{ij} \approx \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{\triangle \mathcal{O}_n^2} \left(\frac{\partial \mathcal{O}_n^{(th)}}{\partial x_i}\right) \left(\frac{\partial \mathcal{O}_n^{(th)}}{\partial x_j}\right). \tag{2.65}$$

U analizi korelacija od temeljne važnosti je koncept kovarijanca izmedu dvije opservable A i B koja se označava kao $cov\,(A,B)$. Započnimo pretpostavkom da imamo M točaka (ili modela) $\left(x^{(1)},...,x^{(M)}\right)$ u okolici optimalnog modela $x^{(0)}=0$, kovarijanca između A i B je definirana kao: [13]

$$cov\,(A,B) = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M}\left[\left(A^m - \langle A\rangle\right)\left(B^{(m)} - \langle B\rangle\right)\right] = \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle \tag{2.66}$$

gdje je $A^{(m)} \equiv A\left(x^{(m)}\right)$, a "<>" označava statistički prosjek

$$\langle A\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} AP\,(A)\,dA \tag{2.67}$$

Korištenjem prethodno spomenute definicije kovarijance definiramo koeficijent korelacije (poznat i kao Pearsonov produkt-moment koeficijent korelacije):

$$\rho\,(A,B) = \frac{cov\,(A,B)}{\sigma_A \sigma_B}. \tag{2.68}$$

Dvije opservable su u potpunosti korelirane ako je $\rho\,(A,B)=1$, u potpunosti antikorelirane ako je $\rho\,(A,B)=-1$ i nema korelacije ako je $\rho\,(A,B)=0$. Upotrebom gaussijanske aproksimacije kovarijancu možemo izraziti na sljedeći način:

$$cov(A,B) = \sum_{i,j=1}^{F}\frac{\partial A}{\partial x_i}\left[\frac{1}{\mathcal{M}}\sum_{m=1}^{M} x_i^{(m)} x_j^{(m)}\right]\frac{\partial B}{\partial x_j} \equiv \sum_{i,j=1}^{F}\frac{\partial A}{\partial x_i} C_{ij}\frac{\partial B}{\partial x_j} \tag{2.69}$$

gdje je $C_{ij} = \hat{\mathcal{M}}_0^{-1}$ matrica kovarijanci koja je jednaka inverzu matrice zakljivljenosti u minimumu. [2] Ostaje još slučaj kada je $A = B$ tada imamo varijancu A, tj. $cov\,(A, A) = var\,(A) = \sigma_A^2$. Varijanca opservable A glasi [15]:

$$\sigma_A^2 = A^T \hat{\mathcal{M}}^{-1} A = \sum_{i,j=1}^{F} \left(\frac{\partial A}{\partial x_i}\right)_0 \hat{\mathcal{M}}_{ij}^{-1} \left(\frac{\partial A}{\partial x_j}\right)_0 . \tag{2.70}$$

Iz varijanca neke opservable može se saznati koliko je ta opservabla raspršena oko svoje prosječne vrijednosti. Za analizu uzroka tog raspršenja potrebno je znati matricu drugih derivacija $\hat{\mathcal{M}}$. Budući da je spomenuta matrica simetrična, može je se prevesti u dijagonalnu formu korištenjem ortogonalne transformacije: $\hat{\mathcal{M}} = \hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{O}}^T$. Oznaka $\hat{\mathcal{O}}$ predstavlja ortogonalnu matricu čije stupce čine normalizirani svojstveni vektor, a $\hat{\mathcal{D}}$ dijagonalnu matricu svojstvenih vrijednosti oblika $\hat{\mathcal{D}} = diag\,(\lambda_1, ..., \lambda_F)$. Kaznena funkcija ima minimum u $x = 0$, što rezultira pozitivnim svojstvenim vrijednostim koje onda zapisujemo kao:

$$\sigma_A^2 = A^T \left(\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{D}}^{-1}\hat{\mathcal{O}}^T\right) A = \left(\hat{\mathcal{O}^T} A\right)^T \hat{\mathcal{D}}^{-1} \left(\hat{\mathcal{O}}^T A\right) = \sum_{i=1}^{F} \lambda_i^{-1} \left(\frac{\partial A}{\partial \xi}\right)_0 \tag{2.71}$$

gdje F-dimenzionalni vektor $\xi = \hat{\mathcal{O}}^T x$ predstavlja točku u parametarskom prostoru, te se napiše u novoj, rotiranoj bazi, odnosno kao linearna kombinacija originalnih parametara modela.

3 Rezultati

Numerička optimizacija funkcionala u ovom radu provedena je pomoću programskog paketa MINUIT. Radi se o alatu koji pronalazi minimalnu vrijednost višeparametarske funkcije (zvane FCN), te analizira oblik funkcije oko minimuma. Statističku analizu funkcije χ^2 ili logaritma funkcije vjerodostojnosti praktično je provesti korištenjem spomentuog paketa kojim ćemo izračunati vrijednosti parametara i njihove nepouzdanosti, kao i njihove korelacije. Za spomenuti izračun koriste se vrijednosti parametara koje su dobivene minimizacijom funkcije FCN, jer one predstavljaju najbolju prilagodbu tih parametara. Iako se radi o najboljim vrijednostim parametara, uz njih se javljaju određene nepouzadnosti koje su opisane širinom minimuma funkcije, odnosno informacije o nepouzdanosti najboljih vrijednosti parametara možemo iščitati iz oblika funkcije koji ona poprima u okolici minimuma. Najbolja prilagodba parametara pronađena je pomoću već postojećih minimizacijskih algoritama koji su ugrađeni u programski paket MIGRAD, najbolji minimizator za većinu funkcija. Postupak minimizacije MIGRAD-a se temelji na Davidon-Fletcher-Powell (DFP) metodi varijabilne metrike i provjeri pozitivne definitnosti. Kod DFP metode, koja je iterativni proces, se pretpostavlja da se može eksplicitno izračunati gradijent funkcije koju minimiziramo FCN obzirom na parametre prilagodbe. Stoga, ukoliko nemamo točno izračunate prve derivacije opisani postupak minimizacije propada. Nakon završene minimizacije možemo vidjeti i matricu pogrešaka koja odgovara inverzu matrice drugih derivacija funkcije FCN. Ukoliko je potrebno, spomenuta matrica se može transformirati i u vanjski koordinatni prostor. Primjenom MINUIT-a dobivamo i pogreške parametara koje su zapisani kao kvadratni korijeni na dijagonali matrice pogrešaka. [14]

3.1 Minimizacija funkcije χ^2

Računanje svojstava nuklearne materije i atomske jezgre zahtjeva poznavanje parametara koji ulaze u lagranžijan. Za mase nukleona, ω i ρ mezona koristimo eksperimentalne vrijednosti m =939 MeV, m_ω =783 MeV, i m_ρ =763 MeV. Masa σ mezona je uzeta kao slobodan parametar, dok je δ mezon izostavljen u ovom radu. Svi parametri u funkcijama vezanja Γ_i, osim elektromagneske konstante vezanja, zajedno sa masom σ mezona m_σ su uzeti iz prilagodbe svojstvima 11 jezgri ^{16}O, ^{40}Ca, ^{52}Ca, ^{64}Ni, ^{88}Se, ^{90}Zr, ^{118}Pd, ^{124}Sn, ^{132}Sn, ^{150}Ce i ^{208}Pb među kojima su neke magične i dvostruko

magične jezgre, blizu i daleko od doline stabilnosti. Sam proces prilagodbe nema jedinstvenu i generalno prihvaćenu strategiju. Za χ^2 prilagodbu parametara korištene su opservable zapisane u tablicama 3.1 i 3.2.

opservabla	p_i	σ_i
E/A (MeV)	-16.06	-0.016
ρ(fm^{-3})	0.153	0.003
K (MeV)	225	11.25
m_D/m	0.57	0.029
m^*/m	0.76	0.001
V_{cen}	50	0.5
a_4(MeV)	32	0.64

Tablica 3.1: Vrijednosti opservabli za nuklearnu materiju.

jezgra	E_{tot} (MeV)	r_c (fm)	$r_n - r_p$(fm)	cijepanje n	cijepanje p
^{16}O	-127.62	2.73	0	6.10	6.30
^{40}Ca	-342.05	3.49	0	6.0	6.0
^{52}Ca	-438.33	0	0	0	0
^{64}Ni	-561.76	3.87	0	0	0
^{88}Se	-747.56	0	0	0	0
^{90}Zr	-783.89	4.27	0.07	0	0
^{118}Pd	-991.82	0	0	0	0
^{124}Sn	-1049.96	4.67	0.19	0	0
^{132}Sn	-1102.92	0	0	1.65	1.75
^{150}Ce	-1230.17	0	0	0	0
^{208}Pb	-1636.45	5.51	0.19	0.9	1.33

Tablica 3.2: Vrijednosti opservabli za svaku jezgru u osnovnom stanju.

Istraživanjem korelacija između parametara modela moguće je saznati hoće li dodavanje dodatnih opservabli ukloniti korelacije. Standarni postupak je određivanje parametara modela uz pomoć χ^2-minimizacije. Tradicionalno, ova procedura se svodi na odabir niza precizno izmjerenih opservabli osnovnog stanja za različite jezgre i zahtjeva da razlika među tim opservablama i predviđanjima modela bude minimizirana. Jednom kada se to napravi, uspješnost modela može biti procjenjena računanjem opservabli koje nisu uključene u prilagodbu. Međutim, često je teško odrediti nepouzdanosti predviđanja modela. Tome se može doskočili proučavanjem malih oscilacija oko minimuma umjesto samog minimuma. Takvo proučavanje daje pristup mnoštvu informacija iz kojih možemo definirati značajne teorijske stupce pogrešaka, te istražiti korelacije između parametara modela i izračunatih opservabli.

Kao u svakom problemu malih oscilacija, derivacije od izračuna χ^2 oko vrijednosti minimuma su opisani sa simetričnom $F \times F$ matricom, gdje F predstavlja ukupan broj parametara modela. Ortogonalnom transformacijom simetrična matrica prelazi u dijagonalnu formu. Dijagonalizacijom se dobije skup od F svojstvenih vrijednosti i F svojstvenih vektora. Proširivanjem točke u parametarskom prostoru pomoću svojstvenih vektora, vrijednosti izračuna derivacija χ^2 oko minimuma postaju sistem od F nevezanih harmoničkih oscilatora gdje svojstvene vrijednosti igraju ulogu F konstanti opruga. Konstanta opruge može biti "kruta" ili "mekana" ovisno o tome dali je zakrljivljenost oko minimuma strma ili plitka. Iz promatranja parametarskog prostora duž krutog smjera i onoga uz određenu linearnu kombinaciju parametara modela proizlazi naglo pogoršanje mjerenja χ^2 što ukazuje da je postupak prilagodbe dovoljno jasan za ograničavanje linerane kombinacije. Upravo ta određena linearna kombinacija koja definira prametre modela u mekom smjeru često daje dovoljno informacija za određivanje opservabli koje nedostaju. Također, uz ovakvu vrstu analize moguće je uspostaviti korelacije između opservabli koje su posebno osjetljive na takav mekani smjer. Ovo je važno jer se određene opservable lakše mjere od drugih. Tipičan primjer je razlika polumjera raspodjela neutrona i protona za ^{208}Pb i električna dipolna polarizabilnost. [2]

3.2 Usporedba matrica drugih derivacija

Izračunu matrice drugih derivacija pristupili smo na dva načina, izračunom drugih derivacija kaznene funkcije χ^2 pomoću izraza (2.63) i prvih derivacija opservabli po parametrima iz (2.65). Matricu dobivenu iz χ^2 zovemo egzaktnom, dok onu dobivenu derivacijom opservabli po parametrima matricom aproksimacije. Model ima 10 parametara, od kojih 3 za konstante vezanja mezona sa nukleonima (σ, ω, ρ), 3 za opis ovisnosti konstante vezanja (σ i ω mezona sa nukleonima) o gustoći, Γ_s, Γ_v, a_{tv} i masa σ mezona. Minimizacijom kaznene funkcije χ^2 dobivamo vrijednosti parametara za koje χ^2 ima najmanju vrijednost. Jednom kada znamo te vrijednosti, računamo druge derivacije opservabli po ukupno 10 parametara. Minimalizacijom dobijemo da je $\chi^2 = 114.90324$, a odgovarajuće vrijednosti parametara su prikazane u tablici 3.3.

Deriviramo 35 opservabli za 11 jezgri (^{16}O, ^{40}Ca, ^{52}Ca, ^{64}Ni, ^{88}Se, ^{90}Zr, ^{118}Pd, ^{124}Sn,

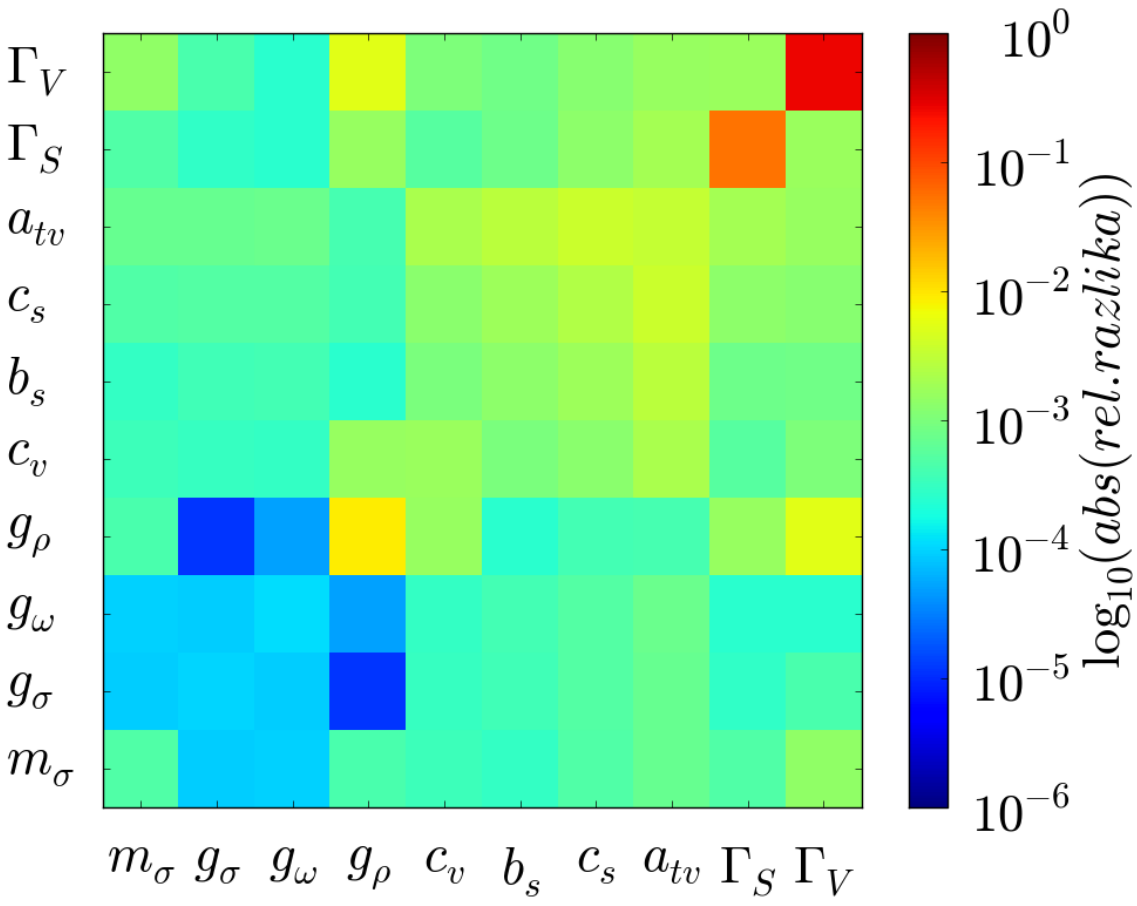
p_i	vrijednosti
m_σ	572.6167
g_σ	10.5465
g_ω	12.8194
g_ρ	4.0890
c_ν	1.4799
b_s	0.6662
c_s	1.2726
a_{tv}	0.2256
Γ_s	-99.8631
Γ_ν	205.0776

Tablica 3.3: Vrijednosti parametara iz modela nakon minimizacije.

^{132}Sn, ^{150}Ce i ^{208}Pb) . Korištene opservable su energija vezanja po nukleonu E/A, gustoća saturacije nuklearne materije ρ, kompresibilnost K, Diracova m_D i efektivna masa nukleona m^*, snaga optičkog potencijala V_{cen}, energija asimetrije a_4 za nuklearnu materiju, te energija vezanja ε_0, polumjer naboja jezgre r_c, spin-orbit cijepanje za neutrone i protone čije se vrijednosti razlikuju za svaku jezgru. Razlike među matricama posljedica su zanemarivanja drugog člana u izrazu za računanje matrice iz derivacija opservabli po parametrima (2.64). Pretpostavka da je model dovoljno bogat za jasan opis niza opservabli uključenih u prilagodbu, govori nam da je taj član (razlika eksperimentalnih i teorijskih vrijednosti opservabli) dovoljno malen da se izostavi (2.65). Grafički prikaz relativnih razlika jasno prikazuje povećanje razlika među matričnim elemetima i područja najvećih razlika. Relativne dviju matrica izračunate su po formuli:

$$rel.razlika(x, x_{ref}) = \frac{x - x_{ref}}{x_{ref}} \tag{3.1}$$

gdje x predstavlja vrijednost koja odgovara matričnim elementima matrice aproksimacije, a x_{ref} referentnu vrijednost koja odgovara elementima egzaktne matrice. Rezultati relativne razlike dviju matrica prikazane su na slici.



Slika 3.1: Relativna razlika dviju matrica.

Sa slike 3.1 jasno vidimo da je najveća relativna razlika za matrične elemente koji su dobiveni drugom derivacijom po konstantama vezanja Γ_ν i Γ_s koje uvode ovisnost vlastitih energija o nukleonskim jednočestičnim energijama, dok su najmanje razlike kod drugih derivacija koje uključuju kombinaciju parametara g_ρ g_σ za određivanje dubine potencijala.

3.3 Svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori

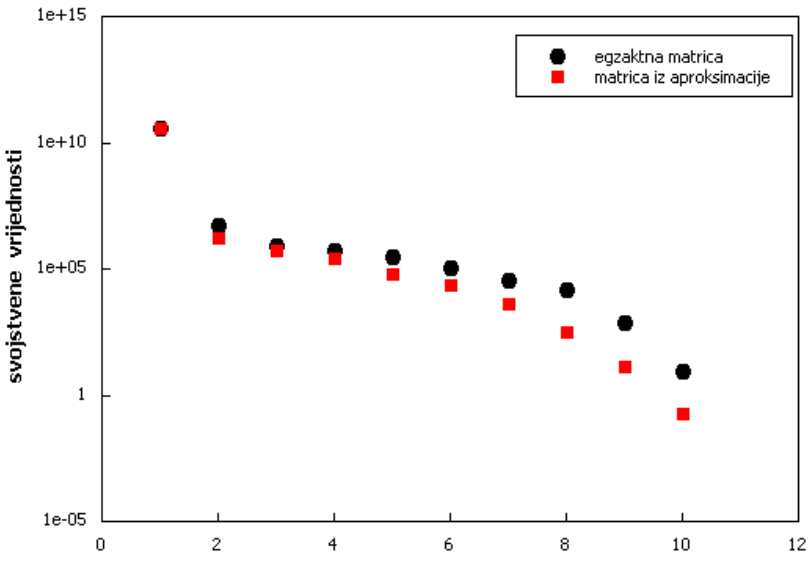
Dijagonaliziranje simetrične matrice drugih derivacija $\hat{\mathcal{M}}$ omogućava nam promatranje ponašanja izmjerenih vrijednosti oko minimuma. Kao rezultat dobivamo dijagonalnu matricu svojstvenih vrijednosti i ortogonalnu matricu svojstvenih vektora. Svojstvene vrijednosti koje imaju velike iznose obilježavaju tvrde smjerove u parametarskom prostoru za koje je karakterističan i brz rast funkcije χ^2 duž tih smjerova. Iz toga zaključujemo da linearne kombinacije parametara koje odgovaraju tvrdim svojstvenim vektorima su čvrsto ograničene opservablama iz tablice 3.3. S druge

egzaktna matrica	aproksimativna matrica
39614000000	39608000000
5248100	1716400
795750	591240
580290	261890
308060	68335
107590	22452
34215	4216.7
15545	323.63
776.23	14.156
8.8714	0.19643

Tablica 3.4: Svojstvene vrijednosti dobivene za egzaktnu i aproksimativnu matricu.

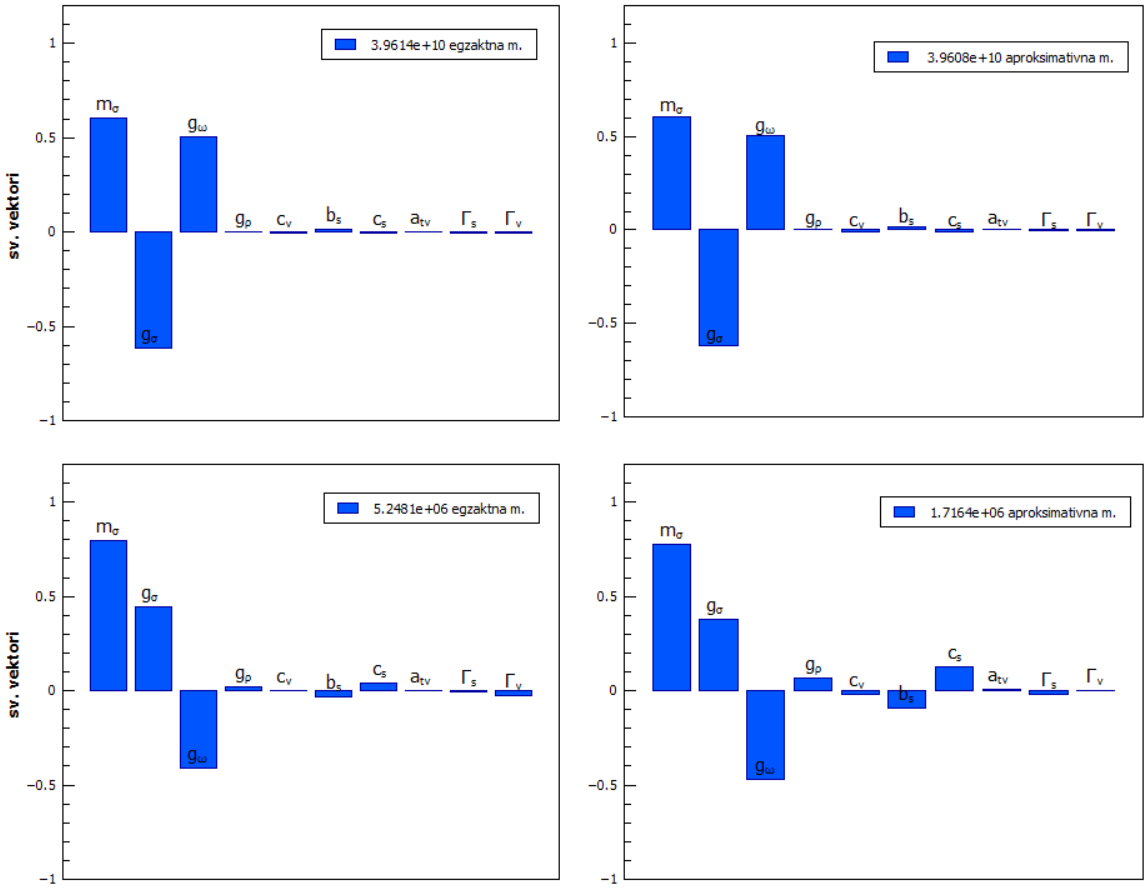
strane, mekani smjerovi u parametarskom prostoru odgovaraju malim svojstvenim vrijednostima, duž kojih mjera kvalitete χ^2 pokazuje maleno propadanje. Odgovarajuće linearne kombinacije parametara koje definiraju energijski funkcional gustoće su slabo ograničene. U tablici 3.4 zapisane su izračunate svojstvene vrijednosti za egzaktnu i aproksimativnu matricu.

Iz tablice 3.4 možemo primjetiti kako za manje svojstvene vrijednosti postoje manje razlike u njihovim vrijednostima koje su čak i istog reda veličine. Porast svojstvenih vrijednosti dovodi do porasta razlike njihovih vrijednosti za dvije matrice. Također, izračunate vrijednosti egzaktne matrice su veće od aproksimativnih čija se vrijednost brže smanjuje, što potvrđuje i slika 3.2.



Slika 3.2: Razlike svojstvenih vrijednosti između dvije matrice.

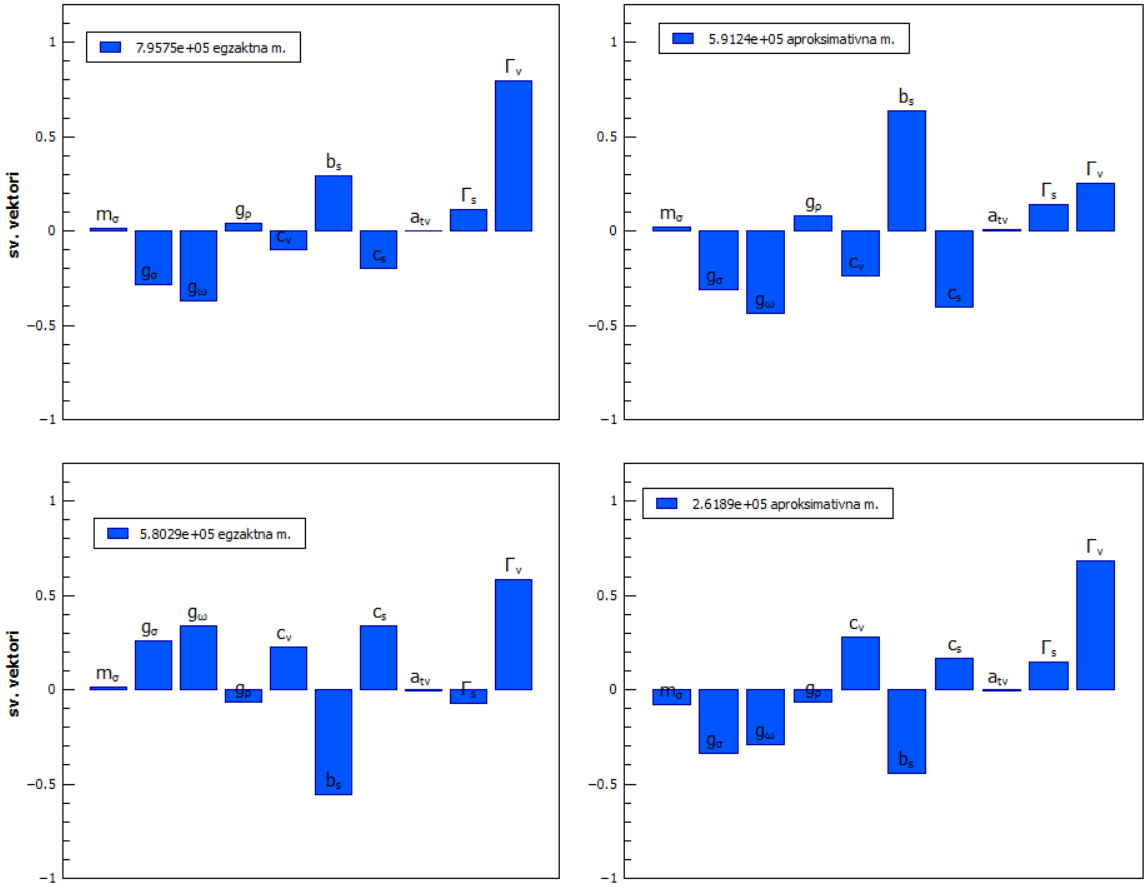
Crvenom bojom su označene svojstvene vrijednosti aproksimativne matrice, a crnom svojstvene vrijednosti egzaktne matrice. Vidimo jako dobro poklapanje za prvu, treću i četvrtu svojstvenu vrijednost dvije matrice, dok se kod ostalih pojavljuje odstupanje koje raste sa smanjenjem vrijednosti. Za svaku svojstvenu vrijednost matrica izračunali smo i odgovarajuće svojstvene vektore. Svakoj svojstvenoj vrijednosti pripada jedan svojstveni vektor koji se sastoji od 10 komponenti gdje je svaka od tih komponenti povezana sa jednim parametrom, kao što se može vidjeti iz sljedećih grafova.



Slika 3.3: Usporedba svojstvenih vektora dviju matrica, tj. dva različita pristupa.

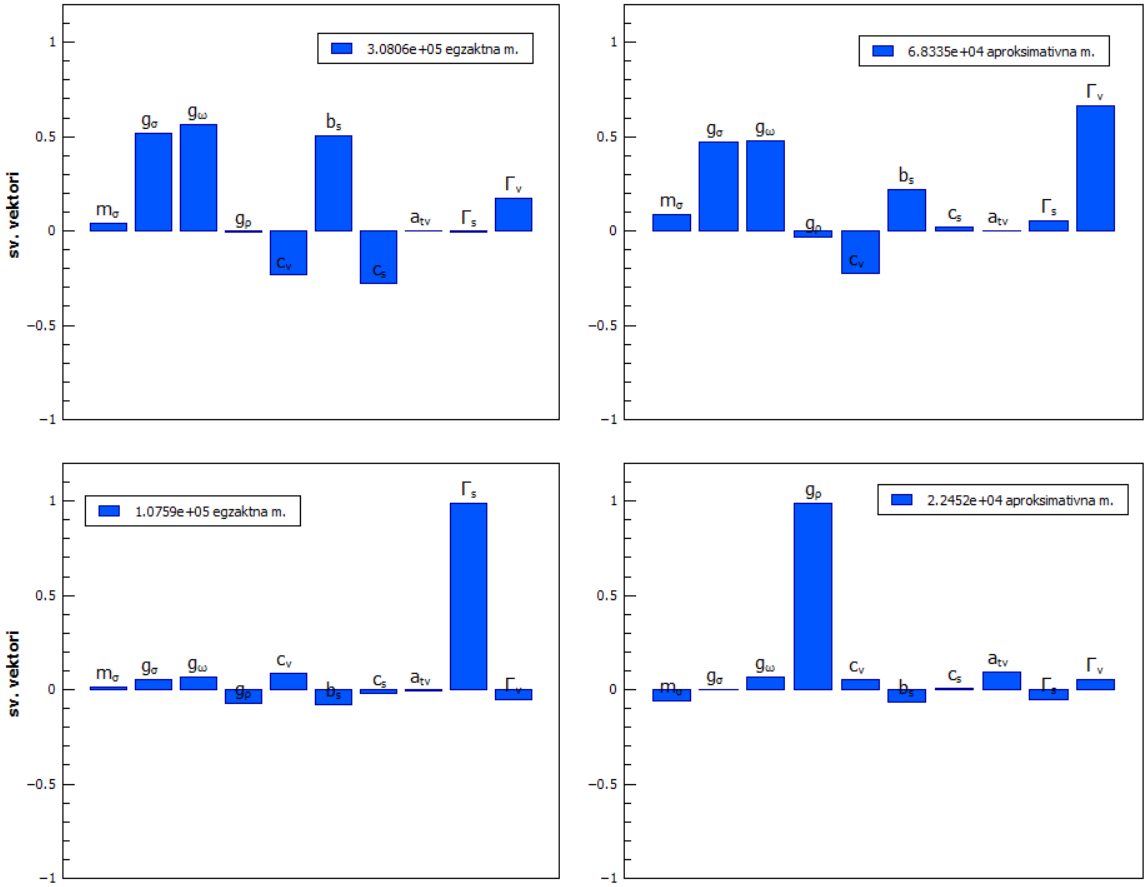
Prvim, najtvrđim modom, za koji je karakteristična najveća svojstvena vrijednost, kod egzaktne matrice dominira mješavina tri parametra, masa σ mezona m_σ, konstanta vezanja σ mezona sa nukleonima g_σ i konstanta vezanja ω mezona sa nukleonima g_ω, gdje su m_σ i g_ω u fazi, a g_σ u protufazi. Usporedimo li iznesena zapažanja sa vektorima za aproksimativnu matricu, dolazimo do istog zaključka. Dominacija određenih parametara u najtvrđem modu ukazuje na to da bi se ti parametri mogli precizno izračunati. Drugi mod egzakte matrice je sličan prvom, te dominiraju isti

parametri s iznimkom da su sada parametri m_σ i g_σ u fazi, a g_ω je u protufazi s njima. Potpuno isti slučaj imamo i kod aproksimativne matrice. Dakle, možemo primjetiti da za prve dvije najveće svojstvene vrijednosti imamo poklapanje između dvije matrice.



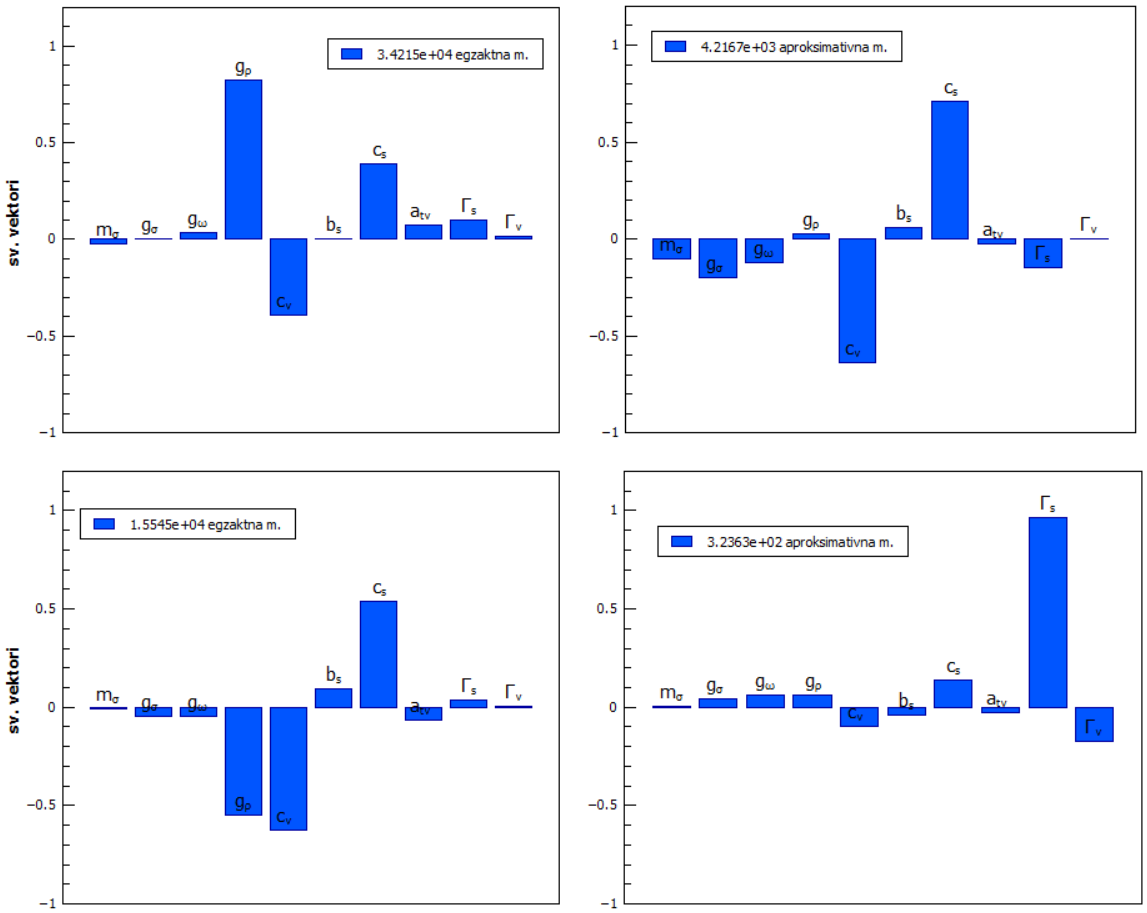
Slika 3.4: Usporedba svojstvenih vektora dviju matrica, tj. dva različita pristupa.

Kao što sa slike 3.4 možemo vidjeti, trećim modom egzaktne matrice dominira parametar Γ_ν, što za drugu matricu nije slučaj. Kod nje je vidljiva dominacija parametra b_s, ali unatoč tome postoji poklapanje svojstvenih vektora dviju matrica. Za prva četri parametra dobivene vrijednosti vektora su jako slične, kasnije njihove razlike postaju vidljivije pogotovo za zadnji parametar. Kod četvrtog moda se nastavlja njihova sličnost sa parametrima g_s, c_v, b_s, c_s, a_{tv} i Γ_v. Kod egzaktne matrice četvrti mod obilježen je parametrima b_s i Γ_ν u protufazi.



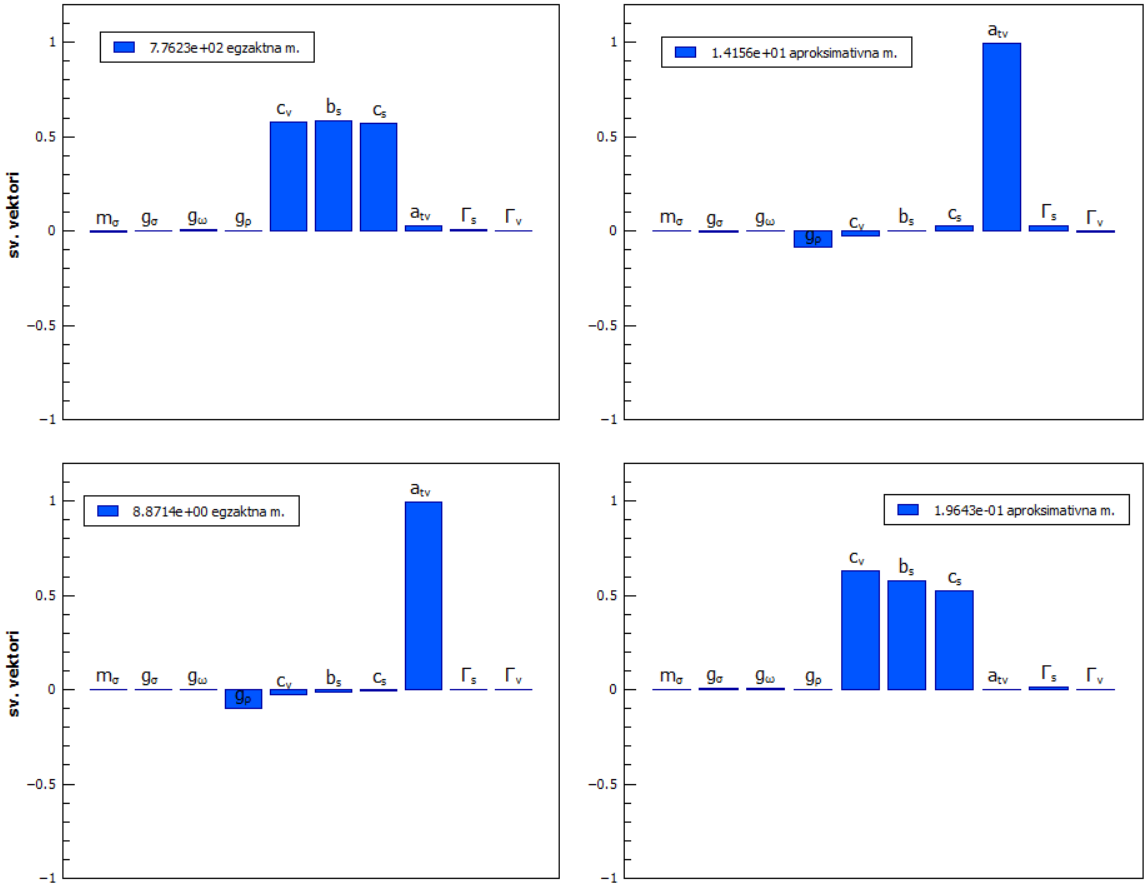
Slika 3.5: Usporedba svojstvenih vektora dviju matrica, tj. dva različita pristupa.

Kod egzaktne matrice peti mod je određen s parametrima g_σ, g_ω i b_s koji su u fazi. Aproksimativna matrica također ima tri parametra koji su u fazi, g_σ, g_ω i Γ_ν među kojima je zadnji ipak malo dominantniji. Zatim dolazimo do šestog moda gdje, kod egzaktne matrice, izrazito dominira parametar Γ_s, dok kod aproksimativne imamo dominaciju parametra g_ρ. Sad se već mogu primjetiti veća odstupanja svojstvenih vektora između dvije matrice, iako se broj komponenti vektora sa najvećim vrijednostima za određeni mod još uvijek poklapa.



Slika 3.6: Usporedba svojstvenih vektora dviju matrica, tj. dva različita pristupa.

U sedmom modu egzaktne matrice imamo tri izražena parametra g_ρ i c_s koji su u protufazi s c_ν, među kojima je g_ρ dominantniji. Kod aproksimativne matrice za sedmi mod pojavljuju se dva parametra u protufazi c_ν i c_s. Kod osmog moda egzaktne matrice dominiraju isti parametri kao u prethodnom, ali sada su parametari g_ρ i c_ν u fazi, a c_s u protufazi s njima. Potpuna suprotnost je dominacija samo jednog parametra Γ_s u osmom modu aproksimativne matrice koji po strukturi odgovara šestom modu egzaktne matrice. Dakle, možemo zaključiti da kod sedmog i osmog moda primjećujemo potpunu nepodudarnost svojstvenih vektora dviju matrica.



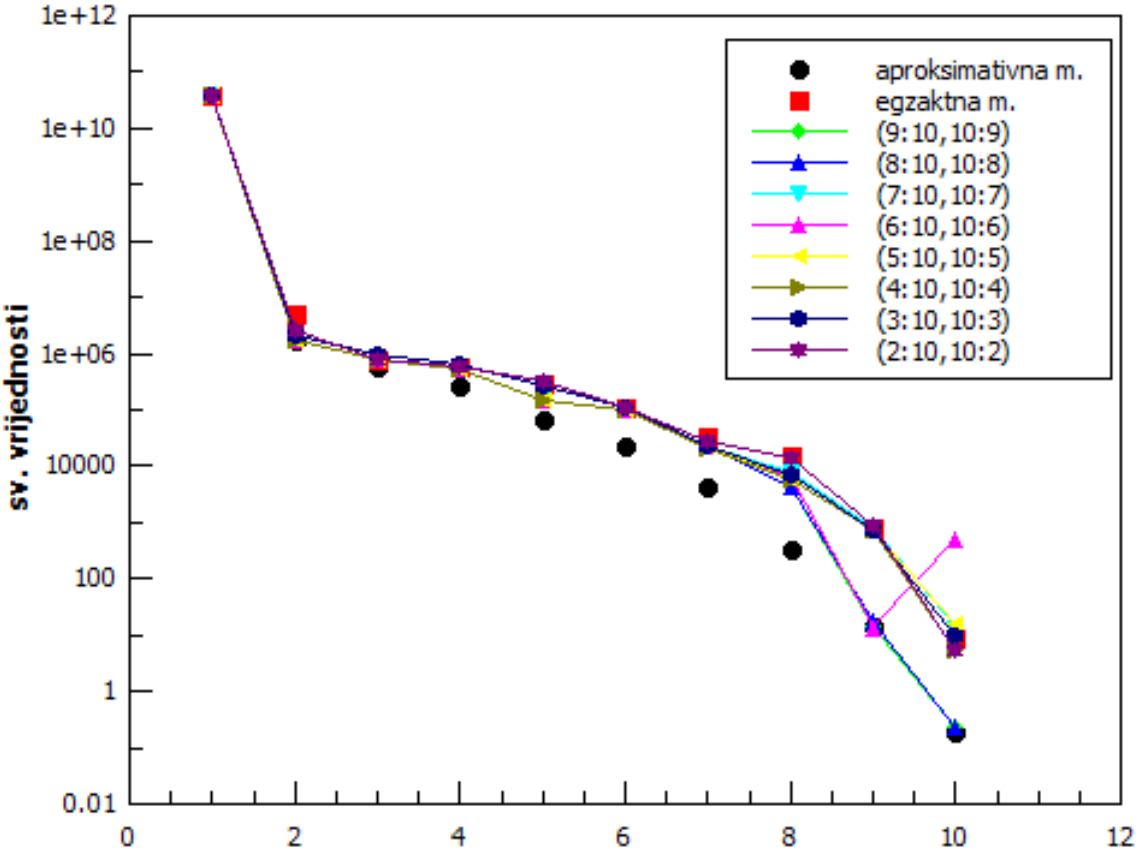
Slika 3.7: Usporedba svojstvenih vektora dviju matrica, tj. dva različita pristupa.

Posljednja dva moda pokazuju zanimljiv zaokret. Naime, deveti mod egzaktne matrice pokazuje dobro slaganje sa desetim modom aproksimativne matrice i deseti mod egzaktne matrice sa devetim modom aproksimativne. Dominacija parametara u zadnja dva moda označava parametre koje je najteže precizno odrediti. Devetim modom egzaktne (i desetim modom aproksimativne matrice) dominiraju parametri c_v, b_s i c_s čije kombinacije određuju ovisnost o gustoći izoskalarnog dijela interakcije. Spomenuti parametri samo u ovom vektoru imaju isti predznak (svi su u fazi) iako sudjeluju i u nekim drugim dobro određenim smjerovima. Zadnjim modom egzaktne (i devetim aproksimativne) prevladava samo jedan parametar a_{tv} koji određuje ovisnost o gustoći konstante vezanja ρ mezona, izovektorskog dijela interakcije koji je teško odrediti. Također, možemo primjetiti da parametari c_v, b_s i c_s u devetom modu egzaktne matrice imaju slične vrijednosti, dok u desetom modu aproksimativne matrice te vrijednosti se ipak malo razlikuju. Kao što je to bio slučaj sa svojstveni vrijednostima, tako i ovdje imamo poklapanje za najtvrđe modove jer ono postoji i kod svojstvenih vrijednosti, a za najmekše potpuni obrat.

3.4 Osjetljivost svojstvenih vrijednosti na zamijenu matričnih elemenata

Nakon usporedbe dviju matrica i njihovih svojstvenih vektora i vrijednosti, tj. dva različita pristupa računu, postavlja se pitanje koji to matrični elementi najviše utječu na razliku tih vrijednosti. Kako bi ispitali osjetljivost svojstvenih vrijednosti na matrične elemente, potrebna nam je bezdimenzionalna matrica prvih derivacija opservabli po parametrima (aproksimativna matrica) i bezdimenzionalna egzaktna matrica (dobivena derivacijom χ^2 po parametrima modela). Ispitivanje osjetljivosti svojstvenih vrijednosti na pojedine elemente matrice temelji se na ideji zamjene matričnih elemenata aproksimativne matrice sa odgovarajućim elementima egzaktne matrice s ciljem smanjenja razlike svojstvenih vrijednosti dviju matrica. Budući da su najveće relativne razlike između matrica za elemente u zadnjim recima i stupcima, upravo te elemente prve mijenjamo. Zamjenom matričnih elemenata aproksimativne matrice na pozicijama deveti redak i deseti stupac (9,10), (10,9), (10,10) i (9,9) sa odgovarajućim elementima egzaktne matrice rezultira promjenom svojstvenih vrijednosti aproksimativne matrice a time i promjenom razlike među njima. Zamjena elemenata tvori kvadrat, koji se samo širi za redak i stupac sa povećanjem promijenjenih elemenata. Na slici 3.8 jasno se vidi ponašanje svojstvenih vrijednosti nakon zamjene.

Sa slike možemo vidjeti kako zamjene određenog skupa matričnih elemenata (blokova) utječu na svojstvene vrijednosti. Crnom bojom prikazane su svojstvene vrijednosti aproksimativne matrice, a crvenom one od egzaktne matrice. Osim očitog da su vrijednosti aproksimativne matrice manje od egzaktnih, prikazano je i koliko je zamjena potrebno za pojedinu svojstvenu vrijednost da postigne onu egzaktne matrice. Kod pete i osme svojstvene vrijednosti vidimo postepeno približavanje željenoj vrijednosti, odnosno za te vrijednosti potrebno je napraviti više zamjena od ostalih. Deveta i deseta vrijednost već nakon treće zamjene (blok 7,10 i 10,7) postižu poklapanje sa ciljanim vrijednostima, iako su to vrijednosti sa najvećom razlikom. Razlike prvih pet svojstvenih vrijednosti se skoro pa i ne mijenjaju sve dok kvadrat zamjene ne proširimo do 3 retka i 10 stupca, te 10 retka i 3 stupca.



Slika 3.8: Promjene svojstvenih vrijednosti sa zamjenom matričnih elemenata..

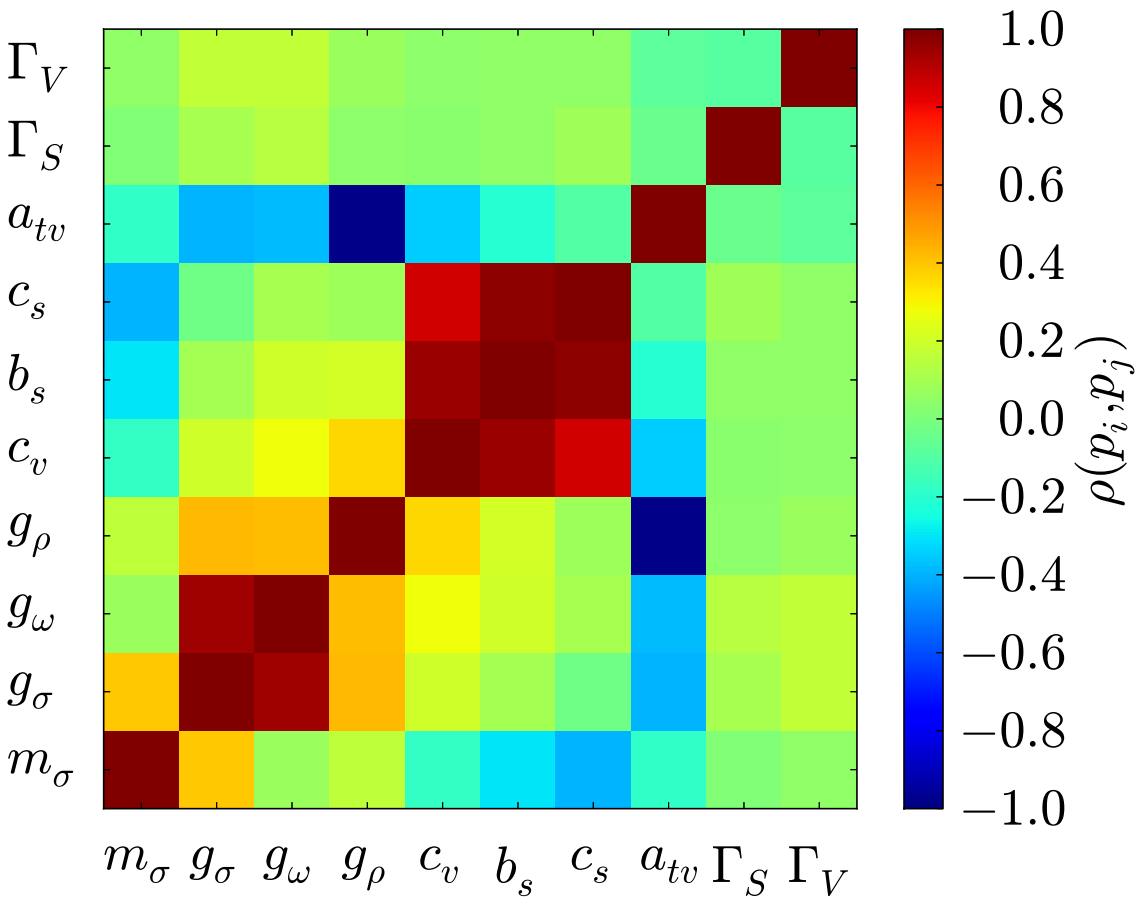
Možemo zaključiti da svojstvene vrijednosti sa najnižim rezultatima, imaju najveće razlike istih, ali i najbrže reagiraju na promijenu matričnih elemenata, dok razlike ostalih vrijednosti se značajnije počinju smanjivati nakon zamjene bloka matričnih elmenata (10:3, 3:10).

3.5 Korelacije među parametrima

U dobivenoj matrici kovarijanci parametara, dijagonalni elementi predstavljaju korelacijske koeficijente za iste parametre što odgovara prikazu jake korelacije. Nedijagonalni elementi matrice prikazuju korelacijske koeficijente za različite parametre te se računaju kao

$$\rho\left(p_i, p_j\right) = \frac{\hat{\mathcal{M}}_{ij}^{-1}}{\sqrt{\hat{\mathcal{M}}_{ii}^{-1}\hat{\mathcal{M}}_{jj}^{-1}}}. \tag{3.2}$$

Upravo su ti elementi posebno zanimljivi. Na slici 3.9 prikazane su vrijednosti koeficijenata korelacije parametara modela.



Slika 3.9: Korelacije među parametrima.

Uz očekivanu korelaciju 1 na dijagonali, može se primjetiti podjela na područja sličnih vrijednosti korelacija. Uz samu dijagonalu smještene su jake korelacije između konstanti vezanja ω i σ mezona sa nukleonima (g_ω, g_σ), te značajne korelacije između parametara b_s i c_ν, c_ν i c_s, c_s i b_s tj. između parametara koji opisuju ovisnosti konstanti vezanja o gustoći. Visoka korelacija između σ i ω mezona je nužna, u čije postojanje smo se uvijerili iz grafa, jer upravo oni određuju jednočestični potencijal RMF modela u kojem se gibaju nukleoni. Umjerena korelacija je prisutna između konstanti vezanja ρ i σ mezona (g_ρ i g_σ) i konstanti vezanja ρ i ω mezona s nukleonima (g_ρ i g_ω). Masa σ mezona i njegove konstante vezana sa nukleonima, te g_ρ i c_v također pokazuju dobre korelacije. Jaku antikorelaciju nalazimo kod parametara a_{tv} i g_ρ. Primjetimo da jedino parametri a_{tv} i m_σ imaju tri do četri vrijednosti korelacijskih koeficijenta blizu -1, tj. najviše umjerenih antikorelacija s drugi parametrima, posebice sa g_σ,g_ω i c_ν te b_s i c_s.

3.6 Korelacije među opservablama

Model smo analizirali i na opservablama konačnih jezgara u osnovnom stanju. Analizu smo proveli na 11 jezgri, ^{16}O, ^{40}Ca, ^{52}Ca, ^{64}Ni, ^{88}Se, ^{90}Zr, ^{118}Pd, ^{124}Sn, ^{132}Sn, ^{150}Ce i ^{208}Pb na odabranom skupu 35 opservabli. U tablici 3.5 nalaze se opservable vezane za nuklearnu materiju korištene u analizi.

opservabla	p_i	σ_i
E/A (MeV)	-16.06	-0.016
ρ(fm^{-3})	0.153	0.003
K (MeV)	225	11.25
m_D/m	0.57	0.029
m^*/m	0.76	0.001
V_{cen}	50	0.5
a_4(MeV)	32	0.64

Tablica 3.5: Vrijednosti opservabli za nuklearnu materiju.

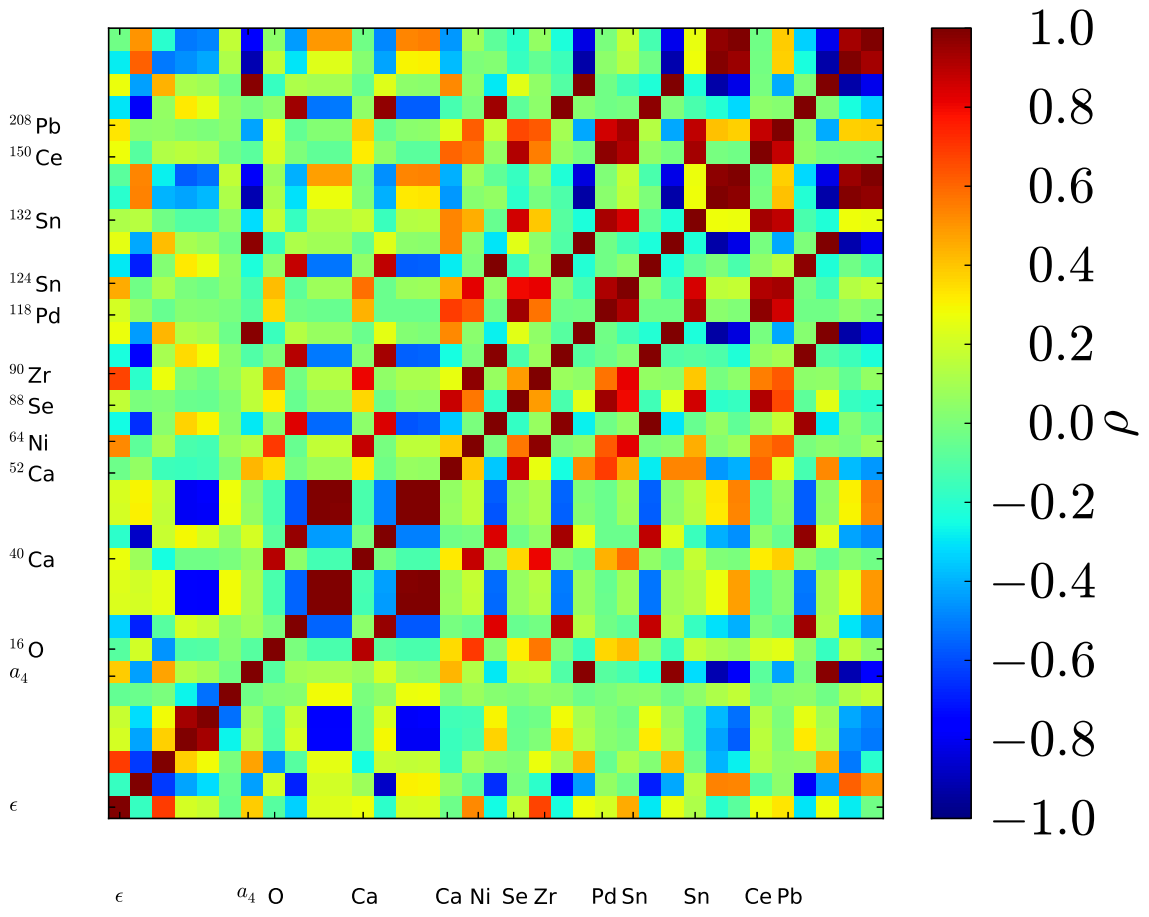
Tablica 3.6 sadrži opservable vezane za pojedine jezgre u osnovnom stanju. Njihov redosljed odgovara onome na osima grafa na slici 3.10.

jezgra	E_{tot} (MeV)	r_c (fm)	$r_n - r_p$(fm)	cijepanje n	cijepanje p
^{16}O	-127.62	2.73	0	6.10	6.30
^{40}Ca	-342.05	3.49	0	6.0	6.0
^{52}Ca	-438.33	0	0	0	0
^{64}Ni	-561.76	3.87	0	0	0
^{88}Se	-747.56	0	0	0	0
^{90}Zr	-783.89	4.27	0.07	0	0
^{118}Pd	-991.82	0	0	0	0
^{124}Sn	-1049.96	4.67	0.19	0	0
^{132}Sn	-1102.92	0	0	1.65	1.75
^{150}Ce	-1230.17	0	0	0	0
^{208}Pb	-1636.45	5.51	0.19	0.9	1.33

Tablica 3.6: Vrijednosti opservabli za svaku jezgru u osnovnom stanju.

Iz tablice 3.6 vidimo da broj opservabli za jezgre nije jednak, od tuda i razlika u razmacima oznaka jezgri na osima. Također, samo dvostruko magična jezgra ^{208}Pb ima izračunate vrijednosti svih pet promatranih opservabli, dok jednu manje imaju jezgre ^{16}O i ^{40}Ca. Preostale jezgre imaju jednu do tri izračunate opservable. Također, spin-orbit cijepanje neutrona i protona postoji za četri promatrane jezgre koje su ujedno i dvostruko magične jezgre. Dakle, za neutrone i protone ^{16}O radi se o raz-

maku između $1p_{1/2}$ i $1p_{3/2}$ orbitala, kod ^{40}Ca to je $1d$ stanje $\left(1d_{3/2} - 1d_{5/2} orbitale\right)$, za ^{132}Sn je $2d$ $\left(2d_{3/2} - 2d_{5/2} orbitale\right)$ i na kraju jezgra ^{208}Pb za neutrone ima $3p$ stanje$\left(3p_{1/2} - 3p_{3/2} orbitale\right)$ dok je kod protona to $2d$ stanje $\left(2d_{1/2} - 2d_{3/2} orbitale\right)$. Jedino jezgra ^{208}Pb ima stanja spin-orbit cijepanja neutrona i protona. Na slici 3.10 prikazane su vrijednosti korelacijskih koeficijenata za opservable prethodno navedenih jezgri , iz tablica 3.5 i tablice 3.6.



Slika 3.10: Korelacije među opservablama za odabrane jezgre u osnovnom stanju.

Promotrimo li graf sa korelacijskim koeficijentima za opservable nuklearne materije i navedenih jezgri, dolazimo do sljedećih opažanja. Očite su jake korelacije izmedu efektivne mase nukleona m^* i Diracove mase m_D za nuklearnu materiju, energije vezanja jezgri ^{16}O i ^{40}Ca, spin-orbit cijepanja neutrona i protona za jezgre ^{16}O, ^{40}Ca i ^{132}Sn, te spin-orbit cijepanje protona između jezgri ^{132}Sn i ^{208}Pb. Kod energije vezanja najjače korelacije se javljaju između jezgri bliskih vrijednosti atomskog broja Z te sa porastom razlike broja protona između jezgri ta korelacija slabi. To možemo vidjeti na primjeru jezgre ^{16}O čija energija vezanja E_{tot} pokazuje jaku korelaciju sa energijom E_{tot} jezgre ^{40}Ca dok već sa jezgrom ^{52}Ca ta korelacija je sla-

bija, a sa ostali jezgrama se nastavlja smanjivati. Jezgra ^{208}Pb sa svojom E_{tot} samo još dodatno potvrđuje naša zapažanja, te pokazuje jako koreliranje sa energijom jezgri bliskih atomskih brojeva, tj. sa ^{118}Pb, ^{124}Sn, ^{132}Sn i ^{150}Ce, a najslabije sa ^{16}O. Znamo da energija vezanja raste se porastom atomskog broja Z do Fe oko Z=56, te da se nakon toga njena vrijednost počinje smanjivati kao rezultat većeg doprinosa Coulombovog odbijanja među protonima, što dovodi do podjele jezgri na one koje se nalaze u području porasta i one koje se nalaze u području pada vrijednosti E_{tot}. Dakle, jezgre koje se nalaze u istom području imaju sličan odnos nuklearne (kratkodosežne) i Coulombove (dugodosežne) interakcije koji na kraju i utječe na jakost energije vezanja. Radijus naboja jezgre r_c promatran je kod 6 odabranih jezgri (^{16}O, ^{40}Ca, ^{64}Ni, ^{90}Zr, ^{124}Sn i ^{208}Pb), te pokazuje približno iste jakosti korelacije za svaku jezgru što znači da je dovoljno odrediti radijus naboja samo jedne jezgre i možemo dobiti dosta dobru informaciju o radijusu r_c preostalih jezgri. Opservabla koja opisuje razliku distribucije neutrona i protona ($r_n - r_p$) prisutna je kod samo 3 promatrane jezgre (^{90}Zn, ^{124}Sn i ^{208}Pb) i za sve 3 jezgre pokazuje jaku korelaciju samo sa energijom asimetrije i sa opservablama $r_n - r_p$ druge dvije jezgre. Energija asimetrije, koju koristimo u računu energije vezanja kao predzadnji član preko kojeg se u račun uključuju i kvantni efekti poput izospinske ovisnosti nuklearne sile, pokazuje korelacije samo sa prethodno spomenutim opservablam tj. sa $r_n - r_p$ navedenih jezgri. Spin-orbit cijepanje promatramo kod 4 jezgri (^{16}O. ^{40}Ca, ^{132}Sn i ^{208}Pb), te vidimo jaku koreliranost spin-orbit cijepanja protona i neutrona kod ^{16}O, što se ponavlja i kod preostale 3 jezgre. Zatim, ponovo se javlja podjela jezgri u parove, pa tako imamo jaku korelaciju spin-orbit cijepanja neutrona/protona između jezgri ^{16}O i ^{40}Ca, te ^{132}Sn i ^{208}Pb, dok je ona slabija kod drugih kombinacija ovih jezgri. Također je zanimljivo za primjetiti da se spin-orbit cijepanje javlja za sve četri dvostruko magične jezgre koje promatramo. Uz njih, primjetna je značajna korelacija izmedu energije vezanja po nukleonu E/A i kompresibilnosti K. Njihova povezanost posljedica je činjenice da druga derivacija E/A ovisi o krutosti nuklearne materije u odnosu na promjene u gustoći koja se mjeri modulom kompresije K kao $K = k_F^2 \frac{d^2}{dk_f^2}(E/A)$. Jaka antikorelacija je vidljiva izmedu kompresibilnosti K i gustoće saturacije nuklearne materije ρ, Diracove mase nukleona m_Di cijepanja neutrona jezgre ^{16}O, te između efektivne mase nukleona m^* i cijepanja protona jezgri ^{16}O i ^{40}Ca. Umjerena antikorelacija se javlja za opservable radijusa naboja jezgre r_c za ^{64}Ni i cijepanja neutrona ^{16}O, te kod

istih opservabli samo za drugu kombinaciju jezgri (^{16}O i ^{16}O, ^{40}Ca i ^{16}O, ^{90}Zr i ^{16}O, ^{124}Sn i ^{16}O, te ^{208}Pb i ^{16}O).

4 Zaključak

Analiza kovarijance koja je ovdje provedena trebala bi dati jasniji uvid u svojstva opservabli odabranih za ovaj model, ali i pomoći u pronalasku opservabli koje bi mogle smanjiti velike procjene nepreciznosti. Kako bi se to ostvarilo nije nam potreban sam minimum funkcije χ^2 , već njezino ponašanje oko minimuma. Pomaci oko minimuma, kao u svakom problemu malih oscilacija, su opisani pomoću simetrične matrice drugih derivacija iz koje se onda mogu izračunati korelacijski koeficijenti između opservabli.

Matrice drugih derivacija izračunte su na dva načina, iz drugih derivacija kaznene funkcije χ^2 i prvih derivacija opservabli po parametrima. Usporedba tih dviju matrica preko njihovih relativnih razlika pokazuje da su razlike najveće za elemente dobivene derivacijom po konstantama vezanja koje uvode ovisnost vlastitih energija o nukleonskim jednočestičnim energijama (Γ_ν i Γ_s), a najmanje za derivaciju koja uključuje kombinaciju parametara za određivanje dubine potencijala (g_ρ g_σ).

Za pristup informacijama važnim za korelacijsku analizu potrebno je dijagonalizirati matricu drugih derivacija jer se iz nje dobivaju svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori. Kretanje duž smjera koji je određen pripadnim svojstvenim vektorom vodi na propadanje kvalitete same prilagodbe na koju utječu svojstvene vrijednosti. ”Mekani” smjer obilježen je malenom ili iščezavajućom svojstvenom vrijednošću što rezultira malenim propadanjem u kvaliteti. Linearna kombinacija parametara modela koja definira takav smjer je slabo ograničena izborom opservabli uključenih u definiciju χ^2 funkcije. Ukoliko je opservabla koju promatramo osjetljiva na takav smjer, znači da je iznos derivacija te opservable velik, pa je sama varijanca velika. Unaprijeđenje samog modela postiže se identifikacijom mekanih smjerova, tj. određivanjem vrste opservabli koje se trebaju dodati u χ^2, čime bi se bolje ograničio teorijski model. Usporedba dobivenih svojstvenih vrijednosti dviju matrica pokazuje kako se njihova razlika smanjuje porastom svojsvenih vrijednost, tj. postoji veće poklapanje za veće svojstvene vrijednosti. Iz prikaza svojstvenih vektora po komponentama za svaku svojstvenu vrijednost može se odrediti koji parametar dominira za koju vrijednost. Pa tako najtvrđim modom dominiraju tri parametra, m_σ, g_σ i g_ω, što znači da se ti parametri mogu precizno izračunati u odnosu na druge. Dominacija komponenti vektora vezanih za pojedine parametare se mijenja sa promijenjom svojstvene vri-

jednosti, ali i matrice na koju se odnose. Najmekši modovi dviju matrica pokazuju potpuno nepoklapanje, pa najmekšim modom egzaktne dominira jedan parametar a_{tv} dok kod aproksimativne to su tri parametra c_v, b_s i c_s.

Matrica kovarijanci parametara na dijagonalnim elementima ima korelacijske koeficijente za iste parametre, dok nedijagonalni elementi matrice prikazuju one za različite parametre. Visoka korelacija se javlja između σ i ω mezona, što se moglo i očekivati jer upravo oni određuju jednočestični potencijal RMF modela u kojem se gibaju nukleoni. Umjerena korelacija je prisutna između g_ρ i g_σ, te između g_ρ i g_ω. Jaku antikorelaciju nalazimo kod parametara a_{tv} i g_ρ.

Kod opservabli jake korelacije se pojavljuju izmedu m^* i m_D za nuklearnu materiju, energije vezanja jezgri ^{16}O i ^{40}Ca, spin-orbit cijepanja neutrona i protona za jezgre ^{16}O, ^{40}Ca i ^{132}Sn, te spin-orbit cijepanje protona između jezgri ^{132}Sn i ^{208}Pb. Korelacije energije vezanja najjače su za jezgre sličnog atomskog broja Z te sa porastom razlike broja protona između jezgri ta korelacija slabi. Na primjer, kod jezgre ^{16}O energija vezanja E_{tot} pokazuje jaku korelaciju sa energijom E_{tot} jezgre ^{40}Ca dok sa jezgrom ^{52}Ca ta korelacija je slabija, a sa ostali jezgrama se nastavlja smanjivati. Jezgra ^{208}Pb sa svojom E_{tot} samo još dodatno potvrđuje zapažanja, te pokazuje jako koreliranje sa energijama jezgri bliskih atomskih brojeva, tj. sa ^{118}Pb, ^{124}Sn. ^{132}Sn i ^{150}Ce, a najslabije sa ^{16}O. Radijus naboja jezgre r_c za jezgre (^{16}O, ^{40}Ca, ^{64}Ni, ^{90}Zr, ^{124}Sn i ^{208}Pb) pokazuje približno iste jakosti korelacije za svaku jezgru što znači da je dovoljno odrediti radijus naboja samo jedne jezgre i možemo dobiti dosta dobru informaciju o radijusu r_c preostalih jezgri. Opservabla $(r_n - r_p)$ za jezgre (^{90}Zn, ^{124}Sn i ^{208}Pb) pokazuje jaku korelaciju samo sa energijom asimetrije i sa opservablama $r_n - r_p$ druge dvije jezgre. Energija asimetrije pokazuje korelacije samo sa prethodno spomenutim opservablam tj. sa $r_n - r_p$ navedenih jezgri. Spin-orbit cijepanje za 4 jezgre (^{16}O, ^{40}Ca, ^{132}Sn i ^{208}Pb) ima jaku koreliranost sa spin-orbit cijepanjem protona i neutrona kod ^{16}O, što se ponavlja i kod preostale 3 jezgre. Zatim, ponovo se javlja podjela jezgri u parove, pa imamo jaku korelaciju spin-orbit cijepanja neutrona/protona između jezgri ^{16}O i ^{40}Ca, te ^{132}Sn i ^{208}P. Uz njih, primjetna je značajna korelacija izmedu E/A i kompresibilnosti K. Jaka antikorelacija je vidljiva izmedu K i ρ, Diracove mase nukleona m_D i cijepanja neutrona jezgre ^{16}O, te između m^* i cijepanja protona jezgri ^{16}O i ^{40}Ca. Umjerena antikorelacija se javlja za opservable radijusa naboja jezgre r_c za ^{64}Ni i cijepanja neutrona ^{16}O, te kod istih opservabli

samo za drugu kombinaciju jezgri (^{16}O i ^{16}O, ^{40}Ca i ^{16}O, ^{90}Zr i ^{16}O, ^{124}Sn i ^{16}O, te ^{208}Pb i ^{16}O). Rezultati koji su dobiveni pokazali su da matrica derivacija χ^2 nije baš tako lako zamjenjiva aproksimativnom matricom, jer ipak postoje značajne razlike u svojstvenim vrijednostima i vektorima što utječe na predviđanje preciznosti određivanja modela neke veličine. Korelacijski koeficijenti parametara su potvrdili neke povezanost, dok su druge ostale bez objašnjenja. Slično je i sa korelacijskim koeficijentima opservabli.

Literatura

[1] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).

[2] F.J.Fattoyev, J.Piekarewicz, Accurate calibration of relativistic mean-field models: Correlating observables and providing meaningful theoretical uncertainties, Phy. Rev. C84, 064302 (2011).

[3] P.-G. Fattoyev, J.Piekarewicz, Phy. Rev. C81, 051303 (2010).

[4] P.-G. Fattoyev, J.Piekarewicz, Phy. Rev. C86, 015802 (2012).

[5] P.-G. Reinhard, W. Nazarewicz, Phy. Rev. C87, 014324 (2013).

[6] P.-G. Reinhard, J.Piekarewicz, W. Nazarewicz, B. K. Agrawal, N. Paar, X. Roca-Maza, Phy. Rev. C88, 034325 (2013).

[7] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P.-G. Reinhard, J. Phy. G41, 074001 (2014).

[8] J.Piekarewicz, W.-C.Chen, F.J.Fattoyev, arXiv:1407.0911.

[9] J. Petković, Određivanje spektra antineutrina iz nuklearnih reaktora (Diplomski rad), Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek, Zagreb (2015).

[10] F.J.Fattoyev, J.Piekarewicz, Accurate calibration of relativistic mean-field models: Correlating observables and providing meaningful theoretical uncertainties, Phy. Rev. C84, 064302 (2011).

[11] S. Typel, Relativistic model for nuclear matter and atomic nuclei with momentum-dependent self-energies, Phys. Rev. C 71, 064301 (2005).

[12] W. Chen, J.Piekarewicz, Building relativistic mean field models for finite nuclei and neutron stars, Phy. Rev. C90, 044305 (2014).

[13] S. Brandt, Data Analysis: Statistical and Computational Methods for Scientists and Engineers, 3rd ed. (Springer, New York, 1999).

[14] F. James, MINUIT reference manual, Cern Program Library Long Writeup D506, Version 92.1 (1992).

[15] I. Novak, Nova generacija relativističkih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće (Diplomski rad), Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek, Zagreb (2016).