

Héjmodelltér-építő számítógépes program U(4)-es formalizmusban

Készítette:

Riczu Gábor

Fizikus MSc-hallgató

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők:

Dr. Darai Judit

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

Dr. Cseh József

Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete

2012.11.11

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Irodalmi áttekintés	5
2.1. A héjmodell	5
2.2. Az L-S csatolás	6
2.3. Térbeli szabadsági fokok: Az SU(3) modell	7
2.4. Spin-zospin szabadsági fokok: Szupermultipliketek	9
2.5. Az antiszimmetria követelménye, és hamis gerjesztések	11
3. Saját vizsgálatok	12
3.1 A héjmodellter építés lépései.....	12
3.2 A héjmodellter-építő program leírása.....	19
3.2.1 A program szerkezetábrája	21
3.2.2 Alprogramok (Szubrutinok) leírása.....	24
3.2.3 Tesztelés	25
4. Összefoglalás	27
5. Köszönetnyilvánítás.....	28
6. Felhasznált irodalom	29

1. Bevezetés

Dolgozatomban egy héjmodellteret építő programot mutatok be.

A héjmodell az atommagszerkezet egyik alapvető modellje, talán a legsikeresebb. Bevezetői Nobel-díjat kaptak az alapötletért. A magot, mint protonok és neutronok együttesét írja le, melyek egy átlagos, az összes nukleon által létrehozott térben mozognak. Pontosabban az abban kialakuló egyrészecske-állapotokat foglalják el, és egymással is kölcsönhatnak, azon túl is, amit az átlagtér képes tekintetbe venni. U.n. mikroszkópikus magmodell, ami a nukleonok szabadsági fokát egyenként veszi tekintetbe. Mégis elég egyszerű leírást eredményez, annak köszönhetően, hogy az egyrészecske-állapotok csoportosulnak, héjakat alkotnak. Ha egy héj teljesen betöltődik, akkor az azt alkotó nukleonok csupán az átlagtérhez járulnak hozzá, ezért részletes leírásukra nincs szükség. Ennélfogva a tekintetbe veendő szabadsági fokok száma kezelhetően mérsékelt marad.

Fontossága és sikere miatt érthetően többféle héjmodell létezik. Talán a leginkább szokásos felosztásuk az impulzusmomentum-csatolás szerint tesz közöttük különbséget. A protonok és a neutronok $s=1/2$ spinnel rendelkeznek, és természetesen a térbeli mozgásukhoz is tartozik impulzusmomentum (l). A soknukleon-rendszer impulzusmomentumát előállíthatjuk úgy is, hogy elsőként összevesszük az egyes nukleonok pályamomentumát (j), és ezeknek vesszük az eredőjét (J). Az ilyen modellt j - j csatolású modellnek hívják. Eljárhatunk azonban úgy is, hogy a nukleonok pályamomentumát csatoljuk össze (L), és ugyanezt tesszük a spinekkel (S), és végül ezek eredőjeként áll elő a mag teljes impulzusmomentuma (J). Ez az L - S csatolás modellje. Dolgozatomban egy olyan számítógép-programról írok, ami L - S csatolt héjmodell terét építi.

A debreceni magfizika kutatásban már évtizedek óta jelen van az algebrai modellezés hagyománya. Az ATOMKI-ban kollektív (folyadékcsepp), és fűrt- (klaszter) modelleket is régóta alkalmaznak a szerkezetvizsgálatban. Héjmodell-számítás is történt, de lényegesen kisebb súllyal. Vizsgálják továbbá ezen alapvető szerkezetmodellek összefüggéseit is. Az utóbbi években hasonló kutatások honosodtak meg az Egyetem Kísérleti Fizikai Tanszékén is. Ezen a területen dolgozik a két témavezetőm.

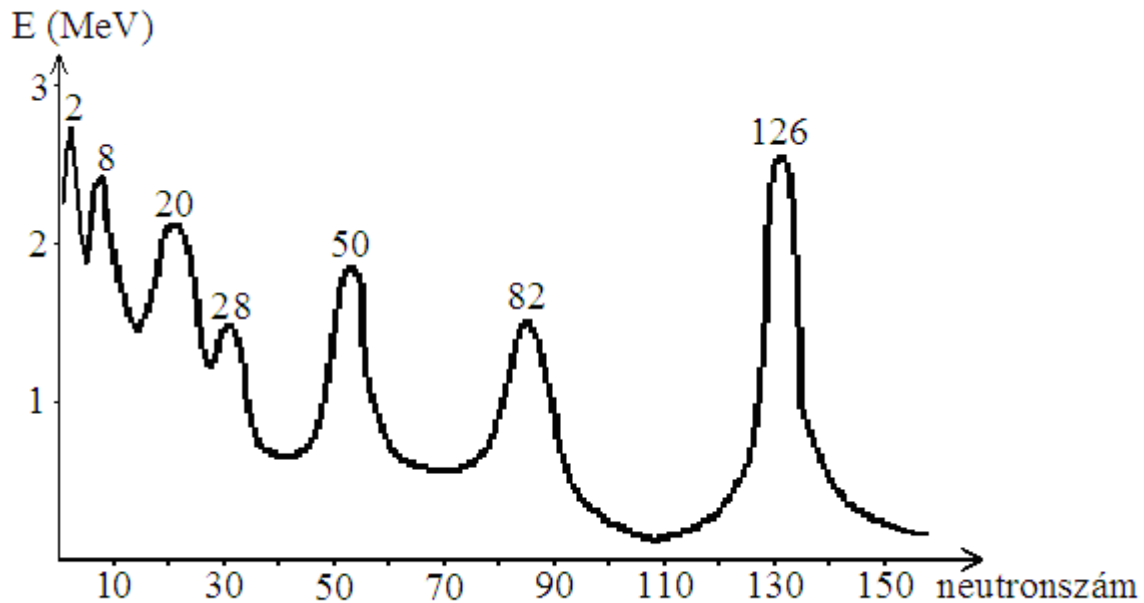
Diákköri dolgozatom témája egy olyan számítógép-program szerkesztése, ami nagy héjmodellteret képes építeni. A dolog közvetlen előzményei a következőkben foglalhatók össze. A nukleonok térbeli viselkedését az Elliott által bevezetett $U(3)$ modell segítségével írjuk le [1]. A spin-izospin szabadsági fokokat Wigner $U(4)$ -es (szupermultiplét) szimmetriája adja [2]. A soknukleon-rendszer modellezésében talán a legnehezebb feladványt az jelenti, hogy a nukleonokra kötelező Pauli-féle kizárási elvet hogyan tudjuk átültetni a gyakorlatba. Ennek a feladatnak a megoldásában (is) komoly segítséget jelent az algebrai modellezés, ami a szimmetriatulajdonságokat jól láthatóvá teszi, és a Pauli-elv is az: a teljes hullámfüggvényre kirótt antiszimmetria követelmény.

Korábban az egyik témavezetőm (Cseh J.) szerkesztett egy olyan programot, ami a térbeli részt automatizálva kezelte, de a spin-izospin szabadsági fokok $U(4)$ -es szimmetriáját, meghagyta kézi számolásra [3]. Ebből adódóan nem tudott nagy méretű modellteret programozva szerkeszteni. Én a BSc szakdolgozatom témájaként az $U(4)$ -es szimmetriákkal szükséges műveletek kezelésére írtam programot [4]. A jelen diákköri dolgozatomban azt mutatom be, hogy ezen előzmények alapján hogyan fejlesztettem olyan programot, ami képes nagyméretű héjmodellter (bázisállapotainak) a megszerkesztésére. Ez számos kisebb részfeladat megoldását követelte meg, valamint az előálló programrendszer összeszervezését a feladat felhasználóbarát megoldása érdekében. A programozást FORTRAN nyelven végeztem, mely választást a korábbi munkákhoz való illeszkedés követelt meg.

2. Irodalmi áttekintés

2.1 A héjmodell

Miután felfedezték az atommagot, sokféle mérést végeztek rajtuk, többek között mérték, hogy mi az a legkisebb energia, amivel gerjeszteni lehet az egyes magokat. Kellően sok mérés után a következő görbét kapták.

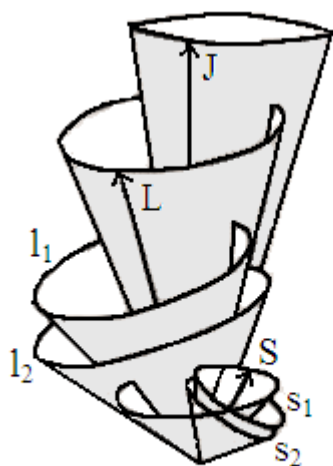


1. ábra

(Az ábrán a gerjesztési energia van ábrázolva a neutrons number függvényében, de lehetett volna a protonszámot is, mivel arra is egy ilyen görbe igaz.) Feltűnő, hogy a 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 neutronnal rendelkező magok különösen nehezen gerjeszthetők, vagyis stabilak. Ezeket a számokat mágikus számoknak, az ilyen proton vagy neutron számmal rendelkező magokat pedig mágikus magoknak nevezték el. Ezen eredmény magyarázásához feltételezték, hogy a nukleonok egy átlagos potenciáltérben mozognak egymástól függetlenül, úgynevezett egyrészecske állapotokat betöltve. Ezek az állapotok pedig különböző energiájú héjakba csoportosulnak, ahol két szomszédos héj között viszonylag nagy az energiakülönbség, ezért nehezen gerjeszthetők. A valódi potenciál közelítésére többféle potenciált lehet használni, pl.: Woods-Saxon, derékszögű, vagy harmonikus oszcillátor potenciált. (Az utóbbiról később még lesz szó.) Bármelyiket is próbálták ki, sohasem kapták vissza a mágikus számokat, legfeljebb csak az első néhányat. A megoldást az jelentette, hogy figyelembe vették a nukleonok spin-pálya kölcsönhatását, ami azt eredményezte, hogy felhasadtak a nívók, és átrendeződtek, visszaadva ezzel a mágikus számokat. [5]

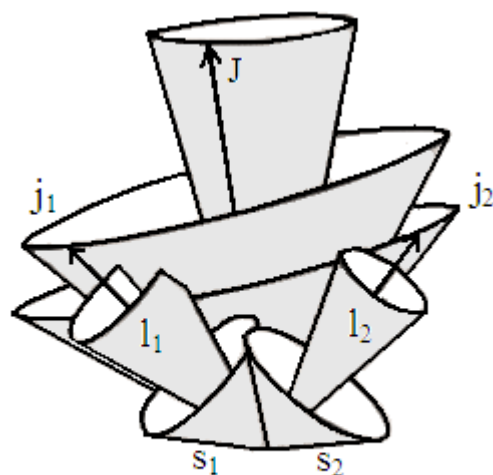
2.2 Az L-S csatolás

Az atommagot alkotó nukleonok rendelkeznek pályaimpulzusmomentummal (l), és spinmomentummal (s), amiknek az eredője adja a teljes momentumot (J). Tudjuk, hogy a teljes momentum egzaktul megmaradó mennyiség, de a másik kettőről ez már nem mondható el. A nukleonok spinje illetve pályamomentumai között kölcsönhatás (csatolás) van, ami az energiát valamekkora mértékben megváltoztatja. Azt hogy mennyire, függ az atommag tömegszámától. Körülbelül $A=40$ -ig az egyes nukleonok spin- és pályamomentuma között gyengébb a csatolás, mint a nukleonok spinmomentumai, és pályamomentumai között, ezen érték felett pedig éppen fordítva van. Tehát a spin- és pályamomentumokat eredő momentummá a bevezetőben írtak szerint kétféleképpen adhatjuk össze. Az L-S, más néven Russel-Saunders csatolás az, amikor összeadjuk a nukleonok pályamomentumait egy eredő L-é, majd összeadjuk a spinmomentumaikat egy eredő S-é, majd ezeket összeadva megkapjuk J-t. Tehát ez a modell kb. 40-es tömegszámig alkalmazható. (Úgy is lehet mondani, hogy az L és az S jó kvantumszámok) J-J csatolásban összeadjuk az egyes nukleonok spinjét és pályamomentumát j_i -ké, majd ezeket összeadva kapjuk J-t. (Itt a j_i -k a jó kvantumszámok) Ez a modell $A=40$ felett hasznos. [6]



Az L-S csatolás vektorsémája

2. ábra



A J-J csatolás vektorsémája

3. ábra

2.3 Térbeli szabadsági fokok:

Az SU(3) modell

Az SU(3) héjmodellben L-S csatolást és harmonikus oszcillátor potenciált használnak. Itt a hullámfüggvénynek két része van. Egyik a térbeli, másik a spin-izospin térbeli viselkedést írja le. A spin-izospin részt SU(4), a térbeli részt (háromdimenziós harmonikus oszcillátort) pedig az SU(3) csoport reprezentációi jellemzik bizonyos mértékben. [7] Ebben a fejezetben csak a térbeli részről lesz szó.

A harmonikus oszcillátor energiáit a következő képlettel számolhatjuk:

$$E = hf \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

$$N = n_x + n_y + n_z$$

ahol n_x, n_y, n_z az x, y, z tengelyre eső oszcillátor kvantumok száma, amiket az $[n_1, n_2, n_3]$ alakú U(3)-as reprezentációk írnak le. Ezekből a következőképpen számolhatók az SU(3) csoport kvantumszámait, a λ és a μ :

$$\lambda = n_z - n_x, \mu = n_x - n_y$$

A (λ, μ) reprezentáció nagyon hasznos, hiszen viszonylag egyszerű módon kiszámolhatjuk a segítségével az impulzusmomentumot [8]:

$$\text{Ha } K_L \neq 0$$

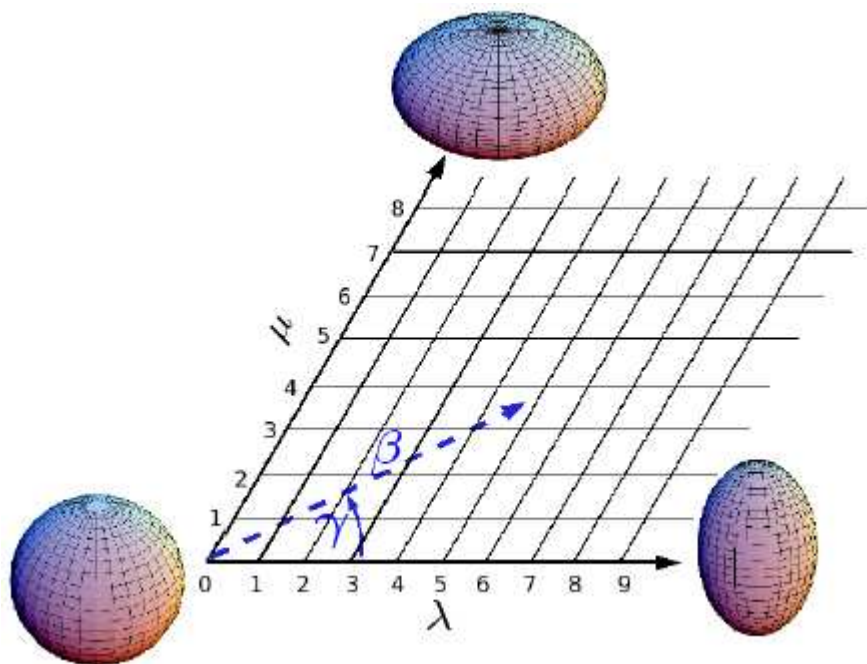
$$L = K_L, K_L + 1, K_L + \max(\lambda, \mu)$$

$$K_L = \min(\lambda, \mu), \min(\lambda, \mu) - 2, \dots, 1, \text{ vagy } 0$$

$$\text{Ha } K_L = 0$$

$$L = \max(\lambda, \mu), \max(\lambda, \mu) - 2, 1, \text{ vagy } 0$$

A (λ, μ) reprezentáció segítségével a mag térbeli alakjára is következtethetünk, amit a lenti ábra mutat. Látható, hogy ha λ és μ 0, akkor gömb alakú a mag, ha μ nagyobb, akkor belapult mint egy zsemle, ha pedig λ nagyobb, akkor megnyúlt, mint egy tojás.



4. ábra

A λ és μ kvantumszámokból számolható az úgynevezett másodrendű Casimir érték is, melynek segítségével magállapotok energiasajátértékeit lehet számolni. Értéke a következő:

$$c_2(\lambda, \mu) = \lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu)$$

2.4 Spin-izospin szabadsági

fokok:

Szupermultiplettek

Egy nukleonrendszer, legyen az akár egy atommag, vagy csak egy héjon lévő nukleonok rendszere, a térbeli szabadsági fokokon kívül rendelkezik spin-izospin, más néven belső szabadsági fokokkal. Egy atommagot ugyan különböző részecskék, protonok és neutronok építenek fel, de ezek nagyon hasonló tulajdonságúak. A tömegük majdnem azonos, és a magerőt is hasonlóan érzik, főleg kis tömegszám esetén. Ezek alapján azt lehet mondani, hogy nem két különböző részecskéről van szó, hanem egy részecske, a nukleon két sajátállapotáról. Ennek leírására bevezették az izospin fogalmát. Megállapodás szerint a proton izospinje $-1/2$, a neutroné $1/2$, amit az $SU(2)$ csoport ír le. Kísérletekből tudjuk, hogy a nukleonok rendelkeznek saját impulzusmomentummal, azaz spinnel. A spin értéke csak $1/2$ vagy $-1/2$ lehet, ami szintén az $SU(2)$ csoporttal írható le. Wigner Jenő egyesítette ezt a kettőt, és az így adódó $SU(4)$ csoportot használta a könnyű magok jellemzésére, melyek irreducibilis reprezentációi úgynevezett „szupermultipletteket” alkotnak.

Egy ilyen reprezentációnak, vagy szupermultipletnek a szimmetriái, egy n nukleonból álló rendszer spin-izospin szabadsági fokait adják meg. A szimmetriák jellemzésére Young-ábrákat használunk, amik négy sorból állnak, mivel 4 nukleon egyrészecske állapot létezik. Ha n_i -vel jelöljük az i -edik sor hosszát (a sort alkotó négyzetek számát), akkor igazak az alábbiak.

$$n_1 \geq n_2 \geq n_3 \geq n_4 \quad n = n_1 + n_2 + n_3 + n_4$$

Ahol n_1 jelöli a protont $1/2$ spinnel, n_2 a neutront $1/2$ spinnel, n_3 a protont $-1/2$ spinnel, és n_4 a neutront $-1/2$ spinnel. Egy Young-ábrához három kvantumszám tartozik, amit alábbiak szerint definiálunk:

$$P = \frac{1}{2}(n_1 + n_2 - n_3 - n_4)$$

$$P' = \frac{1}{2}(n_1 - n_2 + n_3 - n_4)$$

$$P'' = \frac{1}{2}(n_1 - n_2 - n_3 + n_4)$$

Ahol P a teljes spin, P' a teljes izospin, P'' a teljes proton spin, és teljes neutron spin különbsége. Tehát P , P' , P'' az $SU(4)$ irreducibilis reprezentációk, vagy supermultiplettek kvantumszámai. [9]

2.5 Az antiszimmetria követelménye, és hamis gerjesztések

A Pauli-elv kimondja, hogy minden azonos fermionokból álló rendszer hullámfüggvényének antiszimmetrikusnak kell lennie. Természetesen minden magmodellnek, így a héjmodellnek is eleget kell tennie ennek az elvnek, amit az alábbiak szerint valósít meg. Az 1, 2, 3, 4, ... hf energiájú héjakon a térbeli egyrészecske állapotok száma 1, 3, 6, 10, Ha egy héjon p részecske foglal helyet, akkor a hullámfüggvény térbeli szimmetriáit az S_p permutációs csoport jellemzi, melynek irreducibilis reprezentációit a $[i_1, i_2, \dots, i_n]$, $i_1 \geq i_2 \geq \dots \geq i_n$, $i_1 + i_2 + \dots + i_n = p$ Young ábrák adják. Ezek a Young-ábrák képezik az $U(n)$ csoport ábrázolásait is. ($U(3)$ az $U(n)$ csoport alcsoportja, ahol n , az egyrészecske-állapotok száma az adott héjon.) Mivel a hullámfüggvény antiszimmetrikus, $U(4)$ és az $U(n)$ csoportok ábrázolásai egymás adjungáltjai. Ez a Young-ábrák nyelvén a sorok és oszlopok felcserélését jelenti. Vagyis a hullámfüggvény antiszimmetriájáról gondoskodunk azáltal, hogy adott spin- és izospin-koordináták mellett az $U(3)$ csoport azon reprezentációit tekintjük, amelyek olyan $U(n)$ Young-ábrához tartoznak, amit az $U(4)$ ábrázolásnak adjungálásával kapunk. Ha így járunk el, akkor $U(3)$ -as reprezentációk mentesek lesznek a Pauli tiltott állapotoktól.

A héjmodell $U(3)$ -as reprezentációi (bázisállapotai) ugyan már a Pauli-elvnek megfelelnek, de még tartalmazhatnak tömegközépponti, más néven hamis gerjesztéseket, amiktől meg kell szabadulnunk, mivel a magok állapotait a tömegközéppontjukhoz rögzített rendszerükben akarjuk leírni. Egy adott $[n_1, n_2, n_3]$ $U(3)$ -as bázisállapotot csak akkor tartunk meg, ha annak héjmodellbázisbeli multiplicitása nagyobb, mint a hamis gerjesztések produkálta multiplicitása. A hamis gerjesztések meghatározása a következőképpen történik. Egy oszcillátorkvantum az $[1, 0, 0]$ $U(3)$ -as reprezentáció szerint transzformálódik, és a tömegközéppont 1 hf gerjesztései ezen reprezentáció és az alapállapot $[n_1, n_2, n_3]$ $U(3)$ -as reprezentációinak külső szorzataként adódnak: $[n_1, n_2, n_3] \times [1, 0, 0]$. A 2 hf hamis gerjesztések vagy az alapállapotra épülnek: $[n_1, n_2, n_3] \times [2, 0, 0]$, vagy az 1 hf valódi gerjesztésekre: $[n_1, n_2, n_3] \times [1, 0, 0]$. Ha a héjmodellbázist ilyen módon megszabadítottuk a hamis gerjesztésektől is, akkor megkaptuk a valódi bázisállapotokat. [10]

3. Saját vizsgálatok

3.1 A héjmodellter építés lépései

A következőkben egy egyszerű példa segítségével bemutatom, hogyan kell egy adott $U(4)$ -es reprezentációhoz és gerjesztési kvantumhoz tartozó héjmodellteret felépíteni. A modellter építés 7 lépésben valósul meg [11]:

1. Nukleoneloszlás számítása a gerjesztési kvantum függvényében
2. Főhéjanként lehetséges $U(4)$ -es reprezentációk számítása
3. $U(4)$ -es szorzatok kiválasztása
4. Főhéjanként $U(4)$ -es reprezentációk adjungáltjainak számítása
5. Adjungáltak $U(3)$ -as tartalmainak számítása
6. $U(3)$ -as szorzás főhéjak között
7. Tömegközépponti gerjesztések kiszűrése

1. Nukleoneloszlás számítása a gerjesztési kvantum függvényében

Az egyszerűség kedvéért számoljunk a $[5, 5, 5, 5]$ -ös reprezentációval és csak 1 gerjesztési kvantummal. Először is meg kell határoznunk, hogy a rendelkezésre álló 20 nukleont, a gerjesztési kvantum függvényében hogyan tudjuk elhelyezni a főhéjakon. Ehhez a harmonikus oszcillátor energiáját hívjuk segítségül:

$$E = hf \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

$$N = n_x + n_y + n_z$$

Innen láthatjuk, hogy egy N energiájú héjra annyi azonos (Azonos spinű és izospinű) részecskét tehetünk, ahányféleképpen N energiakvantumot szétoszthatunk a három tengely (n_x, n_y, n_z) között. Rövid számolással belátható, hogy ez a szám:

$$M = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

Azaz az N -edik héjon M darab egyrészecskeállapot van. Ez még nem egyenlő a héjra tehető nukleonok számával, mivel nukleonból 4-féle van (proton $1/2$ spinnel, proton $-1/2$ spinnel, neutron $1/2$ spinnel, neutron $-1/2$ spinnel) ezért ezt 4-el szorozva kapjuk meg a maximálisan elhelyezhető részecskék számát az N -edik héjon:

$$2(N+1)(N+2)$$

Ennek ismeretében már számolhatjuk a nukleoneloszlásokat (héjmodellkonfigurációkat). Először a 0, majd az 1 hf gerjesztéshez tartozó konfigurációkat írjuk fel, ahol a zárójelben lévő szám jelöli az adott héj számát, a zárójel után álló szám pedig az, azon a héjon lévő nukleonok számát.

0 hf

(0) 4 (1) 12 (2) 4

1 hf

(0) 4 (1) 12 (2) 3 (3) 1

(0) 4 (1) 11 (2) 5

2. Főhéjanként lehetséges $U(4)$ -es reprezentációk számítása

Most meghatározzuk a meglévő héjmodellkonfigurációk nem üres főhéjain lévő nukleonok lehetséges $U(4)$ -es reprezentációit. Egy adott héjon lévő nukleonok $U(4)$ -es reprezentációi nem tartalmazhatnak nagyobb számot, mint amennyi egyrészecske állapota van a héjnak. Tehát a konfigurációkhoz tartozó $U(4)$ -es reprezentációk:

0 hf

(0) 4	(1) 12	(2) 4
[1, 1, 1, 1]	[3, 3, 3, 3]	[4, 0, 0, 0]
		[3, 1, 0, 0]
		[2, 2, 0, 0]
		[2, 1, 1, 0]
		[1, 1, 1, 1]

1 hf

(0) 4	(1) 12	(2) 3	(3) 1
[1, 1, 1, 1]	[3, 3, 3, 3]	[3, 0, 0, 0]	[1, 0, 0, 0]
		[2, 1, 0, 0]	
		[1, 1, 1, 0]	

(0) 4	(1) 11	(2) 5
[1, 1, 1, 1]	[3, 3, 3, 2]	[5, 0, 0, 0]
		[4, 1, 0, 0]
		[3, 2, 0, 0]
		[3, 1, 1, 0]
		[2, 2, 1, 0]
		[2, 1, 1, 1]

3. U(4)-es szorzatok kiválasztása

Már tudjuk, hogy a főhékakon milyen U(4)-es reprezentációk valósulhatnak meg. Most az összes lehetséges módon összeszorozzuk ezeket a reprezentációkat. Egy ilyen szorzat annyi tényezőzős amennyi a nem üres főhékak száma az adott konfigurációban. A szorzatok:

0 hf

$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [4, 0, 0, 0] = [8, 4, 4, 4]$
 $[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [3, 1, 0, 0] = [7, 5, 4, 4]$
 $[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [2, 2, 0, 0] = [6, 6, 4, 4]$
 $[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [2, 1, 1, 0] = [6, 5, 5, 4]$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [1, 1, 1, 1] = [5, 5, 5, 5]$$

1 hf

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [3, 0, 0, 0] \times [1, 0, 0, 0] = [8, 4, 4, 4] + [7, 5, 4, 4]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [2, 1, 0, 0] \times [1, 0, 0, 0] = [7, 5, 4, 4] + [6, 6, 4, 4] + [6, 5, 5, 4]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [1, 1, 1, 0] \times [1, 0, 0, 0] = [6, 5, 5, 4] + [5, 5, 5, 5]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 2] \times [5, 0, 0, 0] = [9, 4, 4, 3] + [8, 4, 4, 4]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 2] \times [4, 1, 0, 0] = [8, 5, 4, 3] + [9, 4, 4, 4] + [7, 5, 4, 4]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 2] \times [3, 2, 0, 0] = [7, 6, 4, 3] + [7, 5, 4, 4] + [6, 6, 4, 4]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 2] \times [3, 1, 1, 0] = [7, 5, 5, 3] + [7, 5, 4, 4] + [6, 5, 5, 4]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 2] \times [2, 2, 1, 0] = [6, 6, 5, 3] + [6, 6, 4, 4] + [6, 5, 5, 4]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 2] \times [2, 1, 1, 1] = [6, 5, 5, 4] + [5, 5, 5, 5]$$

Most már ki tudjuk válogatni azokat az $U(4)$ -es reprezentációkat, melyek szorzataiban szerepel a kívánt $[5, 5, 5, 5]$ reprezentáció. Ezek a következők:

0 hf

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [1, 1, 1, 1] = [5, 5, 5, 5]$$

1 hf

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [1, 1, 1, 0] \times [1, 0, 0, 0] = [6, 5, 5, 4] + [5, 5, 5, 5]$$

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 2] \times [2, 1, 1, 1] = [6, 5, 5, 4] + [5, 5, 5, 5]$$

4. Főhéként $U(4)$ -es reprezentációk adjungáltjainak számítása

Most a kiválasztott szorzatokban lévő $U(4)$ -es reprezentációk adjungáltjait számoljuk ki. Ezeket úgy kapjuk meg, hogy az egyes reprezentációkhoz tartozó Young-ábrákat tükrözzük a főátlóra.

0 hf

$$[1, 1, 1, 1] \times [3, 3, 3, 3] \times [1, 1, 1, 1] = [5, 5, 5, 5]$$

$$[4] \quad [4, 4, 4] \quad [4]$$

1 hf

$$\begin{array}{cccc} [1, 1, 1, 1] & \times [3, 3, 3, 3] & \times [1, 1, 1, 0] & \times [1, 0, 0, 0] = [6, 5, 5, 4] + [5, 5, 5, 5] \\ [4] & [4, 4, 4] & [3] & [1] \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} [1, 1, 1, 1] & \times [3, 3, 3, 2] & \times [2, 1, 1, 1] = [6, 5, 5, 4] + [5, 5, 5, 5] \\ [4] & [4, 4, 3] & [4, 1] \end{array}$$

5. Adjungáltak U(3)-as tartalmainak számítása

Ez a számítás elég bonyolult, de egy program segítségével [12] könnyen megkaphatjuk a tartalmakat, melyek jelen esetben a következők.

0 hf

$$\begin{array}{l} [4] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [0, 0, 0] \\ [4, 4, 4] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [4, 4, 4] \\ [4] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [8, 0, 0], [6, 2, 0], [4, 4, 0], [4, 2, 2] \end{array}$$

1 hf

$$\begin{array}{l} [4] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [0, 0, 0] \\ [4, 4, 4] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [4, 4, 4] \\ [3] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [6, 0, 0], [4, 2, 0], [2, 2, 2] \\ [1] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [3, 0, 0] \end{array}$$

$$\begin{array}{l} [4] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [0, 0, 0] \\ [4, 4, 3] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [4, 4, 3] \\ [4, 1] \quad \text{-----} \rightarrow U(3): [9, 1, 0], [8, 2, 0], [7, 3, 0], [7, 2, 1], [6, 2, 2], [6, 4, 0], [6, 3, 1], [5, 4, 1], \\ \quad \quad \quad [5, 3, 2], [4, 4, 2] \end{array}$$

6. U(3)-as szorzás főhék között

Most összeszorozzuk a megkapott U(3)-as tartalmakat az alábbiak szerint.

0 hf

$$\begin{array}{c} [0, 0, 0] \times [4, 4, 4] \times \{ [8, 0, 0] + [6, 2, 0] + [4, 4, 0] + [4, 2, 2] \} = [12, 4, 4] + [10, 6, 4] + [8, 8, 4] + \\ \quad \quad \quad [8, 6, 6] \end{array}$$

1 hf

$$[0,0,0] \times [4,4,4] \times \{[6,0,0]+[4,2,0]+[2,2,2]\} \times [3,0,0] = [13, 4, 4] + [12, 5, 4] + 2[11, 6, 4] + 2[10, 7, 4] \\ + [10, 6, 5] + [9, 8, 4] + [9, 7, 5] + 2[9, 6, 6] + \\ + [8, 8, 5] + [8, 7, 6]$$

$$[0, 0, 0] \times [4, 4, 3] \times \{[9, 1, 0] + [8, 2, 0] + [7, 3, 0] + [7, 2, 1] + [6, 4, 0] + [6, 3, 1] + [6, 2, 2] + \\ + [5, 4, 1] + [5, 3, 2] + [4, 4, 2]\} = [13, 5, 3] + [13, 4, 4] + 2[12, 5, 4] + [12, 6, 3] + 3[11, 6, 4] + \\ + [11, 7, 3] + 3[10, 7, 4] + [11, 5, 5] + 3[10, 6, 5] + [10, 8, 3] + \\ + 2[9, 8, 4] + 3[9, 7, 5] + 2[9, 6, 6] + 2[8, 8, 5] + 2[8, 7, 6]$$

Ha gerjesztésként összeadjuk a reprezentációkat, akkor megkapjuk azt a héjmodellteret, amiből még le kell vonni a tömegközépponti gerjesztéseket. Ezek a reprezentációk:

0 hf

$$[12, 4, 4], [10, 6, 4], [8, 8, 4], [8, 6, 6]$$

1 hf

$$2[13, 4, 4], 3[12, 5, 4], 5[11, 6, 4], 5[10, 7, 4], 4[10, 6, 5], 3[9, 8, 4], 4[9, 7, 5], 4[9, 6, 6], \\ 3[8, 8, 5], 3[8, 7, 6], [13, 5, 3], [12, 6, 3], [11, 7, 3], [11, 5, 5], [10, 8, 3]$$

7. Tömegközépponti gerjesztések kiszűrése

Természetesen 0 hf-nél nincs tömegközépponti gerjesztés, de 1 hf-nél már van, amit a következőképpen számolunk. Vesszük 0 hf-nél az U(3)-as reprezentációkat, majd $[1, 0, 0]$ -val szorozzuk őket a korábbiak szerint.

1 hf

$$\{[12,4,4]+[10,6,4]+[8,8,4]+[8,6,6]\} \times [1,0,0] = [13, 4, 4] + [12, 5, 4] + [11, 6, 4] + [10, 7, 4] + \\ + [10, 6, 5] + [9, 8, 4] + [9, 6, 6] + [8, 8, 5] + [8, 7, 6]$$

Ennek ismeretében már fel tudjuk írni a valódi héjmodellteret 1 hf gerjesztésig. 0 hf-nél könnyű dolgunk van, hiszen itt nem kell a reprezentációkból semmit sem levonni, vagyis egyszerűen felírjuk a korábban kiszámolt reprezentációkat. 1 hf-nél az előző részben kiszámolt eredményekből, ha kivonjuk a most számolt hamis gerjesztéseket, akkor készen is

vagyunk. Tehát az $[5, 5, 5, 5]$ -ös $U(4)$ -es reprezentációhoz, és az 1 hf gerjesztéshez tartozó valódi héjmodelltér a következő:

0 hf

$[12, 4, 4], [10, 6, 4], [8, 8, 4], [8, 6, 6]$

1 hf

$[13, 4, 4], 2[12, 5, 4], 4[11, 6, 4], 4[10, 7, 4], 3[10, 6, 5], 2[9, 8, 4], 4[9, 7, 5], 3[9, 6, 6],$
 $2[8, 8, 5], 2[8, 7, 6], [13, 5, 3], [12, 6, 3], [11, 7, 3], [11, 5, 5], [10, 8, 3]$

3.2 A héjmodelltér-építő program leírása

Az előző fejezetben láthattuk, hogyan kell egy adott $[n_1, n_2, n_3, n_4]$ $U(4)$ -es reprezentációhoz és gerjesztési kvantumhoz tartozó héjmodellteret kiszámolni. Ez a számolás kis reprezentációra és gerjesztési kvantumra még elvégezhető papíron ceruzával, de ha nagyobb gerjesztési kvantumot és reprezentációt választunk, akkor már belátható időn belül nem lehet megoldani (Nem beszélve arról, hogy az ember hibázhat.), ezért célszerű számítógépes programot írni erre a feladatra. A következőkben az általam, erre a célra írt fortran nyelvű programot szeretném bemutatni.

Először a program működésének mellőzésével leírom röviden összefoglalva, hogy miket tud számolni, és az egyes eredményeket milyen file-okba írja ki

hmszinput.dat: Innen olvassa be a bemenő adatokat. Itt meg kell adni a nukleonszámot, gerjesztési kvantumot, és egy $U(4)$ -es reprezentációt. Adott nukleonszámhoz csak a következő gerjesztési kvantumok tartozhatnak (Ez a kikötés az $U(3)$ tartalmazást számító program [12] miatt van, mert az csak ilyen párosításokra fut le.):

Nukleonszám		gerjesztési kvantumok száma
1	- 4	0 - 7
5	- 16	0 - 6
17	- 40	0 - 5

hmkoutput.dat: 0-tól a megadott gerjesztési kvantummal bezárólag a hozzájuk tartozó héjmodell konfigurációkat (nukleonok eloszlását a főhéjakon) tartalmazza.

u4routput.dat: A héjmodell konfigurációkhoz tartozó $U(4)$ -es reprezentációkat tartalmazza. Pontosabban a nem üres főhéjakon lévő nukleonok lehetséges $U(4)$ -es reprezentációit.

u4szoutput.dat: Az $U(4)$ -es reprezentációk összes lehetséges szorzatának szorzótényezőit tartalmazza konfigurációként.(A szorzat annyi tényezőből áll, amennyi főhéj nem üres, ha csak 1 főhéj nem üres, akkor az ehhez a héjhoz tartozó $U(4)$ -es reprezentációkat tartalmazza.)

ju4szoutput.dat: Azoknak az $U(4)$ -es szorzatoknak a szorzótényezőit tartalmazza, amik eredményében megtalálható a kívánt $U(4)$ -es reprezentáció.

adjoutput.dat: A ju4szoutput.dat-ban lévő $U(4)$ -es szorzat tényezőinek az adjungáltjait tartalmazza.

u3tartoutput.dat: Az adjoutput.dat-ban lévő adjungáltak $U(3)$ -as tartalmait tartalmazza.

u3szoutput.dat: Az u3tartoutput.dat-ban lévő egyes tényezőkhöz tartozó $U(3)$ -as tartalmak szorzatát tartalmazza.

hmoutput.dat: 0-tól a megadott gerjesztési kvantummal bezárólag, a hozzájuk tartozó héjmodellteret leíró $U(3)$ -as reprezentációkat tartalmazza.(Ezekből kell később a tömegközépponti gerjesztéseket levonni.)

tkpsoutput.dat: 1-től a megadott gerjesztési kvantummal bezárólag, a hozzájuk tartozó tömegközépponti gerjesztéseket leíró $U(3)$ -as reprezentációkat tartalmazza. (Egy adott g gerjesztéshez, $1 \dots g$ gerjesztéshez tartozó $U(3)$ -as reprezentációkat tartalmazza. Pl.: ha $g=2$ hf, akkor $[2, 0, 0]$ és $[1, 0, 0]$ reprezentációkkal kell számolni.)

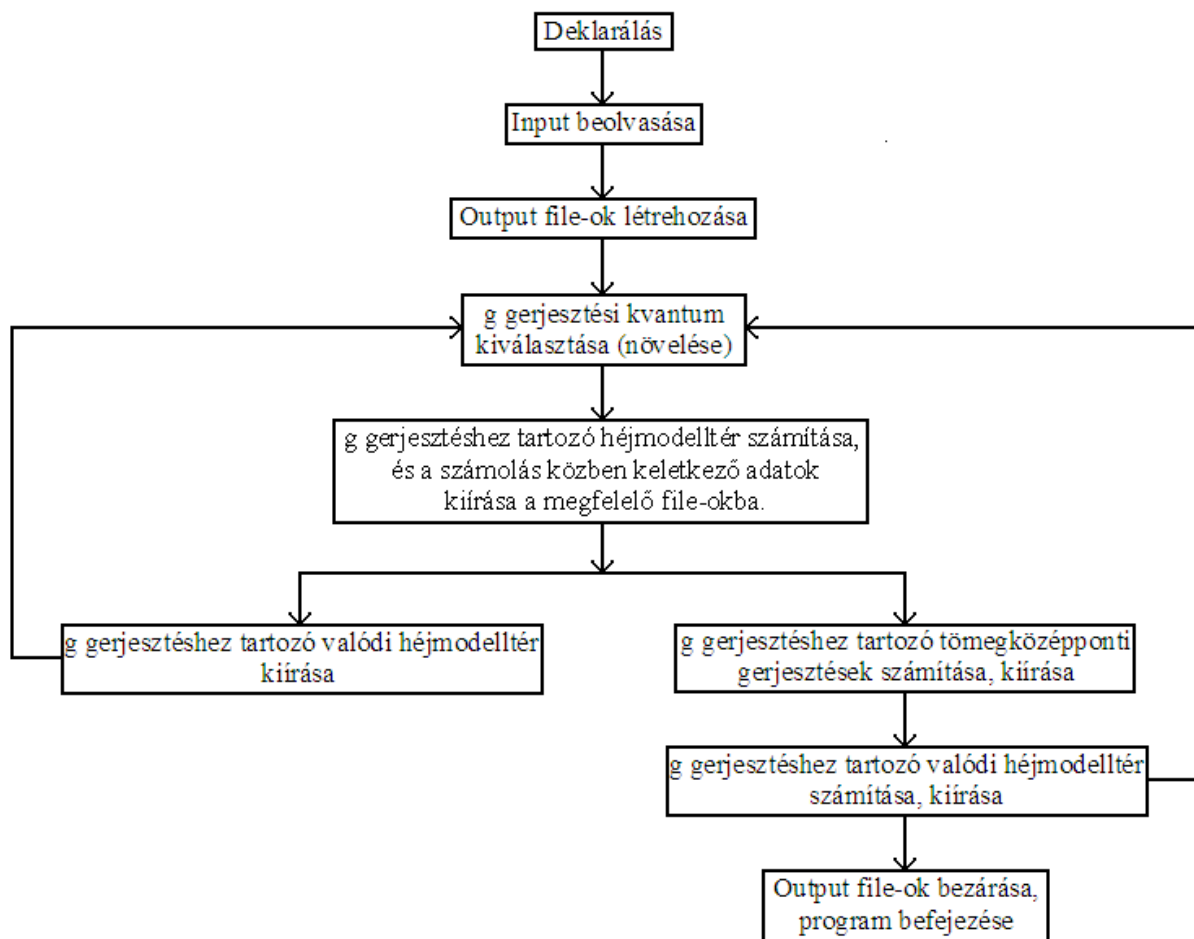
tkpoutput.dat: 1-től a megadott gerjesztési kvantummal bezárólag, a tömegközépponti gerjesztéseket leíró $U(3)$ -as reprezentációkat tartalmazza

vhmoutput.dat: Ez a legfontosabb output. 0-tól a megadott gerjesztési kvantummal bezárólag, a hozzájuk tartozó valódi héjmodellteret leíró $U(3)$ -as reprezentációkat, $SU(3)$ tartalmakat, és Casimir értékeket tartalmazza, a Casimir értékek szerint csökkenő sorrendben.

3.2.1

A program szerkezetábrája

Ahhoz, hogy jobban megismerjük a program szerkezetét, működését, ábrázolom a főbb egységeit, és az azok közötti kapcsolatokat. Egy egység (Az ábrán téglalap.) természetesen lehet összetett is, amit szintén tovább lehetne bontani kisebb részekre, de ha minden egyes részt külön felírnék, akkor egy nagyon nagy és bonyolult ábrát kapnánk eredményül. Ennek elkerülése céljából a programnak csak a főbb részeit jelölöm, majd részletesebben kifejtem a jelentésüket.



5. ábra

Deklarálás:

Mint a programok, ez is azon változók bevezetésével (deklarálásával) kezdődik, melyet a program során használni kívánunk.

Input beolvasása:

A számolást nem kezdhethük el a bemenő adatok ismerete nélkül, ezért beolvassuk az input file-ból ezeket.

Output file-ok létrehozása:

A számolás során elég sok adat keletkezik, amiket különböző file-okban tárolunk. Ahhoz, hogy ezt megtehessük, létrehozuk őket. (Kezdetben ezek üresek.)

g gerjesztési kvantum kiválasztása (növelése):

0-tól az inputban megadott g gerjesztési kvantummal bezárólag számoljuk a héjmodellteret. Ez a rész 0-tól növeli a gerjesztés értékét az inputban megadottig. Először $g=0$, majd ha ismét ez következik, akkor $g=1$, és így tovább az inputbeli értékig.

g gerjesztéshez tartozó héjmodelltér számítása, és a számolás közben keletkező adatok kiírása a megfelelő file-okba:

Ez a legnagyobb egység, hiszen itt történik a legtöbb számolás. A fő cél, hogy g-hez kiszámoljuk a héjmodellteret (Amiből később le kell vonni a tömegközépponti gerjesztéseket.), de míg ez megtörténik addig sok részeredményt kapunk, amiket kiírunk a 3.2-es fejezetben leírt file-okba.

g gerjesztéshez tartozó valódi héjmodelltér kiírása:

Ha $g=0$, akkor még nincsenek tömegközépponti gerjesztések, ezért a kiszámolt héjmodelltér azonos a valódi héjmodelltérrel amit file-ba írunk.

g gerjesztéshez tartozó tömegközépponti gerjesztések számítása, kiírása:

Ha a gerjesztés, azaz g értéke 0-tól nagyobb, akkor kell tömegközépponti gerjesztéseket számolni. Ebben a részben ennek a számolása, történik, majd kiírása file-ba.

g gerjesztéshez tartozó valódi héjmodelltér számítása, kirása:

A valódi héjmodelltér számításához a héjmodellteret leíró $U(3)$ -as reprezentációkból kivonjuk az előbb kiszámolt tömegközépponti gerjesztésekhez tartozó $U(3)$ -as reprezentációkat, majd kiírjuk őket egy file-ba.

Output file-ok bezárása, program befejezése:

Ha 0-tól a megadott gerjesztési kvantumig az adott $U(4)$ -es reprezentációhoz tartozó héjmodellteret kiszámoltuk, és minden keletkező adatok kiírtunk az output file-okba, akkor bezárjuk a file-okat, és befejezzük a program futását.

3.2.2 Alprogramok (Szubrutinok) leírása

Egy nagy program írásánál nagyon hasznos az alprogramok vagy szubrutinok használata, mivel ezek segítségével áttekinthetőbb és rövidebb lesz a program. Az általam írt program szubrutinjai:

u4tartalmak: Adott főhéjakhoz tartozó nukleonok lehetséges $U(4)$ -es reprezentációit számolja.

u4joszorzat: Többszorosított többtagú $U(4)$ -es szorzatot számol, és megnézi, hogy a kívánt $U(4)$ -es reprezentáció szerepel-e az eredményben. Ha igen, akkor a jel változó értéke 1 lesz, ha nem, akkor 0.

adju: $U(4)$ -es reprezentációknak számolja az adjungáltjait.

u3tart: Adott főhéjakhoz tartozó $U(4)$ -es reprezentációk adjungáltjainak az $U(3)$ -as tartalmait számolja. A programnak ezt az egy részét nem én írtam, hanem készen kaptam! [12]

u3szorzo: Többszorosított többtagú $U(3)$ -as szorzatot számol.

hmpakol: $U(3)$ -as szorzás eredményét pakolja át egy másik tömbbe.

u3alap: 0 gerjesztésnél a $vu3n$ tömbbe pakolja át a hm tömb tartalmát

u3szorzog: $U(3)$ -as reprezentációkat szoroz $[n_1, 0, 0]$ -val. A tömegközépponti gerjesztésekhez szükséges.

vu3nszamolo: Adott gerjesztés mellett a kiszámolt $U(3)$ -as bázisállapotokból kivonja ugyanahhoz a gerjesztéshez tartó hamis tömegközépponti gerjesztéseket.

3.2.3 Tesztelés

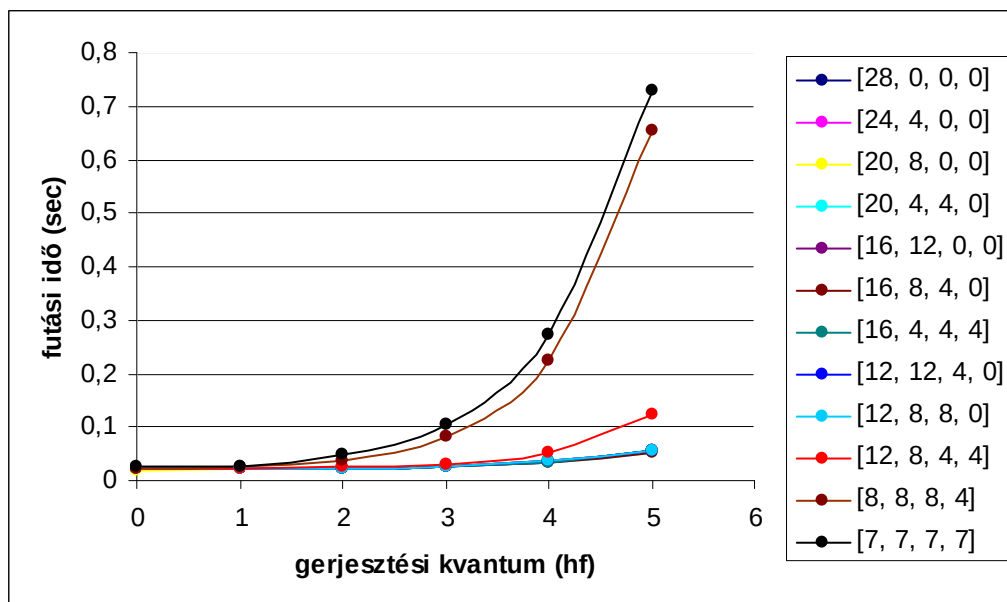
A tesztelés során több különböző inputra futtattam le a programot, majd kézzel ellenőriztem az eredményeket, melyek helyesnek bizonyultak. Futtatáshoz az alábbi számítógépet használtam:

Számítógép: Acer E720

Operációs rendszer: Microsoft Windows XP Professional 2002-es verzió

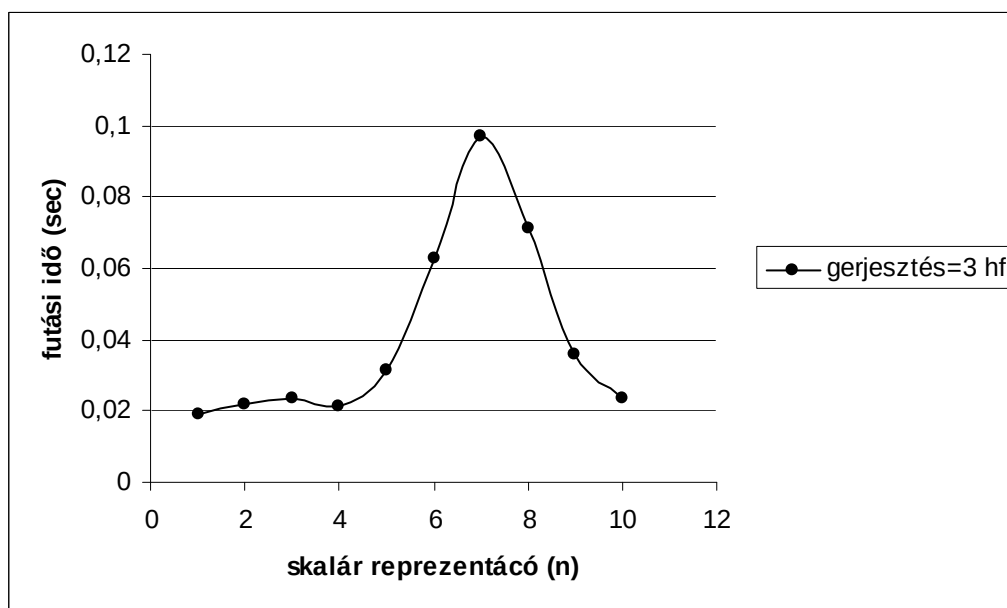
Futtatáshoz használt program: Force 2.0 Fortran Compiler and Editor

Továbbá vizsgáltam, hogy különböző inputokra milyen gyorsan fut le, mely során az alábbi ábrákat kaptam. Ezen az ábrán a futási időt ábrázoltam a gerjesztési kvantumszám függvényében különböző U(4)-es reprezentációkra, melyek azonos nukleonszámhoz tartoznak. Ebből kiderül, hogy a gerjesztés növelésével meredeken nő a futási idő, és a leglassabb futás a [7, 7, 7, 7] skalár reprezentációhoz tartozik. (Az [n, n, n, n] reprezentációt skalárnak hívjuk.)



6. ábra

Itt a futási időt ábrázoltam n függvényében, ahol n a $[n, n, n, n]$ reprezentációt jelöli. (A gerjesztést 3 hf-nek választottam.) Első látásra meglepő az eredmény, hiszen azt várhatnánk, ha n nő, akkor a futási idő is nőni fog, de ez nem így van. A görbének $n=1$ -nél, 4-nél, és 10-nél minimuma van. Ez nem véletlen, hiszen ezeknél a számoknál a főhék alapállapotban teljesen betöltöttek, vagyis hozzájuk csak egy-egy $U(4)$ -es reprezentáció tartozik. Könnyen belátható, hogy ha gerjesztjük, akkor is csak kismértékben fog nőni az egyes reprezentációk száma, vagyis kevés szorzat képezhető belőlük, és így keveset kell számolnia, gyorsan lefut. A szomszédos minimumok között emelkedik a görbe, elér egy maximumot, majd ismét lefele ível. Ez is a nukleonok számával magyarázható. Ha egy minimumtól növeljük a nukleonszámot (n -et), akkor az egyes főhékhoz tartozó $U(4)$ -es reprezentációk száma nőni fog, de ha elérünk egy bizonyos értéket, akkor eléri maximumát, majd ismét csökken, és ezzel arányosan változik a számítások száma, a futási idő.



7. ábra

4. Összefoglalás és kitekintés

Dolgozatomban egy nagyméretű héjmodelltér-építő programot mutattam be. Ebben a modellben a nukleonok térbeli mozgását az $U(3)$ szimmetria, spin-izospin-térbeli szabadsági fokait pedig az $U(4)$ -es szimmetria jellemzi. A munkám a Debrecenben folyó elméleti magfizikai kutatásokhoz jelent hozzájárulást, közvetlen előzményei is abban gyökereznek, amint ezt a Bevezetőben kifejtettem.

A kilátásokat illetően elsőként egy tervezett továbbfejlesztést említek meg. A jelen program egy adott $U(4)$ -es (szupermultiplett) szimmetriához tartozó modellteret építi fel. Tervezzük ennek általánosítását az összes lehetséges $U(4)$ -es szimmetria tekintetbe vételével. A fizikai alkalmazást illetően pedig arra a tendenciára utalnék, ami a mai magszerkezet-kutatásban igen hangsúlyosan van jelen: a nagyméretű számításokra. Ez részben a számítógépek teljesítménynövekedésének köszönhető, részben pedig a szimmetriákra alapozott modellezés sikerének, aminek segítségével kiválasztható a problémákhoz legjobban illeszkedő csonkítási eljárás. E kettő kombinálása révén, amit olykor csoportelméleti számítógépes fizikának is neveznek, a korábbiakhoz képest sokkal jobb leírása várható a magszerkezetnek. Csupán két példát emelek ki. Az egyik a (kvadrupólus) kollektivitás és a fűrtösödés megjelenésének megértése kizárólag a héjmodell keretében. A másik az "ab initio" számolások kivitelezése. Ebben az elméletben az egyik érdekesség az, hogy reális, a kvantumkromodinamika által javasolt, vagy a nukleon-nukleon szórásokból származtatott erőket alkalmaznak, szemben az eddig használatos effektív kölcsönhatásokkal, amelyeket az aktuális modelltérhez kellett renormálni. Tekintetbe vesznek minden nukleont, vagyis nincs a héjmodellben zárt törzs, befagyasztott nukleonokkal, ezért hívják törzsnélküli (no-core) héjmodellnek. Az ilyen számítások a várakozások szerint a közeli jövőben a kísérleti magspektroszkópiában rutinszerűen vizsgálható magállapotok tulajdonságai alapján tudják tesztelni a nukleon-nukleon erőket. Ennek alapján egyesek a magszerkezet-kutatásban igazi frontáttörésre számítanak.

5. Köszönetnyilvánítás

Szeretnék ezúton is köszönetet mondani témavezetőimnek, Dr. Darai Juditnak a Debreceni Egyetem, Kísérleti Fizikai Tanszék egyetemi adjunktusának, és Dr. Cseh Józsefnek, a Magyar Tudományos Akadémia (MTA) Atommagkutató Intézet (ATOMKI) tudományos tanácsadójának dolgozatom elkészítéséhez nyújtott sok hasznos tanácsukért, és segítségükért.

6. Felhasznált irodalom

- [1] J. P. Elliott, Proc. Roy. Soc. London, A 245 (1958) 128; 562.
- [2] E. P. Wigner, Phys. Rev. 51 (1937) 106.
- [3] J. Cseh, Comp. program "Mspace", Giessen-Debrecen,
- [4] Riczu Gábor, Bsc-szakdolgozat, DE, Debrecen, 2012.
- [5] Sükösd Csaba: Atommagfizika, Fizika III., Nemzeti Tankönyvkiadó Bp. (2006) 383-388.
- [6] L. Eisenbud, G. T. Garvey, E. P. Wigner: Az atommag szerkezete, Akadémiai Kiadó, Budapest, (1969), 63-65.
- [7] Cseh József, Az atommagok csomósodásának félmikroszkopikus algebrai leírása, Akadémiai doktori értekezés, MTA ATOMKI, Debrecen, (1993) 13.
- [8] J. Cseh and G. Lévai, Semimicroscopic Algebraic Cluster Model of Light Nuclei. I. Two Cluster-Systems with Spin-Isospin-Free Interactions, (1994) 178.
- [9] Khursheed Ahmed, Wigner Supermultiplet Bases and Coupling Coefficients, Ph. D. Thesis, McGill University Montreal, (1971) 1-2.
- [10] Cseh József, Az atommagok csomósodásának félmikroszkopikus algebrai leírása, Akadémiai doktori értekezés, MTA ATOMKI, Debrecen, (1993) 12.
- [11] J. Cseh and G. Lévai, Semimicroscopic Algebraic Cluster Model of Light Nuclei. I. Two Cluster-Systems with Spin-Isospin-Free Interactions, (1994) 189-190.
- [12] J. P. Drayer, Department of Physics (Computer Science), Louisiana State University, Program for generating $U(N) \rightarrow U(3)$ irrep. Decomposition.