

# Naruszenie symetrii izospinowej przez oddziaływanie silne w podejściu opartym na teorii funkcjonału gęstości

**Paweł Bączyk**

Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski



Seminarium Fizyki Jądra Atomowego

Warszawa, 3 października 2019

# Plan seminarium

- 1) Efekty naruszenia symetrii izospinowej w jądrach atomowych
- 2) Model teoretyczny i modyfikacja oddziaływania Skyrme'a
- 3) Obliczenia różnic energii wiązania
- 4) Charakter nowych członów
- 5) Wyjście poza przybliżenie pola średniego

# Składniki jąder atomowych

neutron



$$t_z = +\frac{1}{2}$$

proton



$$t_z = -\frac{1}{2}$$

nukleony

$$t = \frac{1}{2}$$

## Izospinowa liczba kwantowa

- izospin:  $t$
- rzut izospinu:  $t_z = -t, \dots, t$

# Składniki jąder atomowych

neutron



$$t_z = +\frac{1}{2}$$

proton



$$t_z = -\frac{1}{2}$$

nukleony

$$t = \frac{1}{2}$$

## Izospinowa liczba kwantowa

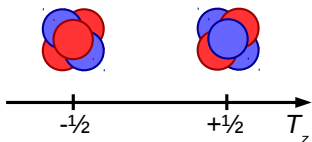
- izospin:  $t$
- rzut izospinu:  $t_z = -t, \dots, t$

## Dla jądra o $N$ neutronach i $Z$ protonach

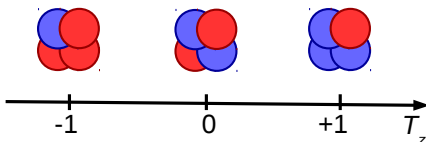
- rzut izospinu:  $T_z = N \cdot \left(+\frac{1}{2}\right) + Z \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{N-Z}{2}$
- całkowity izospin:  $T \geq |T_z|$

# Multiplety izospinowe

dublet izospinowy  $T = \frac{1}{2}$



tryplet izospinowy  $T = 1$



## Symetria izospinowa

Układ nie wyróżnia ani neutronów, ani protonów – traktuje je identycznie.

# Oddziaływania między nukleonami

## Oddziaływanie Coulombowskie

Występuje między protonami:



## Oddziaływanie jądrowe silne

Występuje między nukleonami:



# Oddziaływania między nukleonami

## Oddziaływanie Coulombowskie

Występuje między protonami:



Symetria izospinowa jest naruszona!

## Oddziaływanie jądrowe silne

Występuje między nukleonami:



# Oddziaływania między nukleonami

## Oddziaływanie Coulombowskie

Występuje między protonami:



Symetria izospinowa jest naruszona!

## Oddziaływanie jądrowe silne

Występuje między nukleonami:



Łamanie symetrii izospinowej obserwowane w eksperymentach rozproszeniowych.



# Oddziaływania między nukleonami

## Oddziaływanie Coulombowskie

Występuje między protonami:



Symetria izospinowa jest naruszona!

## Oddziaływanie jądrowe silne

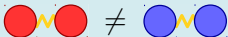
Występuje między nukleonami:



Łamanie symetrii izospinowej obserwowane w eksperymentach rozproszeniowych.

## Naruszenie symetrii izospinowej (ISB)

### Naruszenie symetrii ładunkowej (CSB)



### Naruszenie niezależności ładunkowej (CIB)



# Oddziaływania między nukleonami

## Oddziaływanie Coulombowskie

Występuje między protonami:



Symetria izospinowa jest naruszona!

## Oddziaływanie jądrowe silne

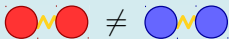
Występuje między nukleonami:



Łamanie symetrii izospinowej obserwowane w eksperymentach rozproszeniowych.

## Naruszenie symetrii izospinowej (ISB)

### Naruszenie symetrii ładunkowej (CSB)



### Naruszenie niezależności ładunkowej (CIB)



### Przyczyna naruszenia symetrii izospinowej

Różnice w strukturze nukleonów:

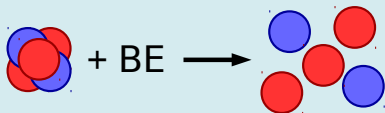
- proton (*uud*)
- neutron (*udd*)

### Teoretyczny opis oddziaływania *NN*

- obecnie opis w ramach QCD niemożliwy
- fenomenologiczne potencjały dopasowane do danych rozproszeniowych, np. AV18

# Energie wiązania

## Energia wiązania

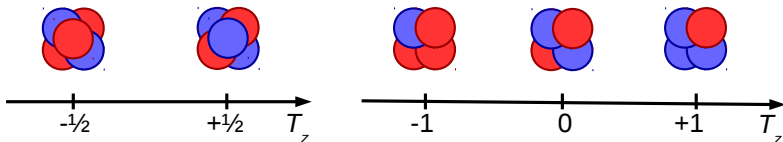


## Energia wiązania zależy od $T_z$

$$BE(\text{state with } T_z = 1/2) > BE(\text{state with } T_z = 0)$$

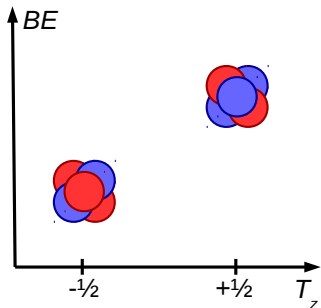
- dominujący efekt Coulombowski
- możliwość sprawdzenia wpływu oddziaływania silnego

Jak to wpłynie na BE dla multipletów izospinowych?

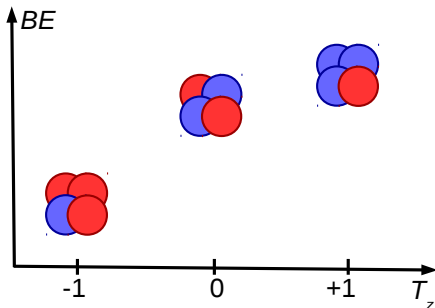


# Opis multipletów izospinowych

dublet izospinowy  $T = \frac{1}{2}$

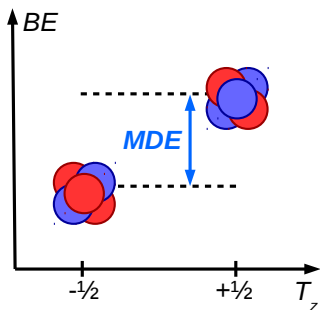


tryplet izospinowy  $T = 1$

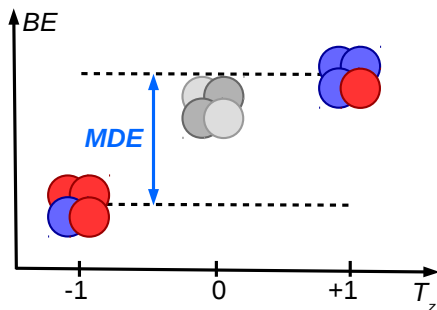


# Opis multipletów izospinowych

dublet izospinowy  $T = \frac{1}{2}$



tryplet izospinowy  $T = 1$

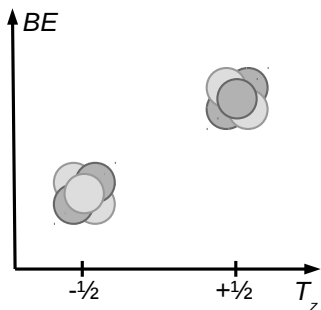


**Energia przesunięcia zwierciadlanego**

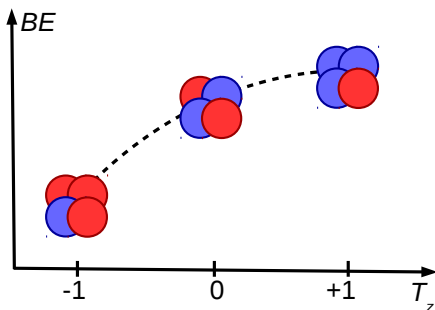
$$\text{MDE} = \text{BE}(\text{diagram}) - \text{BE}(\text{diagram})$$

# Opis multipletów izospinowych

dublet izospinowy  $T = \frac{1}{2}$

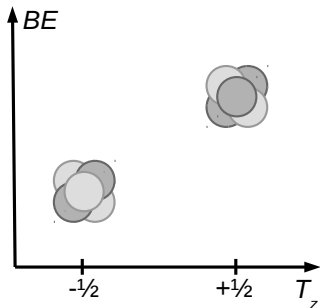


tryplet izospinowy  $T = 1$

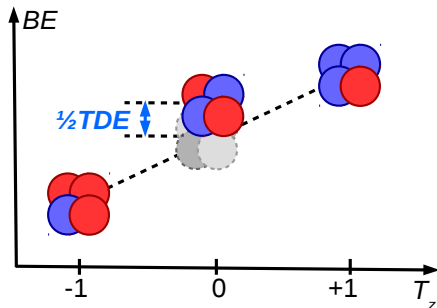


# Opis multipletów izospinowych

dublet izospinowy  $T = \frac{1}{2}$



tryplet izospinowy  $T = 1$



**Energia przesunięcia trypletowego**

$$TDE = BE(\text{two red, one blue}) + BE(\text{two blue, one red}) - 2BE(\text{one red, two blue})$$

# Model teoretyczny

Potencjał  $NN$

np. AV18

- z członami CSB i CIB

modele *ab initio*,  
np. GFMC  
→  
z ich ograniczeniami

Opis jąder atomowych

np. energii wiązania,  
MDE, TDE



# Model teoretyczny

## Potencjał $NN$

np. AV18

- z członami CSB i CIB

modele *ab initio*,  
np. GFMC  
→  
z ich ograniczeniami

## Opis jąder atomowych

np. energii wiązania,  
MDE, TDE

## Problem twardego rdzenia

- silne odpychanie na odległościach  $\sim 0,4$  fm
- taki potencjał nie może być wykorzystany w metodzie HF

# Teoria efektywna

**Nasz cel:** modelowanie stanu podstawowego i niskoenergetycznych stanów wzbudzonych

**Założenie:** stany te są niezależne od procesów wymagających dużego transferu pędu  $q$  pomiędzy nukleonami

# Teoria efektywna

**Nasz cel:** modelowanie stanu podstawowego i niskoenergetycznych stanów wzbudzonych

**Założenie:** stany te są niezależne od procesów wymagających dużego transferu pędu  $q$  pomiędzy nukleonami

Rozwinięcie potencjału w przestrzeni pędowej:

$$v(q) = v_0 + v_2 q^2 + v_4 q^4 + \dots$$

może być ograniczone przez obcięcie ultrafioletowe.

# Teoria efektywna

**Nasz cel:** modelowanie stanu podstawowego i niskoenergetycznych stanów wzbudzonych

**Założenie:** stany te są niezależne od procesów wymagających dużego transferu pędu  $q$  pomiędzy nukleonami

Rozwinięcie potencjału w przestrzeni pędowej:

$$v(q) = v_0 + v_2 q^2 + v_4 q^4 + \dots$$

może być ograniczone przez obcięcie ultrafioletowe.

Odwrotna transformacja Fouriera do przestrzeni położeniowej:

$$v(\mathbf{r}) = c\delta_a(\mathbf{r}) + d_1 a^2 \nabla \delta_a(\mathbf{r}) \nabla + d_2 a^2 \delta_a(\mathbf{r}) \nabla^2 + \dots$$

$$\lim_{a \rightarrow 0} \delta_a(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$$

# Skyrme interaction

W modelu pola średniego można zastąpić  $\delta_a(\mathbf{r}) \rightarrow \delta(\mathbf{r})$ , otrzymując oddziaływanie kontaktowe:

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_{Sk}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \underbrace{\left( t_0 \left( 1 + x_0 \hat{P}_\sigma \right) \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}_{\text{rząd wiodący, człon centralny}} \\
 & + \underbrace{\frac{1}{2} \left( t_1 \left( 1 + x_1 \hat{P}_\sigma \right) \right) \left( \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) + \left( t_2 \left( 1 + x_2 \hat{P}_\sigma \right) \right) \vec{k}' \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{kolejny rząd, człon gradientowy}} \\
 & + \underbrace{\frac{1}{6} t_3 \left( 1 + x_3 \hat{P}_\sigma \right) \rho_0^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}_{\text{człon zależny od gęstości}} + \underbrace{iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{człon spin-orbita}}
 \end{aligned}$$

10 parametrów dopasowuje się do nisko energetycznych danych jądrowych.

# Skyrme interaction

W modelu pola średniego można zastąpić  $\delta_a(\mathbf{r}) \rightarrow \delta(\mathbf{r})$ , otrzymując oddziaływanie kontaktowe:

$$\begin{aligned}
 \hat{V}_{Sk}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \underbrace{\left( t_0 (1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}_{\text{rząd wiodący, człon centralny}} \\
 & + \underbrace{\frac{1}{2} \left( t_1 (1 + x_1 \hat{P}_\sigma) \right) \left( \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) + \left( t_2 (1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \right) \vec{k}' \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{kolejny rząd, człon gradientowy}} \\
 & + \underbrace{\frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \rho_0^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}_{\text{człon zależny od gęstości}} + \underbrace{iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{człon spin-orbita}}
 \end{aligned}$$

10 parametrów dopasowuje się do nisko energetycznych danych jądrowych.

Oddziaływanie Skyrme'a jest izospinowo niezmiennicze



# Teoria funkcjonału gęstości (DFT)

Siła Skyrme'a może stanowić generator funkcjonału gęstości energii:

$$E_{Sk}[\rho] = \langle \Phi | \hat{V}_{Sk} | \Phi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ik} \langle ik | \hat{V}_{Sk} | ik \rangle = \int d^3r \mathcal{H}_{Sk}(\mathbf{r})$$

Gęstość cząstkowa:

$$\rho(\mathbf{r}\sigma q, \mathbf{r}\sigma' q') = \sum_i \phi_i(\mathbf{r}\sigma q) \phi_i^*(\mathbf{r}\sigma' q')$$

# Teoria funkcjonału gęstości (DFT)

Siła Skyrme'a może stanowić generator funkcjonału gęstości energii:

$$E_{Sk}[\rho] = \langle \Phi | \hat{V}_{Sk} | \Phi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ik} \langle ik | \hat{V}_{Sk} | ik \rangle = \int d^3r \mathcal{H}_{Sk}(\mathbf{r})$$

Gęstość cząstkowa:

$$\rho(\mathbf{r}\sigma q, \mathbf{r}\sigma' q') = \sum_i \phi_i(\mathbf{r}\sigma q) \phi_i^*(\mathbf{r}\sigma' q')$$

## Program do obliczeń DFT – HFODD

- problem rozwiązywany w trójwymiarowej bazie oscylatora harmonicznego
- kulombowskie człony wprost i wymienny liczone dokładnie
- mieszanie  $pn$  i metoda wymuszonego obrotu w izoprzestrzeni (*isocranking*)
- wychodzące poza przybliżenie pola średniego rzutowanie na dobry moment pędu i izospin oraz mieszanie konfiguracji

N. Schunck *et al.*, *Comp. Phys. Comm.* **216**, 145 (2017).



# Model teoretyczny

## Potencjał $NN$

np. AV18

- z członami CSB i CIB

teoria efektywna

## Oddziaływanie Skyrme'a

- oddziaływanie typu  $\delta$ 
  - człon centralny
  - człony gradientowe
  - człon zależny od gęstości
  - człon spin-orbita
- 10 wolnych parametrów
- **izospinowo niezmiennicze:**



modele *ab initio*,  
np. GFMC  
z ich ograniczeniami

teoria jądrowego  
funkcjonału gęstości

## Opis jąder atomowych

np. energii wiązania,  
MDE, TDE

obliczenia

## Parametryzacje

np. SV

dopasowanie

## Funkcjonał gęstości energii Skyrme'a

+ energia kinetyczna  
+ wkład kulombowski

# Model teoretyczny

## Potencjał $NN$

np. AV18

- z członami CSB i CIB

teoria efektywna

## Oddziaływanie Skyrme'a

- oddziaływanie typu  $\delta$ 
  - człon centralny
  - człony gradientowe
  - człon zależny od gęstości
  - człon spin-orbita
- 10 wolnych parametrów
- **izospinowo niezmiennicze:**



modele *ab initio*,  
np. GFMC

z ich ograniczeniami

## Podejście DFT

- **stosowalność**
- **metody poza DFT**
- **wykorzystanie izospinowo niezmienniczego oddziaływania**

teoria jądrowego  
funkcjonału gęstości

## Opis jąder atomowych

np. energii wiązania,  
MDE, TDE

obliczenia

## Parametryzacje

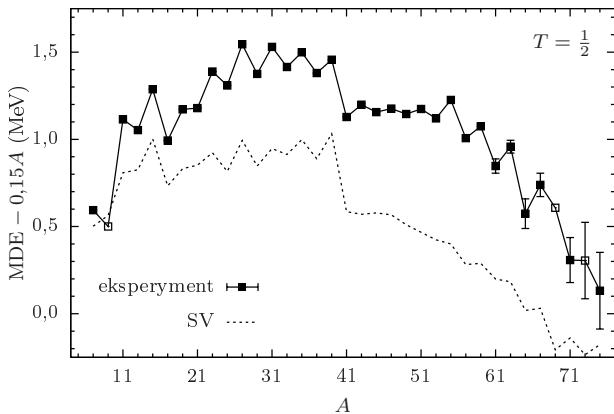
np. SV

dopasowanie

## Funkcjonał gęstości energii Skyrme'a

- + energia kinetyczna
- + wkład kulombowski

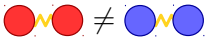
# Mirror Displacement Energy (MDE)



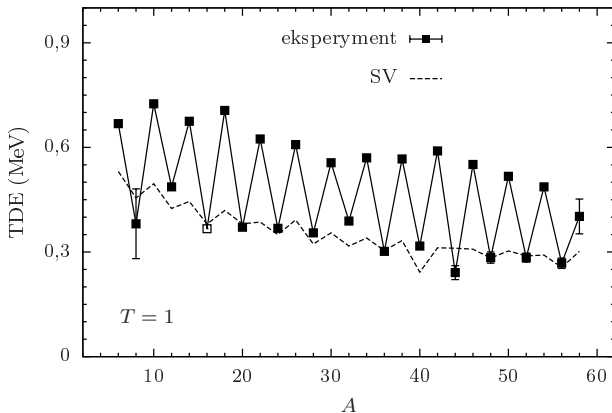
MDE =



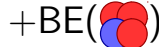
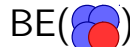
Brakuje łamania symetrii ładunkowej!



# Triplet Displacement Energy (TDE)



TDE =



Brakuje łamania niezależności ładunkowej!



# Klasyfikacja Henley'a-Millera

**Długozasięgowe** oddziaływanie kulombowskie, które wprowadza ISB, można rozłożyć na część **izoskalarną**, **izowektorową** i **izotensorową**.

Zgodnie z klasyfikacją Henley'a-Millera, **oddziaływanie krótkozasięgowe** (Skyrme'a), które jest typowo izoskalarne:

- **klasa I** – izoskalar

$$V_I^{NN}(i, j) = a + b\vec{\tau}(i) \cdot \vec{\tau}(j),$$



może być wzbogacone o:

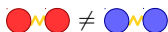
- **klasa II** – izotensor

$$V_{II}^{NN}(i, j) = c \left[ \tau_3(i)\tau_3(j) - \frac{1}{3}\vec{\tau}(i) \cdot \vec{\tau}(j) \right],$$



- **klasa III** – izowektor

$$V_{III}^{NN}(i, j) = d [\tau_3(i) + \tau_3(j)].$$



E.M. Henley, and G.A. Miller, in *Mesons in Nuclei* (North Holland, Amsterdam, 1979), p. 405

# Modyfikacja oddziaływania Skyrme'a

$$V_{ISB} = V_{Skyrme} + t^{II} \cdot V_{CIB} + t^{III} \cdot V_{CSB}$$

$$V_{CIB}: \text{blue} \text{---} \text{red} \neq \frac{1}{2} (\text{red} \text{---} \text{red} + \text{blue} \text{---} \text{blue})$$

$$V_{CSB}: \text{red} \text{---} \text{red} \neq \text{blue} \text{---} \text{blue}$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_{Sk}^{ISB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \underbrace{\left( t_0 (1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}_{\text{rzęd wiodący, człon centralny}} \\ & + \underbrace{\frac{1}{2} \left( t_1 (1 + x_1 \hat{P}_\sigma) \right) \left( \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right)}_{\text{kolejny rząd, człon powierzchniowy}} \\ & + \underbrace{\left( t_2 (1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \right) \vec{k}' \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{człon zależny od gęstości}} \\ & + \underbrace{\frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \rho_0^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}_{\text{człon zależny od gęstości}} \\ & + \underbrace{iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{człon spin-orbita}} \end{aligned}$$

Modyfikacje kolejnych rzędów rozwinięcia teorii efektywnej

- LO – człon centralny (objętościowy)
- NLO – człony gradientowe (powierzchniowe)

# Modyfikacja oddziaływania Skyrme'a

$$V_{ISB} = V_{Skyrme} + t^{II} \cdot V_{CIB} + t^{III} \cdot V_{CSB}$$

$$V_{CIB}: \text{blue} \text{---} \text{red} \neq \frac{1}{2} (\text{red} \text{---} \text{red} + \text{blue} \text{---} \text{blue})$$

$$V_{CSB}: \text{red} \text{---} \text{red} \neq \text{blue} \text{---} \text{blue}$$

Modyfikacje kolejnych rzędów rozwinięcia teorii efektywnej

- LO – człon centralny (objętościowy)
- NLO – człony gradientowe (powierzchniowe)

$$\begin{aligned} \hat{V}_{Sk}^{ISB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \underbrace{\left( t_0 (1 + x_0 \hat{P}_\sigma) + t_0^{II} (3\tau_1^{(3)} \tau_2^{(3)} - \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) + t_0^{III} (\tau_1^{(3)} + \tau_2^{(3)}) \right)}_{\text{rzęd wiodący, człon centralny}} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ & + \underbrace{\frac{1}{2} \left( t_1 (1 + x_1 \hat{P}_\sigma) \right)}_{\text{kolejny rząd, człon powierzchniowy}} \left( \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) \\ & + \underbrace{\left( t_2 (1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \right)}_{\text{człon zależny od gęstości}} \vec{k}' \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} \\ & + \underbrace{\frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \rho_0^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right)}_{\text{człon zależny od gęstości}} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ & + \underbrace{iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{człon spin-orbita}} \end{aligned}$$

# Modyfikacja oddziaływania Skyrme'a

$$V_{ISB} = V_{Skyrme} + t^{II} \cdot V_{CIB} + t^{III} \cdot V_{CSB}$$

$$V_{CIB}: \text{blue} \text{---} \text{red} \neq \frac{1}{2} (\text{red} \text{---} \text{red} + \text{blue} \text{---} \text{blue})$$

$$V_{CSB}: \text{red} \text{---} \text{red} \neq \text{blue} \text{---} \text{blue}$$

Modyfikacje kolejnych rzędów rozwinięcia teorii efektywnej

- LO – człon centralny (objętościowy)
- NLO – człony gradientowe (powierzchniowe)

$$\begin{aligned} \hat{V}_{Sk}^{ISB}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \underbrace{\left( t_0 (1 + x_0 \hat{P}_\sigma) + t_0^{II} (3\tau_1^{(3)} \tau_2^{(3)} - \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) + t_0^{III} (\tau_1^{(3)} + \tau_2^{(3)}) \right)}_{\text{rzęd wiodący, człon centralny}} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ & + \underbrace{\frac{1}{2} \left( t_1 (1 + x_1 \hat{P}_\sigma) + t_1^{II} (3\tau_1^{(3)} \tau_2^{(3)} - \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) + t_1^{III} (\tau_1^{(3)} + \tau_2^{(3)}) \right)}_{\text{kolejny rząd, człon powierzchniowy}} \left( \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 + \vec{k}'^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) \\ & + \underbrace{\left( t_2 (1 + x_2 \hat{P}_\sigma) + t_2^{II} (3\tau_1^{(3)} \tau_2^{(3)} - \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) + t_2^{III} (\tau_1^{(3)} + \tau_2^{(3)}) \right)}_{\text{człon zależny od gęstości}} \vec{k}' \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} \\ & + \underbrace{\frac{1}{6} t_3 (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \rho_0^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right)}_{\text{człon zależny od gęstości}} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ & + \underbrace{iW_0 (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}}_{\text{człon spin-orbita}} \end{aligned}$$



# Dopasowanie parametrów modelu

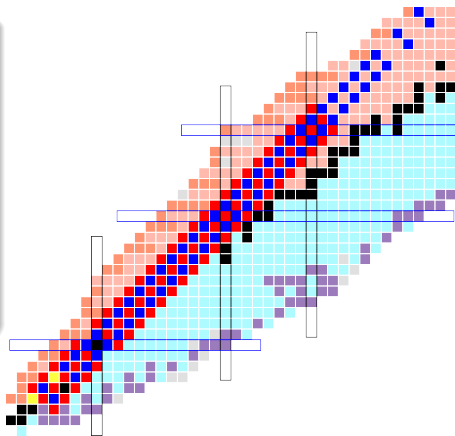
## Dane użyte do dopasowania

Obliczenia dla:

- dubletów izospinowych  $T = \frac{1}{2}$   
o masach  $A = 7 - 75$   
⇒ MDE
- trypletów izospinowych  $T = 1$   
o masach  $A = 6 - 58$   
⇒ MDE, TDE

Eksperymentalne energie wiązania zaczerpnięte z AME2016.

M. Wang *et al.*, CPC **41**, 030003 (2017).



# Dopasowanie parametrów modelu

## Dane użyte do dopasowania

### Obliczenia dla:

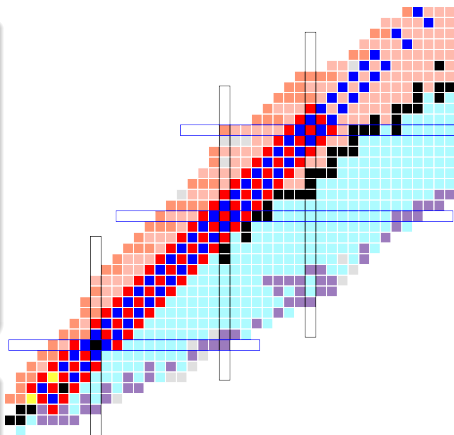
- dubletów izospinowych  $T = \frac{1}{2}$   
o masach  $A = 7 - 75$   
⇒ MDE
- trypletów izospinowych  $T = 1$   
o masach  $A = 6 - 58$   
⇒ MDE, TDE

Eksperymentalne energie wiązania zaczerpnięte z AME2016.

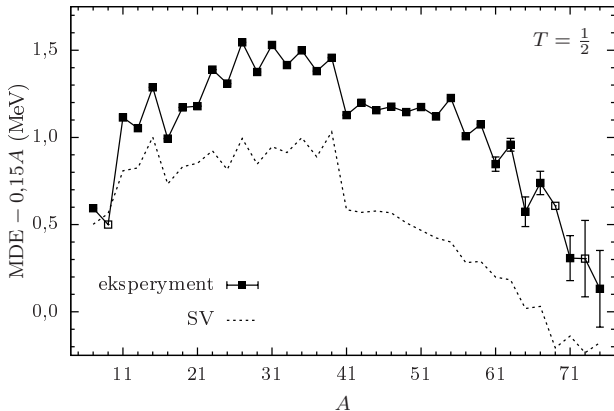
M. Wang *et al.*, CPC **41**, 030003 (2017).

## Implementacja i dopasowanie nowych członów

- P. Bączyk *et al.*, Acta Phys. Pol. B **48**, 259 (2017).
- N. Schunck *et al.*, Comp. Phys. Comm. **216**, 145 (2017).



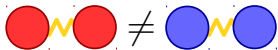
# Mirror Displacement Energy (MDE)



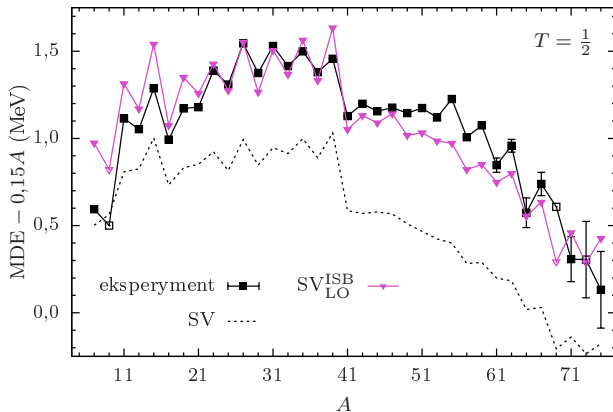
MDE =



Brakuje łamania symetrii  
ładunkowej!



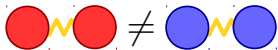
# Mirror Displacement Energy (MDE)



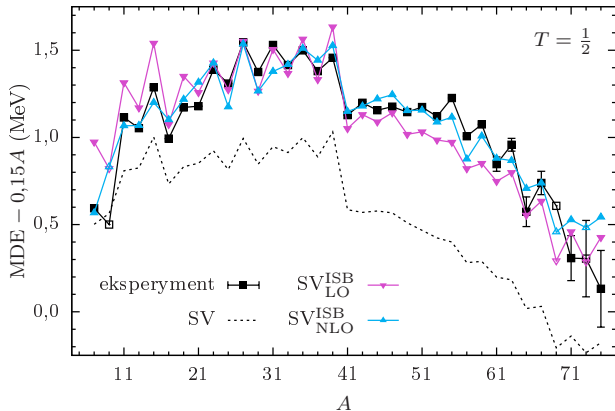
MDE =



Uwzględnienie łamania  
symetrii ładunkowej!

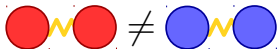


# Mirror Displacement Energy (MDE)



$$MDE = BE(\text{blue/red}) - BE(\text{red/blue})$$

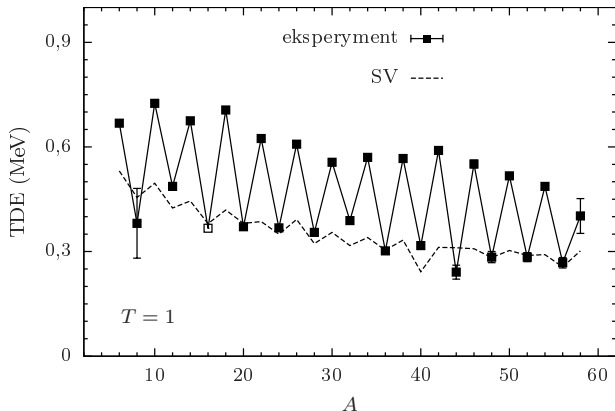
Uwzględnienie łamania symetrii ładunkowej!



Poprawa obliczeń MDE w kolejnym rzędzie rozwinięcia!

- P. Bączyk et al., *Phys. Lett. B* **778**, 178 (2018).
- P. Bączyk et al., *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **46**, 03LT01 (2019).

# Triplet Displacement Energy (TDE)



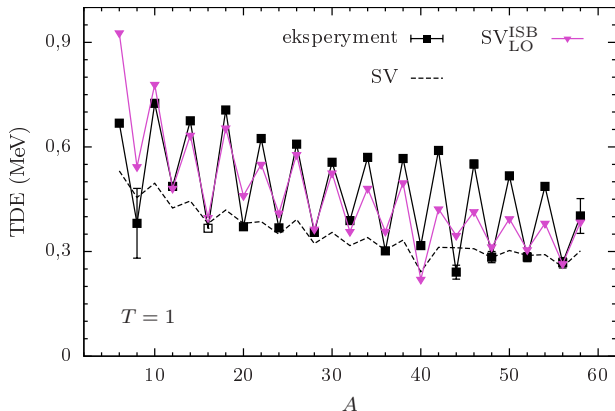
TDE =

$$\begin{aligned}
 & \text{BE}(\text{blue} \text{---} \text{red}) \\
 & + \text{BE}(\text{red} \text{---} \text{blue}) \\
 & - 2\text{BE}(\text{red} \text{---} \text{red})
 \end{aligned}$$

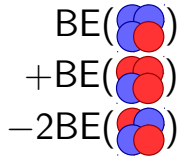
Brakuje łamania  
niezależności ładunkowej!

$$\text{blue} \text{---} \text{red} \neq \frac{1}{2} (\text{red} \text{---} \text{red} + \text{blue} \text{---} \text{blue})$$

# Triplet Displacement Energy (TDE)



TDE =



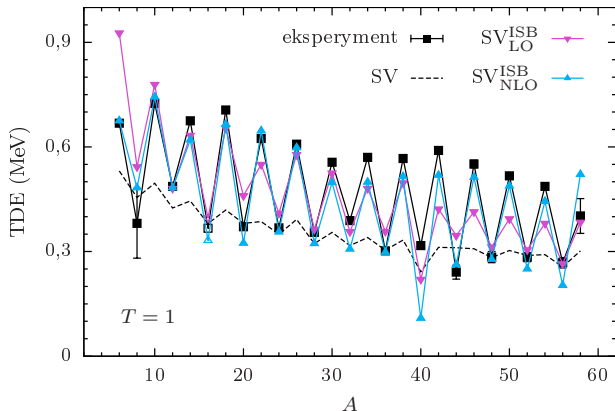
Uwzględnienie łamania  
niezależności ładunkowej!



Odtworzenie oscylacji TDE w rachunkach DFT!

- P. Bączyk *et al.*, *Phys. Lett. B* **778**, 178 (2018).
- P. Bączyk *et al.*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **46**, 03LT01 (2019).

# Triplet Displacement Energy (TDE)



$$\text{TDE} =$$

$$+ \text{BE}(\text{red-blue})$$

$$+ \text{BE}(\text{blue-red})$$

$$- 2\text{BE}(\text{red-red})$$

Uwzględnienie łamania  
niezależności ładunkowej!

$$\text{red-blue} \neq \frac{1}{2}(\text{red-red} + \text{blue-blue})$$

Odtworzenie oscylacji TDE w rachunkach DFT!

- P. Bączyk *et al.*, *Phys. Lett. B* **778**, 178 (2018).
- P. Bączyk *et al.*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **46**, 03LT01 (2019).



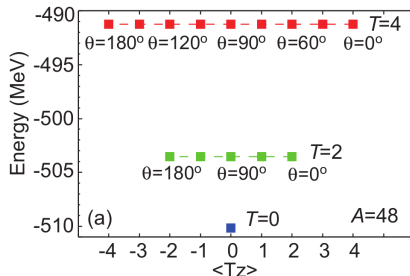
# Metoda *isocranking*

## Cel

stan  $|T = 1, T_z = 0 \rangle$

## Komplikacja

stan  $T_z = 0$  jest mieszanką 50-50  
stanów  $T = 0$  i  $T = 1$



K. Sato, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, and W. Satuła,  
Phys. Rev. C **88**, 061301(R) (2013).

## Narzędzie – *isocranking*

- przybliżone rzutowanie na izospin w formalizmie mieszania *pn*
- analogiczny do modelu *cranking*
- opis stanu  $|T = 1, T_z = 0 \rangle$  przez ewolucję rozwiązań  $|T = 1, T_z = \pm 1 \rangle$

# Stałe sprzężenia ISB dla parametryzacji SV

**Pierwiastek z odchylenia kwadratowego** wyników DFT i wartości eksperymentalnych dla MDE i TDE (keV):

	Coulomb	ISB LO	ISB NLO
MDE $T = \frac{1}{2}$	547	152	111
MDE $T = 1$	1029	336	182
TDE	175	96	56

**Dopasowane stałe sprzężenia w LO i NLO**

$t_0$  w  $\text{MeV fm}^3$ , a  $t_1$  i  $t_2$  w  $\text{MeV fm}^5$ :

class II		class III	
LO	NLO	LO	NLO
$t_0^{\text{II}} = 3.7 \pm 0.4$	$t_0^{\text{II}} = -18 \pm 2$	$t_0^{\text{III}} = -7.3 \pm 0.3$	$t_0^{\text{III}} = 11 \pm 2$
$t_{0;\text{SLy4}}^{\text{II}} = 5.2 \pm 0.8$	$t_1^{\text{II}} = 24 \pm 2$	$t_{0;\text{SLy4}}^{\text{III}} = -5.4 \pm 0.2$	$t_1^{\text{III}} = -14 \pm 4$
$t_{0;\text{SkM}^*}^{\text{II}} = 5.1 \pm 0.8$	$t_2^{\text{II}} = 0.6 \pm 0.8$	$t_{0;\text{SkM}^*}^{\text{III}} = -5.5 \pm 0.2$	$t_2^{\text{III}} = -7.8 \pm 0.8$

Stałe sprzężenia nie mają interpretacji fizycznej.

P. Lepage, arXiv:nucl-th/9706029.

# Porównanie rachunków DFT i GFMC

## Potencjał $NN$

np. AV18

- z członami CSB i CIB

↓  
teoria efektywna  
↓

## Oddziaływanie Skyrme'a

- oddziaływanie typu  $\delta$ 
  - człon centralny
  - człony gradientowe
  - człon zależny od gęstości
  - człon spin-orbita
- 10 wolnych parametrów
- z członami ISB:



modele *ab initio*,  
np. GFMC  
→  
dla lekkich jąder

## Obliczenia DFT

rachunki dla lekkich  
multipletów  
z wykorzystaniem  
członów ISB w NLO

teoria jądrowego  
funkcjonału gęstości  
→

## Opis jąder atomowych

np. energii wiązania,  
MDE, TDE

↑  
obliczenia  
↓

## Parametryzacje

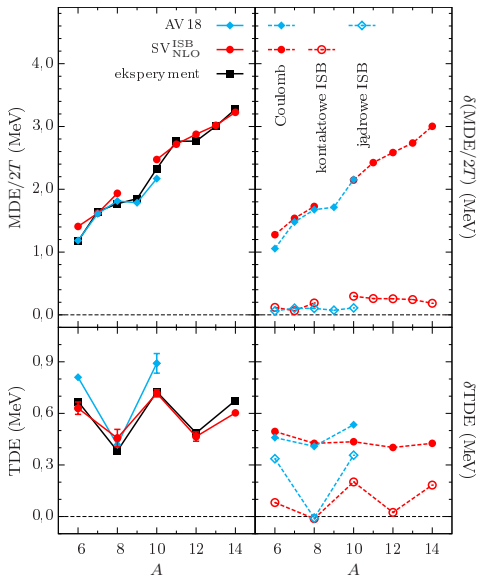
np. SV,  $SV_{LO}^{ISB}$ ,  $SV_{NLO}^{ISB}$

↑  
dopasowanie  
↓

## Funkcjonał gęstości energii Skyrme'a

+ energia kinetyczna  
+ wkład kulombowski

# Fizyczny charakter nowo dodanych członów



Rachunki Monte Carlo oparte na funkcjach Greena (GFMC)

- potencjał AV18 (z członami CIB i CSB) oraz oddziaływanie 3N
- bardzo dokładne

● koszt numeryczny rośnie wykładniczo z liczbą nukleonów

R.B. Wiringa *et al.*, *Phys. Rev. C* **51**, 38 (1995).

J. Carlson *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1067 (2015).

Nowe człony ISB dodane do DFT modelują oddziaływanie silne NN!

P. Bączyk *et al.*, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **46**, 03LT01 (2019).

# Obliczenia wychodzące poza przybliżenie pola średniego

## DFT

teoria funkcjonału  
gęstości



wyznacznik Slatera  $|\Phi\rangle$



## Własności

energie wiązania,  
MDE, TDE

↓  
rzutowanie na *dobre* liczby kwantowe  
↓

## MR-DFT

wieloreferencyjne  
DFT

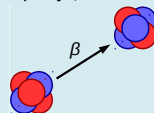


$$|\Phi; IM; T_z\rangle^{(i)} = \sum_{K, T \geq |T_z|} a_{KT}^{(i)} \hat{P}_{T_z T_z}^T \hat{P}_{MK}^I |\Phi\rangle$$



## Spektroskopia

rozpady  $\beta$



↓  
mieszanie konfiguracji  
↓

## NCCI

bezdzeniowe  
mieszanie  
konfiguracji



$$|\Psi; IM; T_z\rangle^{(k)} = \sum_{ij} c_{ij}^{(k)} |\Phi_j; IM; T_z\rangle^{(i)}$$



energie stanów  
wzbudzonych

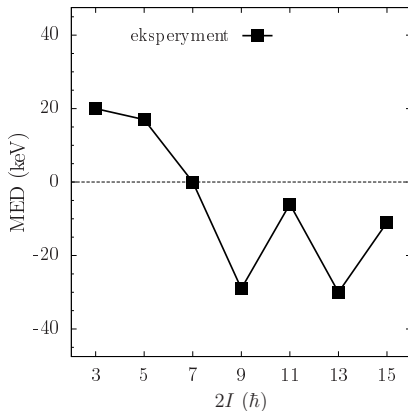
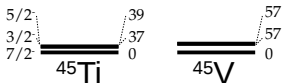
# Mirror Energy Difference (MED)

15/2: ————— 3015      ————— 3004

13/2: ————— 2657      ————— 2626

11/2: ————— 1468      ————— 1462

9/2: ————— 1353      ————— 1324



$$\text{MED}(I) = E^*(I, ^{45}\text{V}) - E^*(I, ^{45}\text{Ti})$$

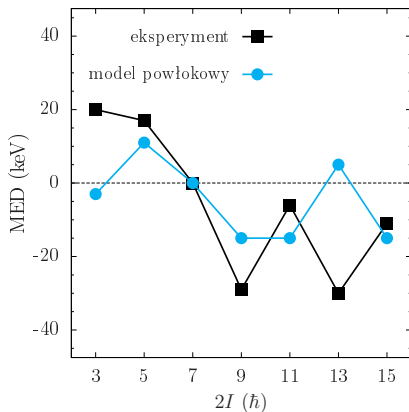
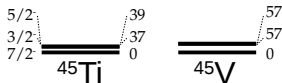
# Mirror Energy Difference (MED)

15/2: ————— 3015      ————— 3004

13/2: ————— 2657      ————— 2626

11/2: ————— 1468      ————— 1462

9/2: ————— 1353      ————— 1324



M. A. Bentley *et al.*, *Phys. Rev. C* **92**, 024310 (2015).

$$\text{MED}(I) = E^*(I, {}^{45}\text{V}) - E^*(I, {}^{45}\text{Ti})$$

# Mirror Energy Difference (MED)

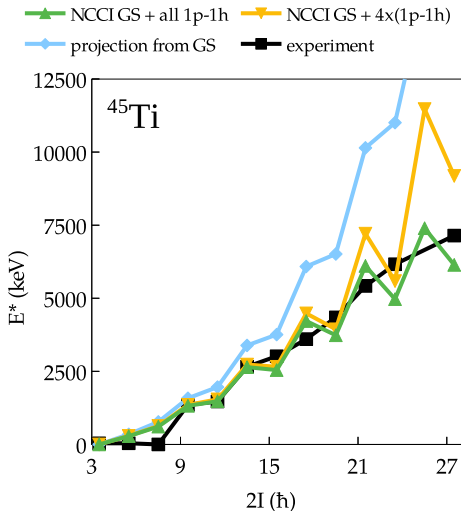
wyznacznik Slatera  $|\Phi\rangle$

rzutowanie na *dobre* liczby kwantowe

$$|\Phi; IM; T_z\rangle^{(i)} = \sum_{K, T \geq |T_z|} a_{KT}^{(i)} \hat{P}_{T_z T_z}^T \hat{P}_{MK}^I |\Phi\rangle$$

mieszanie konfiguracji

$$|\Psi; IM; T_z\rangle^{(k)} = \sum_{ij} c_{ij}^{(k)} |\Phi_j; IM; T_z\rangle^{(i)}$$



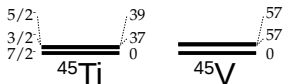


# Mirror Energy Difference (MED)

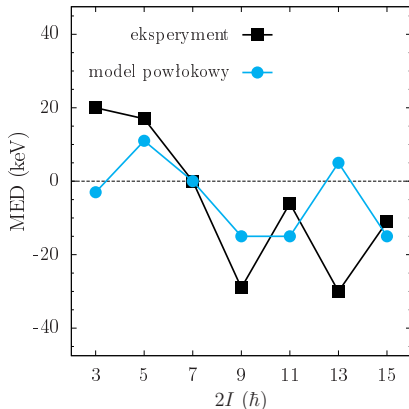
15/2: ————— 3015 ————— 3004

13/2: ————— 2657 ————— 2626

11/2: ————— 1468 ————— 1462  
9/2: ————— 1353 ————— 1324



$$\text{MED}(I) = E^*(I, ^{45}\text{V}) - E^*(I, ^{45}\text{Ti})$$



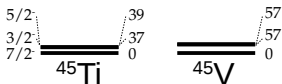
M. A. Bentley *et al.*, *Phys. Rev. C* **92**, 024310 (2015).

# Mirror Energy Difference (MED)

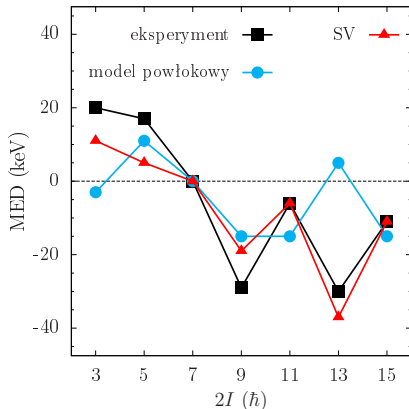
15/2: ————— 3015 ————— 3004

13/2: ————— 2657 ————— 2626

11/2: ————— 1468 ————— 1462  
9/2: ————— 1353 ————— 1324



$$\text{MED}(I) = E^*(I, ^{45}\text{V}) - E^*(I, ^{45}\text{Ti})$$



M. A. Bentley *et al.*, *Phys. Rev. C* **92**, 024310 (2015).

Pierwsze obliczenia MED w formalizmie opartym o DFT!

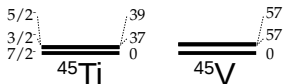
praca jest kontynuowana

# Mirror Energy Difference (MED)

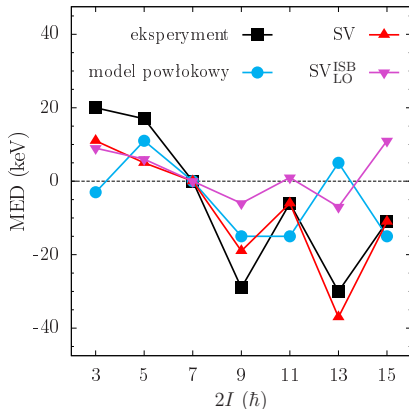
15/2: ————— 3015 ————— 3004

13/2: ————— 2657 ————— 2626

11/2: ————— 1468 ————— 1462  
9/2: ————— 1353 ————— 1324



$$\text{MED}(I) = E^*(I, ^{45}\text{V}) - E^*(I, ^{45}\text{Ti})$$



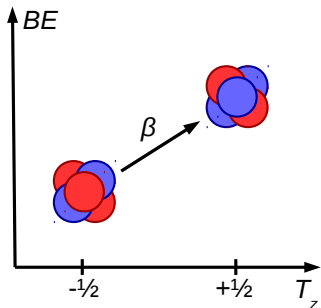
M. A. Bentley *et al.*, *Phys. Rev. C* **92**, 024310 (2015).

Pierwsze obliczenia MED w formalizmie opartym o DFT!

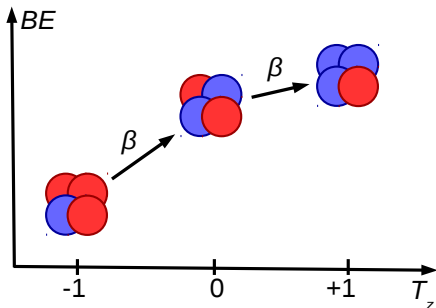
praca jest kontynuowana

# Badanie rozpadów $\beta$ (wraz z M. Konieczką)

przejścia  
w jądrach zwierciadlanych



przejścia superdozwolone  
 $0^+ \rightarrow 0^+$



# Badanie rozpadów $\beta$ (wraz z M. Konieczką)

## Współczynnik zmieszania

$$\alpha_{\text{ISB}} = 1 - \sum_i \left| b_{iT=|T_z|}^{(nl;\varphi)} \right|^2$$

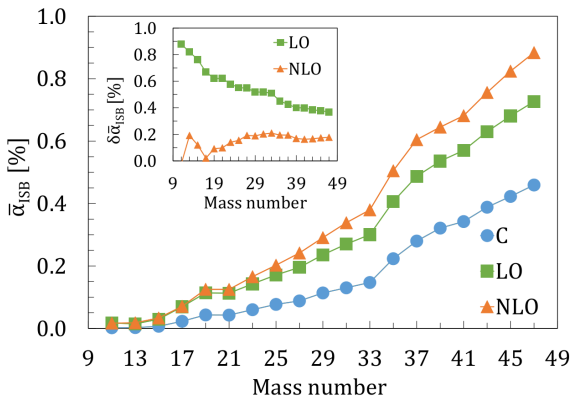
## Wkład kontaktowych członów ISB

- do MDE: 7-8% wkładu kulombowskiego
- do  $\alpha_C$ : 40-90% wkładu kulombowskiego

Człony ISB są istotne przy opisie funkcji falowych!

M. Konieczka, P. Bączyk, W. Satuła,  
arXiv:1909.09350.

$$|n; \varphi; IM; T_z\rangle = \sum_{i, T \geq |T_z|} b_{iT}^{(nl;\varphi)} |\varphi; IM; TT_z\rangle^{(i)}$$

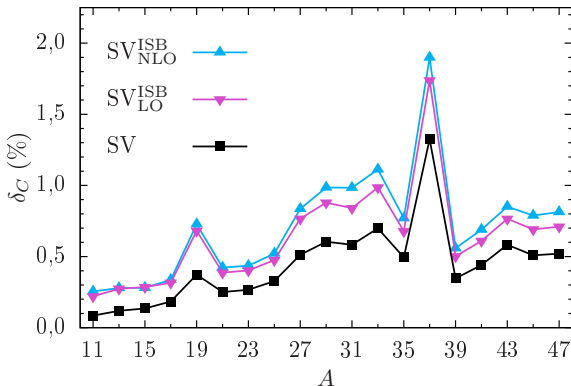


# Badanie rozpadów $\beta$ (wraz z M. Konieczką)

Rozpad  $\beta$  Fermiego w jądrach zwierciadlanych

$$|M_F| = \left| \left\langle T \approx \frac{1}{2}, T_z = +\frac{1}{2} \left| \hat{T}_+ \right| T \approx \frac{1}{2}, T_z = -\frac{1}{2} \right\rangle \right|$$

$$|M_F|^2 = 1 - \delta_C$$



Człony ISB są istotne przy opisie rozpadów  $\beta$ !

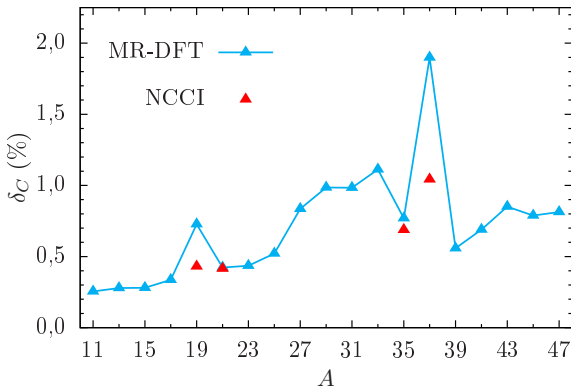
M. Konieczka, P. Bączyk,  
W. Satuła, arXiv:1909.09350.

# Badanie rozpadów $\beta$ (wraz z M. Konieczką)

Rozpad  $\beta$  Fermiego w jądrach zwierciadlanych

$$|M_F| = \left| \left\langle T \approx \frac{1}{2}, T_z = +\frac{1}{2} \left| \hat{T}_+ \right| T \approx \frac{1}{2}, T_z = -\frac{1}{2} \right\rangle \right|$$

$$|M_F|^2 = 1 - \delta_C$$



Człony ISB są istotne przy opisie rozpadów  $\beta$ !

M. Konieczka, P. Bączyk, W. Satuła, arXiv:1909.09350.

Systematyczna poprawa wyników dzięki NCCI!

mieszanie konfiguracji o tym samym  $K$

# Badanie rozpadów $\beta$ (wraz z M. Konieczką)

Rozpad  $\beta$  Fermiego w jądrach zwierciadlanych

dane doświadczalne dostępne dla  
 $A = 19, 21, 35$  i  $37$

B. Fenker *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 062502 (2018).

Testowanie Modelu Standardowego

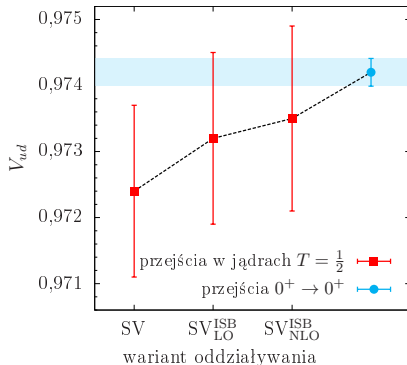
Mieszanie kwarków opisane jest macierzą Cabibbo-Kobayashiego-Maskawy (CKM):

$$\begin{pmatrix} d' \\ s' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{ud} & V_{us} & V_{ub} \\ V_{cd} & V_{cs} & V_{cb} \\ V_{td} & V_{ts} & V_{tb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ s \\ b \end{pmatrix}$$

Warunek unitarności:

$$|V_{ud}|^2 + |V_{us}|^2 + |V_{ub}|^2 = 0,9994(5)$$

M. Tanabashi *et al.*, (Particle Data Group),  
*Phys. Rev. D* **98**, 030001 (2018).



Nasz wynik zgodny z obliczeniami dla przejść  $0^+ \rightarrow 0^+$ !

M. Konieczka, P. Bączyk, W. Satuła, arXiv:1909.09350.



# Przewidywania mas jąder neutronowo-deficytowych

$$BE(T, T_z = -T) = MDE + BE(T, T_z = +T)$$

Jądro	Przewidywanie	Mass excess (keV)		
		AME2012	AME2016	Zhang <i>et al.</i>
<sup>52</sup> Co	-34370(40)	-33990(200)#	-34361.0(84)	
<sup>56</sup> Cu	-38650(40)	-38240(200)#	-38643(15)	
<sup>73</sup> Rb	-46100(80)	-46080(100)#	-46080(200)#	
<sup>44</sup> V	-23710(40)	-24120(180)	-24120(180)	-23827(20)
<sup>86</sup> Ru	-40310(190)		-39770(400)#	
<sup>82</sup> Mo	-40910(190)		-40370(400)#	

- P. Bączyk *et al.*, *Phys. Lett. B* **778**, 178 (2018).
- M. Vilén *et al.*, praca zaakceptowana w *Phys. Rev. C*.
- Y.H. Zhang *et al.*, *Phys. Rev. C* **98**, 014319 (2018).

# Podsumowanie

- 1) Wprowadzenie członów ISB do oddziaływania Skyrme'a, ich implementacja w kodzie numerycznym HFODD oraz dopasowanie nowych stałych sprzężenia
- 2) Obliczenia MDE i TDE w wiodącym i kolejnym rzędzie rozwinięcia teorii efektywnej
- 3) Zbadanie fizycznego charakteru nowych członów
- 4) Wyjście poza przybliżenie pola średniego: obliczenia MED i rozpadów  $\beta$
- 5) Wykonanie przewidywań masowych
- 6) Badanie funkcjonału wyprowadzonego z modelu sprzężenia kwarków i mezonów

# Współpracownicy

**Wojciech Satuła, Maciej Konieczka**  
Uniwersytet Warszawski

**Jacek Dobaczewski**  
University of York

**Antony Thomas, Kay Martinez, Sofija Antić**  
University of Adelaide

**Pierre Guichon**  
CEA Saclay

**Jirina Stone**  
University of Tennessee

