

PhD ÉRTEKEZÉS

Könnyű atommagok szerkezetének és reakcióinak mikroszkopikus leírása

CSÓTÓ ATTILA

Kossuth Lajos Tudományegyetem



Témavezető: Lovas Rezső

MTA Atommagkutató Intézete
Debrecen, 1992. június

Tartalomjegyzék

1	Bevezetés	3
2	A szóráselmélet elemei	7
2.1	Egycsatornás szóráselmélet a valós energiatengelyen	7
2.2	Egycsatornás szóráselmélet a komplex energiasíkon	11
2.3	Többcsatornás szóráselmélet	15
2.4	Rezonanciaállapotok leírása	19
3	A mikroszkopikus dinamikai klasztermodell	27
3.1	A rezonálócsoport-modell	27
3.2	A generátorkoordináták módszere	31
3.3	Fragmentációs tulajdonságok	36
3.4	Magreakciók leírása a klasztermodellben	39
4	A klasztermodell magfüggvényeinek számítása	45
4.1	Az általános számítási séma	45
4.2	A magfüggvények számítása eltolt Gauss-bázison	48
4.3	A magfüggvények számítása temperált Gauss-bázison	62
5	A ${}^6\text{Li}$ atommag alapállapotának vizsgálata	67
5.1	Előzmények	67
5.2	Modelltér, kölcsönhatás	70
5.3	Energetikai és fragmentációs tulajdonságok	77
5.4	A ${}^6\text{Li}$ sugara és kvadrupólmomentuma	81
5.5	Spektroszkópiai faktorok	82
5.6	Következtetések	84
5.A.	Függelék: A klaszterizáció mértékének számítása	87
5.B.	Függelék: A spektroszkópiai amplitúdó formulája	88
6	A $d(t, n)\alpha$ magreakció polológiai vizsgálata	89
6.1	Előzmények	89
6.2	A használt kölcsönhatás	95
6.3	Póluskeresés	99
6.4	Következtetések	105

7 Összefoglalás	107
Summary	111
Köszönetnyilvánítás	115
Irodalomjegyzék	117

1. fejezet

Bevezetés

Az atommag protonokból és neutronokból álló soktest-fizikai rendszer. Elméleti vizsgálatát megnehezíti az a tény, hogy a nukleonok közötti kölcsönhatás pontos erőtvénye nem ismeretes. Ha azt a feltevést fogadjuk el, hogy a nukleonok belső szerkezettel rendelkeznek, ilyen egzakt kéttest-kölcsönhatás nem is létezik. A szabad nukleonok egyes mérhető jellemzői (pl. mágneses momentum) azt mutatják, hogy a relativisztikus kvantumeffektusok már kis energiákon is éreztetik hatásukat. Ebből nyilvánvaló, hogy az atommag “végső” elméletének egy olyan kvantumtérelméletnek kell lennie, amely a magot a nukleon alkotórészeinek szintjéről építi fel. Nincs azonban remény sem arra, hogy egy ilyen modell technikailag megvalósítható lesz a belátható jövőben. Másrészt egy ilyen elmélet bonyolultsága amúgy is megnehezítené a tanulmányozandó jelenségek mögötti fizikai tartalom kihámozását. A relativisztikus leírasmód feladásának jogosságát csak a modellek jóslatainak a kísérletekkel való összevetése erősítheti vagy cáfolhatja meg.

Noha az N -test-probléma elvben megoldható [1], gyakorlati alkalmazás háromnál nagyobb tömegszámú magokra csak szórványosan történt. Nehezebb magok leírására további feltevéseket kell tennünk, magmodelleket kell alkalmaznunk. A mikroszkopikus magmodellek a mag bizonyos sajátosságainak túlhangsúlyozásával az N részecske Hilbert-terét leszűkítik oly módon, hogy az adott probléma a szűkebb téren viszonylag egyszerűen megoldhatóvá válik.

A függetlenrészecskés modellek feltételezik, hogy a nukleonok individualitásukat megőrizve egy közösen kialakított potenciáltérben mozognak, gyakorlatilag függetlenül. Az egyes nukleonok közötti kölcsönhatást esetleg mint maradékkölcsönhatást veszik figyelembe. A kollektív modellek alapfeltevése az, hogy a magot alkotó nukleonok képesek koherens, összehangolt mozgást (rezgést, forgást) kialakítani. Az egyesített modell a fenti két elképzelés “eredője”, mivel feltételezi, hogy a mag egészének kollektív mozgása jelöli ki azt az időben változó potenciáletteret, amiben az egyes nukleonok függetlenül mozognak.

A mikroszkopikus klasztermodell a kollektív modellek egyik változata. Feltételezi, hogy a viszonylag hosszú hatótávolságú párkorrelációs kölcsönhatás az egyes nukleonoknak csomókba (cluster) szerveződését igyekszik kiemelni. Ezáltal a mag néhány ilyen csomó szuperpozíciójaként épül fel. Tehát az N részecske Hilbert-terét ez a modell úgy szűkíti, hogy az egyes csomókon belüli kvantumállapotokat rögzíti. A továbbiakban a feladat a csomók közötti relatív mozgás dinamikai leírása. A nukleonok megkülönböztet-

hetetlenségét kifejező antiszimmetrizálást a modell következetesen figyelembe veszi. Ez a vonása különbözteti meg leginkább a makroszkopikus néhányklaszter-modellektől, amelyek a magot szintén két-három csomóból építik fel, de ott ezek szerkezetnélküliek, s így az antiszimmetrizálás nem (vagy csak részben) vehető figyelembe.

Azt, hogy a klasztermodell milyen magtartományokban lehet működőképes néhány kísérleti tapasztalatból sejtethetjük.

Várható, hogy a középnehéz illetve nehéz magokban a felületi α -klaszterizáció jelentős lehet mivel a magok felületéhez közel a nukleonsűrűség csökken, és ismert, hogy a maganyag kis sűrűségű helyein az α részecskék kifagyása valószínű. Valóban a törzs+ α típusú klasztermodellek jól leírják az ilyen magok (pl ^{20}Ne , ^{44}Ti) tulajdonságait.

A könnyű ($4 \leq N \leq 8$) atommagokban négy nukleonnak egy α -részecskévé történő összeállása energetikailag kedvező az α -részecske kiugróan nagy kötési energiája miatt, így érthető, hogy egy α + többi klaszter típusú klasztermodell többé-kevésbé egységes módon képes leírni ezt a magtartományt [2].

Az atommagok csomósodásra való hajlamának szép bizonyítékát jelentik a klaszterátadó direkt reakciók. A direkt reakció gyors időbeli lefolyása lehetetlenné teszi, hogy az a bombázó részecskének a $\{b, a - b\}$ tagozódása a reakció ideje alatt történjen meg. A kezdeti a mag hullámfüggvényének jelentős súllyal kellett tartalmaznia $b+(a-b)$ komponst. Például a $^{12}\text{C}(^7\text{Li},t)^{16}\text{O}$ reakció a ^7Li -ben jelentős $\alpha+t$ klaszterizációt sejtet.

A klasztermodell további alkalmazási területe a könnyű atommagok – nem feltétlenül direkt – reakcióinak vizsgálata. Amennyiben a közbenső magot a befutó és kifutó csatornában aszimptotikusan megjelenő klaszterkonfigurációkból építjük fel a többszörös szóráselmélet keretein belül, a magreakció egy lehetséges elméleti leírását kapjuk.

Jelen dolgozatban a klasztermodell alkalmazását mutatjuk be a magszerkezet, illetve a magreakciók leírására két illusztratív példán keresztül.

Az első példában a ^6Li alapállapotának egy olyan $\alpha+p+n$ típusú mikroszkopikus leírását adjuk, amely a klaszterek relatív mozgásának dinamikáját megkísérli a makroszkopikus háromtest-modellek szigorával kezelni. Vizsgáljuk az energetikai és fragmentációs tulajdonságokat. Eredményeinket összevetjük a kísérletekkel és makroszkopikus háromtest-modellekkel.

A második példában a ^5He $J^\pi = \frac{3}{2}^+$ spin-paritású rezonanciaállapotának pólusszerkezetét vizsgáljuk. Ez az állapot mint közbenső mag fontos szerepet játszik a $d+t \rightarrow \alpha+n$ termonukleáris reakcióban. Közelmúltbeli kísérletek fenomenologikus analízisei azt jósolták, hogy a reakció nagy hatáskeresztmetszetéért egy egzotikus objektum, a reakció dinamikáját tartalmazó S-mátrix egy úgynevezett árnyékpólusa a felelős. A magfizikában ez az első olyan megfigyelt rezonancia, amely a megszokottól eltérő szerkezetű. Számításaink bizonyítják, hogy az árnyékpólus a reakciónak egy mikroszkopikus modelljében valóban megjelenik.

A dolgozat felépítése a következő. A 2. fejezetben a [3,4,5,6,7,8] munkák alapján, a teljesség igénye nélkül bemutatom a szóráselmélet azon elemeit, amelyek feltétlenül szükségesek a további mondanivaló megértéséhez. A 3. fejezetben a mikroszkopikus dinamikai klasztermodell felépítését, a klaszterizációt jellemző mennyiségeket és a magreakciók leírásának egy klasztermodellbeli megvalósítását ismertetem a [9,10,11,12,13,14,15] összefoglaló művekre támaszkodva. A klasztermodell-számításokban az egyik fő

nehézséget a soktest-hullámfüggvények közötti mátrixelemek számolása jelenti. A 4. fejezetben bemutatom az általunk kidolgozott általános formalizmust. Ez a fejezet a fizikai mondanivaló megértésében nem játszik lényeges szerepet, a technikai részletek iránt nem érdeklődő olvasó nyugodtan kihagyhatja. Ezek a fejezetek általánosak, nem kötődnek konkrét atommagokhoz. Az 5. és 6. fejezet a fent említett két konkrét problémára alkalmazza a klasztermodellbeli leírást. Az 5. fejezet a ${}^6\text{Li}$ alapállapotának, míg a 6. a $d+t\rightarrow\alpha+n$ reakciónak a vizsgálatát tartalmazza. Saját vizsgálataimmal a 4., 5. és 6. fejezetben leírt eredményekhez járultam hozzá.

2. fejezet

A szóráselmélet elemei

A kvantummechanikai szóráselméletnek két alapvető tárgyalásmódja lehetséges, időtől függő illetve időtől független. Maga a szórási folyamat időtől függő jelenség, időfüggetlen keretben való leírását az a tény teszi lehetővé, hogy a szóródó részecskék kölcsönhatási tartománya, mikrofizikai objektumokról lévén szó, nagyon kicsi. Így mérőeszközeinkkel a részecskéknek csak a szóródás előtti illetve utáni szabad állapotát tudjuk észlelni. Ha az összes lehetséges időfüggetlen kezdőállapotból (befutó csatornák) valamennyi lehetséges időfüggetlen végállapotba (kifutó csatornák) való átmenetről számot tudunk adni, ismerjük a rendszer teljes dinamikáját. Általában a rendszer olyan módon van preparálva, hogy a kezdeti és végállapotok száma kicsi. A továbbiakban az időfüggetlen tárgyalásmódot követjük.

2.1 Egycsatornás szóráselmélet a valós energiatengelyen

Két részecske rendszerét tekintjük, speciális esetként a kötött állapotot is beleértve. Feltételezzük, hogy csak egyetlen befutó és egyetlen kifutó csatorna van. Ha a részecskéknek van spinje illetve izospinje, akkor a Hilbert-tér a háromdimenziós euklideszi téren definiált négyzetesen integrálható függvények fölött értelmezett $\mathcal{H}_{\text{space}}$, és a \mathcal{H}_{si} spin-izospin tér direkt szorzata, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{space}} \otimes \mathcal{H}_{\text{si}}$. A továbbiakban spin és izospin nélküli részecskéket vizsgálunk, azaz $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{space}}$, az eredmények egyszerűen általánosíthatóak. Két részecskéből álló rendszer Schrödinger-egyenlete a valós energiatengelyen

$$(\hat{T} + \hat{V}) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad E \in R. \quad (2.1)$$

Ha a \hat{V} potenciáloperátor translációinvariáns és invariáns a Galilei-transzformációval szemben, akkor az (2.1) egyenlet koordináta-representációban redukálható egy tömegközépponti és egy relatív mozgási egyenletrendszerre. Tömegközépponti rendszerben, helyrepresentációban (2.1) az

$$\langle \mathbf{r} | (\hat{T} + \hat{V}) |\Psi\rangle = E \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle, \quad (2.2)$$

illetve, egy

$$1 = \int d\mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'| \quad (2.3)$$

teljes rendszer felhasználásával az

$$\int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{T} | \mathbf{r}' \rangle \Psi(\mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \hat{V} | \mathbf{r}' \rangle \Psi(\mathbf{r}') = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

alakot ölti, ahol $\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = \Psi(\mathbf{r})$. Mivel a kinetikus energia operátora impulzusreprezentációban

$$\langle \mathbf{p} | \hat{T} | \mathbf{p}' \rangle = \frac{p^2}{2\mu} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (2.5)$$

alakú (μ a redukált tömeg), egyszerűen belátható, hogy

$$\langle \mathbf{r} | \hat{T} | \mathbf{r}' \rangle = \Delta_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.6)$$

Így tehát az (2.1) Schrödinger-egyenlet koordinátareprezentációban a jól ismert

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

formájú, illetve ha a potenciál lokális ($V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Ha a potenciál gömbszimmetrikus, (2.8) megoldása parciális hullámok szerint kifejezhető:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \sum_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\hat{r}), \quad (2.9)$$

és az l -edik parciális hullámra vonatkozó radiális Schrödinger-egyenlet a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R_l(r) = ER_l(r) \quad (2.10)$$

alakban áll elő. A (2.10) egyenlet egy másodrendű, homogén, közönséges differenciál-egyenlet, amelynek végtelen sok megoldásából a számunkra érdekeseket két határfeltétel megadásával választhatjuk ki egyértelműen.

Az (2.1) egyenlet megoldását más úton is megkísérelhetjük. Átírva az

$$(E - \hat{T}) |\Psi\rangle = \hat{V} |\Psi\rangle \quad (2.11)$$

alakba, ha $(E - \hat{T})$ -nek létezik inverze akkor (2.11) megoldása formálisan megkapható:

$$|\Psi\rangle = \hat{G}_0(E) \hat{V} |\Psi\rangle, \quad (2.12)$$

ahol $\hat{G}_0(E) = (E - \hat{T})^{-1}$ a szabad probléma Green-operátora. (Amennyiben \hat{V} -nek vannak hosszú hatótávú komponensei is, \hat{G}_0 helyére $\hat{G}_L(E) = (E - \hat{T} - \hat{V}_L)^{-1}$, \hat{V} helyére

\widehat{V}_S írandó. Itt a potenciált $\widehat{V} = \widehat{V}_S + \widehat{V}_L$ rövid (S), illetve hosszú (L) hatótávolságú komponenseire bontottuk.) A (2.11) egyenlet bal oldalán koordinátareprezentációban differenciáloperátor áll, így (2.11) teljes megoldása a homogén egyenlet teljes megoldásának és az inhomogén egyenlet egy partikuláris megoldásának szuperpozíciójaként áll elő

$$|\Psi\rangle = |\chi\rangle + \widehat{G}_0(E)\widehat{V}|\Psi\rangle, \quad (2.13)$$

ahol $|\chi\rangle$ a szabad probléma síkhullámmegoldása. Ez az (2.1) Schrödinger-egyenletnek megfelelő Lippmann-Schwinger-egyenlet. A (2.10) egyenlet analogonja

$$R_l(r) = \chi_l(r) + \int dr' G_{0l}(r, r') V(r') R_l(r') \quad (2.14)$$

alakú, ahol a $G_{0l}(r, r')$ Green-függvény tartalmazza a határfeltételeket.

Ha a (2.13) operátoregyenlet, illetve a hozzá tartozó (2.14) integrálegyenlet magja Hilbert-Schmidt típusú (kompakt) akkor fennáll a Fredholm-alternatíva [16]: ha a

$$D(E) = \det(1 - \widehat{G}_0\widehat{V}) \quad (2.15)$$

Fredholm-determináns nem nulla, az inhomogén egyenletnek bármely $|\chi\rangle$ -re egyértelmű megoldása van. Ezek a szórési állapotok. Ha $D(E) = 0$, a homogén egyenletnek vannak nem triviális megoldásai (valós E esetén ezek a kötött állapotok, míg komplex E esetén a rezonanciák). Ekkor az inhomogén egyenletnek csak olyan $|\chi\rangle$ -nél van (nem egyértelmű) megoldása, amely az adjungált egyenlet megoldásainak alterére ortogonális. Ha ilyen megoldások léteznek akkor az a furcsa helyzet áll elő, hogy a diszkrét állapot az inhomogén szórési egyenletet is kielégíti. Az ilyen tulajdonságú állapotokat kontinuum kötött állapotoknak (continuum bound state) illetve virtuális állapotoknak (virtual state) nevezik [17].

A (2.10) radiális egyenletnek az alábbi, határfeltételekkel értelmezett megoldásait szokás definiálni.

Reguláris $\varphi_l(k, r)$ megoldásról beszélünk, ha mindkét határfeltételt az origóban rójuk ki, mégpedig úgy, hogy a megoldás és a deriváltja viselkedjen úgy az origóban mint a szabad megoldás:

$$\varphi_l(k, r) = r j_l(k, r), \quad \text{ha } r \rightarrow 0, \quad (2.16)$$

ahol $j_l(k, r)$ a szférikus Bessel-függvény [18], $k = (2E\mu/\hbar^2)^{1/2}$. Az ehhez tartozó integrálegyenlet

$$\varphi_l(k, r) = r j_l(k, r) + \int_0^r dr' G_{0l}(k, r, r') V(r') \varphi_l(k, r'), \quad (2.17)$$

$$G_{0l}(k, r, r') = k r r' (j_l(kr) n_l(kr') - n_l(kr) j_l(kr')), \quad (2.18)$$

$n_l(kr)$ a szférikus Neumann-függvény [18].

Ha mindkét határfeltételt az aszimptotikus tartományban rójuk ki, a Jost-megoldásokhoz jutunk. Az $f_l^\pm(k, r)$ Jost megoldásokat tehát

$$f_l^\pm(k, r) = k r h_l^\pm(kr), \quad \text{ha } r \rightarrow \infty \quad (2.19)$$

definiálja, ahol $h_l^\pm(kr)$ a kifutó/befutó Hankel-függvény, $h_l^\pm(kr) = n_l(kr) \pm i j_l(kr)$. Az integrálegyenlet

$$f_l^\pm(k, r) = kr h_l^\pm(kr) - \int dr' G_{0l}(k, r, r') V(r') f_l^\pm(k, r') \quad (2.20)$$

alakú.

A határfeltételek vegyes megadásával a ψ fizikai megoldást kapjuk:

$$\psi_l(k, 0) = 0 \quad (2.21)$$

$$\psi_l(k, r) = \frac{i}{2} kr \left[h_l^-(kr) - S_l(k) h_l^+(kr) \right], \quad \text{ha } r \rightarrow \infty, \quad (2.22)$$

ahol $S_l(k)$ az \widehat{S} szórásoperátor energiareprezentációbeli alakja, az S -mátrix. Egy csatorna esetén ez egy közönséges függvény. Integrális alakban

$$\psi_l(k, r) = kr j_l(kr) + \int dr' G_{0l}^+(k, r, r') V(r') \psi_l(k, r'), \quad (2.23)$$

$$G_{0l}^+(k, r, r') = -k r r' j_l(kr_<) h_l^+(kr_>). \quad (2.24)$$

$G_{0l}^+(k, r, r')$ a fizikai megoldás Green-függvénye, $r_<$ illetve $r_>$ pedig az r és r' közül a kisebbet, illetve a nagyobbat jelöli. Felhasználva a $(h_l^+(kr) - h_l^-(kr))/2i = j_l(kr)$ összefüggést, a fizikai megoldás (2.22) alakja átírható a

$$\psi_l(k, r) \sim \left(j_l(kr) + k a_l(k) h_l^+(kr) \right) \quad (2.25)$$

formára, ahol az

$$a_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik} \quad (2.26)$$

szórási amplitudó az l -hullámbeli teljes σ_l hatáskeresztmetszettel a

$$\sigma_l = |a_l(k)|^2 \quad (2.27)$$

kapcsolatban van. Valós energiáknál az \widehat{S} operátor unitér, így $S_l(k)$ felírható

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (2.28)$$

alakban, ahol $\delta_l(k)$ az l parciális hullámban megjelenő (valós) szórási fázistolás.

A reguláris-, Jost- és fizikai megoldások az alábbi kapcsolatban állnak egymással:

$$\varphi_l(k, r) = \frac{1}{2ik} \left[F_l(-k) f_l^+(k, r) - F_l(k) f_l^-(k, r) \right] \quad (2.29)$$

és

$$\psi_l(k, r) = k \varphi_l(k, r) / F_l(k). \quad (2.30)$$

Bevezettük az

$$F_l(k) = f_l^+(k, 0) \quad (2.31)$$

relációval értelmezett Jost-függvényt. Egyszerűen belátható, hogy

$$F_l(-k) = f_l^-(k, 0). \quad (2.32)$$

Felhasználva a (2.29), (2.19) és (2.18) egyenleteket és azt, hogy a (2.18)-beli Green-függvény átírható $G_{0l}(k, r, r') = \frac{i}{2}kr'r'(h_l^-(kr)h_l^+(kr') - h_l^+(kr)h_l^-(kr'))$ alakba, $F_l(k)$ -t integrálalakban is előállíthatjuk

$$F_l(k) = 1 + k \int dr' r' h_l^+(kr') V(r') \varphi_l(r'). \quad (2.33)$$

A (2.22), (2.29) és (2.30) egyenletekből megállapítható, hogy az S-mátrix a Jost-függvénnyel áll egyértelmű kapcsolatban

$$S_l(k) = \frac{F_l(-k)}{F_l(k)}. \quad (2.34)$$

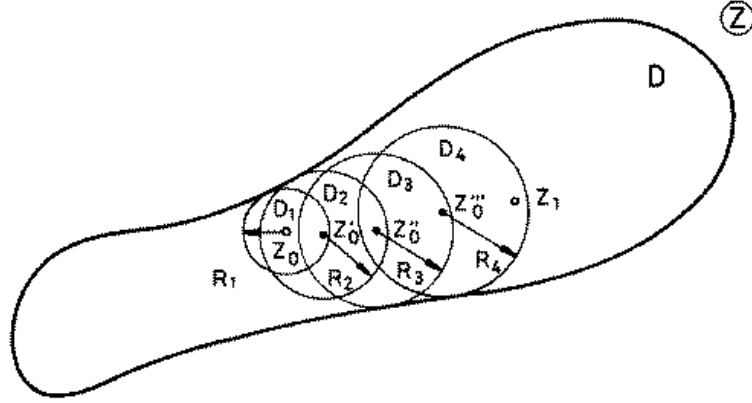
A reguláris megoldást az origóban kirótt határfeltétel definiálja és a megoldás aszimptotikus viselkedése tartalmazza a szórási információt. A Jost-megoldást az aszimptotikus határfeltétel értelmezi, s a megoldás $r=0$ helyen felvett értéke jellemzi a szórást. Az utóbbi előnyösebb analitikus tulajdonságokkal rendelkezik, ezért a továbbiakban ezt vizsgáljuk részletesebben.

2.2 Egycsatornás szóráselmélet a komplex energiasíkon

Ebben az alfejezetben az előzőekben ismertetett formulákat a komplex energia- (illetve k -) síkra terjesztjük ki. A kiterjesztés a komplex függvénytanból ismeretes analitikus folytatás [19] segítségével történik. Ennek lényege a következő. Legyen értelmezve egy $f(z)$ függvény a komplex z síkon. Tegyük fel, hogy a függvény analitikus (akárhányszor differenciálható) a z_0 pontban, és keressük a függvényt a z_1 pontban. Fejtsük Taylor-sorba $f(z)$ -t z_0 körül. A sorfejtés $f(z)$ -nek z_0 körüli konvergenciakörén belül konvergál, tehát ezen körön belüli bármely pontban $f(z)$ értéke a z_0 -beli függvényértékekkel és a deriváltakkal kifejezhető. A konvergenciakör sugarát z_0 és $f(z)$ z_0 -hoz legközelebbi pólusának távolsága adja meg. Ezután a konvergenciakör minden pontja körüli újabb konvergenciaköröket felvéve folytatható $f(z)$ lépésről-lépésre újabb tartományokra. Az 1. ábra mutatja a fent leírtak működési mechanizmusát.

Az analitikus folytatást az a tény teszi nagy gyakorlati jelentőségűvé, hogy ha egy valós tengelyen adott függvény a komplex sík egy adott pontjába analitikusan folytatható, akkor e folytatás eredménye éppen a függvény helyettesítési értéke az adott pontban. Ennek egyenes következménye például, hogy ha $f_1(z)$ illetve $f_2(z)$ analitikus a D_1 illetve D_2 egymással részben átfedő értelmezési tartományokon, és $f_1(z) = f_2(z)$ $D_1 \cap D_2$ -n, akkor $f_1(z) = f_2(z)$ az egész $D_1 \cup D_2$ tartományon is.

A radiális egyenlet 2.1. fejezetben ismertetett megoldásainak analiticitását a bennük szereplő függvények ($j_l(kr)$, $n_l(kr)$, $h_l^\pm(kr)$, $F_l(\pm k)$) analitikus viselkedése szabja meg. A



1. ábra: Az analitikus folytatás.

$j_l(kr)$ függvény analitikus az egész síkon, $n_l(kr)$ és $h_l^\pm(kr)$ pedig mindenütt, kivéve az origót.

Mivel a további megfontolásainkban az S -mátrix kulcsszerepet játszik, ennek analitikus tulajdonságait részletesebben megvizsgáljuk. Az S -mátrixot (2.34) alapján a Jost-függvénnyel fejezhetjük ki. Valós hermitikus potenciálok széles osztályára bizonyított, hogy a Jost-függvény analitikus az egész komplex síkon. Yukawa típusú potenciálokra az analiticitási tartomány az $Im(k) < (\text{hatótáv})^{-1}$ félsík. Ebben a tartományban tehát $S_l(k)$ pólusai kizárólag $F_l(k)$ zérushelyeitől származnak. A Jost-függvény definíciójából következik, hogy $F_l(k)$ valós a képzetes k tengelyen, ezért az $F_l(k)$ és $F_l(-k^*)^*$ függvények értéke itt megegyezik. Mivel $F_l(k)$ illetve $F_l(-k^*)^*$ analitikusan folytatható a $Re(k) \geq 0$ illetve $Re(k) \leq 0$ tartományra, amely tartományok részben átfednek, a fentiek értelmében $F_l(k) = F(-k^*)^*$ az egész síkon. A Jost-függvények ezen tulajdonságát a Schwarz-féle reflexiók szimmetriának hívják. Ebből következik, hogy az $F_l(k) = 0$ egyenlet gyökei, s így $S_l(k)$ pólusai a képzetes k tengelyre szimmetrikusan, párosával helyezkednek el.

Tekintsünk egy pólust a pozitív imaginárius féltengelyen, azaz a $k = i\gamma$ ($\gamma > 0$) pontban legyen $F(i\gamma) = 0$. Ekkor a reguláris megoldás

$$\varphi_l(k, r) = -\frac{1}{2\gamma} F_l(-i\gamma) f_l^+(k, r) \quad (2.35)$$

alakú, ami (2.19) és a Hankel-függvények tulajdonsága miatt négyzetesen integrálható. A pozitív képzetes pólus tehát kötött állapotokat ír le, $E_B = -\hbar^2 \gamma^2 / 2\mu$ negatív energiával.

Mivel a $k = \pm\kappa + i\gamma$ ($\gamma > 0$) koordinátájú pólusok szintén négyzetesen integrálható függvényeket eredményeznének, de $E = \hbar^2 (\pm\kappa + i\gamma)^2 / 2\mu$ komplex energiasajátértékekkel, a felső félsíkon csak tisztán képzetes gyökök fordulhatnak elő.

Vegyük szemügyre a valós tengelyt, $k = \kappa = \text{valós}$. A k gyök mellett létezik a $-k$ gyök is ami (2.29) miatt azt eredményezi, hogy a reguláris megoldás azonosan nulla. Ez (2.16)-tal csak akkor van összhangban ha $k=0$ és $l=0$. A valós tengelyen tehát legfeljebb a $k=0$ pontban lehet gyök hely, és az s -hullámú.

Az alsó félsíkon, ahol $Im(k) < 0$, a gyökhelyekre semmiféle fizikai korlátozás nincs,

mivel a $\varphi_l(k, r)$ függvények nem négyzetesen integrálhatók, s így nem reprezentálhatnak stabil, kötött állapotot. A következő eseteket különböztetjük meg.

A $k = -i\gamma$ pólus ($\gamma > 0$) a negatív képzetes tengelyen $E = -\hbar^2\gamma^2/2\mu$ negatív energiát ad, de a $\varphi_l(k, r)$ megoldás $r \rightarrow \infty$ esetén divergál. Ezt antikötött állapotnak nevezik. Ismert példája a spin-szingulett deuteron $E = -0.065$ MeV energiájú állapota.

A $k = \pm\kappa - i\gamma$ ($\gamma > 0$) gyökök neve elbomló- illetve felépülő rezonanciák ($|\kappa| < \gamma$ esetén kvázirezonanciák). Az elnevezést a valós tengelyhez közeli pólus és a valós (fizikai) energiákon mérhető hatáskeresztmetszet kapcsolata indokolja: az S -mátrixnak egy valós k tengelyhez közeli pólusa ($k = \kappa - i\gamma$, $\kappa > \gamma > 0$, $E = E_R - i\Gamma$) a valós energia függvényében Breit–Wigner-típusú

$$\sigma(E) \sim \frac{1}{E} \frac{\Gamma^2}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2} \quad (2.36)$$

hatáskeresztmetszethez vezet. Továbbá a δ_l fázistolás az energia függvényében az E_R energián áthaladva közel 180° -kal megnő, $S_l(k)$ pedig a komplex k síkon körívet ír le (Argand-kör). A fenti állítások igazolásához a (2.26), (2.27) és (2.28) mellett csak azt kell felhasználnunk, hogy egy pólushoz közeli valós k energián a Jost-függvény $F(k) = k - (\kappa - i\gamma)$ alakkal közelíthető. A rezonanciák további lényeges tulajdonsága, hogy, mint (2.22)-ből látható, a fizikai megoldás ilyenkor tisztán kifutó aszimptotikájú. Ezek az úgynevezett Gamow-állapotok.

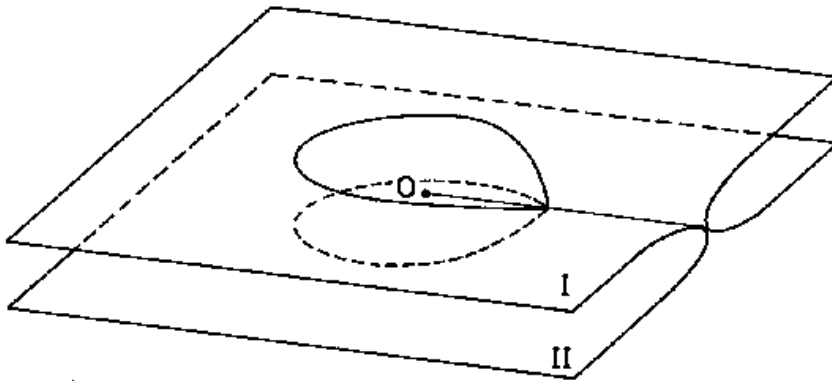
Az S -mátrix fentebb felsorolt diszkrét pólusainál a (2.13) Lippmann-Schwinger-egyenlet homogén részének van egyértelmű megoldása, azaz ezek a komplex energiaértékek a (2.15) Fredholm-determináns zérushelyei.

A rezonanciáknak, a fenti tulajdonságaik alapján, kétféle elméleti megközelítése lehetséges. Az indirekt módszer szerint minden valós energián megoldjuk a szórási feladatot, majd a megoldásokból kinyerhető $\delta_l(E)$ fázistolásokat elemezzük az E függvényében. Ahol $\delta_l(E)$ közel 180° -ot nő egy rövid $(E_0 - \Delta E, E_0 + \Delta E)$ szakaszon, ott található a rezonancia. Az $E = E_R - i\Gamma$ rezonanciapólus paramétereit $E_R = E_0$ illetve $\Gamma = 2/(d\delta_l(E)/dE)|_{E=E_0}$ adja. A direkt módszerrel a Schrödinger-egyenlet rezonancia-határfeltételt kielégítő megoldásait keressük a komplex energiasíkon. Az irodalomban használt néhány direkt és indirekt módszert a 2.4. fejezetben mutatunk be.

Mielőtt rátérnénk a sokcsatornás szóráselméletre egy fontos kérdést vizsgáljunk meg alaposabban. Ezidáig az E energiát és a k hullámszámot mint egyenértékű fogalmakat használtuk, amelyek függvényében az egyes mennyiségek értelmezve voltak. Azonban a kettejük kapcsolatát megadó

$$E = \frac{1}{2\mu} \hbar^2 k^2 \quad (2.37)$$

összefüggésből látszik, hogy az $E \leftrightarrow k$ leképezés a komplex síkon nem kölcsönösen egyértelmű. Ha k -t polárkoordinátákban $k = k_0 \exp(i\varphi)$ alakban adjuk meg, láthatjuk, hogy (2.37) a $0 < k_0 < \infty$, $0 < \varphi < \pi$ felső félsíkot a pozitív valós féltengely mentén bemetszett E síkra képezi le. Úgyszintén a $0 < k_0 < \infty$, $\pi < \varphi < 2\pi$ alsó félsíkot. A (2.37) leképezés minden E ponthoz, az $E=0$ és $E = \infty$ pontokat kivéve, két különböző k értéket rendel hozzá. Ez bizonyos nemkívánatos következményeket von maga után. Például valamely k -beli nem zárt görbe – például a $|k| = 1$, $0 \leq \varphi < \pi$ félkörív



2. ábra: A Riemann-felület.

– az E síkon zárt görbébe megy át. A komplex függvénytanban megadják a komplex számok ábrázolásának olyan geometriai módját, amely a (2.37) leképezést a teljes k -síkon kölcsönösen egyértelművé teszi. Ez a geometriai konstrukció a Riemann-felület, amely a következő módon van értelmezve. Vegyük az E síknak két példányát (levelét), bemetszésekkel pozitív valós féltengelyeik mentén, és tegyük fel, hogy az első (I.) levél viseli a felső, a második (II.) levél pedig az alsó k -félsík pontjainak képeit. Továbbá helyezzük el úgy az I. levelet a II. levélre, hogy az azonos koordinátájú pontok egymás fölött helyezkedjenek el. Ezután azon célból, hogy a leképezés folytonosságát ismét létrehozzuk, a negatív valós k -féltengelyen, egymással összeragasztjuk az I. bemetszés alsó partját (e féltengely képét a felső félsík leképezésénél) és a II. bemetszés felső partját (ugyanennek a tengelynek az alsó félsík leképezésénél adódó képét), hozzávéve egy félsugarat, amely a pozitív valós E féltengely fölött fekszik. Ugyanezen célból összeragasztjuk az I. levél bemetszésének felső partját és a II. levél bemetszésének alsó partját is egy pozitív valós E féltengely fölött fekvő félsugar segítségével. Azonban a célból, hogy a leképezés kölcsönös egyértelműségét megőrizzük, ezt a félsugarat különbözőnek kell tekintenünk az előzőtől annak ellenére, hogy geometriailag egybeesnek. Ha a $k = 0$ pontot egyszer körüljárjuk a $|k| = k_0$ körvonal mentén, akkor a (2.27)-nek megfelelő E pont az $E = 0$ pontot az $|E| = E_0$ körvonal mentén kétszer járja körül (2.ábra). Ezért a Riemann-felület ezen pontját négyzetes elágazási pontnak nevezzük.

A továbbiakban az $E \leftrightarrow k$ kapcsolatot azzal tesszük egyértelművé, hogy a T (felső) illetve B (alsó) jelöléssel megadjuk, hogy az adott k -hoz tartozó E melyik Riemann-levélen fekszik. A felső Riemann-levelet nevezzük fizikai levélnek is (amit P -vel jelölünk). A Riemann-felület szerkesztési módjából nyilvánvaló, hogy ha egy fizikai levélen lévő $E = \varepsilon + i\gamma$ ($\varepsilon > 0$, $\gamma > 0$) pontból indulva keresztezzük a pozitív valós energiatengelyt, akkor az alsó levélre jutunk. Hasonlóan az alsó levélről indulva a pozitív valós tengely keresztezésével a felső levélre juthatunk.

Az S -mátrix pólusai közül a kötött állapotok a felső levélen, míg az antikötött állapotok és a rezonanciák az alsó levélen fekszenek. A Riemann-felület definícióját a következő alfejezetben általánosítjuk többcsatornás esetre.

2.3 Többcsatornás szóráselmélet

Többcsatornás szórásról beszélünk, ha egy kezdő állapothoz több végállapot tartozhat. A kezdő állapotú és a végállapotú fragmentációkat nevezik befutó- illetve kifutó csatornáknak is. Tipikus végállapotok két összetett részecske ütközésekor a következők:

$$a + b \rightarrow \begin{cases} a + b & (a) \\ a^* + b^* & (b) \\ c + d & (c) \end{cases} \quad (2.38)$$

Az egyes folyamatokat rendre rugalmas (elasztikus) szórásnak, rugalmatlan gerjesztésnek és átrendeződési (rearrangement) ütközésnek nevezzük. Azokat a végállapotokat, amelyek egy adott tömegközépponti energián nem valósulhatnak meg, zárt csatornáknak nevezzük. Az az energia, amelynél egy csatorna kinyílik, a csatorna küszöbenergiája. A fenti folyamatokra a küszöbenergiák rendre

$$\begin{aligned} E_1^{\text{th.}} &= E_a + E_b - E_a - E_b = 0, \\ E_2^{\text{th.}} &= E_{a^*} + E_{b^*} - E_a - E_b, \\ E_3^{\text{th.}} &= E_c + E_d - E_a - E_b. \end{aligned} \quad (2.39)$$

A csatorna pontos definícióját a következőkben adjuk meg. Egy két részecskétől két részecskéhez vezető folyamatot meghatározó Hamilton-operátort célszerű az alábbi formában felírni

$$\widehat{H} = \widehat{H}_a(\boldsymbol{\xi}_a) + \widehat{H}_b(\boldsymbol{\xi}_b) + \widehat{H}_{ab}(\mathbf{r}_{ab}), \quad (2.40)$$

ahol \widehat{H}_a illetve \widehat{H}_b az a illetve b részecske belső Hamilton-operátora, \widehat{H}_{ab} pedig a relatív mozgáshoz tartozó Hamilton-operátor. A belső koordinátákat $\boldsymbol{\xi}_a$ illetve $\boldsymbol{\xi}_b$, a relatív koordinátát pedig \mathbf{r}_{ab} jelöli. Az egyes belső Hamilton-operátorok sajátfüggvényeit jelölje $\phi_{j_a m_a \pi_a}^{(a)}(\boldsymbol{\xi}_a)$ illetve $\phi_{j_b m_b \pi_b}^{(b)}(\boldsymbol{\xi}_b)$. Tehát fennállnak a

$$\widehat{H}_a \phi_{j_a m_a \pi_a}^{(a)}(\boldsymbol{\xi}_a) = E_{j_a m_a \pi_a}^{(a)} \phi_{j_a m_a \pi_a}^{(a)}(\boldsymbol{\xi}_a) \quad (2.41)$$

$$\widehat{H}_b \phi_{j_b m_b \pi_b}^{(b)}(\boldsymbol{\xi}_b) = E_{j_b m_b \pi_b}^{(b)} \phi_{j_b m_b \pi_b}^{(b)}(\boldsymbol{\xi}_b) \quad (2.42)$$

egyenletek, ahol j_a , m_a és π_a illetve j_b , m_b és π_b rendre a spin, spinvetület és paritás. Jelölje l_{ab} a relatív mozgás pálya-impulzusmomentumát. A J , M és π teljes impulzusmomentumhoz, impulzusmomentum-vetülethez és paritáshoz tartozó csatorna-hullámfüggvényt ezek után a

$$\Psi_{JM\pi}^{(a,b,j_a,j_b,\Lambda_{ab},l_{ab})}(\boldsymbol{\xi}_a, \boldsymbol{\xi}_b, \mathbf{r}_{ab}) = \left[\left[\phi_{j_a \pi_a}^{(a)} \phi_{j_b \pi_b}^{(b)} \right]_{\Lambda_{ab}} \chi_{l_{ab}}^{(ab)}(\mathbf{r}_{ab}) \right]_{JM\pi} \quad (2.43)$$

alakban írhatjuk fel, ahol χ a relatív mozgási függvény, $[\]$ az impulzusmomentum-csatolást jelöli és $\pi = \pi_a \pi_b (-1)^{l_{ab}}$.

Amennyiben az a -t és b -t felépítő részecskék valamely kvantumstatisztikát követnek, $\phi^{(a)}$ -nak és $\phi^{(b)}$ -nek szimmetrikusnak/antiszimmetrikusnak kell lennie, továbbá az a és

b összetett rendszer elemei között is szimmetrizálnunk/antiszimmetrizálnunk kell. A továbbiakban az α csatorna elnevezés az

$$\alpha = \{a, b, j_a, j_b, \Lambda_{ab}, l_{ab}, J, M, \pi\} \quad (2.44)$$

elemek összességét jelöli. Az α csatornabeli E_α^{th} küszöbenergia

$$E_\alpha^{\text{th}} = E_{j_a \pi_a}^{(a)} + E_{j_b \pi_b}^{(b)}, \quad (2.45)$$

az E_α tömegközépponti csatornaenergia pedig

$$E_\alpha = E - E_{j_a \pi_a}^{(a)} - E_{j_b \pi_b}^{(b)}, \quad (2.46)$$

ahol E a rendszer teljes energiája.

Amennyiben a (2.44) teljesen meghatározott csatornákat használjuk, a teljes Hilbert-tér az egyes csatornákhöz tartozó Hilbert-terek direkt összegeként állítható elő $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\alpha_1} \oplus \mathcal{H}_{\alpha_2} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{\alpha_n}$. Ha n csatorna van, ahhoz n radiális egyenlet tartozik, s azok megoldásait egyetlen n komponensű mennyiségnek tekinthetjük. Például a (2.21)-(2.22) fizikai megoldás valós energián, ha c -vel jelöljük a befutó csatornát,

$$\lim_{r_\gamma \rightarrow \infty} \Psi_\gamma^{(c)}(k_\gamma, r_\gamma) \sim \frac{1}{\sqrt{v_\gamma}} \left(\chi_\gamma^{(-)}(k_\gamma, r_\gamma) \delta_{\gamma c} - S_{\gamma c} \chi_\gamma^{(+)}(k_\gamma, r_\gamma) \right) \quad \gamma \text{ nyitott} \quad (2.47)$$

$$\lim_{r_\gamma \rightarrow \infty} \Psi_\gamma^{(c)}(k_\gamma, r_\gamma) \sim \chi_\gamma^B(k_\gamma, r_\gamma) \quad \gamma \text{ zárt} \quad (2.48)$$

alakú. Itt $v_\gamma = k\hbar/\mu$ a csatornasebesség, $\chi_\gamma^{(-)}$ illetve $\chi_\gamma^{(+)}$ a szabad probléma befutó- illetve kifutó megoldása, χ_γ^B kötött állapot, S pedig az $n \times n$ -es S -mátrix. Az egyes csatornákon belüli rugalmas hatáskeresztmetszet illetve a csatornák közötti reakció-hatáskeresztmetszet

$$\sigma_e^\gamma \sim |1 - S_{\gamma\gamma}|^2, \quad (2.49)$$

$$\sigma_r^{\gamma\delta} \sim |S_{\gamma\delta}|^2 \quad (2.50)$$

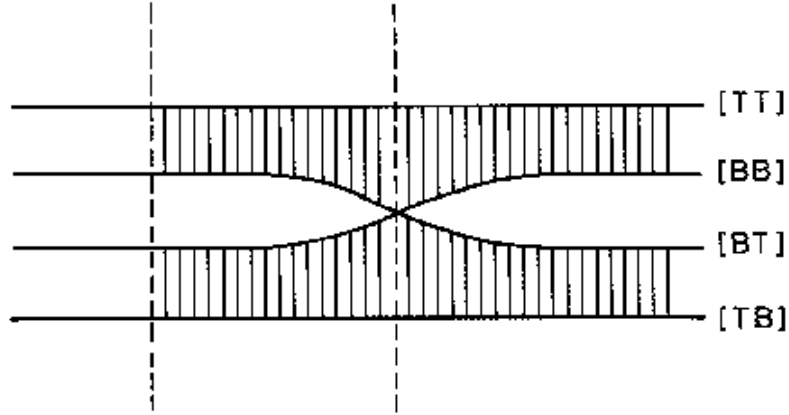
alakban adható meg az S -mátrix elemeivel. Az arányossági tényezők a kezdeti állapot impulzusmomentumokra való átlagolás és a végállapotbeli összegzés kinematikai faktoraiból számolhatók (lásd pl. [3]).

A további eredmények is értelemszerűen általánosíthatók. Mi itt csak az előző alfejezetben definiált Riemann-felület általánosítását részletezzük.

Egy adott E energián az E_α csatornaenergiák (2.46) alapján egyértelműen meghatározhatók. A k_α csatorna-hullámszámokat az

$$E_\alpha = \frac{1}{2\mu_\alpha} \hbar^2 k_\alpha^2 \quad \alpha=1,2,\dots,n \quad (2.51)$$

komplex leképezés értelmezi. A (2.51) -ben megjelenő, nem kölcsönösen egyértelműséget úgy szüntethetjük meg, hogy a kétfelű Riemann-felületet minden csatornaküszöbnél megszerkesztjük. Ezáltal n csatorna esetén 2^n levélből álló Riemann-felületet nyerünk. A konstrukciót két csatorna esetén a 3. ábra szemlélteti oldalnézetből. A szaggatott vonalak



3. ábra: Kétsatornás Riemann-felület oldalnézetből.

a küszöbenergiák, a függőleges vonalak pedig azt jelölik, hogy a megfelelő síkok az adott tartományon össze vannak kötve. A $\{E_\alpha\}_{\alpha=1}^n \leftrightarrow \{k_\alpha\}_{\alpha=1}^n$ hozzárendelést a Riemann-level megadásával tesszük egyértelművé. Ez legegyszerűbben a T és B betűkből álló n -tagú karaktersorozattal történhet. A $[TT \dots T]$ síkot fizikai síknak is nevezzük és P -vel is jelöljük. Az ábrán feltüntettük ezeket a karaktersorozatokat is. Könnyen belátható, hogy ha keresztezzük a valós energiatengelyt egy adott E energián, akkor a nyitott csatornák hullámszáma a k -síkon félsíkot vált (a felső félsíkról az alsóra kerül vagy fordítva), míg a zárt csatornák hullámszáma nem (a zárt csatorna k -ja ilyenkor a képzetes k -tengelyt keresztezi). Ez azt jelenti, hogy a $\{T, B\}$ karaktersorozatban a nyitott csatornák karakterei váltanak B -ről T -re illetve T -ről B -re. Ha például egy háromcsatornás esetben a $[BTB]$ síkon vagyunk és keresztezzük a valós tengelyt a második és harmadik küszöb között akkor a $[TBB]$ síkra jutunk. A fizikai síkról a többi síkra való eljutás útvonalait mutatja a 4. ábra egy kétsatornás esetben. Az 1, 2, 3 illetve 4 útvonal a $[TT] = P$, $[BB]$, $[BT]$ illetve $[TB]$ síkokra vezet. Az útvonalak végpontja ugyanaz a komplex érték mind a négy esetben.

Kötött állapotú zárt csatornák karaktere T , antikötött állapotoké B .

A (2.47), (2.48) fizikai megoldások folytathatók komplex energiákra. Itt az S -mátrixnak az alábbi szimmetriatulajdonságai vannak [20]:

$$S_{(ij\dots m)}(E_{(ij\dots m)}^*) = 1/S_{(ij\dots m)}^\dagger(E), \quad (2.52)$$

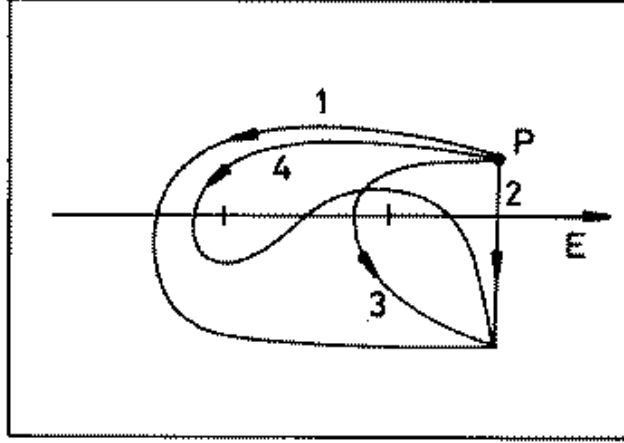
$$S_{(ij\dots m)}^\dagger(E) = S_{(ij\dots m)}(E^*), \quad (2.53)$$

ahol E és E^* a fizikai síkon lévő energiák, $E_{(ij\dots m)}$ pedig azon a Riemann-síkon van amelynek az i, j, \dots, m csatornához tartozó karaktere B , míg a többi csatornához tartozó karakter T . $S_{(ij\dots m)}$ jelöli az S -mátrix i, j, \dots, m -edik sora és oszlopa által meghatározott almátrixot. Összehasonlítva (2.52)-t és (2.53)-at a következő egyenlethez jutunk:

$$S_{(ij\dots m)}(E_{(ij\dots m)}) = 1/S_{(ij\dots m)}(E). \quad (2.54)$$

Egy kétsatornás esetben (2.54) a következő összefüggéseket jelenti

$$S(E \text{ a } [BB]\text{-n}) = 1/S(E \text{ a } P\text{-n}), \quad (2.55)$$



4. ábra: Az egyes Riemann-síkokra vezető útvonalak egy kétszatornás Riemann-felületen (a rövid függőleges vonalak a szatornaküszöbök).

$$S_{11}(E \text{ a } [BT]\text{-n}) = 1/S_{11}(E \text{ a } P\text{-n}), \quad (2.56)$$

$$S_{22}(E \text{ a } [TB]\text{-n}) = 1/S_{22}(E \text{ a } P\text{-n}), \quad (2.57)$$

ahol az (2.55)-beli S egy 2×2 -es mátrix.

Az előző alfejezetben láttuk, hogy a fizikailag érdekes jelenségek az S -mátrix pólusai-val kapcsolatosak. Vizsgáljuk meg a többszatornás szórás S -mátrixának pólusszerkezetét, és azt, hogy mely pólusoknak lehet hatása a valós energiákon mérhető fizikai mennyiségekre.

Vegyünk szemügyre egy n -szatornás szórási problémát. Ha a Hamilton-operátor hermitikus, úgy az S -mátrixnak a fizikai síkon csak $k_j = i\gamma_j$ ($i = 1, 2, \dots, n$) kötött állapot pólusai lehetnek. Szemeljük ki az n szatornából egyet, s jelöljük ezt i -vel. Tegyük fel, hogy i -ben (mint egyszatornás problémában) van egy $k_i = \kappa_i - i\gamma_i$ ($\gamma > 0$) pólus. Amennyiben i -hez hozzácsatoljuk a további $n - 1$ szatornát, úgy az i -beli pólus az n -szatornás problémában összesen 2^{n-1} darab pólus megjelenését eredményezi különböző Riemann-síkokon. Ezt a következőképpen láthatjuk be. Az n -szatornás probléma S -mátrixának pólushelyeit az $n \times n$ -es Fredholm-determináns zérushelyei adják. Legyen a szatornák közti csatolás zérus erősségű. Ekkor ez az $n \times n$ -es determináns a szatornák 1×1 -es Fredholm-determinánsainak szorzatára esik szét

$$D(E) = D_1(E_1)D_2(E_2) \cdots D_n(E_n), \quad (2.58)$$

ahol

$$E = E_1 + E_1^{\text{th.}} = E_2 + E_2^{\text{th.}} = \dots = E_n + E_n^{\text{th.}}. \quad (2.59)$$

Feltevésünk szerint $D_i(E_i) = 0$, így $D(E) = 0$ a többi szatorna Fredholm-determinánsának értékétől függetlenül. A (2.59) összefüggések egyértelműen meghatározzák a többi szatorna energiáját, az E_j szatornaenergiához azonban a $+k_j$ és $-k_j$, azaz B és T karakterű hullámszám egyaránt tartozhat. Tehát $D(E)$ -nek zérushelye van minden olyan Riemann-síkon, amelynek i -edik karaktere B . Ezeknek a síkoknak a száma pedig valóban

2^{n-1} . Zérus csatolási határesetben ezeknek az energiáknak a számértéke ugyanaz. Ha növeljük a csatolási erősséget, az egyes síkokon lévő pólushelyek eltolódnak egymáshoz képest, és keresztezve a valós energiatengelyt síkot is válthatnak.

A fizikai energiákon mérhető mennyiségekre gyakorolt hatásait illetően általában elfogadott vélemény, hogy a fizikai síkhoz legközelebbi, legrövidebb útvonalon elérhető síkon lévő pólusoknak lehet számottevő hatásuk. Ez a fizikai síkhoz legközelebbi sík az energia függvényében más és más lehet. Például egy kétcsatornás esetben a 4. ábra szerint a két csatornaküszöb között ez a sík a $[BT]$, míg a második küszöb fölött a $[BB]$. Általában a k -edik és $k + 1$ -edik csatorna küszöb között a $[B_1B_2 \dots B_kTT \dots T]$. Azokat a pólusokat, amelyek nem a fizikaihoz legközelebbi síkon fekszenek, [20] elnevezésével élve árnyékpólusoknak is hívják.

2.4 Rezonanciaállapotok leírása

Ebben az alfejezetben bemutatunk néhány, rezonanciaállapotok leírására használt módszert. A módszereket általában egycsatornás esetben, egytest-potenciálrezonanciákra mutatjuk be, ha szükséges az általánosítás lényeges pontjait megemlítve.

A 2.2. fejezetben említettük, hogy rezonanciák leírásának két módja lehet, a valós energiákon elvégzett szórás fázisanalízis indirekt módszere illetve a komplex energiasajátértékek direkt meghatározása.

Az indirekt módszerek közül megemlítjük azokat, amelyek a Kohn-Hulthén-féle variációs módszer különféle válfajain alapulnak. Ennek lényege, hogy a

$$\widehat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.60)$$

egyenlet (2.21), (2.22) szórás határfeltételt kielégítő megoldásait a

$$\Psi^t = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i + \phi^- - S\phi^+ \quad (2.61)$$

próbafüggvénnyel közelítjük, ahol a c_i -k és az S lineáris variációs paraméterek, a φ_i -k négyzetesen integrálható függvények, ϕ^+ és ϕ^- pedig az origóban reguláris, aszimptotikusan kifutó illetve befutó függvények (töltetlen esetben az origóban regularizált Hankel-, töltött esetben Coulomb-függvények).

Itt és a továbbiakban előfordulnak nem négyzetesen integrálható függvények. Ahhoz, hogy az ezeket tartalmazó mátrixelemeket ki tudjuk számítani, szükséges a belső szorzat általánosítása [21]. E szerint az $\langle \tilde{\chi}_1 | \chi_2 \rangle$ általánosított belső szorzat bra oldalán a radiális rész komplex konjugálva van, így a

$$\langle \tilde{\chi}_1 | \chi_2 \rangle = \int \tilde{\chi}_1^* \chi_2 d\mathbf{r} \quad (2.62)$$

integrálbeli $\tilde{\chi}_1^*$ olyan függvényt jelöl, amelynek csak a szögtől függő része van komplex konjugálva. Továbbá az \mathbf{r} szerinti integrálást egy rugalmas, komplex síkbeli kontúron elvégezve az eredetileg divergens integrál regularizálható. Kimutatható, hogy a hagyományos értelemben létező integrál az általánosított értelemben is létezik, és értéke ugyanaz.

A továbbiakban a \sim jelet nem írjuk ki, azok a mátrixelemek, amelyekben nem négyzetesen integrálható függvények lépnek fel, értelemszerűen az általánosított értelemben számolandók.

A (2.61)-beli variációs paramétereket a

$$\langle \delta\Psi^t | \widehat{H} - E | \Psi^t \rangle = 0 \quad (2.63)$$

projekciós egyenletből kaphatjuk meg. Behelyettesítve (2.61)-et és a variálást elvégezve a következő lineáris inhomogén algebrai egyenletrendszert nyerjük

$$\sum_{j=1}^N \langle \varphi_i | \widehat{H} - E | \varphi_j \rangle c_j + \langle \varphi_i | \widehat{H} - E | \phi^+ \rangle S = -\langle \varphi_i | \phi^- \rangle \quad i=1,2,\dots,N \quad (2.64)$$

$$\sum_{j=1}^N \langle \phi^+ | \widehat{H} - E | \varphi_j \rangle c_j + \langle \phi^+ | \widehat{H} - E | \phi^+ \rangle S = -\langle \phi^+ | \phi^- \rangle \quad (2.65)$$

Bármely adott $E > 0$ energiánál megoldva (2.64)–(2.65)-öt a c_i együtthatók és az S mátrix megkapható. Ez utóbbiból az $S = \exp(2i\delta)$ összefüggés alapján nyerhető a fázistolás. A (2.64)–(2.65)-beli mátrixelemekben ϕ^+ és ϕ^- nem négyzetesen integrálható függvények, a mátrixelemek számítása azonban hagyományos értelemben, komplex kontúr nélkül sem okoz gondot mert $(\widehat{H} - E) | \phi^\pm \rangle = 0$ ha $r \rightarrow \infty$.

Több csatorna esetén a fenti módszer

$$\Psi_\gamma^{(c)t} = \sum_{i=1}^N c_i^{(\gamma)} \varphi_i^\gamma + \frac{1}{\sqrt{v_\gamma}} (\phi_\gamma^- \delta_{\gamma c} - S_{\gamma c} \phi_\gamma^+) \quad \gamma = 1, 2, \dots, N \quad (2.66)$$

próbafüggvénnyel használandó. A csatornaindex γ , míg c a befutó csatorna. Zárt csatornára $S_{\gamma c}$ -nek nincs fizikai jelentése, az egyszerűség kedvéért jelöljük S -sel. Bebizonyítható, hogy a fenti variációs módszerrel nyert infinitezimális megváltozásokkal szemben stacionárius Ψ^t nem stacionárius S -mátrixot szolgáltat, és ez az S -mátrix többcsatornás esetben nem is szimmetrikus, és az unitaritás sincs garantálva. Azonban az így nyert S -mátrixhoz hozzáadva egy jól meghatározott korrekciót, az úgynevezett Kato-korrekciót, S stacionárius és szimmetrikus lesz. Erről részletesebben a 3.4. fejezetben szólnunk.

A nem négyzetesen integrálható függvények megjelenése (2.61)-ben néha gondokat okozhat a (2.64)–(2.65) mátrixelemek számítása során (például egy soktestprobléma esetén). Éppen ezért felmerülhet az igény egy olyan módszer iránt, amely csak négyzetesen integrálható függvényeket használ a szórási probléma leírására. A [22] cikkben kidolgoztak egy ilyen módszert, amely a kötött állapotok bázissorfejtéses módszer (WFE) általánosításának fogható fel. A WFE módszer a

$$\Psi^t = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i \quad (2.67)$$

próbafüggvényt használja, amelyet (2.63)-ba helyettesítve a következő homogén algebrai egyenletrendszert nyerjük:

$$\sum_{j=1}^N \langle \varphi_i | \widehat{H} - E | \varphi_j \rangle c_j = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.68)$$

Ez egy sajátérték-egyenlet. Negatív energiájú megoldásai a kötött állapotok, míg a pozitív energia-sajátértékek a kontinuum diszkretizációjaként foghatók fel. A pozitív energiájú megoldások azokat a szórási függvényeket közelítik, amelyeknek a_i -nál, az i -edik bázisfüggvény "hatótávolságánál", nódusuk van. A szórási információ ezekhez az energiákhoz aránylag egyszerűen kinyerhető. A módszerben az a kényelmetlen, hogy az energiaértékeket nem mi írjuk elő, hanem a bázis megválasztásával automatikusan adódnak.

Ha különböző N értékekre oldjuk meg (2.68)-at és a különböző nódusszámokhoz tartozó energiákat ábrázoljuk N függvényében, kis meredekségű platóval rendelkező görbékert kapunk. Belátható, hogy a platóhoz tartozó energiát a rezonancia valós részének tekinthetjük, a rezonancia szélességét pedig a plató meredekségéből olvashatjuk ki [23,22].

A fenti Kohn-Hulthén-féle és a WFE módszer egyfajta ötvözésének tekinthető Filipov módszere [24]. Ő is a (2.61) próbafüggvényből indul ki, de mindvégig négyzetesen integrálható függvényeket használ az aszimptotikus függvények kifejtésére is. Ez nem mond ellent a matematikai tételeknek, mivel azok nem e kifejtés lehetetlenségét állítják, csupán azt, hogy egy ilyen kifejtés lehetőségére nincs garancia.

Tegyük fel, hogy a reguláris Coulomb-, illetve Bessel-függvények és az origóban regularizált Coulomb-, illetve Neumann-függvények kifejezhetők a $\{\varphi_i\}$ négyzetesen integrálható bázison. Közelítsük a hullámfüggvényt a belső tartományon is ugyanezen a bázison. Legyen a szórási próbafüggvény

$$\Psi^t = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i + \sum_{i=N+1}^{\infty} \bar{c}_i^{\text{reg}} \varphi_i - \text{tg} \delta \sum_{i=N+1}^{\infty} \bar{c}_i^{\text{irreg}} \varphi_i \quad (2.69)$$

alakú, ahol δ a fázistolás. A \bar{c}_i^{reg} és \bar{c}_i^{irreg} együtthatók mint az energia függvényei oszcillátor- és Laguerre-bázis esetén, töltetlen és töltött esetre [25]-ben található. Az N értékét úgy kell megválasztani, hogy a rövid hatótávolságú potenciál

$$\langle \varphi_k | V_s | \varphi_l \rangle \quad (2.70)$$

mátrixeleme $k > N$ és/vagy $l > N$ esetén jó közelítéssel elhanyagolható legyen. Ekkor, figyelembe véve még, hogy a Hamilton-operátor aszimptotikus része (T illetve $T + V_c$) a fenti bázisokon tridiagonális, a mátrixelemek kiszámítása a (2.69)-beli végtelen szummák ellenére is elvégezhető. A (2.69) próbafüggvényt (2.63)-ba helyettesítve egy $N + 1$ egyenletből álló inhomogén algebrai egyenletrendszert kapunk az $N + 1$ ismeretlenre ($c_1, c_2, \dots, c_N, \text{tg} \delta$).

A rezonanciák direkt leírásának egyik gyakran használt módszere a Siegert-féle variációs módszer. Ez a Kohn-Hulthén-módszer mintájára a Rayleigh-Ritz-féle variációs módszer kiterjesztése komplex energiákra. A próbafüggvényt

$$\Psi^t = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i + c_{N+1} \phi^+(E) \quad E \in C \quad (2.71)$$

alakban vesszük fel. Behelyettesítve (2.71)-et a (2.63) projekciós egyenletbe, az alábbi homogén egyenletrendszert nyerjük

$$\sum_{j=1}^N \langle \varphi_i | \widehat{H} - E | \varphi_j \rangle c_j + \langle \varphi_i | \widehat{H} - E | \phi^+ \rangle c_{N+1} = 0 \quad i=1,2,\dots,N \quad (2.72)$$

$$\sum_{j=1}^N \langle \phi^+ | \widehat{H} - E | \varphi_j \rangle c_j + \langle \phi^+ | \widehat{H} - E | \phi^+ \rangle c_{N+1} = 0. \quad (2.73)$$

Ez $N+1$ homogén egyenlet $N+2$ ismeretlenre $(c_1, c_2, \dots, c_N, c_{N+1}, E)$. Ezért csak bizonyos diszkrét energiáknál létezik triviálistól különböző megoldása. Ezek a megoldások a

$$D(E) = \det \begin{bmatrix} \langle \varphi_1 | \widehat{H} - E | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \widehat{H} - E | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \widehat{H} - E | \phi^+ \rangle \\ \langle \varphi_2 | \widehat{H} - E | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | \widehat{H} - E | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_2 | \widehat{H} - E | \phi^+ \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \phi^+ | \widehat{H} - E | \varphi_1 \rangle & \langle \phi^+ | \widehat{H} - E | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \phi^+ | \widehat{H} - E | \phi^+ \rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (2.74)$$

egyenletből nyerhetők. Bár a mátrixelemekben fellépő ϕ^+ függvény nem négyzetesen integrálható, hanem exponenciálisan növekvő amplitudók között oszcilláló Gamow-függvény, a mátrixelemek gond nélkül számolhatók, mivel $(\widehat{H} - E) | \phi^+ \rangle = 0$ ha $r \rightarrow \infty$. Az energiára nézve (2.74) egy transzcendens egyenlet, ugyanis ϕ^+ nem lineárisan függ E -től. Egy komplex E változós komplex értékű függvény E_0 zérushelyeit kell meghatároznunk. Ezt megtehetjük például a [26]-beli recept szerint. Fejtsük Laurent-sorba $1/D(E)$ -t E_0 körül a -1 -edik tagtól kezdődően (ezzel feltételeztük, hogy (2.74)-nek csak egyszeres multiplicitású gyökeit keressük)

$$1/D(E) = \frac{c_{-1}}{E - E_0} + c_0 + c_1(E - E_0) + \dots, \quad (2.75)$$

és álljunk meg az n -edik tagnál. Helyettesítsünk be E helyére rendre $n+3$ olyan értéket, amely várhatóan mind E_0 közelébe esik. Az így kapott $n+3$ algebrai egyenletet megoldva becslést kapunk E_0 -ra. Ezt és az előző értékek közül $n+2$ -t (2.75)-be helyettesítve E_0 -ra újabb becslést kapunk. Ezt az eljárást a numerikus konvergenciáig kell folytatni.

Filippov módszerének direkt változatát Okhrimenko adta meg [27]. A próbafüggvényt

$$\Psi^t = \sum_{j=1}^N c_j \varphi_j + \sum_{j=N+1}^{\infty} (\bar{c}_j^{\text{irreg}} \varphi_j + i \bar{c}_j^{\text{reg}}) \varphi_j \quad E, \bar{c}_j^{\text{reg}}, \bar{c}_j^{\text{irreg}} \in \mathbb{C} \quad (2.76)$$

alakban vette fel (i az imaginárius egység). A projekciós egyenlet N algebrai egyenletet szolgáltat $N+1$ változóra (c_1, c_2, \dots, E)

$$\sum_{k=1}^N \langle \varphi_j | \widehat{H} - E | \varphi_k \rangle c_k = - \sum_{k=N+1}^{\infty} \langle \varphi_j | \widehat{H} - E | \varphi_k \rangle (\bar{c}_k^{\text{irreg}}(E) + i \bar{c}_k^{\text{reg}}(E)), \quad (2.77)$$

ahol $j = 1, 2, \dots, N$. Ez így önmagában nem oldható meg, ezért Okhrimenko bevezeti a

$$c_N = (\bar{c}_N^{\text{irreg}} + i \bar{c}_N^{\text{reg}}) \quad (2.78)$$

csatolási feltételt. Ezzel a módszer variációs jellege megszűnt, hiszen utólag, a variálás után róttunk ki egy extra feltételt. Így a projekciós egyenlet (2.77) levezetése során legfeljebb mint heurisztikus elv használható. A módszert egy modellproblémára alkalmazva kimutattuk [28], hogy a (2.78) feltétel szükséges, de nem elégséges: a módszer az igazi

gyökök mellett álrezonanciákat is produkál. Az igazi megoldások kiválogatására és az N -beli konvergencia gyorsítására egy extra nemlineáris paraméter bevezetésével módszertadtunk. Ezt használva Okhrimenko módszere kellő elővigyázatossággal alkalmazható rezonanciák leírására.

Az eddigiekből is kiderült, hogy a rezonanciaállapotok direkt leírásának egyik fő nehézsége a Gamow-aszimptotika beépítése a hullámfüggvénybe. Az atom- és molekulafizikában kidolgozott komplex skálázási módszer [29,30] kiküszöböli ezt a nehézséget. Vessük alá a

$$\widehat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.79)$$

egyenletet egy

$$U(\theta)f(r) = e^{\frac{3}{2}i\theta}f(re^{i\theta}) \quad (2.80)$$

módon értelmezett folytonos paraméterű, nemkorlátos hasonlósági transzformációnak. Bizonyos matematikai feltételeknek eleget tevő (úgynevezett dilatációs analitikus [31]) lokális és nemlokális potenciálok széles osztályára a

$$\widehat{H}_\theta\Psi_\theta = E\Psi_\theta, \quad (2.81)$$

$$\widehat{H}_\theta = U(\theta)(\widehat{T} + \widehat{V})U(\theta)^{-1}, \quad \Psi_\theta = U(\theta)\Psi(r) \quad (2.82)$$

transzformált (nem önadjungált Hamilton-operátort tartalmazó) probléma spektrumáról bebizonyítható a következő (ABC-) tétel [32]:

- a \widehat{H}_θ operátor folytonos spektruma az $E \exp(-2i\theta)$, $E > 0$ egyenlettel adott félegyenes lesz, tehát \widehat{H} folytonos spektruma leforog az alsó komplex energiasíkba;
- a \widehat{H} kötött állapotú sajátértékei, valamint E_{res} ($|\arg E_{\text{res}}| < 2\theta$) Gamow-energiái a \widehat{H}_θ spektrumához tartoznak négyzetesen integrálható sajátfüggvénnyel.

Ezért (2.81) diszkrét megoldásait a legkülönbözőbb négyzetesen integrálható bázist használó közelítő módszerrel megkaphatjuk. Például a WFE módszer is alkalmazható

$$\Psi_\theta = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i \quad (2.83)$$

próbafüggvénnyel. Az energiasajátértékek és a sajátfüggvények együtthatói a

$$\sum_{j=1}^N \langle \varphi_i | \widehat{H}_\theta - E | \varphi_j \rangle c_j = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.84)$$

egyenletrendszerből nyerhetők. Mivel a \widehat{H}_θ operátor nem önadjungált, a mátrixelemeket a fentebb említett általánosított értelemben kell számolnunk.

Az (2.84) sajátérték-egyenletből N darab megoldást kapunk. A gyökök nagy része egy, a valós energiatengellyel közel 2θ szöget bezáró félegyenes mentén helyezkedik el. Ezek a kontinuum diszkrétizált pontjai. A gyökök egyenesre való illeszkedésének pontossága és a hajlásszög 2θ -hoz való közelsége méri a módszer jóságát az adott N és θ értékeknél. Néhány gyök leesik a 2θ félegyenesről. Ezek a rezonanciák (és a kötött

állapotok). θ értékének változtatásával a kontinuum pontok egy körív mentén mozognak, míg a diszkrét energia-sajátértékek jó közelítéssel helyben maradnak, illetve csak kis mértékben mozdulnak el az úgynevezett θ -trajektórián. A rezonancia pontos helyét a viriáltétel komplex energiákra történő általánosítása alapján [33] a θ -trajektória azon pontjával azonosíthatjuk, ahol a θ -beli változási sebesség minimális, $dE/d\theta|_{E=E_{\text{res}}} \approx 0$.

Balslev bebizonyította [34], hogy az eredeti probléma Ψ hullámfüggvényét a transzformált probléma Ψ_θ megoldásából az $U(\theta)^{-1}$ visszatranszformáló operációval nyerhetjük. Meglepetés volt látni, hogy amennyiben (2.81) megoldásának Ψ_θ^N közelítését határozzuk meg, a visszatranszformálás után nyerhető Ψ^N eltér az egzakt Ψ megoldástól N bármilyen nagy értéke esetén is, azaz

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (U(\theta)^{-1} \Psi_\theta^N) \neq \Psi. \quad (2.85)$$

E probléma magyarázatát abban találtuk meg [35], hogy a $\lim_{N \rightarrow \infty}$ és az $U(\theta)^{-1}$ operációk nem cserélhetők fel, így, noha Balslev tétele miatt

$$U(\theta)^{-1} \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_\theta^N \right) = \Psi, \quad (2.86)$$

a fordított sorrendű operációk nem állítják elő Ψ -t. Kimutattuk, hogy a közelítő megoldás Ψ -től való eltéréseinek mértéke bázisfüggő, és példát adtunk olyan bázisra, amelynél ez az eltérés gyakorlatilag elhanyagolható.

Kötött, rezonancia- és szórési állapotok egységes keretben történő tárgyalását teszi lehetővé a potenciál szeparábilis sorfejtésén alapuló PSE-módszer [36]. Kötött és rezonans állapotok esetén a módszer kiindulási pontja a (2.13) Lippmann-Schwinger-egyenlet homogén része. Közelítsük a rövid hatótávolságú potenciáloperátort a $\{|i\rangle\}_{i=1}^N$ négyzetesen integrálható bázison a

$$\widehat{V} \approx \sum_{i,j=1}^N |i\rangle \langle i| \widehat{V} |j\rangle \langle j| = \sum_{i,j=1}^N |i\rangle V_{ij} \langle j| \quad (2.87)$$

szeparábilis alakkal. Behelyettesítve ezt (2.13) homogén részébe és bra oldalról hatva a k -adik bázisfüggvénnyel

$$\langle k | \Psi \rangle = \sum_{i,j=1}^N \langle k | \widehat{G}_0 | i \rangle V_{ij} \langle j | \Psi \rangle \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (2.88)$$

Bevezetve az $\langle i | \Psi \rangle = c_i$, $\langle i | \widehat{G}_0 | j \rangle = G_{ij}^0$ és az $\langle i | j \rangle = S_{ij}$ jelölést, (2.88)-at átrendezve a következőt kapjuk:

$$\sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^N G_{ki}^0 V_{ij} - S_{kj} \right) c_j = 0 \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (2.89)$$

Ennek a homogén lineáris egyenletrendszernek akkor van triviálistól különböző megoldása ha

$$\det \left(\sum_{i=1}^N G_{ki}^0 V_{ij} - S_{ij} \right) = 0 \quad k, j = 1, 2, \dots, N. \quad (2.90)$$

Ez az egyenlet szolgáltatja a kötött állapotú és rezonanciaenergiákat, amelyeket visszahelyettesítve (2.89)-be a hullámfüggvény kombinációs együtthatói is megkaphatók. A módszer abban különbözik a WFE módszertől, hogy csak a rövid hatótávolságú potenciált közelíti, mégpedig olyan bázison, amelyen az aszimptotikát tartalmazó Green-operátor mátrixelemei egzaktul számíthatók. Így a megoldásból adódó közelítő hullámfüggvény automatikusan jó aszimptotikájú. Ez igen erős korlátozást jelent $\{|i\rangle\}$ -re, ami megnehezíti a módszernek nem triviális problémákra való alkalmazhatóságát.

Konkrét feladatok megoldása során a fenti módszerek közül mindazok használhatók, amelyek technikailag viszonylag könnyen kivitelezhetők és eleget tesznek a megkívánt pontossági feltételeknek.

3. fejezet

A mikroszkopikus dinamikai klasztermodell

Ebben a fejezetben bemutatjuk a könnyű atommagok szerkezetének és reakcióinak egységes leírására kidolgozott mikroszkopikus dinamikai klasztermodellt. Ennek egyik alapváltozata a rezonálócsoport-modell (RGM), amely tartalmazza az N -részecske-probléma speciálisan választott bázison csonkított alterét és az ezen a téren értelmezett dinamikai alapegyenletet. Az RGM egyenlet megoldási módszerei közül a generátorkoordináták módszerét (GCM) mutatjuk be részletesen. Ismertetjük a csomósodás mértékének jellemzésére bevezetett mennyiségek definícióját, és végül bemutatunk egy, a többcsatornás szóráselmélet keretei között megfogalmazott módszert magreakciók klasztermodellbeli leírására.

3.1 A rezonálócsoport–modell

Tegyük fel, hogy az N nukleont tartalmazó mag az A illetve B nukleonszámú klaszterből épül fel ($N = A + B$). Az RGM hullámfüggvénye a következő alakú

$$\Psi = \mathcal{A}_{AB} \left(\phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} F(\mathbf{r}_{AB}) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) \right), \quad (3.1)$$

ahol ϕ_A^{int} és ϕ_B^{int} a klaszterek belső állapotát leíró normált, antiszimmerikus, translációinvariáns, harmonikusoscillátor-függvényekből felépülő héjmodellfüggvény, $F(\mathbf{r}_{AB})$ a klaszterek relatív mozgásának függvénye, míg $Z(\mathbf{r}_{\text{cm}})$ a tömegközéppont mozgását leíró négyzetesen integrálható, normált függvény. Az \mathcal{A}_{AB} klaszterek közötti maradék-antiszimetrizátort az

$$\mathcal{A}_{AB} = \left(\frac{A!B!}{(1 + \delta_{AB})N!} \right)^{1/2} \left(1 + \sum_{\varepsilon(A \leftrightarrow B)} (-1)^\varepsilon \hat{P}_\varepsilon \right) \quad (3.2)$$

összefüggés definiálja, ahol $\delta_{AB}=1$, ha a klaszterek azonosak és nulla egyébként, \hat{P}_ε az ε permutációt előállító permutációoperátor, $(-1)^\varepsilon$ pedig az ε permutáció paritása. Az összegzést minden olyan permutációra elvégezzük, ami a klaszterek közti részecskecseréből áll. A belső állapotú függvényeket úgy építjük fel, hogy az A illetve B klaszterhez rendelt harmonikusoscillátor-potenciál legalacsonyabb állapotaiba helyezzük az A , illetve

B számú nukleont. Ekkor a Bethe-Rose tétel [37] értelmében a harmonikusoszillátorfüggvényekből mint egyrészezske-pályákból felépülő C klaszter Slater-determinánsai faktorizálódnak

$$\Psi_{Sl}^C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_C) = \left(\frac{C\beta_C}{\pi} \right)^{3/4} \exp\left(-\frac{C\beta_C}{2}\mathbf{r}_C^2\right) \phi_C^{\text{int}}(\beta_C), \quad (3.3)$$

ahol $C = A$ vagy B , β_C pedig a C klaszter oszcillátor méretparamétere $\beta_C = m\omega_C/\hbar$, és az \mathbf{r}_i egyrészezske-koordinátákba beleértjük a spin-izospin koordinátákat is. A klaszterek tömegközéppontjait

$$\mathbf{r}_C = \frac{1}{C} \sum_{i=1}^{N_C} \mathbf{r}_i \quad (3.4)$$

definiálja, míg a mag tömegközéppontjába mutató vektor, illetve a klaszterek tömegközéppontjai közötti vektor

$$\mathbf{r}_{\text{cm}} = \frac{A\mathbf{r}_A + B\mathbf{r}_B}{N}, \quad (3.5)$$

$$\mathbf{r}_{AB} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B. \quad (3.6)$$

A (3.3)-beli ϕ_C^{int} belső állapotú függvények csak valamilyen $\boldsymbol{\xi}_C := \{\boldsymbol{\xi}_1^C, \boldsymbol{\xi}_2^C, \dots, \boldsymbol{\xi}_{N_C-1}^C\}$ belső relatív koordinátáktól függenek, ezért translációinvariánsak. A $\boldsymbol{\xi}_C$ koordináták sokféleképpen megadhatók, például választhatjuk a

$$\boldsymbol{\xi}_i^C = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_C \quad i = 1, 2, \dots, N_C \quad (3.7)$$

koordinátákat. A (3.7) egyenletekből csak $N_C - 1$ darab független, ugyanis figyelembe véve (3.4)-et

$$\boldsymbol{\xi}_C^C = -\boldsymbol{\xi}_1^C - \boldsymbol{\xi}_2^C \dots - \boldsymbol{\xi}_{N_C-1}^C. \quad (3.8)$$

Bevezethetjük a Jacobi-koordinátákat is

$$\boldsymbol{\xi}_i = \mathbf{r}_{i+1} - \frac{1}{i} \sum_{j=1}^i \mathbf{r}_j \quad i = 1, 2, \dots, N_C - 1. \quad (3.9)$$

Az (3.1) hullámfüggvényben ezek szerint az eredeti $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{A+B}\}$ egyrészezske-koordinátákról áttértünk a $\{\boldsymbol{\xi}_1^A, \boldsymbol{\xi}_2^A, \dots, \boldsymbol{\xi}_{N_A-1}^A, \boldsymbol{\xi}_1^B, \boldsymbol{\xi}_2^B, \dots, \boldsymbol{\xi}_{N_B-1}^B, \mathbf{r}_{AB}, \mathbf{r}_{\text{cm}}\}$ koordinátákra.

A hullámfüggvény (3.1)-beli speciális megválasztása teszi lehetővé, hogy a klasztereken belüli kvantumállapotok rögzítésével az eredeti N -test-problémát a klaszterek közötti dinamikát leíró $F(\mathbf{r}_{AB})$ relatív mozgási hullámfüggvény meghatározására redukáljuk. Az $F(\mathbf{r}_{AB})$ optimális megválasztására a (2.63) projekciós egyenletet használjuk fel. Az ebben szereplő Hamilton-operátor $\widehat{H} - \widehat{T}_{\text{cm}}$. Itt \widehat{H} az N -test rendszer mikroszkopikus Hamilton-operátora

$$\widehat{H} = \widehat{T}_{\text{cm}} + \widehat{H}_A^{\text{int}} + \widehat{H}_B^{\text{int}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}_{AB}} + \widehat{V}_{AB}, \quad (3.10)$$

ahol $\widehat{T}_{\text{cm}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{r}_{\text{cm}}}$ a tömegközéppont kinetikus energiája, M a teljes, μ pedig a redukált tömeg. A $\widehat{H}_C^{\text{int}}$ a klaszterek belső Hamilton-operátorai, \widehat{V}_{AB} pedig a klaszterek közt ható potenciál

$$\widehat{V}_{AB} = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \widehat{V}_{ij}, \quad (3.11)$$

ahol \widehat{V}_{ij} a nukleon-nukleon kölcsönhatás operátora. A C klaszter belső energiája:

$$E_C = \langle \phi_C^{\text{int}} | \widehat{H}_C^{\text{int}} | \phi_C^{\text{int}} \rangle. \quad (3.12)$$

Ahhoz, hogy (3.1)-et a projekciós egyenletben felhasználhassuk, valamilyen bázisállapotok szerinti sorfejtésként kell előállítanunk. Az RGM-beli folytonos indexű bázisfüggvényt

$$\Psi_{\mathbf{r}} = \mathcal{A}_{AB} \left(\phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) \right) \quad (3.13)$$

definiálja, így (3.1) felírható

$$\Psi = \int \Psi_{\mathbf{r}} F(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.14)$$

alakban. Ezt és a (3.10) Hamilton-operátort (2.63)-ba írva nyerhető az RGM alapegyenlete

$$\int \left(H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - EN(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) F(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = 0, \quad (3.15)$$

aminek energia és normálási magfüggvényeit (kerneleit) a

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) | \widehat{H} - \widehat{T}_{\text{cm}} | \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{AB}) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) \rangle \quad (3.16)$$

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) | \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{AB}) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) \rangle \quad (3.17)$$

összefüggések definiálják. Felhasználva (3.4)-et és (3.5)-öt belátható, hogy $Z(\mathbf{r}_{\text{cm}})$ a koordinátaiban permutációinvariáns függvény, így felcserélhető az antiszimetrizálással. Mivel $Z(\mathbf{r}_{\text{cm}})$ normált és $\widehat{H} - \widehat{T}_{\text{cm}}$ nem függ a tömegközéppont koordinátájától, a (3.16)-(3.17)-beli \mathbf{r}_{cm} szerinti integrálás elvégezhető

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) | \widehat{H} - \widehat{T}_{\text{cm}} | \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) \rangle, \quad (3.18)$$

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) | \mathcal{A}_{AB} \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) \rangle. \quad (3.19)$$

Az

$$\mathcal{A}_{AB} = 1 + \mathcal{A}'_{AB}, \quad (3.20)$$

felbontással leválaszthatjuk a kicserélődésből eredő részt

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_D + H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_E \quad (3.21)$$

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_D + N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_E. \quad (3.22)$$

A D direkt, illetve E kicserélődési kernelek definíciója nyilvánvaló. Mivel a ϕ_C^{int} belső állapotok egyre vannak normálva

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_D = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.23)$$

Továbbá, felhasználva (3.12)-t, egyszerű számolással a

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_D = \left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + E_A + E_B + V_{AB}(\mathbf{r}) \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.24)$$

alakra jutunk, ahol a $V_{AB}(\mathbf{r})$ direkt (folding) potenciált

$$V_{AB}(\mathbf{r}) = \langle \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) | \widehat{V}_{AB} | \phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{AB}) \rangle \quad (3.25)$$

definiálja. A (3.23) és (3.24) összefüggéseket (3.15)-be helyettesítve az RGM egyenlet az egyrészesekés Schrödinger-egyenlethez hasonló

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{AB}(\mathbf{r}) \right) F(\mathbf{r}) + \int \left(H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_E - EN(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_E \right) F(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = (E - E_A - E_B) F(\mathbf{r}) \quad (3.26)$$

alakot ölti. A $(H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_E - EN(\mathbf{r}, \mathbf{r}')_E)$ energiafüggő nemlokális potenciál a (3.20)-beli \mathcal{A}'_{AB} klaszterek közötti részecskecsereket leíró operátor következménye.

Eddig nem specifikáltuk az (3.1) hullámfüggvény impulzusmomentum-térbeli jó kvantumszámait. Ezt tömegközépponti rendszerben ($\mathbf{r}_{cm} = 0$) a (2.43) csatorna-hullámfüggvény mintájára

$$\Psi_{JM\pi}^{(A,B,j_A,j_B,\Lambda_{AB},l_{AB})}(\boldsymbol{\xi}_A, \boldsymbol{\xi}_B, \mathbf{r}_{AB}) = \left[\left[\phi_{A j_A \pi_A}^{\text{int}} \phi_{B j_B \pi_B}^{\text{int}} \right]_{\Lambda_{AB}} F_{l_{AB}}^{(AB)}(\mathbf{r}_{AB}) \right]_{JM\pi} \quad (3.27)$$

módon tehetjük meg, a jelölések megegyeznek a (2.43)-beliekkel. Ha a klaszterek belső pálya-impulzusmomentuma nulla, j_A , illetve j_B a klasztereket alkotó nukleonok összecsatolt spinjével egyezik meg.

A (3.27)-beli hullámfüggvény egy adott $A + B$ típusú tagozódást és meghatározott impulzusmomentum-konfigurációt ír le. A magok kötött állapotának leírásánál kívánatos, magreakciók esetén pedig egyenesen szükségeszerű, hogy az N -részeske Hilbert-terét több különböző (3.27) típusú állapot szuperpozíciójából építsük fel

$$\Psi_{JM\pi} = \sum_{i=1}^{N_{cl}} \Psi_{JM\pi}^{(A_i, B_i, j_{A_i}, j_{B_i}, \Lambda_{A_i B_i}, l_{A_i B_i})}(\boldsymbol{\xi}_{A_i}, \boldsymbol{\xi}_{B_i}, \mathbf{r}_{A_i B_i}). \quad (3.28)$$

Az $\{A_i, B_i, j_{A_i}, j_{B_i}, \Lambda_{A_i B_i}, l_{A_i B_i}\}$ összességet (A_i -be és B_i -be beleértve a β_{A_i}, β_{B_i} méretparamétereket is) i -típusú klaszterizációnak, vagy i -edik csatornának fogjuk nevezni. Egy (3.28) típusú próbafüggvénnyel a projekciós egyenletből egy (3.26) típusú egyenletekből álló csatolt inegro-differenciálegyenlet-rendszert nyerhetünk az ismeretlen $F_1(\mathbf{r}_1), F_2(\mathbf{r}_2), \dots, F_{N_{cl}}(\mathbf{r}_{N_{cl}})$ függvényekre.

A (3.28) hullámfüggvénybe az egyszerűbb írásmód kedvéért csak két klaszterre való tagozódásokat vettünk be. Még rugalmasabbá tehetjük hullámfüggvényünket, ha csomóhármásokra, -négyesekre stb. való fragmentációkat is beveszünk. Az V. fejezetben a ${}^6\text{Li}$ leírására mutatunk be egy tipikus háromklaszteres modellt.

Ejtsünk néhány szót a (3.11)-beli nukleon-nukleon (N-N) kölcsönhatás megválasztási módjáról. Célunk az, hogy modellünk az egyes magok leírása során minél kevesebb, az adott mag tulajdonságaihoz illesztendő paramétert tartalmazzon, az optimális eset a teljes paraméterfüggetlenség volna. A klasztermodell alapfilozófiája e tekintetben a következő. Válasszuk meg az N-N kölcsönhatás paramétereit úgy, hogy jól leírja a magot alkotó csomók egyes mérhető fizikai tulajdonságai (kötési energia, magsugár, elektromágneses

tulajdonságok stb.) közül az adott esetben legfontosabbakat. Mivel a klasztermodell-beli számítások jóval egyszerűbbek, ha a (3.1)-beli klaszterek 0s héjú magok (a tényleges számolások zöme ilyen), célszerű az N-N kölcsönhatás paramétereit az összes 0s héjú mag fizikai jellemzőihez illeszteni. A továbbiakban ezen alrendszerekből felépülő nagyobb magok további paramétert nem használó leírásának jósága méri a módszer önkonzisztenciáját. Az így nyert N-N kölcsönhatások effektív kölcsönhatások, amelyek a realiztikus N-N kölcsönhatásoknak csak néhány kvalitatív tulajdonságát szimulálják (taszító törzs jelenléte, a többé-kevésbé realiztikus potenciálsugár). A mezonkicserélődési elméletekből nyerhető realiztikus (Reid-, Hamada-Johnston-, párizsi, bonni, stb.) kölcsönhatások ugyanis nem használhatók, mivel közülük a lokálisak (pl. a Reid-, Hamada-Johnston-erő) nem tudják reprodukálni a 0s héjú magok térfogati tulajdonságait, mások pedig (pl. párizsi, bonni, argonne-i) energiafüggő, nemlokális potenciálok.

A konkrét vizsgálatok nagy része centrális kölcsönhatást használ. Ez jelentősen egyszerűsíti a számításokat, azonban a (3.28) konfigurációk közül csak néhánynak a bevetelét teszi lehetővé. Mint az eredmények mutatják az esetek nagy részében ez a néhány konfiguráció is képes a magok tulajdonságainak igen pontos leírására. Ez is indirekt bizonyítéka a magok klaszterizációra való nagyfokú hajlamának. Néhány esetben azonban (pl. deformált magok, egyes magreakciók) a nemcentrális kölcsönhatások használata elkerülhetetlen.

A továbbiakban feladatunk a (3.16)-(3.17) kernelek kiszámítása és a (3.26) egyenlet megoldása. A kernelek kiszámítását megnehezíti az a tény, hogy az antiszimmetrizálást a ξ_A illetve ξ_B relatív koordinátáktól függő belső állapotokon kell végrehajtani. Egy-két évtizeddel ezelőtt ez a legegyszerűbb magokra is komoly nehézségeket okozott. Az algebrai programozási nyelvek rohamos fejlődésével a helyzet megváltozott, s jelenleg a fenti antiszimmetrizálás nem okoz különösebb gondot. A tömegközéppont triviális függését leszámítva (3.16)-(3.17)-ben $N - 1$ vektorváltozó szerinti integrálást kell elvégeznünk, szerencsére azonban az esetek nagy részében ezek sokdimenziós Gauss-típusú integrálok összegére bonthatók, amelyek ha nem is könnyen, de analitikusan kiszámíthatók. Nagy problémát okoz azonban az összeg tagjainak esetenkénti rendkívül nagy száma. A (3.26) integrodifferenciál-egyenlet megoldására jól bevált matematikai módszerek vannak (pl. a Fox-Goodwin-módszer) azonban ezek gyakran igen nagy számítástechnikai kapacitást igényelnek.

A klasztermodell széleskörű elterjedését jelentősen elősegítette a generátorkoordináták módszere (GCM), amely a kernelek kiszámítását és a dinamikai egyenlet megoldását viszonylag szerény számítástechnikai eszközökkel is lehetővé teszi. Mivel ez a módszer konkrét magtól függetlenül kiválóan algoritmizálható, a következő alfejezetben részletebben bemutatjuk. Számolásaink során mindvégig ezt a módszert használtuk.

3.2 A generátorkoordináták módszere

A (3.16)-(3.16) RGM kernelek kiszámítását nehezíti, hogy ezek N vektorváltozó szerinti bonyolult függvények integráljai. Az atom- és molekulafizikából ismert, hogy Slater-determináns alakú N-test-hullámfüggvények közötti mátrixelemek sokkal könnyebben kezelhető egy- és kéttest mátrixelemek kiszámítására vezethetők vissza. A GCM-ben éppen

ezért olyan bázisfüggvényt választunk, amely harmonikusoszillátor-függvényekből felépített kétcentrumú héjmodellfüggvény, azaz Slater-determináns:

$$\Psi_{Sl}(\mathbf{s}_A, \mathbf{s}_B, \beta_A, \beta_B) = \mathcal{A}_{AB} \left(\Psi_A^{Sl}(\mathbf{s}_A, \beta_A) \Psi_B^{Sl}(\mathbf{s}_B, \beta_B) \right). \quad (3.29)$$

Itt az \mathbf{s}_C ($C = A$ vagy B) paraméterek az úgynevezett generátorkoordináták. Az egyes klasztereket leíró Ψ_C^{Sl} Slater-determinánsokat a legalacsonyabb energiájú oszcillátor-pályákra helyezett részecskék, \mathbf{s}_C pontokra centrált

$$\varphi_{n_k l_k m_k}(\mathbf{r}_k, \mathbf{s}_C, \beta_C) = \varphi_{n_k l_k m_k}^{ho}(\mathbf{r}_k - \mathbf{s}_C, \beta_C) \chi_s(k) \tau_t(k) \quad (3.30)$$

pályáiból építjük fel. Itt $\chi(k)$ és $\tau(k)$ a k -adik részecske spin illetve izospin-függvénye, s és t pedig a spin- illetve izospinvetület. Válasszuk le a klaszterek belső állapotát leíró translációinvariáns belső hullámfüggvényt a tömegközéppont koordinátáját tartalmazó függvényről. Felhasználva a (3.3) összefüggést, (3.29) a

$$\Psi_{Sl}(\mathbf{s}_A, \mathbf{s}_B, \beta_A, \beta_B) = \Psi_{Sl}(\mathbf{S}, \mathbf{s}, \beta_A, \beta_B) = \left(\frac{AB\beta_A\beta_B}{\pi^2} \right)^{3/4} \times \mathcal{A}_{AB} \left(\phi_A^{\text{int}}(\beta_A) \phi_B^{\text{int}}(\beta_B) \exp \left(-a(\mathbf{r}_{\text{cm}} - \mathbf{S})^2 - b(\mathbf{r}_{\text{cm}} - \mathbf{S})(\mathbf{r}_{AB} - \mathbf{s}) - c(\mathbf{r}_{AB} - \mathbf{s})^2 \right) \right) \quad (3.31)$$

alakba írható. A következő jelöléseket vezettük be

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_A - \mathbf{s}_B, \quad \mathbf{S} = \frac{A\mathbf{s}_A + B\mathbf{s}_B}{N}, \quad (3.32)$$

$$a = \frac{A\beta_A + B\beta_B}{2}, \quad (3.33)$$

$$b = \frac{AB(\beta_A - \beta_B)}{N}, \quad (3.34)$$

$$c = \frac{AB(A\beta_B + B\beta_A)}{2N^2}. \quad (3.35)$$

Koordinátarendszerünk kezdőpontját megválaszthatjuk úgy, hogy $\mathbf{S} = 0$ legyen. Ekkor, mint (3.31)-ből és (3.34)-ből látható, a tömegközéppont mozgása csak akkor választódik le a klaszterek relatív mozgásáról, ha $b = 0$, vagyis ha a klaszterek β_A és β_B méretparamétere megegyezik. Ha (3.31)-ben a tömegközéppont mozgása nem szeparálódik, modellünk a tömegközéppont nem kívánatos álgerjesztéseit is tartalmazza. Ezért a GCM-ben hosszú ideig a $\beta_A = \beta_B$ feltevéssel éltek, még akkor is, ha a klaszterek nyilvánvalóan különböző méretűek voltak. A $\beta_A = \beta_B$ feltevés feladása esetén úgy szabadulhatunk meg a tömegközéppont álgerjesztéseitől, ha (3.31)-et, nem élve a $\mathbf{S} = 0$ választással, integráljuk \mathbf{S} szerint. Megmutatható, hogy ez az eljárás a teljes impulzus 0 értékére való vetítéssel egyenértékű. Ekkor ugyanis

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) &= \left(\frac{a}{2\pi} \right)^{3/4} \int d\mathbf{S} \Psi_{Sl}(\mathbf{s}_A, \mathbf{s}_B, \beta_A, \beta_B) \\ &= \mathcal{A}_{AB} \left(\phi_A^{\text{int}}(\beta_A) \phi_B^{\text{int}}(\beta_B) \Gamma(\mathbf{r}_{AB}, \mathbf{s}, \gamma_0) \right) \end{aligned} \quad (3.36)$$

szerint a tömegközéppont mozgását már nem tartalmazó $\Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0)$ függvényt nyerjük. A (3.36) egyenletben

$$\Gamma(\mathbf{r}_{AB}, \mathbf{s}, \gamma_0) = \left(\frac{2\gamma_0}{\pi}\right)^{3/4} \exp\left(-\gamma_0(\mathbf{r}_{AB} - \mathbf{s})^2\right), \quad (3.37)$$

és

$$\gamma_0 = \frac{AB\beta_A\beta_B}{2(A\beta_A + B\beta_B)}. \quad (3.38)$$

Az impulzusvetített GCM bázisfüggvény (3.36) alakját (3.1)-gyel összehasonlítva látjuk, hogy (3.36) a tömegközéppont $Z(\mathbf{r}_{\text{cm}})$ függvényétől eltekintve egy olyan RGM hullámfüggvénnyel egyezik meg, ahol az $F(\mathbf{r}_{AB})$ relatív mozgási függvény a $\Gamma(\mathbf{r}_{AB}, \mathbf{s}, \gamma_0)$ eltolt Gauss-függvény. A GCM hullámfüggvényét a következő alakban szokás felvenni:

$$\Phi_{GCM}(\beta_A, \beta_B, \gamma_0) = \int \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) F(\mathbf{s}) d\mathbf{s}. \quad (3.39)$$

Ezt a (2.63) projekciós egyenletbe helyettesítve az

$$\int (H(\mathbf{s}, \mathbf{s}') - EN(\mathbf{s}, \mathbf{s}')) F(\mathbf{s}') d\mathbf{s}' = 0 \quad (3.40)$$

úgynevezett Hill-Wheeler-egyenletet nyerjük az ismeretlen $F(\mathbf{s})$ súlyfüggvényre. Itt

$$H(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \langle \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) | \widehat{H} - \widehat{T}_{\text{cm}} | \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}', \beta'_A, \beta'_B, \gamma'_0) \rangle_{\mathbf{r}_{\text{cm}}} \quad (3.41)$$

és

$$N(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \langle \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) | \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}', \beta'_A, \beta'_B, \gamma'_0) \rangle_{\mathbf{r}_{\text{cm}}} \quad (3.42)$$

a GCM energia- illetve normálási magfüggvényei (az \mathbf{r}_{cm} index azt jelöli, hogy \mathbf{r}_{cm} szerint nincs integrálás). Amennyiben a (3.39) hullámfüggvény különböző klaszterizációkat és/vagy az egyes klaszterizációkon belül egy klaszterre több méretparamétert tartalmaz (többszörös eset), akkor a (3.41)-(3.42) kernelekben a két oldali méretparaméterek különbözhetnek a bra oldaliakétól. Ezt jelöltük vesszőkkel. Érdeemes megjegyezni, hogy a (3.41)-(3.42) kernelek számítása során a (3.36) impulzusvetítést \mathbf{r}_{cm} szerinti integrálással lehet helyettesíteni. Ugyanis sem $\widehat{H} - \widehat{T}_{\text{cm}}$ sem Φ_{int} nem tartalmazza a tömegközéppont koordinátáját, továbbá (3.31) alakja miatt

$$\Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}', \beta'_A, \beta'_B, \gamma'_0) = \left(\frac{a'}{2\pi}\right)^{3/4} \int d\mathbf{r}_{\text{cm}} \Psi_{Sl}(\mathbf{s}'_A, \mathbf{s}'_B, \beta'_A, \beta'_B) \quad (3.43)$$

használható (v. ö. (3.36)). A (3.41)-(3.42) kernelek az eredeti (3.31) Slater-determinánst tartalmazó kernelekkel az alábbi kapcsolatban vannak

$$H(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \left(\frac{aa'}{4\pi^2}\right)^{3/4} \int \langle \Psi_{Sl}(\mathbf{s}_A, \mathbf{s}_B, \beta_A, \beta_B) | \widehat{H} | \Psi_{Sl}(\mathbf{s}'_A, \mathbf{s}'_B, \beta'_A, \beta'_B) \rangle d\mathbf{S} \quad (3.44)$$

és

$$N(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \left(\frac{aa'}{4\pi^2}\right)^{3/4} \int \langle \Psi_{Sl}(\mathbf{s}_A, \mathbf{s}_B, \beta_A, \beta_B) | \Psi_{Sl}(\mathbf{s}'_A, \mathbf{s}'_B, \beta'_A, \beta'_B) \rangle d\mathbf{S}. \quad (3.45)$$

A (3.44)-(3.45)-beli mátrixelemek valóban az egyszerűen kezelhető Slater-determinánsokat tartalmazzák. A (3.44)-(3.45) kernelek számításával a 4. fejezetben foglalkozunk részletesen.

A (3.36) bázisfüggvény a relatív mozgás impulzusmomentumának nem sajátállapota. Jó relatív pályamomentumú állapotot a

$$\Phi_{\text{int}}^{\text{AMP}}(s, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) = \int \Phi(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) Y_{l_{AB} m_{AB}}(\hat{\mathbf{s}}) d\hat{\mathbf{s}} \quad (3.46)$$

művelettel nyerhetünk. Erről belátható, hogy egy impulzusmomentum-vetítéssel ér föl. Ezt a függvényt kell a (3.27) típusú csatolási sémába helyettesítenünk. A (3.46) projekció a (3.44)-(3.45) kernelek tekintetében a

$$H(s, s')^{\text{AMP}} = H(s, s')_{l_{AB} m_{AB}}^{l'_{A'B'} m'_{A'B'}} = \int \int Y_{l_{AB} m_{AB}}^*(\hat{\mathbf{s}}) H(\mathbf{s}, \mathbf{s}') Y_{l'_{A'B'} m'_{A'B'}}(\hat{\mathbf{s}}') d\hat{\mathbf{s}} d\hat{\mathbf{s}}' \quad (3.47)$$

illetve

$$N(s, s')^{\text{AMP}} = N(s, s')_{l_{AB} m_{AB}} = \int \int Y_{l_{AB} m_{AB}}^*(\hat{\mathbf{s}}) N(\mathbf{s}, \mathbf{s}') Y_{l_{AB} m_{AB}}(\hat{\mathbf{s}}') d\hat{\mathbf{s}} d\hat{\mathbf{s}}' \quad (3.48)$$

integrálok elvégzését jelenti (ha \widehat{H} csak centrális potenciált tartalmaz $l'_{A'B'} = l_{AB}$ és $m'_{A'B'} = m_{AB}$). A jó impulzusmomentumú állapotokat tartalmazó Hill-Wheeler-egyenlet a következő:

$$\int \left(H(s, s')^{\text{AMP}} - EN(s, s')^{\text{AMP}} \right) F(s')^{\text{AMP}} ds' = 0. \quad (3.49)$$

Kötött állapotok leírása során a (3.49) integrálegyenletet általában diszkrétizálják, vagyis a (3.39)-beli s szerinti integrált a

$$\Phi_{\text{GCM}}^{\text{AMP}}(\beta_A, \beta_B, \gamma_0) = \sum_{i=1}^{N_s} \Phi_{\text{int}}^{\text{AMP}}(s_i, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) F(s_i)^{\text{AMP}} \quad (3.50)$$

diszkrét s_i -kre való összeggel helyettesítve a

$$\sum_{j=1}^{N_s} \left(H(s_i, s_j)^{\text{AMP}} - EN(s_i, s_j)^{\text{AMP}} \right) F(s_j)^{\text{AMP}} = 0 \quad (3.51)$$

általánosított mátrix-sajátérték problémát oldják meg. Az RGM és GCM, (3.38) után már említett, viszonyában ez azt jelenti, hogy az $F(\mathbf{r}_{AB})$ RGM relatív mozgási hullámfüggvényt impulzusmomentum-vetített eltolt Gauss-függvények lineáris kombinációjával közelítjük (a közelítés tetszőlegesen pontosra tehető [38]). Ilyen módon azt is mondhatjuk, hogy a rezonálócsoport-modell egy megvalósítási módja a generátorkoordináták módszere.

A (3.36) illetve (3.43) összefüggések miatt az (3.50) kifejtésben a bázis γ_0 paramétere rögzítve van. Ez néha túl nagy kötöttség, kívánatos volna tőle megszabadulnunk. Ezt megtehetjük. Belátható, hogy egy síkhullám relatív mozgású kétsomó-hullámfüggvény GCM-kifejtése a következő:

$$\mathcal{A}_{AB} \left(\phi_A^{\text{int}}(\beta_A) \phi_B^{\text{int}}(\beta_B) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{AB}) \right) = \left(\frac{\gamma_0}{2\pi} \right)^{3/4} \exp\left(\frac{k^2}{4\gamma_0} \right) \int \exp(i\mathbf{k}\mathbf{t}) \Phi_{\text{int}}(\mathbf{t}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) d\mathbf{t}. \quad (3.52)$$

Síkhullámok szerint viszont minden négyzetesen integrálható Γ függvény előállítható a

$$\Gamma(\mathbf{r}_{AB}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{AB}) d\mathbf{k} \quad (3.53)$$

Fourier-transzformációval, ahol

$$g(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \Gamma(\mathbf{t}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{t}) d\mathbf{t} \quad (3.54)$$

az inverz Fourier-transzformált. Ha

$$\Gamma(\mathbf{r}_{AB}) = \left(\frac{2\gamma}{\pi}\right)^{3/4} \exp\left(-\gamma(\mathbf{r}_{AB} - \mathbf{s})^2\right), \quad (3.55)$$

akkor

$$g(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{k^2}{4\gamma} - i\mathbf{k}\mathbf{s}\right). \quad (3.56)$$

Ezt visszahelyettesítve (3.53)-ba, (3.52) felhasználásával a tetszőleges γ paraméterű (3.55) eltolt Gauss-függvényt tartalmazó GCM bázisállapotot a

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma}\right)^{3/4} \int d\mathbf{k} \exp\left(\frac{\gamma_0 - \gamma}{4\gamma_0\gamma} k^2 - i\mathbf{k}\mathbf{s}\right) \\ &\times \int d\mathbf{t} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{t}) \Phi_{\text{int}}(\mathbf{t}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) \end{aligned} \quad (3.57)$$

integráltranszformációval nyerhetünk. Itt felhasználtuk, hogy a \mathbf{k} és a \mathbf{t} szerinti integrálás sorrendje felcserélhető az antiszimetrizálással. Az (3.57)-beli \mathbf{k} szerinti integrál integrandusa az egész komplex \mathbf{k} síkon analitikus, így a \mathbf{k} szerinti integrálást elvégezve az

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma}\right)^{3/4} \left(\frac{4\pi\gamma\gamma_0}{\gamma_0 - \gamma}\right)^{3/2} \\ &\times \int d\mathbf{t} \exp\left(-\frac{\gamma\gamma_0}{\gamma_0 - \gamma}(\mathbf{s} - \mathbf{t})^2\right) \Phi_{\text{int}}(\mathbf{t}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0) \end{aligned} \quad (3.58)$$

összefüggést nyerjük. Ez a transzformáció a (3.44)–(3.45) kernelek tekintetében a

$$\begin{aligned} H(\mathbf{s}, \beta_A, \beta_B, \gamma; \mathbf{s}', \beta'_A, \beta'_B, \gamma') &= \frac{1}{(2\pi)^6} \left(\frac{\gamma\gamma'_0}{\gamma\gamma'}\right)^{3/4} \left(\frac{4\pi\gamma\gamma_0}{\gamma_0 - \gamma}\right)^{3/2} \left(\frac{4\pi\gamma'\gamma'_0}{\gamma'_0 - \gamma'}\right)^{3/2} \int d\mathbf{t} \int d\mathbf{t}' \\ &\times \exp\left(-\frac{\gamma_0\gamma}{\gamma_0 - \gamma}(\mathbf{s} - \mathbf{t})^2 - \frac{\gamma'_0\gamma'}{\gamma'_0 - \gamma'}(\mathbf{s}' - \mathbf{t}')^2\right) H(\mathbf{t}, \beta_A, \beta_B, \gamma_0, \mathbf{t}', \beta'_A, \beta'_B, \gamma'_0) \end{aligned} \quad (3.59)$$

transzformáció elvégzését jelenti (a normálási kernelre hasonló összefüggés nyerhető).

Az eddigiek egy általánosítása a lélegző klaszterek modellje. Ebben a modellben a

klaszterek molekulyszerű rezgéseit leíró \mathbf{s}_k paraméterek mellett az egyes klaszterek alak-
tartó vibrációját, monopólusszerű lélegzését megengedő β paraméterek is generátorkoor-
dináták. A próbafüggvényt a (3.36), vagy (3.58) bázisfüggvények segítségével a

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} \sum_{k=1}^{N_s} F_{ijk} \Phi_{\text{int}}(\mathbf{s}_k, \beta_A^i, \beta_B^j, \gamma_{ij}) \\ &= \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} \sum_{k=1}^{N_s} F_{ijk} \mathcal{A} \left(\phi_A^{\text{int}}(\beta_A^i) \phi_B^{\text{int}}(\beta_B^j) \left(\frac{2\gamma_{ij}}{\pi} \right)^{3/4} \exp[-\gamma_{ij}(\mathbf{r}_{AB} - \mathbf{s}_k)^2] \right) \end{aligned} \quad (3.60)$$

alakban vesszük fel. Ha a (3.36) bázisfüggvényt használjuk, akkor az egyes γ_{ij} -ket a
(3.38) összefüggés határozza meg, az (3.58) esetében a γ_{ij} -k tetszőlegesek lehetnek. Az
 F_{ijk} együtthatókat variációs paramétereknek tekintjük és a (2.63) projekciós egyenletből
határozzuk meg őket.

Tegyük fel, hogy a szabad klaszterek állapotát különböző méretparaméterű $\phi_C^{\text{int}}(\beta_C^i)$
belső állapotok lineáris kombinációjával írjuk le, és a kombinációs együtthatókat szintén
a (2.63) projekciós egyenletből határozzuk meg. Ekkor a C klaszter m -edik állapotának
hullámfüggvénye:

$$\phi_C^{(m)} = \sum_{i=1}^{N_C} r_C^{m,i} \phi_C^{\text{int}}(\beta_A^i) \quad m = 1, 2, \dots, N_C \quad (3.61)$$

(az $r_C^{m,i}$ együtthatókat határoztuk meg variációsán). Az $m = 1$ érték a klaszterek alapál-
lapota, míg az $m = 2, 3, \dots, N_C$ a gerjesztett állapotok. Invertáljuk (3.61)-t

$$\phi_C^{\text{int}}(\beta_A^i) = \sum_{m=1}^{N_C} t_C^{m,i} \phi_C^{(m)}, \quad m = 1, 2, \dots, N_C \quad (3.62)$$

és az így nyert belső állapotokat helyettesítsük (3.60)-ba. Ekkor próbafüggvényünk

$$\sum_{i=1}^{N'_A} \sum_{j=1}^{N'_B} \sum_{k=1}^{N_s} F_{ijk} \mathcal{A} \left[\left(\sum_{n=1}^{N_A} t_A^{n,i} \phi_A^{(n)} \right) \left(\sum_{m=1}^{N_B} t_B^{m,j} \phi_B^{(m)} \right) \Gamma(\mathbf{r}_{AB}, \mathbf{s}_k, \gamma) \right] \quad (3.63)$$

alakot ölt. Itt $N'_A \leq N_A$ illetve $N'_B \leq N_B$ lehet.

A lélegző klaszterek modellje két szempontból is javítja a szokásos klasztermodellbeli
leírást. Egyrészt megjavítja a szabad klaszterek leírását, mert egy Slater-determináns
helyett többet használ, másrészt a (3.63) próbafüggvényt sokkal rugalmasabbá teszi,
mivel a klaszterek alapállapotai mellett gerjesztett állapotokat is bevesz. Amennyiben
(3.63)-ban $N'_A = N'_B = 1$ a modellt befagyasztott modellnek nevezzük. Ez, noha csak
alapállapotú klasztereket tartalmaz, jobb, mint a hagyományos leírás a realiztikusabb
belső klaszterállapotok miatt.

3.3 Fragmentációs tulajdonságok

Ezidáig a magok csomósodási hajlamáról legfeljebb kvalitatív kijelentéseket tettünk. Eb-
ben az alfejezetben [39] és [40] alapján definiálunk néhány mennyiséget, amelyek alkal-
masak a klaszterizáció számszerű jellemzésére.

Az (3.1) egyenlettel megadott hullámfüggvény a (3.13)-beli $\Psi_{\mathbf{r}}$ bázisfüggvények segítségével (3.14) szerint fejthető ki. A $\Psi_{\mathbf{r}}$ bázis nem ortogonális. Egy nem ortogonális bázisban a Ψ vektornak definiálhatjuk a kovariáns- és kontravariáns komponenseit. A kovariáns komponensek Ψ -nek az egyes bázisállapotokra vett ortogonális vetületei

$$g(\mathbf{r}) = \langle \Psi_{\mathbf{r}} | \Psi \rangle. \quad (3.64)$$

Ez a magfizikában általánosan ismert spektroszkópai amplitudó, amely például magreakciók DWBA leírásánál játszik fontos szerepet. Az (3.64)-hez tartozó spektroszkópai faktort

$$s = \int g(\mathbf{r})^* g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \langle \Psi | \Psi_{\mathbf{r}} \rangle \langle \Psi_{\mathbf{r}} | \Psi \rangle d\mathbf{r} \equiv (g | g) \quad (3.65)$$

értelmezi (kerek zárójellel az \mathbf{r} koordináta szerinti integrálást jelöljük). A kontravariáns komponenseket

$$G(\mathbf{r}) = \int N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{-1} g(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.66)$$

definiálja, ahol $N(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{-1}$ a (3.17) kernelű integráloperátor inverzének kernelje. Az inverzképzés legegyszerűbben az integráloperátor spektrális előállításával definiálható. Ekkor a normálási kernel nulla sajátértékhez tartozó sajátállapotai gondot okozhatnának, ezért ezeket ki kell zárunk az N részecske Hilbert-teréből. Belátható [41], hogy ha $F(\mathbf{r}_{AB})$ egy ilyen sajátállapot akkor

$$\mathcal{A}_{AB}(\phi_A^{\text{int}} \phi_B^{\text{int}} F(\mathbf{r}_{AB}) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}})) = 0. \quad (3.67)$$

Ezek fizikailag érdektelen, úgynevezett redundáns állapotok, kizárásuk nem jelent korlátozást.

A kontravariáns komponensek szemléletesen szólva azok a komponensek amelyekkel mint amplitudókkal az állapotfüggvény a bázisállapotokból kikombinálható:

$$\Psi = \int G(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (3.68)$$

Egy általános Ψ állapot $\{\Psi_{\mathbf{r}}\}$ altérbe eső komponensének súlyát, azaz ennek a komponensnek a hossz négyzetét a csomósodás mértékének (amount of clustering) nevezzük és S -el jelöljük. Egy nem ortogonális bázisban a hossz négyzet az altérbeli kovariáns és kontravariáns komponensek szorzatösszege, tehát $\{\Psi_{\mathbf{r}}\}$ -ben természetesen

$$S = \int G(\mathbf{r})^* g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.69)$$

Amennyiben Ψ (3.1) alakú, $G(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r})$ és $S = 1$. A csomósodás mértékének bevezetése ilyenkor nem jár különösebb haszonnal. Más azonban a helyzet, ha a magot a (3.28) típusú hullámfüggvénnyel írjuk le. Ez tartalmaz egyrészt különböző fragmentumokra való tagozódást (például a ${}^6\text{Li}$ magot felépíthetjük az $\alpha + d$, ${}^5\text{He} + p$, ${}^5\text{Li} + n$, ${}^3\text{H} + {}^3\text{He}$ stb. kétklaszter-konfigurációkból), másrészt az egyes tagozódásokon belül számos impulzusmomentum-kombinációt. Amennyiben (3.28) egyes tagjai ortogonálisak volnának egymásra, úgy az egyes klaszterizációk súlyát a megfelelő hullámfüggvény-komponens

abszolútértékének négyzete szolgáltatóná (mivel $\Psi_{JM\pi}$ normált). A nem-ortogonális komponensek egymáshoz viszonyított súlyát azonban ilyen módon nem tudjuk megadni. E helyett írjuk fel a (3.28) hullámfüggvényt a $\Psi_{\mathbf{r}}^{\mu}$ bázis segítségével (μ a csatorna-, vagy klaszterizáció indexe)

$$\Psi = \sum_{\mu} \Psi^{\mu} = \sum_{\mu} \int \Psi_{\mathbf{r}}^{\mu} F^{\mu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.70)$$

alakban. Ekkor a μ klaszterizációhoz tartozó spektroszkópiai amplitudó, és a spektroszkópiai faktor

$$g_{\mu}(\mathbf{r}) = \langle \Psi_{\mathbf{r}}^{\mu} | \Psi \rangle, \quad (3.71)$$

illetve

$$s_{\mu} = (g_{\mu} | g_{\mu}) \quad (3.72)$$

alakú. A μ altérbeli kovariáns amplitudó

$$G_{\mu}(\mathbf{r}) = \int N_{\mu\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^{-1} g_{\mu}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.73)$$

módon van értelmezve, tehát a a hullámfüggvény μ altérbe eső $\overline{\Psi}^{\mu}$ vetülete

$$\overline{\Psi}^{\mu} = \int G_{\mu}(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{r}}^{\mu} d\mathbf{r}. \quad (3.74)$$

A μ klaszterizáció

$$S_{\mu} = \int G_{\mu}(\mathbf{r})^* g_{\mu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.75)$$

mértéke ezek után megadja a Ψ állapot $\{\Psi_{\mathbf{r}}^{\mu}\}$ altérbe eső komponensének súlyát. A (3.74) és (3.70) formulák felhasználásával belátható, hogy

$$S_{\mu} = \langle \overline{\Psi}^{\mu} | \Psi \rangle, \quad (3.76)$$

Az s_{μ} -nek semmiképpen nincs valószínűségi jelentése, az S_{μ} azonban – némi önkénytel– ilyen jelentéssel felruházható. Mégis mindkettő alkalmas arra, hogy a (3.28) hullámfüggvénnyel leírt μ klaszterizációra való hajlamát kvalitatíve velük jellemezzük.

A klaszterizáció (3.75) mértékét [40] alapján kifejezhetjük a (3.42) GCM normálási kernelek segítségével. A (3.28) RGM hullámfüggvényt a (3.36) GCM bázison (3.50) felhasználásával a következőképpen közelíthetjük (a lényegtelen paramétereket nem írjuk ki)

$$\Psi = \sum_{\mu} \sum_i F_{\mu}(s_i) \Phi_{\text{int}}^{\mu}(s_i) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}). \quad (3.77)$$

Az F_{μ} komponenseket a GCM magszerkezeti számításból nyerhetjük. Hasonlóképpen a μ altérbe eső $\overline{\Psi}^{\mu}$ komponens

$$\overline{\Psi}^{\mu} = \sum_i f_{\mu}(s_i) \overline{\Phi}_{\text{int}}^{\mu}(s_i) Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) \quad (3.78)$$

alakba írható. Ha felhasználjuk azt a tényt, hogy a $\Psi - \overline{\Psi}^{\mu}$ vektor a $\overline{\Phi}_{\text{int}}^{\mu} Z(\mathbf{r}_{\text{cm}})$ altérre ortogonális (azaz $\langle \overline{\Phi}_{\text{int}}^{\mu} Z(\mathbf{r}_{\text{cm}}) | \Psi - \overline{\Psi}^{\mu} \rangle = 0$), a következő összefüggést nyerhetjük

$$\sum_j N_{\mu\mu}(s_i, s_j) f_{\mu}(s_j) = \sum_{\nu} \sum_j N_{\mu\nu}(s_i, s_j) F_{\nu}(s_j), \quad (3.79)$$

ahol $N_{\nu\mu}(s_i, s_j)$ a (3.42) GCM normálási kernel (felhasználtuk, hogy a $Z(\mathbf{r}_{\text{cm}})$ függvény normált). A (3.77) és (3.78) kifejezéseket (3.76)-be helyettesítve, továbbá $f_\mu(s_j)$ -t (3.79) felhasználásával kiküszöbölve kapjuk, hogy

$$S_\mu = \sum_{\nu\rho} \sum_{ijkl} F_\nu^*(s_i) N_{\nu\mu}(s_i, s_j) N_{\mu\mu}^{-1}(s_j, s_k) N_{\mu\rho}(s_k, s_l) F_\rho(s_l). \quad (3.80)$$

A (3.80)-ban szereplő kifejezések mindegyike rendelkezésre áll egy GCM-beli magszerkezeti számolás után.

3.4 Magreakciók leírása a klasztermodellben

A magreakciók leírásának egy, M. Kamimura által kidolgozott [42] többcsatornás-szórás-elméleti módszerét mutatjuk be. Azért ezt választottuk, mert ez a GCM keretein belül oldja meg a feladatot.

Mint a 3.1. fejezetben láttuk, az egycsatornás klasztermodell (3.26) alapegyenlete egy olyan Schrödinger-típusú egyrészecske-egyenlet, amely bonyolult energiafüggő, nemlokális potenciált tartalmaz. Ennek az egyenletnek a szórási határfeltételt kielégítő megoldásait keressük. Megoldási módszerünk az S -mátrixra vonatkozó Kohn-Hulthén-féle variációs módszeren alapszik.

Írjuk fel (3.26) radiális részét

$$\begin{aligned} & \int Y_{lm}^*(\hat{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{AB}(\mathbf{r}) \right) F(\mathbf{r}) d\hat{r} + \int Y_{lm}^*(\hat{r}) K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^E F(\mathbf{r}') Y_{lm}(\hat{r}') d\hat{r}' \\ & = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V_{AB}(r) - E_{\text{cm}} \right) F_l(r) + \int K(r, r')_l^E F_l(r') dr' = 0 \end{aligned} \quad (3.81)$$

alakban, ahol $E_{\text{cm}} = E - E_A - E_B$ a tömegközépponti energia és K_l^E az impulzusmomentum-vetített kicserélődési kernel. Vezessünk be egy r_c csatornasugarat, amelyen túl $V_{AB}(r)$ a Coulomb-potenciálhoz tart, míg K_l^E eltűnik

$$V_{AB}(r) \approx \frac{Z_A Z_B e^2}{r} \quad \text{ha } r > r_c \quad (3.82)$$

és

$$K(r, r')_l^E \approx 0 \quad \text{ha } r > r_c, \text{ vagy } r' > r_c. \quad (3.83)$$

Keressük (3.81)-nek a

$$F_l(0) = 0 \quad (3.84)$$

és

$$F_l(r) = h_l^-(k, r) - S_l(k) h_l^+(k, r) \quad r > r_c \quad (3.85)$$

határfeltételeket kielégítő megoldásait (k az E_{cm} -hez tartozó hullámszám, h^- és h^+ pedig a befutó- illetve kifutó Coulomb-függvény). Definiáljuk az \mathcal{L}_l operátort

$$\mathcal{L}_l(r, r') \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V_{AB}(r) - E_{\text{cm}} \right) \delta(r, r') + K(r, r')_l^E \quad (3.86)$$

módon, és vezessük be az

$$(f\mathcal{L}_l g) \equiv \int_0^\infty \int_0^\infty f(r)\mathcal{L}_l(r, r')g(r')drdr' \quad (3.87)$$

jelölést (a 2.4. fejezetben említettek szerint nem az f komplex konjugáltját hanem magát f -et használjuk az integrandusban). Ekkor (3.81) az

$$\mathcal{L}_l F_l = 0 \quad (3.88)$$

alakban írható. Tegyük fel, hogy a (3.81) problémának valamilyen F_t közelítő megoldását tudjuk meghatározni, ami az

$$F_t(0) = 0 \quad (3.89)$$

$$F_t(r) = h_l^-(k, r) - S_t(k)h_l^+(k, r) \quad r > r_c \quad (3.90)$$

határfeltételeket elégíti ki (F_t és S_t l indexét az egyszerűség kedvéért elhagytuk). A közelítő és az egzakt megoldás eltérése

$$\Delta F(r) = F_t(r) - F_l(r). \quad (3.91)$$

Felhasználva (3.88)-at és (3.91)-et belátható, hogy

$$(F_t\mathcal{L}_l F_t) = ([F_l + \Delta F]\mathcal{L}_l F_t) = (F_l\mathcal{L}_l F_t) + (\Delta F\mathcal{L}_l \Delta F). \quad (3.92)$$

Parciális integrálásokkal

$$(F_l\mathcal{L}_l F_t) - (F_l\mathcal{L}_l F_l) = \frac{i}{\alpha}(S_l - S_t) \quad (3.93)$$

nyerhető, ahol $\alpha = \mu/k\hbar$. Felhasználtuk a (3.84) és (3.89) egyenleteket és az

$$\left[F_l(r)\frac{d}{dr}F_t(r) - F_t(r)\frac{d}{dr}F_l(r) \right]_{r \rightarrow \infty} = S_L - S_t \quad (3.94)$$

Wronski-relációt. A (3.92) és (3.93) egyenletekből a Kato-azonossághoz juthatunk

$$S_l = S_t + i\alpha(F_t\mathcal{L}_l F_t) - i\alpha(\Delta F\mathcal{L}_l \Delta F). \quad (3.95)$$

Definiáljuk F_t -nek egy $J[F_t]$ funkcionálját

$$J[F_t] = S_t + i\alpha(F_t\mathcal{L}_l F_t) \quad (3.96)$$

módon. Belátható, hogy $F_t = F_l$ esetén

$$J[F_l] = S_l \quad (3.97)$$

mivel $S_t = S_l$ és (3.95) második tagja eltűnik. Ha $F_t \neq F_l$ a

$$J[F_t] - S_l = i\alpha(\Delta F\mathcal{L}_l \Delta F) \quad (3.98)$$

eltérés ΔF -ben másodrendű, így $J[F_t]$ stacionárius F_t változásaival szemben a (3.88) egyenlet egzakt F_t megoldása körül. Ha δF_t egy infinitezimális megváltozása F_t -nek (és $\delta F_t(0) = 0$), úgy $J[F_t]$ megváltozása (a (3.93)-hez hasonló parciális integrálásokkal)

$$\begin{aligned}\delta J[F_t] &= \delta S_t + i\alpha[(F_t \mathcal{L}_l \delta F_t) + (\delta F_t \mathcal{L}_l F_t)] \\ &= \delta S_t + i\alpha[(F_t \mathcal{L}_l \delta F_t) - (\delta F_t \mathcal{L}_l F_t)] + 2i\alpha(\delta F_t \mathcal{L}_l F_t) \\ &= 2i\alpha(\delta F_t \mathcal{L}_l F_t).\end{aligned}\tag{3.99}$$

Így a $J[F_t]$ funkcionálra vonatkozó $\delta J[F_t] = 0$ stacionaritási feltevés maga után vonja a

$$(\delta F_t \mathcal{L}_l F_t) = 0\tag{3.100}$$

egyenletet bármely δF_t -re. Ez pedig nem más mint az F_t próbafüggvényre vonatkozó (2.63) projekciós egyenlet, amely a (2.61) próbafüggvénnyel a (2.64-65) Kohn-Hulthén-egyenletekre vezet. A gyakorlatban tehát a (3.81), (3.84) és (3.85) szórási problémához tartozó stacionárius S -mátrixot úgy nyerhetünk, hogy (3.81)-et megoldjuk a próbafüggvényre vonatkozó, 2.4. fejezetben vázolt Kohn-Hulthén-módszerrel, majd az így nyert S_t -ből előállítjuk az $S_{st} = S_t + i\alpha(F_t \mathcal{L}_l F_t)$ stacionárius (Kato-korrigált) S -mátrixot, amely (3.95) alapján csak kis mértékben (ΔF -ben másodrendben) tér el az egzakt S_t -től. Mivel S_t illetve S_{st} unitaritását nem tételeztük fel, módszerünk numerikus pontosságát az $|S_t|$, illetve $|S_{st}|$ egyhez közeli volta méri (természetesen csak akkor, ha a potenciál valós).

A továbbiakban a feladatunk az, hogy egy olyan (a jó aszimptotikát tudó) próbafüggvényt konstruáljunk, amelyhez a klasztermodellbeli mátrixelemek viszonylag egyszerűen számíthatók. Ha a

$$F_t = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i + \phi^- - S_t \phi^+\tag{3.101}$$

alakú próbafüggvényben (ϕ^- és ϕ^+ az origóban regularizált, aszimptotikusan befutó illetve kifutó Hankel/Coulomb-függvények) a φ_i négyzetesen integrálható függvényeknek a

$$\varphi_i(r) = \int \int Y_{lm}^*(\hat{r}) \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{s}_i) Y_{lm}(\hat{s}) d\hat{r} d\hat{s}\tag{3.102}$$

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{s}_i) = \left(\frac{2\gamma}{\pi}\right)^{3/4} \exp\left(-\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{s}_i)^2\right)\tag{3.103}$$

impulzusmomentum-vetített eltolt Gauss-függvényeket választjuk, akkor a $(\varphi_i \mathcal{L}_l \varphi_j)$ mátrixelem éppen a (3.47)-(3.48) impulzusmomentum-vetített GCM kerneleket fogja tartalmazni [42], nevezetesen

$$(\varphi_i \mathcal{L}_l \varphi_j) = H(s_i, s_j)^{\text{AMP}} - EN(s_i, s_j)^{\text{AMP}}.\tag{3.104}$$

Gondot azoknak a mátrixelemeknek a kiszámítása jelent, amelyek a ϕ^- illetve ϕ^+ függvények valamelyikét tartalmazzák. Ekkor ugyanis nem tudjuk a mátrixelemeket GCM kernelekre visszavezetni. Éppen ezt kiküszöbölendő Kamimura az alábbi próbafüggvényt vezeti be

$$F_t(r) = \sum_{i=1}^N c_i \chi_i(r),\tag{3.105}$$

ahol

$$\chi_i(r) = \begin{cases} p_i \varphi_i(r) & r < r_c \\ h^-(k, r) - s_i h^+(k, r) & r > r_c. \end{cases} \quad (3.106)$$

Megköveteljük, hogy a próbafüggvény a csatolási sugárnál legyen sima (folytonos és folytonosan differenciálható). Ez a p_i és s_i konstansokra a következő feltételeket jelenti

$$p_i \varphi_i(r_c) = h^-(k, r_c) - s_i h^+(k, r_c) \quad (3.107)$$

$$p_i \varphi_i'(r_c) = h^{-'}(k, r_c) - s_i h^{+'}(k, r_c). \quad (3.108)$$

Innen

$$p_i = (h^-(k, r_c) h^{+'}(k, r_c) - h^+(k, r_c) h^{-'}(k, r_c)) / D_i(k, r_c) \quad (3.109)$$

$$s_i = (\varphi_i(r_c) h^{-'}(k, r_c) - h^-(k, r_c) \varphi_i'(r_c)) / D_i(k, r_c), \quad (3.110)$$

ahol

$$D_i(k, r_c) = (\varphi_i(r_c) h^{+'}(k, r_c) - h^+(k, r_c) \varphi_i'(r_c)). \quad (3.111)$$

A χ_i függvényeket felírhatjuk

$$\chi_i(r) = p_i (\varphi_i(r) + \phi_i(r)) \quad (3.112)$$

alakban is, ahol

$$p_i \phi_i = \begin{cases} 0 & r < r_c \\ h^-(k, r) - s_i h^+(k, r) - p_i \varphi_i & r > r_c. \end{cases} \quad (3.113)$$

Ekkor a $(\chi_i \mathcal{L}_l \chi_j)$ mátrixelemek a következőképpen állíthatók elő

$$\begin{aligned} (\chi_i \mathcal{L}_l \chi_j) &= p_i p_j \left[(\varphi_i \mathcal{L}_l \varphi_j) + \int_0^\infty \int_{r_c}^\infty \varphi_i(r) \mathcal{L}_l(r, r') \phi_j(r') dr dr' \right. \\ &\quad \left. + \int_{r_c}^\infty \int_0^\infty \phi_i(r) \mathcal{L}_l(r, r') \varphi_j(r') dr dr' + \int_{r_c}^\infty \int_{r_c}^\infty \phi_i(r) \mathcal{L}_l(r, r') \phi_j(r') dr dr' \right]. \end{aligned} \quad (3.114)$$

Mivel az r_c csatornasugár definíciója alapján ha $r > r_c$, vagy $r' > r_c$, akkor

$$\mathcal{L}_l(r, r') = \mathcal{L}_l^c \delta(r - r'), \quad (3.115)$$

ahol

$$\mathcal{L}_l^c(r) \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{Z_A Z_B e^2}{r} - E_{\text{cm}}, \quad (3.116)$$

a (3.114) mátrixelem a következő formára egyszerűsödik

$$(\chi_i \mathcal{L}_l \chi_j) = p_i p_j [(\varphi_i \mathcal{L}_l \varphi_j) - ((\varphi_i \mathcal{L}_l^c \varphi_j))]. \quad (3.117)$$

Itt bevezettük a

$$((f \mathcal{L}_l^c g)) = \int_{r_c}^\infty f(r) \mathcal{L}_l(r) g(r) dr \quad (3.118)$$

definíciót. Ezek után a Kohn-Hulthén-féle variációs módszert a (3.105) próbafüggvénnyel használva a fellépő mátrixelemek csak a GCM kerneleket és négyzetesen integrálható függvények könnyen számolható egydimenziós integráljait tartalmazzák.

A próbafüggvény (3.105) és (3.106) definíciója és (3.90) alapján nyilvánvaló, hogy

$$\sum_{i=1}^N c_i = 1 \quad (3.119)$$

és

$$\sum_{i=1}^N c_i s_i = S_t. \quad (3.120)$$

A (3.119) egyenlet szerint a c_i együtthatók nem függetlenek, közülük egy a többi segítségével kiküszöbölhető. Legyen ez az együttható c_1 , azaz $c_1 = 1 - c_2 - c_3 - \dots - c_N$. Ekkor próbafüggvényünk az

$$F_t(r) = \chi_1(r) + \sum_{i=2}^N c_i (\chi_i(r) - \chi_1(r)) \quad (3.121)$$

alakot ölti. A variációs módszerből a c_i együtthatókra a

$$\sum_{j=2}^N L_{ij} c_j = M_i \quad i = 2, 3, \dots, N \quad (3.122)$$

lineáris inhomogén egyenletrendszer nyerjük, ahol

$$L_{ij} = (\chi_i \mathcal{L}_l \chi_j) - (\chi_i \mathcal{L}_l \chi_1) - (\chi_1 \mathcal{L}_l \chi_j) + (\chi_1 \mathcal{L}_l \chi_1), \quad (3.123)$$

$$M_i = (\chi_1 \mathcal{L}_l \chi_1) - (\chi_i \mathcal{L}_l \chi_1). \quad (3.124)$$

A szórási probléma megoldásának gyakorlati menete a következő. Adott energiához (illetve a hozzá tartozó hullámszámhoz) megkonstruálunk N (3.106) típusú bázisfüggvényt úgy, hogy a φ_i eltolt Gauss-függvények lefedjék az \mathcal{L}_l nemlokális tagjainak hatósugarát (azaz az r_c csatornasugarat az utolsó Gauss-függvény hatósugarán belül választhassuk meg). Ekkor r_c -t célszerű $r_c = (s_{N-1} + s_N)/2$ alakban felvenni, ahol az s_{N-1} és s_N a két utolsó eltolt Gauss-függvény centrálási pontja. Ezután (3.109) és (3.110) alapján meghatározzuk a p_i és s_i együtthatókat, valamint (3.117) szerint a mátrixelemeket. A (3.122) egyenletrendszer megoldva nyerjük a c_i együtthatókat, ezek segítségével pedig (3.120) alapján S_t -t. A stacionárius (Kato-korrigált) S -mátrixot (3.96) szolgáltatja. A szórási fázistolás S_{st} -ből az $S_{st} = \exp(2i\delta)$ összefüggés alapján nyerhető.

A módszernek többcsatornás esetre való általánosítása magától értetődő. Itt csak a főbb lépéseket ismertetjük, a részletek tekintetében [42]-re utalunk. Tegyük fel, hogy egy ütközés során kialakuló rendszer valamely állapotát a befutó kezdeti csatorna és a kifutó csatornák (rugalmas szórás, rugalmatlan gerjesztés, átrendeződési reakció) (3.27) típusú csatorna-hullámfüggvényeinek (3.28) szuperpozíciójával írjuk le. Az egyes csatornáknak a relatív mozgás függvénye egy adott energián az alábbi aszimptotikus határfeltételt elégíti ki

$$F_\gamma^{(e)}(r_\gamma) = \frac{1}{\sqrt{v_\gamma}} \left[h_l^-(k_\gamma, r_\gamma) \delta_{\gamma c} - S_{\gamma c} h_\gamma^+(k_\gamma, r_\gamma) \right], \quad r_\gamma > r_\gamma^c, \quad \gamma = 1, 2, \dots, N_{ch}, \quad (3.125)$$

ahol γ a csatornaindex, k_γ a csatornahullámszám, v_γ a csatornabeli sebesség, c a befutó csatorna, r_γ^c pedig a γ csatorna sugara. Természetesen az S -mátrixelemnek csak a nyitott csatornába való átmenet esetén van fizikai értelme, így az S unitaritását az

$$\sum_{\gamma \in \text{open}} |S_{\gamma c}|^2 = 1 \quad (3.126)$$

egyenlet fejezi ki, ahol az összegzés a nyitott csatornákra megy.

Ha a problémát közelítőleg oldjuk meg, az F_t közelítő megoldás aszimptotikája

$$F_{\gamma,t}^{(c)}(r_\gamma) = \frac{1}{\sqrt{v_\gamma}} \left[h_l^-(k_\gamma, r_\gamma) \delta_{\gamma c} - S_{\gamma c,t} h_\gamma^+(k_\gamma, r_\gamma) \right], \quad r_\gamma > r_\gamma^c, \quad \gamma = 1, 2, \dots, N_{ch}. \quad (3.127)$$

Az egycsatornás esetben ismertetett variációs elvet lehet általánosítani többcsatornás esetre. Ennek következtében egyrészt a stacionárius és szimmetrikus S_{st} -mátrix a közelítő S_t -mátrixból egy (3.96)-hoz hasonló korrekcióval nyerhető. Másrészt az S stacionaritására vonatkozó feltételből a hullámfüggvényre vonatkozó többcsatornás Kohn-Hulthén-féle variációs elv következik az egycsatornás esethez hasonlóan. A mátrixelemek visszavezetése GCM kernelekre és egydimenziós integrálokra, a (3.122)-szerű (de sokcsatornás) lineáris egyenletrendszer leszámaztatása és megoldása, valamint ebből S_t és S_{st} előállítása az egycsatornás esettel teljesen analóg, így itt nem részletezzük.

A számításokból nyerhető $N_0 \times N_0$ (N_0 a nyitott csatornák száma) dimenziós S_{st} mátrixból az egyes csatornákon belüli elasztikus fázistolásokat az

$$S_{\alpha\alpha,st} = \eta_\alpha e^{2i\delta_\alpha} \quad \alpha \text{ nyitott} \quad (3.128)$$

összefüggés definiálja, ahol η_α az inelaszticitási paraméter ($0 < \eta_\alpha \leq 1$).

Kamimura módszerének komplex energiákra való általánosítását a 6. fejezetben mutatjuk be.

4. fejezet

A klasztermodell magfüggvényeinek számítása

Ebben a fejezetben a (3.44-45) GCM-kernelek számításának egy jól algoritmizálható módszerét mutatjuk be. A módszer alapjait R. Beck, F. Dickmann és Kruppa András dolgozta ki [43], a numerikus megvalósítás két 0s héjú klaszterből felépülő magnak csak centrális kölcsönhatást tartalmazó modelljére Kruppa András érdeme. A módszer továbbfejlesztését egy többkonfigurációs, többklaszteres, nem centrális kölcsönhatást is tartalmazó modellre én végeztem el, Pál Károlynak, Varga Kálmánnak, Kruppa Andrásnak és Lovas Rezsőnek néhány eredményét is felhasználva.

4.1 Az általános számítási séma

Tegyük fel, hogy Ψ_d^N a $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$ nem szükségképpen ortogonális egyrészecske-állapotokból felépülő determináns alakú hullámfüggvény

$$\Psi_d^N = \hat{P}(\varphi_1(\mathbf{r}_1), \varphi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \varphi_N(\mathbf{r}_N)) = \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \varphi_2(\mathbf{r}_1) & \dots & \varphi_N(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_1(\mathbf{r}_2) & \varphi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_N(\mathbf{r}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{r}_N) & \varphi_2(\mathbf{r}_N) & \dots & \varphi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}, \quad (4.1)$$

ahol \hat{P} az antiszimmetrizátor:

$$\hat{P} = \sum_{\varepsilon} (-1)^{\varepsilon} \hat{P}_{\varepsilon}. \quad (4.2)$$

Az összegzés az N állapot összes ε permutációján fut végig, \hat{P}_{ε} az egyrészecske állapotokat permutáló operátor, $(-1)^{\varepsilon}$ pedig az ε permutáció paritása. Két Ψ_d^N alakú hullámfüggvény fedése

$$\langle \Psi_d^N | \Psi_d^N \rangle = \sum_{\varepsilon_1} (-1)^{\varepsilon_1} \sum_{\varepsilon_2} (-1)^{\varepsilon_2} \langle \varphi_{\varepsilon_{11}} | \varphi_{\varepsilon_{21}} \rangle \langle \varphi_{\varepsilon_{12}} | \varphi_{\varepsilon_{22}} \rangle \dots \langle \varphi_{\varepsilon_{1N}} | \varphi_{\varepsilon_{2N}} \rangle \quad (4.3)$$

alakban írható fel (a $\langle \Psi_d^N | \Psi_d^N \rangle$ fedés egy N változós integrált jelöl). A (4.3)-ban szereplő tagok között több azonos található, ezeket összevonva a

$$\langle \Psi_d^N | \Psi_d^N \rangle = N! \sum_{\varepsilon} (-1)^{\varepsilon} \langle \varphi_1 | \varphi_{\varepsilon_1} \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_{\varepsilon_2} \rangle \dots \langle \varphi_N | \varphi_{\varepsilon_N} \rangle \quad (4.4)$$

kifejezést nyerjük, ami felírható

$$\langle \Psi_d^N | \Psi_d^N \rangle = N! \begin{vmatrix} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \varphi_N \rangle \\ \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_2 | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_N | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_N | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_N | \varphi_N \rangle \end{vmatrix} \quad (4.5)$$

alakban. A \hat{T}_i egytest-operátorokból (például a kinetikus energia vagy az elektromos multipólus operátor) felépülő $\sum_{i=1}^N \hat{T}_i$ operátor

$$\begin{aligned} \langle \Psi_d^N | \sum_{i=1}^N \hat{T}_i | \Psi_d^N \rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_{\varepsilon_1} (-1)^{\varepsilon_1} \sum_{\varepsilon_2} (-1)^{\varepsilon_2} \\ &\times \langle \varphi_{\varepsilon_{11}} | \varphi_{\varepsilon_{21}} \rangle \langle \varphi_{\varepsilon_{12}} | \varphi_{\varepsilon_{22}} \rangle \dots \langle \varphi_{\varepsilon_{1i}} | \hat{T}_i | \varphi_{\varepsilon_{2i}} \rangle \dots \langle \varphi_{\varepsilon_{1N}} | \varphi_{\varepsilon_{2N}} \rangle \end{aligned} \quad (4.6)$$

mátrixeleme némi számolás után az

$$\begin{aligned} \langle \Psi_d^N | \sum_{i=1}^N \hat{T}_i | \Psi_d^N \rangle &= N! \sum_{i=1}^N \sum_{\varepsilon} (-1)^{\varepsilon} \langle \varphi_1 | \varphi_{\varepsilon_1} \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_{\varepsilon_2} \rangle \dots \langle \varphi_i | \hat{T}_i | \varphi_{\varepsilon_i} \rangle \dots \langle \varphi_N | \varphi_{\varepsilon_N} \rangle \\ &= N! \sum_{i=1}^N \begin{vmatrix} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \varphi_N \rangle \\ \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_2 | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_i | \hat{T}_i | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_i | \hat{T}_i | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_i | \hat{T}_i | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_N | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_N | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_N | \varphi_N \rangle \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (4.7)$$

alakot ölti. A \hat{V}_{ij} kétttest-operátorból (például nukleon-nukleon kölcsönhatás) felépülő $\sum_{1 \leq i < j}^N \hat{V}_{ij}$ operátor

$$\begin{aligned} \langle \Psi_d^N | \sum_{i,j} \hat{V}_{ij} | \Psi_d^N \rangle &= \sum_{i,j} \sum_{\varepsilon_1} (-1)^{\varepsilon_1} \sum_{\varepsilon_2} (-1)^{\varepsilon_2} \\ &\times \langle \varphi_{\varepsilon_{11}} | \varphi_{\varepsilon_{21}} \rangle \langle \varphi_{\varepsilon_{12}} | \varphi_{\varepsilon_{22}} \rangle \dots \langle \varphi_{\varepsilon_{1i}} \varphi_{\varepsilon_{1j}} | \hat{V}_{ij} | \varphi_{\varepsilon_{2i}} \varphi_{\varepsilon_{2j}} \rangle \dots \langle \varphi_{\varepsilon_{1N}} | \varphi_{\varepsilon_{2N}} \rangle \end{aligned} \quad (4.8)$$

mátrixeleme az előzőekhez hasonlóan

$$\begin{aligned} \langle \Psi_d^N | \sum_{i,j} \hat{V}_{ij} | \Psi_d^N \rangle &= N! \sum_{i,j} \sum_{\varepsilon} (-1)^{\varepsilon} \\ &\times \langle \varphi_1 | \varphi_{\varepsilon_1} \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_{\varepsilon_2} \rangle \dots \langle \varphi_i \varphi_j | \hat{V}_{ij} | \varphi_{\varepsilon_i} \varphi_{\varepsilon_j} \rangle \dots \langle \varphi_N | \varphi_{\varepsilon_N} \rangle \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$= N! \sum_{i,j} \begin{vmatrix} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \varphi_N \rangle \\ \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_2 | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_i | \widehat{X}_i | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_i | \widehat{X}_i | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_i | \widehat{X}_i | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_j | \widehat{X}_j | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_j | \widehat{X}_j | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_j | \widehat{X}_j | \varphi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_N | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_N | \varphi_2 \rangle & \dots & \langle \varphi_N | \varphi_N \rangle \end{vmatrix} \quad (4.10)$$

alakra egyszerűsödik. A (4.10) kifejezés csak szimbólum, ha a determinánst kifejtjük és a “ $\langle \varphi_i | \widehat{X}_i | \varphi_{\varepsilon_i} \rangle \langle \varphi_j | \widehat{X}_j | \varphi_{\varepsilon_j} \rangle := \langle \varphi_i \varphi_j | \widehat{V}_{ij} | \varphi_{\varepsilon_i} \varphi_{\varepsilon_j} \rangle$ ” szimbolikus behelyettesítést elvégezzük akkor kapjuk (4.9) jobb oldalát (a (4.10) determinánssal felírt szimbolikus kifejezés számítástechnikai szempontból sokkal könnyebben kezelhető). Az (4.5), (4.7) és (4.10) kifejezésekből nyilvánvaló, hogy a

$$\Psi_{\text{Sl}}^N = \frac{1}{\sqrt{N!}} \Psi_{\text{d}}^N \quad (4.11)$$

Slater-determinánsok közötti mátrixelemeket egy- és kéttest-mátrixelemekből felépített determinánsok segítségével állíthatjuk elő (az $1/\sqrt{N!}$ szorzó miatt a Slater-determinánsok (4.5), (4.7) és (4.10) típusú kifejezéseiben nincs $N!$ szorzó). Ez utóbbiak számítása pedig összehasonlíthatatlanul egyszerűbb, mint a $3N$ -dimenziós integráloké.

Tegyük fel, hogy $\Psi_{d_1}^{N_1}$ és $\Psi_{d_2}^{N_2}$ egy N_1 illetve N_2 számú egyrészecske-függvényből felépülő (4.1) típusú determináns alakú függvény. Ekkor bebizonyítható, hogy a

$$\widehat{P}_{\varepsilon(1 \leftrightarrow 2)} \left(\Psi_{d_1}^{N_1} \Psi_{d_2}^{N_2} \right) \quad (4.12)$$

függvény éppen a $\Psi_{\text{d}}^{N_1+N_2} = \widehat{P} \left(\varphi_1(\mathbf{r}_1), \varphi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \varphi_{N_1}(\mathbf{r}_{N_1}), \dots, \varphi_{N_1+N_2}(\mathbf{r}_{N_1+N_2}) \right)$ determinánssal egyezik meg. Itt a $\widehat{P}_{\varepsilon(1 \leftrightarrow 2)}$ operátor (maradék-antiszimmetrizátor) a $\Psi_{d_1}^{N_1}$ és $\Psi_{d_2}^{N_2}$ közti antiszimmetrizálást végzi el

$$\widehat{P}_{\varepsilon(1 \leftrightarrow 2)} = 1 + \sum_{\varepsilon(1 \leftrightarrow 2)} (-1)^\varepsilon \widehat{P}_\varepsilon, \quad (4.13)$$

ahol az összegzés olyan permutációkon fut végig, amelyek $\Psi_{d_1}^{N_1}$ -beli állapotoknak $\Psi_{d_2}^{N_2}$ -belielliekkel történő cseréjét írják le. Ezek szerint a $\Psi_{\text{Sl}}^{N_1}$ és $\Psi_{\text{Sl}}^{N_2}$ Slater-determinánsokból felépülő antiszimmetrizált $\Psi_{\text{Sl}}^{N_1+N_2}$ függvény (4.11) felhasználásával

$$\Psi_{\text{Sl}}^{N_1+N_2} = \left(\frac{N_1! N_2!}{(N_1 + N_2)!} \right)^{1/2} \left(1 + \sum_{\varepsilon(1 \leftrightarrow 2)} (-1)^\varepsilon \widehat{P}_\varepsilon \right) \left(\Psi_{\text{Sl}}^{N_1} \Psi_{\text{Sl}}^{N_2} \right) \quad (4.14)$$

formájú. Ez pedig, figyelembe véve a klaszterek közötti antiszimmetrizátor (3.2) definícióját, éppen olyan alakú, mint a (3.29) GCM bázisfüggvény (a (3.2)-beli $\delta_{A,B}$ az aszimptotikus csatorna-hullámfüggvények normálásáról gondoskodik azonos klaszterek esetén). Feladatunk ezek után a φ egyrészecske-függvények megválasztása, az egy- és kéttest-mátrixelemek kiszámítása, majd ezeket felhasználva a (4.5), (4.7) és (4.10) formulák kiértékelése.

4.2 A magfüggvények számítása eltolt Gauss-bázison

A 3.2. fejezetben láttuk, hogy ha a φ egyrészecske-függvényekként a (3.30) \mathbf{s}_C pontra centrált ($C = A$ vagy B) harmonikusoszillátor-függvényeket használjuk, akkor a GCM bázisfüggvény a (3.36) impulzusvetítés után az

$$\mathcal{A}_{AB}(\phi_A^{\text{int}}(\beta_A)\phi_B^{\text{int}}(\beta_B)\Gamma(\mathbf{r}_{AB}, \mathbf{s}, \gamma_0)) \quad (4.15)$$

alakot ölti, tehát a relatív mozgást jellemző függvény egy eltolt Gauss-függvény. A továbbiakban a kétklaszter-konfigurációkon túl három (vagy több) klaszterre való tagozódást is le akarunk írni. Ebben az esetben a (4.15) bázisfüggvény természetes módon általánosítható. Például egy háromklaszter-konfiguráció az impulzusmomentum-csatolási sémát is kiírva (a lényegtelen indexeket elhagyva)

$$\Psi_{S,(l_1 l_2)L}^{(12)3} = \mathcal{A}_{ABC} \left\{ \left[\phi_S[\Gamma_{l_1}^{(AB)}(\mathbf{r}_{AB}, \mathbf{s}_1, \gamma_{10})\Gamma_{l_2}^{(AB)C}(\mathbf{r}_{(AB)C}, \mathbf{s}_2, \gamma_{20})]_L \right]_{JM} \right\} \quad (4.16)$$

alakú, ahol $\phi_{SM_S} = [\phi_A^{\text{int}}(\beta_A)\phi_B^{\text{int}}(\beta_B)\phi_C^{\text{int}}(\beta_C)]_{SM_S}$ a belső állapot, \mathbf{r}_{AB} és $\mathbf{r}_{(AB)C}$ pedig a klaszterek közötti Jacobi-koordináták:

$$\mathbf{r}_{AB} = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A, \quad (4.17)$$

$$\mathbf{r}_{(AB)C} = \mathbf{r}_C - \frac{A\mathbf{r}_A + B\mathbf{r}_B}{A+B}. \quad (4.18)$$

Tegyük fel, hogy az egyes klaszterek $0s$ héjúak. Ekkor az egyrészecske-függvények

$$\varphi_k(\mathbf{r}_k - \mathbf{s}_\alpha, \beta_\alpha) = \left(\frac{\beta_\alpha}{\pi}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{\beta_\alpha}{2}(\mathbf{r}_k - \mathbf{s}_\alpha)^2\right) \chi_s(k) \tau_t(k) \quad (4.19)$$

alakúak (két klaszter esetében $\alpha = A$ vagy B , három klaszter esetében pedig $\alpha = A$, B vagy C ; a továbbiakban, ha külön nem említjük mindig kétklaszter-esetre írjuk fel a példákat). Tételezzük fel egy pillanatra, hogy a nukleonok mindegyike más-más pontra centrált más-más méretparaméterű függvény. Ekkor a GCM bázisállapot a

$$\Psi_{S1} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{P} \left(\varphi_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}_1, \beta_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}_2, \beta_2) \dots \varphi_N(\mathbf{r}_N - \mathbf{s}_N, \beta_N) \right) \quad (4.20)$$

sokcentrumú héjmodell-függvény. Természetesen

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{s}_A, \quad \beta_i = \beta_A, \quad \text{ha } i \leq A, \quad (4.21)$$

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{s}_B, \quad \beta_i = \beta_B, \quad \text{ha } A < i \leq A+B, \dots \quad (4.22)$$

Tegyük fel, hogy a két oldali klaszterizáció különbözhet a bra oldaliétól, s jelöljük a két oldali mennyiségeket vesszővel (pl. A' , B' , \mathbf{s}'_A , \mathbf{s}'_B stb.). Az egyrészecske-fedések, a $-(\hbar^2/2\mu)\Delta_{\mathbf{r}}$ kinetikus energia egyrészecske- és a $V_{AB}(\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B) = V_0 \exp(-\frac{d}{2}(\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B)^2)$ centrális potenciál kétrészecske-mátrixelemei rendre [15]

$$\langle \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{s}, \beta) | \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{s}', \beta') \rangle = \left(\frac{4\beta\beta'}{(\beta + \beta')^2}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{\beta\beta'}{2(\beta + \beta')}(\mathbf{s} - \mathbf{s}')^2\right) \delta_{ss'} \delta_{tt'} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{s}, \beta) | -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} | \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{s}', \beta') \rangle = \\ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\beta\beta'}{\beta + \beta'} \left(3 - \frac{\beta\beta'}{\beta + \beta'} (\mathbf{s} - \mathbf{s}')^2 \right) \langle \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{s}, \beta) | \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{s}', \beta') \rangle \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}_i, \beta_i) \varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}_j, \beta_j) | V_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) | \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}'_i, \beta'_i) \varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}'_j, \beta'_j) \rangle \\ = V_0 (1 + dA(i, j))^{-3/2} \exp(-\delta(i, j) \mathbf{b}(i, j)^2) \\ \times \langle \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}_i, \beta_i) | \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}'_i, \beta'_i) \rangle \langle \varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}_j, \beta_j) | \varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}'_j, \beta'_j) \rangle \end{aligned} \quad (4.25)$$

alakúak, ahol

$$\mathbf{b}(i, j) = \frac{\beta_i \mathbf{s}_i + \beta'_i \mathbf{s}'_i}{\beta_i + \beta'_i} - \frac{\beta_j \mathbf{s}_j + \beta'_j \mathbf{s}'_j}{\beta_j + \beta'_j}, \quad (4.26)$$

$$A(i, j) = \frac{\beta_i + \beta_j + \beta'_i + \beta'_j}{(\beta_i + \beta'_i)(\beta_j + \beta'_j)}, \quad (4.27)$$

$$\delta(i, j) = \frac{d}{2} \frac{1}{1 + dA(i, j)}. \quad (4.28)$$

Amennyiben a nukleon-nukleon kölcsönhatás a \hat{P}_σ , \hat{P}_τ , \hat{P}_r (mivel a hullámfüggvény antiszimmetrikus $\hat{P}_r = -\hat{P}_\sigma \hat{P}_\tau$) spin-, izospin- és térkicszerelő kétrészecske-operátor valamelyikét tartalmazza, (4.25)-ben csak az egyrészecske-fedésekben megjelenő (4.23)-beli spin-izospin szerinti δ függvények változnak meg (például $\langle \varphi_i \varphi_j | V_{12} \hat{P}_\sigma | \varphi'_i \varphi'_j \rangle = \dots \delta_{s_i s'_i} \delta_{s_j s'_j} \delta_{t_i t'_i} \delta_{t_j t'_j}$). Ezeket behelyettesítve az (4.5), (4.7) és (4.10) formulákba, olyan összegeket kapunk, amelyeknek egyes tagjai exponenciális függvények, és az exponensben \mathbf{s}_i -nek és \mathbf{s}'_i -nek a kvadratikus formája áll (a kinetikus energia esetén az exponenciális függvény előtti szorzó is egy ilyen kvadratikus alak). A (3.36) impulzusvetítéshez át kell térnünk az \mathbf{s}_i és \mathbf{s}'_i vektorok tömegközépponti rendszerére. Ekkor

$$\mathbf{S} = \frac{A \mathbf{s}_A + B \mathbf{s}_B (+ C \mathbf{s}_C)}{A + B (+ C)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i. \quad (4.29)$$

Válasszuk meg továbbá a koordinátarendszerünket úgy, hogy

$$\mathbf{S}' = \frac{A' \mathbf{s}'_A + B' \mathbf{s}'_B (+ C' \mathbf{s}'_C)}{A' + B' (+ C')} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{s}'_i = 0 \quad (4.30)$$

legyen. A (4.21)-(4.22) felhasználásával minden \mathbf{s}_i és \mathbf{s}'_i pont \mathbf{S} és \mathbf{S}' segítségével

$$\mathbf{s}_i = \mathbf{S} + \mathbf{u}_i = \mathbf{S} + \sum_{j=1}^{N_C-1} c_{ij} \boldsymbol{\rho}_j \quad (4.31)$$

$$\mathbf{s}'_i = \mathbf{u}'_i = \sum_{j=1}^{N'_C-1} c'_{ij} \boldsymbol{\rho}'_j \quad (4.32)$$

alakban írható, ahol N_C és N'_C a bra illetve ket oldali klaszterek száma, $\boldsymbol{\rho}$ és $\boldsymbol{\rho}'$ pedig a Jacobi-koordináták

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\rho}_1 &= \mathbf{s}_B - \mathbf{s}_A, & \left(\boldsymbol{\rho}_2 = \mathbf{s}_C - \frac{A\mathbf{s}_A + B\mathbf{s}_A}{A+B}, \dots \right) \\ \boldsymbol{\rho}'_1 &= \mathbf{s}'_B - \mathbf{s}'_A, & \left(\boldsymbol{\rho}'_2 = \mathbf{s}'_C - \frac{A'\mathbf{s}'_A + B'\mathbf{s}'_B}{A'+B'}, \dots \right) \end{aligned} \quad (4.33)$$

(N_C illetve N'_C számú klaszter esetén $N_C - 1$ illetve $N'_C - 1$ számú ilyen koordináta van). Írjunk tehát a kernelekben \mathbf{s}_i helyére $\mathbf{S} + \mathbf{u}_i$ -t, \mathbf{s}'_i helyére pedig \mathbf{u}'_i -t és integráljunk \mathbf{S} szerint, majd az eredményben helyettesítsük \mathbf{u}_i -t és \mathbf{u}'_i -t (4.31)-(4.32) szerint. Ekkor az impulzusvetített kerneleket nyerjük. A fenti sokcentrumú héjmodelles módszer nagy előnye, hogy a (4.23), (4.24) és (4.25)-ből felépített sokrészesecske kernelekben az $\mathbf{s}_i \rightarrow \mathbf{S} + \mathbf{u}_i$, $\mathbf{s}'_i \rightarrow \mathbf{u}'_i$ áttérés után mindig elvégezhető az \mathbf{S} szerinti integrálás és a klaszterekre vonatkozó információt (pl. hogy hány klaszter van) (4.31)-(4.32) formájában csak ezután kell a kernelekbe beletennünk. Az egyes kernelek egy-egy általános tagja ezek után, ha például a bra és ket oldalon is egy-egy kétklaszteres konfiguráció van:

$$c_N \exp \left(-u_N \mathbf{s}^2 - u'_N \mathbf{s}'^2 + w_N \mathbf{s} \mathbf{s}' \right), \quad (4.34)$$

$$c_T (f_0 + f \mathbf{s}^2 + f' \mathbf{s}'^2 + g \mathbf{s} \mathbf{s}') \exp \left(-u_T \mathbf{s}^2 - u'_T \mathbf{s}'^2 + w_T \mathbf{s} \mathbf{s}' \right), \quad (4.35)$$

$$c_V \exp \left(-u_V \mathbf{s}^2 - u'_V \mathbf{s}'^2 + w_V \mathbf{s} \mathbf{s}' \right) \quad (4.36)$$

alakú (a $\boldsymbol{\rho}$, $\boldsymbol{\rho}'$ jelölésről áttértünk az irodalomban szokásos \mathbf{s} , \mathbf{s}' jelölésre, azonban nem felejtendő el, hogy ezek a vektorok már a (4.33)-mal definiált relatív vektorok). Természetesen az egyes együtthatók a β -kból felépülő (T -nél $\hbar^2/2\mu$ -tól, V -nél d -től is függő) igen bonyolult kifejezések, amelyek [15]-ben megtalálhatók.

Ha a bra és ket oldalon is egy-egy háromklaszter-konfiguráció áll, akkor (4.34)-(4.36)-ban az \mathbf{s}_1 , \mathbf{s}_2 , \mathbf{s}'_1 , \mathbf{s}'_2 vektorok kvadratikus formája áll. Azonban, mint egyszerű számolással belátható, ha a (3.36) impulzusvetítést egy háromklaszter konfigurációra alkalmazzuk, akkor, noha az így nyert függvény már nem tartalmazza a tömegközéppont koordinátáját, az egyes relatív mozgási függvények általában nem szeparálódnak (4.16) alakba. Csak akkor nyerünk ilyen alakot, ha a három klaszter közül kettőnek a méretparamétere azonos (a továbbiakban csak ilyen esetekkel fogunk foglalkozni). Ahhoz, hogy három különböző méretparaméter mellett is (4.16)-szerű alakot nyerjünk az $\mathbf{S} = (A\mathbf{s}_A + B\mathbf{s}_B + C\mathbf{s}_C)/N$ koordináta mellett az (AB) alrendszer $\mathbf{S}_{(AB)} = (A\mathbf{s}_A + B\mathbf{s}_B)/(A+B)$ koordinátája szerinti integrálással járó impulzusvetítést is el kellene végeznünk.

A (4.34), (4.35) és (4.36) általános tagokkal reprezentált kernelekből ezek után (ha szükséges) a (3.59) kettős integráltranszformációval olyan kerneleket nyerhetünk, amelyekben a relatív mozgásbeli eltolt Gauss-függvény γ paramétere tetszőleges. Be lehet látni, hogy egy ilyen transzformáció után a kernelek általános tagja ugyancsak (4.34)-(4.36) alakú [15].

Következő feladatunk a (3.47-48)-ban kijelölt impulzusmomentum-vetítés elvégzése.

Ez (4.34)-re például a következőt jelenti

$$c_N \int \int Y_{lm}^*(\hat{s}) \exp\left(-u_N \mathbf{s}^2 - u'_N \mathbf{s}'^2 + w_N \mathbf{s} \mathbf{s}'\right) Y_{lm}(\hat{s}') d\hat{s} d\hat{s}', \quad (4.37)$$

ami felhasználva az

$$\exp\left(w_N \mathbf{s} \mathbf{s}'\right) = 4\pi \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} i_{l'}(w_N \mathbf{s} \mathbf{s}') Y_{l'm'}(\hat{s}) Y_{l'm'}^*(\hat{s}') \quad (4.38)$$

összefüggést (ahol $i_{l'}$ az elsőfajú módosított szférikus Bessel-függvény [18]), a

$$4\pi c_N \exp\left(-u_N \mathbf{s}^2 - u'_N \mathbf{s}'^2\right) i_l(w_N \mathbf{s} \mathbf{s}') \quad (4.39)$$

végeredményre vezet. A (4.35) alakon úgy végezhető el az impulzusmomentum-vetítés a legkönnyebben, ha (4.35)-öt

$$c_T \left(f_0 + f \frac{\partial}{\partial(-u_T)} + f' \frac{\partial}{\partial(-u'_T)} + g \frac{\partial}{\partial(w_T)} \right) \exp\left(-u_T \mathbf{s}^2 - u'_T \mathbf{s}'^2 + w_T \mathbf{s} \mathbf{s}'\right) \quad (4.40)$$

alakba írjuk, majd az exponenciális függvény vetítéséből kapható (4.39) típusú kifejezésen elvégezzük a kijelölt differenciálásokat.

Amennyiben egy háromklaszter-konfiguráció normálási (és energia-) kerneleinek

$$N(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}'_1, \mathbf{s}'_2) = \exp\left(\sum_{1 \leq i < j}^2 (-u_{ij} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - u'_{ij} \mathbf{s}'_i \mathbf{s}'_j) + \sum_{i,j=1}^2 (-w_{ij} \mathbf{s}_i \mathbf{s}'_j)\right) \quad (4.41)$$

általános tagján végrehajtjuk az

$$\int Y_{l_{AB} m_{AB}}^*(\hat{s}_1) Y_{l_{(AB)C} m_{(AB)C}}^*(\hat{s}_2) N(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}'_1, \mathbf{s}'_2) Y_{l_{AB} m_{AB}}(\hat{s}'_1) Y_{l_{(AB)C} m_{(AB)C}}(\hat{s}'_2) d\hat{s}_1 d\hat{s}_2 d\hat{s}'_1 d\hat{s}'_2 \quad (4.42)$$

impulzusmomentum-vetítést, az alábbi kifejezést nyerjük [44]:

$$\sum_{l_1, l_2, \dots, l_6=0}^{\infty} i_{l_1}(x_1) i_{l_2}(x_2) \cdots i_{l_6}(x_6) f(l_1, l_2, \dots, l_6) \exp\left(-\sum_{i=1}^2 (u_{ii} \mathbf{s}_i^2 + u'_{ii} \mathbf{s}'_i{}^2)\right), \quad (4.43)$$

ahol az x -ek u_{ij} , u'_{ij} , w_{ij} , \mathbf{s}_i és \mathbf{s}'_i skalár függvényei. Az f függvény az impulzusmomentum-csatolások kinematikai faktoraiból jön, és fellépte miatt az l_1, l_2, \dots, l_6 -ra való összegzések össze vannak csatolódva, külön-külön nem végezhető el. A (4.43) kifejezést [45]-ben használták, és azt állították róla, hogy az l -ekre történő összegzés során a kifejezés elég gyorsan konvergál. Próbaszámításaink ezzel szemben azt mutatták, hogy mivel gyakorlatilag lehetetlen úgy összehangolni az egyes l -ek növelését, hogy a (4.43) sor egyenletesen konvergens legyen, a numerikus számítás időigényes és a végeredmény hibájának becslése is igen körülményes. Mivel pedig a sajátérték-probléma megoldása érzékenyen függhet a mátrixelemek kis hibájától is, úgy ítéljük meg, hogy (4.43) kiszámításának problémája egy precíz klasztermodell-számolásban csak komoly gyakorlati nehézségek árán (rendkívül nagy gépidőigény) kezelhető. A fenti probléma kiküszöbölhető, ha a klaszterek relatív

mozgását eltolt Gauss-függvények helyett temperált Gauss-függvényekkel írjuk le. Erről a 4.3. fejezetben szólunk részletesen.

Ha az $\hat{1}$, \hat{T} és \hat{V} operátorok mellett más egy- illetve kéttest-operátoroknak a Slater-determinánsok közötti mátrixelemét is ki akarjuk számítani, akkor a fent részletezett eljárást kell követnünk. Példaként bemutatjuk a nemcentrális tenzor- és spin-pálya kölcsönhatás, valamint a magsugár és a kvadrupólmomentum kerneleinek kiszámítását. A tenzor és spin-pálya kölcsönhatásra vonatkozó részletes számolásokat Pál Károly végezte el.

A tenzorkölcsönhatás operátora

$$V_T(\mathbf{r}) = V_{T0} \exp\left(-\frac{d_T}{2}\mathbf{r}^2\right) r^2 \left(\frac{3(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{r})}{r^2} - (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)\right) \quad (4.44)$$

alakú, ahol $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_1$ és $\boldsymbol{\sigma}_2$ pedig az egyes részecskékhez tartozó Pauli-mátrix vektorai. A (4.44) alak átírható (lásd pl. [46])

$$V_T(\mathbf{r}) = V_{T0} \exp\left(-\frac{d_T}{2}\mathbf{r}^2\right) \sqrt{\frac{24\pi}{5}} r^2 (S^{(2)} \cdot Y^{(2)}(\hat{r})) \quad (4.45)$$

formára, ahol az $Y^{(2)}(\hat{r})$ és az $S^{(2)}$ másodrendű szférikus tenzorok gömbi komponenseit

$$Y_m^{(2)}(\hat{r}) = Y_{2m}(\hat{r}) \quad m = -2, -1, 0, 1, 2 \quad (4.46)$$

$$S_m^{(2)} = \sum_{\nu, \mu=-1}^1 \langle 1\nu 1\mu | 2m \rangle \sigma_{1\nu}^{(1)} \sigma_{2\mu}^{(1)} \quad (4.47)$$

alakban adhatjuk meg. A (4.47)-beli $\sigma_{1\nu}^{(1)}$ és $\sigma_{2\mu}^{(1)}$ az egyes illetve kettes részecske Pauli-mátrixainak mint elsőrendű szférikus tenzoroknak a μ -edik illetve ν -edik gömbi komponense, például

$$\sigma_{10}^{(1)} = \sigma_{1z}, \quad \sigma_{1\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{1x} \pm i\sigma_{1y}), \quad (4.48)$$

$\langle 1\nu 1\mu | 2m \rangle$ pedig a Clebsch-Gordan-együtthatót jelöli. A (4.45)-beli zárójelen belüli \cdot jel a két másodrendű tenzor skaláris szorzatát jelöli:

$$(S^{(2)} \cdot Y^{(2)}(\hat{r})) = \sum_{m=-2}^2 (-1)^m S_m^{(2)} Y_{-m}^{(2)}(\hat{r}). \quad (4.49)$$

A (4.45) és (4.49) összefüggések alapján nyilvánvaló, hogy (4.45) átírható spinfüggő (jelölje ezt \mathcal{S}) és térfüggő (\mathcal{R}) tényezők valamint egy exponenciális függvény szorzatának összegére

$$\begin{aligned} V_T(\mathbf{r}) &= V_{T0} \sqrt{\frac{24\pi}{5}} \exp\left(-\frac{d_T}{2}\mathbf{r}^2\right) \sum_{m=-2}^2 (-1)^m S_m^{(2)} r^2 Y_{2-m}(\hat{r}) \\ &= V_{T0} \sqrt{\frac{24\pi}{5}} \exp\left(-\frac{d_T}{2}\mathbf{r}^2\right) \sum_{m=-2}^2 (-1)^m \mathcal{S}_m \mathcal{R}_{-m}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

m	0	1	-1	2	-2
s_i	+ + + - - -	+ + + -	+ - - -	+ -	-
s_j	+ - - + + -	+ + - +	- + - -	+ -	-
s'_i	+ + - + - -	+ - - -	+ + + -	- +	+
s'_j	+ - + - + -	- + - -	+ + - +	- +	+
$\langle S_m^{(2)} \rangle$	c -c -c -c -c c	-1 -1 1 1	1 1 -1 -1	2 2	

1. táblázat: A tenzorkölcsönhatás spintérbeli mátrixelemei.

Az összeg egy tagjának (4.25) kéttest-mátrixeleme

$$\begin{aligned} \langle V_T \rangle = \langle \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}_i, \beta_i, s_i, t_i) \varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}_j, \beta_j, s_j, t_j) | \mathcal{S}_m \mathcal{R}_{-m} e^{-\frac{d}{2} \mathbf{r}^2} \\ | \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}'_i, \beta'_i, s'_i, t'_i) \varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}'_j, \beta'_j, s'_j, t'_j) \rangle \end{aligned} \quad (4.51)$$

alakú (s_i, s_j, s'_i, s'_j a részecskék spin- t_i, t_j, t'_i, t'_j az izospin vetületei). Ezt a mátrixelemet az egyrészecske-pályák (4.19) alakját felhasználva a spin- illetve koordinátatérben külön-külön értékelhetjük ki. A spintérbeli

$$\langle \chi^1(s_i) \chi^2(s_j) | S_m^{(2)} | \chi^1(s'_i) \chi^2(s'_j) \rangle \quad (4.52)$$

mátrixelemek hosszadalmas, de elemi számolás után megkaphatók. A végeredményt 1. táblázatban foglaltuk össze, ahol + jelentése $+1/2$, - jelentése $-1/2$, a c értéke pedig $\sqrt{2/3}$. A fel nem tüntetett mátrixelemek mind nullák.

A térbeli rész integrálja

$$I = \frac{(\beta_i \beta_j \beta'_i \beta'_j)^{3/4}}{\pi^3} \int e^{-\frac{\beta_i}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}_i)^2 - \frac{\beta_j}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}_j)^2} e^{-\frac{d}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2} \mathcal{R}_m e^{-\frac{\beta'_i}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{s}'_i)^2 - \frac{\beta'_j}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{s}'_j)^2} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (4.53)$$

alakú. Az $\mathcal{R}_m = 1$ esetben a (4.25) skalárpotenciál mátrixelemét kapnánk vissza. Áttérve az

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{u} + \frac{1}{\beta_i + \beta'_i} \mathbf{t}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{u} - \frac{1}{\beta_j + \beta'_j} \mathbf{t} \quad (4.54)$$

összefüggésekkel értelmezett \mathbf{u} és \mathbf{t} változókra

$$I = A^3 e^{-\Gamma + u_1 u_0^2 + t_1 t_0^2} \int \mathcal{R}_m e^{-u_1(\mathbf{u} + \mathbf{u}_0)^2} e^{-t_1(\mathbf{t} + \mathbf{t}_0)^2} d\mathbf{u} d\mathbf{t}, \quad (4.55)$$

ahol

$$A = \frac{1}{\beta_i + \beta'_i} + \frac{1}{\beta_j + \beta'_j} \quad (4.56)$$

$$t_1 = \frac{1}{2}(A + dA^2) \quad (4.57)$$

$$\mathbf{t}_0 = -\frac{1}{2t_1} \left(\frac{\beta_i \mathbf{s}_i + \beta'_i \mathbf{s}'_i}{\beta_i + \beta'_i} - \frac{\beta_j \mathbf{s}_j + \beta'_j \mathbf{s}'_j}{\beta_j + \beta'_j} \right), \quad (4.58)$$

Γ , u_1 és \mathbf{u}_0 pedig szintén a β_i , β'_i , β_j , β'_j , \mathbf{s}_i , \mathbf{s}'_i , \mathbf{s}_j és \mathbf{s}'_j változókkal van kifejezve. Mivel a későbbiekben nem lesz rájuk szükség, konkrét alakjukat nem írjuk ki. Az (4.54) integráltranszformációt végrehajtva a térfüggő rész az

$$\mathcal{R}_m = A^2 \mathbf{t}^2 Y_{2m}(\hat{t}) \quad (4.59)$$

alakot ölti. A (4.55)-beli

$$A^2 \int \mathbf{t}^2 e^{-t_1(\mathbf{t}+\mathbf{t}_0)^2} Y_{2m}(\hat{t}) d\mathbf{t} \quad (4.60)$$

\mathbf{t} szerinti integrál némi számolás után az

$$A^2 \mathbf{t}_0^2 Y_{2m}(\hat{t}_0) \int e^{-t_1(\mathbf{t}+\mathbf{t}_0)^2} d\mathbf{t} \quad (4.61)$$

alakra hozható. Ezt visszahelyettesítve (4.55)-be az $A^2 \mathbf{t}_0^2 Y_{2m}$ szorzótól eltekintve az $\mathcal{R}_m = 1$ -hez tartozó skaláropotenciál mátrixelemét kapjuk. Tehát a térbeli integrál végeredménye

$$I = A^2 \mathbf{t}_0^2 Y_{2m}(\hat{t}_0) \langle V_{\text{scal.}} \rangle. \quad (4.62)$$

Behelyettesítve ezt (4.50)-be (továbbá mivel a táblázatból láthatólag a spintérbeli mátrixelem csak akkor nem nulla, ha $m = s_i + s_j - s'_i - s'_j$), a tenzorkölcsönhatás mátrixeleme

$$\begin{aligned} \langle V_T \rangle &= A^2 \mathbf{t}_0^2 \delta_{t_i t'_i} \delta_{t_j t'_j} \sqrt{\frac{24\pi}{5}} \langle \chi^1(s_i) \chi^2(s_j) | S_{s_i+s_j-s'_i-s'_j}^2 | \chi^1(s'_i) \chi^2(s'_j) \rangle \\ &\quad \times (-1)^{s_i+s_j-s'_i-s'_j} Y_{2, s'_i+s'_j-s_i-s_j}(\hat{t}_0) \langle V_{\text{scal.}} \rangle \end{aligned} \quad (4.63)$$

alakú. A benne szereplő mennyiségeket az 1. táblázat (4.56)-(4.58) és (4.25) tartalmazza. A (4.25)-beli potenciálerősség és diffuzitás most természetesen V_{T0} illetve d_T .

Az (4.63)-beli gömbfüggvény argumentuma az \mathbf{s} vektorok lineáris kombinációjaként előálló \mathbf{t}_0 vektor szöge. Írjuk át ezt olyan alakba, amely az egyes \mathbf{s} vektorok szögétől függ. Az $Y_{2m}(\hat{t}_0)$ függvény felírható ugyanolyan argumentumú elsőrendű gömbfüggvények segítségével, nevezetesen

$$\begin{aligned} Y_{22}(\hat{t}_0) &= \sqrt{\frac{10\pi}{3}} Y_{11}(\hat{t}_0) Y_{11}(\hat{t}_0) \\ Y_{21}(\hat{t}_0) &= \sqrt{\frac{20\pi}{3}} Y_{10}(\hat{t}_0) Y_{11}(\hat{t}_0) \\ Y_{20}(\hat{t}_0) &= \frac{\sqrt{20\pi}}{3} \left(Y_{11}(\hat{t}_0) Y_{1-1}(\hat{t}_0) + Y_{10}(\hat{t}_0) Y_{10}(\hat{t}_0) \right) \end{aligned} \quad (4.64)$$

$$\begin{aligned} Y_{2-1}(\hat{t}_0) &= \sqrt{\frac{20\pi}{3}} Y_{10}(\hat{t}_0) Y_{1-1}(\hat{t}_0) \\ Y_{2-2}(\hat{t}_0) &= \sqrt{\frac{10\pi}{3}} Y_{1-1}(\hat{t}_0) Y_{1-1}(\hat{t}_0). \end{aligned} \quad (4.65)$$

Ezt felhasználva $\mathbf{t}_0^2 Y_{2m}(\hat{t}_0)$ átírható a \mathbf{t}_0 mint elsőrendű gömbi tenzor szférikus koordinátáit tartalmazó kifejezéssé. Ennek egy tagja

$$\mathbf{t}_0^2 Y_{1i}(\hat{t}_0) Y_{1j}(\hat{t}_0) = \frac{3}{4\pi} t_{0i}^{(1)} t_{0j}^{(1)}, \quad (4.66)$$

ahol felhasználtuk, hogy egy \mathbf{x} vektor szférikus komponensei

$$x_i^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} |\mathbf{x}| Y_{1i}(\hat{x}) \quad (4.67)$$

alakban írhatók. Az (4.66) kifejezés jobb oldalába behelyettesítve \mathbf{t}_0 (4.58) alakját, továbbá felhasználva, hogy tetszőleges \mathbf{a} és \mathbf{b} vektorokra $(a+b)_i^{(1)} = a_i^{(1)} + b_i^{(1)}$, a $\mathbf{t}_0^2 Y_{2m}(\hat{t}_0)$ kifejezés az egyes \mathbf{s} vektorok szférikus komponenseinek szorzatából álló összeg alakjára írható át, például

$$\mathbf{t}_0^2 Y_{22}(\hat{t}_0) = \sqrt{\frac{10\pi}{3}} \frac{3}{4\pi} \frac{1}{2t_1} \left(-\frac{\beta_i s_{i1}^{(1)} + \beta'_i s'_{i1}{}^{(1)}}{\beta_i + \beta'_i} - \frac{\beta_j s_{j1}^{(1)} + \beta'_j s'_{j1}{}^{(1)}}{\beta_j + \beta'_j} \right)^2. \quad (4.68)$$

A spin-pálya kölcsönhatás operátora

$$V_{SO}(\mathbf{r}) = V_{SO}^0 \hbar^{-2} \exp\left(-\frac{d_{SO}}{2} \mathbf{r}^2\right) (\mathbf{L}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)) \quad (4.69)$$

alakú, ahol \mathbf{L} a két nukleon relatív mozgásának

$$\mathbf{L} = -\frac{1}{2} i\hbar \mathbf{r} (\nabla_1 - \nabla_2) \quad (4.70)$$

pálya-impulzusmomentum operátora. A (4.69) kifejezés, felhasználva a

$$\nabla_\nu e^{-\frac{\beta}{2}(\mathbf{r}_\nu - \mathbf{s})^2} = -\beta(\mathbf{r}_\nu - \mathbf{s}) e^{-\frac{\beta}{2}(\mathbf{r}_\nu - \mathbf{s})^2} \quad (4.71)$$

összefüggést, szintén tér- és spinfüggő tagok szorzatának összege lesz. Az összeg egy tagja

$$V_{SO}(\mathbf{r}) = V_{SO}^0 \hbar^{-2} \exp\left(-\frac{d_{SO}}{2} \mathbf{r}^2\right) \mathcal{R} \mathcal{S}, \quad (4.72)$$

ahol

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= -i\hbar(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \left[\beta'_i (\mathbf{s}'_i - \mathbf{r}_1) - \beta'_j (\mathbf{s}'_j - \mathbf{r}_2) \right] \\ &= -i\hbar \left[(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times (\beta'_i \mathbf{s}'_i - \beta'_j \mathbf{s}'_j) + (\beta'_j - \beta'_i) (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2) \right], \end{aligned} \quad (4.73)$$

illetve

$$\mathcal{S} = \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2. \quad (4.74)$$

A (4.72) operátor kéttest-mátrixelemét a tenzorkölcsönhatáshoz hasonlóan a spin- és koordinátatérben külön-külön számolhatjuk ki. A spintérbeli rész

$$\langle \chi^1(s_i)\chi^2(s_j) | \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 | \chi^1(s'_i)\chi^2(s'_j) \rangle. \quad (4.75)$$

A térbeli rész (4.53) integrálján végrehajtva az (4.54) transzformációt, az (4.55) alakot nyerjük. Az integráltranszformáció a térfüggő részt

$$\mathcal{R} = -i\hbar A \left\{ \mathbf{t} \times (\beta'_i \mathbf{s}'_i - \beta'_j \mathbf{s}'_j) + (\beta'_j - \beta'_i) \mathbf{t} \times \mathbf{u} \right\} \quad (4.76)$$

alakba viszi át. Ezt behelyettesítve (4.55)-be, az

$$A^3 e^{-\Gamma + u_1 \mathbf{u}_0^2 + t_1 \mathbf{t}_0^2} (-i\hbar A) \left\{ \int \mathbf{t} e^{-t_1(\mathbf{t} + \mathbf{t}_0)^2} d\mathbf{t} \times \left[(\beta'_i \mathbf{s}_i - \beta'_j \mathbf{s}'_j) \int e^{-u_1(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_0)^2} d\mathbf{u} + (\beta'_j - \beta'_i) \int \mathbf{u} e^{-u_1(\mathbf{u} + \mathbf{u}_0)^2} d\mathbf{u} \right] \right\} \quad (4.77)$$

eredményre jutunk. Az integrálokat egyszerűsíthetjük, ha felhasználjuk, hogy

$$\int \mathbf{a} e^{-c(\mathbf{a} + \mathbf{a}_0)^2} d\mathbf{a} = -\mathbf{a}_0 \int e^{-c(\mathbf{a} + \mathbf{a}_0)^2} d\mathbf{a}. \quad (4.78)$$

Ezek után a spin-pálya kölcsönhatás kéttest-mátrixeleme

$$\langle V_{SO} \rangle = -\frac{i}{2} A \delta_{t_i t'_i} \delta_{t_j t'_j} \langle \chi^1(s_i)\chi^2(s_j) | \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 | \chi^1(s'_i)\chi^2(s'_j) \rangle \cdot \left[\mathbf{t}_0 \times [(\beta'_j - \beta'_i) \mathbf{u}_0 - (\beta'_i \mathbf{s}'_i - \beta'_j \mathbf{s}'_j)] \right] \langle V_{\text{scal.}} \rangle \quad (4.79)$$

alakú lesz (felhasználtuk, hogy (4.55) $\mathcal{R} = 1$ esetén éppen a skalárpotenciál). A(4.79)-beli vektori szorzat második tagja felírható $\mathbf{v} + \mathbf{t}_0 \cdot \text{const.}$ alakban, így a szorzat a $[\mathbf{t}_0 \times \mathbf{v}]$ alakra egyszerűsödik, ahol

$$\mathbf{v} = \frac{(\beta'_i + \beta_j)(\beta_i \mathbf{s}_i + \beta'_j \mathbf{s}'_j) - (\beta_i + \beta'_j)(\beta'_i \mathbf{s}'_i + \beta_j \mathbf{s}_j)}{\beta_i + \beta'_i + \beta_j + \beta'_j}. \quad (4.80)$$

A (4.79)-beli skalárszorzatot célszerű szférikus komponensekkel kiírni:

$$\langle V_{SO} \rangle = -\frac{i}{2} A \delta_{t_i t'_i} \delta_{t_j t'_j} \sum_{m=-1}^1 (-1)^m \langle \chi^1(s_i)\chi^2(s_j) | \sigma_{1m}^{(1)} + \sigma_{2m}^{(1)} | \chi^1(s'_i)\chi^2(s'_j) \rangle \times \left[\mathbf{t}_0 \times \mathbf{v}_0 \right]_{-m}^{(1)} \langle V_{\text{scal.}} \rangle. \quad (4.81)$$

A spintérbeli mátrixelemek egyszerű számolással kaphatók

$$\langle \chi^1(\frac{1}{2})\chi^2(\pm\frac{1}{2}) | \sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{21}^{(1)} | \chi^1(-\frac{1}{2})\chi^2(\pm\frac{1}{2}) \rangle = -\sqrt{2}, \quad (4.82)$$

$$\langle \chi^1(\pm\frac{1}{2})\chi^2(\frac{1}{2}) | \sigma_{11}^{(1)} + \sigma_{21}^{(1)} | \chi^1(\pm\frac{1}{2})\chi^2(-\frac{1}{2}) \rangle = -\sqrt{2}, \quad (4.83)$$

$$\langle \chi^1(s_1)\chi^2(s_2) | \sigma_{10}^{(1)} + \sigma_{20}^{(1)} | \chi^1(s_1)\chi(s_2) \rangle = 2(s_1 + s_2), \quad (4.84)$$

$$\langle \chi^1(-\frac{1}{2})\chi^2(\pm\frac{1}{2}) | \sigma_{1-1}^{(1)} + \sigma_{2-1}^{(1)} | \chi^1(\frac{1}{2})\chi(\pm\frac{1}{2}) \rangle = \sqrt{2}, \quad (4.85)$$

$$\langle \chi^1(\pm\frac{1}{2})\chi^2(-\frac{1}{2}) | \sigma_{1-1}^{(1)} + \sigma_{2-1}^{(1)} | \chi^1(\pm\frac{1}{2})\chi(\frac{1}{2}) \rangle = \sqrt{2}. \quad (4.86)$$

Az összes többi mátrixelem nulla. Bebizonyítható továbbá, hogy

$$[\mathbf{t} \times \mathbf{v}]_{\pm 1}^{(1)} = \mp i [v_0^{(1)} t_{\pm 1}^{(1)} - t_0^{(1)} v_{\pm 1}^{(1)}] \quad (4.87)$$

illetve

$$[\mathbf{t} \times \mathbf{v}]_0^{(1)} = i [-t_1^{(1)} v_{-1}^{(1)} - v_1^{(1)} t_{-1}^{(1)}]. \quad (4.88)$$

Ezek után (felhasználva, hogy a spintérbeli mátrixelem csak akkor nem nulla ha $\sigma_{1m}^{(1)} + \sigma_{2m}^{(1)}$ -ben $m = s_i + s_j - s'_i - s'_j$) a spin-pálya kölcsönhatás kéttest-mátrixeleme

$$\begin{aligned} \langle V_{SO} \rangle &= -\frac{i}{2} A \delta_{t_i t'_i} \delta_{t_j t'_j} (-1)^{s_i + s_j - s'_i - s'_j} \langle \chi^1(s_i)\chi^2(s_j) | \sigma_{1 s_i + s_j - s'_i - s'_j}^{(1)} + \sigma_{2 s_i + s_j - s'_i - s'_j}^{(1)} \\ &\quad | \chi^1(s'_i)\chi(s'_j) \rangle [\mathbf{t}_0 \times \mathbf{v}_0]_{s_i - s_j + s'_i + s'_j}^{(1)} \langle V_{scal.} \rangle. \end{aligned} \quad (4.89)$$

alakú. A benne szereplő mennyiségeket (4.56)-(4.58), (4.25), (4.82)-(4.86) és (4.87)-(4.88) tartalmazza.

A mag sűrűségeloszlására jellemző négyzetes közepsugár (RMS anyagsugár) operátora

$$\overline{R_M^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{cm})^2 \quad (4.90)$$

alakú. Ez jelen alakjában a tömegközépponti vektor fellépte miatt N -test operátor. Elvégezve a négyzetre emelést és az összegzést, továbbá felhasználva, hogy $N\mathbf{r}_{cm} = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i$, a (4.90) kifejezés

$$\overline{R_M^2} = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i^2 - N\mathbf{r}_{cm}^2 \right) \quad (4.91)$$

alakba írható. Az \mathbf{r}_i^2 egytest-operátor

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_i^2 \rangle &= \langle \varphi(\mathbf{r}_i - \mathbf{s}_i, \beta_i, s_i, t_i) | \mathbf{r}_i^2 | \varphi(\mathbf{r}_i - \mathbf{s}'_i, \beta'_i, s'_i, t'_i) \rangle \\ &= \delta_{t_i t'_i} \delta_{s_i s'_i} \frac{(\beta_i \beta'_i)^{3/4}}{\pi^{3/2}} \int e^{-\frac{\beta_i}{2}(\mathbf{r}_i - \mathbf{s}_i)^2} \mathbf{r}_i^2 e^{-\frac{\beta'_i}{2}(\mathbf{r}_i - \mathbf{s}'_i)^2} d\mathbf{r}_i \end{aligned} \quad (4.92)$$

mátrixelemét kissé átalakítva, a

$$\delta_{t_i t'_i} \delta_{s_i s'_i} \frac{(\beta_i \beta'_i)^{3/4}}{\pi^{3/2}} \int e^{-r_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0)^2 + c \mathbf{r}_i^2} d\mathbf{r}_i \quad (4.93)$$

kifejezést kapjuk, ahol az

$$r_1 = \frac{\beta_i + \beta'_i}{2}, \quad \mathbf{r}_0 = \frac{\beta_i \mathbf{s}_i + \beta'_i \mathbf{s}'_i}{\beta_i + \beta'_i} \quad (4.94)$$

jelöléseket vezettük be (c a β_i , β'_i , \mathbf{s}_i és \mathbf{s}'_i változókkal kifejezett \mathbf{r}_i -től független skálár, konkrét alakja lényegtelen). A (4.93) integrál a

$$\delta_{t_i t'_i} \delta_{s_i s'_i} \left(\mathbf{r}_0^2 + \frac{3}{\beta_i + \beta'_i} \right) \frac{(\beta_i \beta'_i)^{3/4}}{\pi^{3/2}} \int e^{-r_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0)^2 + c} d\mathbf{r}_i \quad (4.95)$$

alakba írható, ami nem más, mint

$$\langle \mathbf{r}_i^2 \rangle = \left(\mathbf{r}_0^2 + \frac{3}{\beta_i + \beta'_i} \right) \langle \varphi_i | \varphi'_i \rangle. \quad (4.96)$$

A (4.91)-beli \mathbf{r}_{cm}^2 operátornak a (3.29) N -részecskés Slater-determinánsok közötti mátrixelemét akkor tudjuk kiszámítani egyszerűen, ha a klaszterek méretparamétere azonos (a bra és ket oldali méretparaméter különbözhet). Ekkor ugyanis a Slater-determinánsból faktorizálódik a tömegközéppont függvénye. Így a keresett mátrixelem

$$\langle \Psi_{\text{Sl}} | \mathbf{r}_{\text{cm}}^2 | \Psi_{\text{Sl}} \rangle = \text{const} \int e^{-\frac{N(\beta+\beta')}{2} \mathbf{r}_{\text{cm}}^2} \mathbf{r}_{\text{cm}}^2 d\mathbf{r}_{\text{cm}} \int \dots d\boldsymbol{\xi}, \quad (4.97)$$

ami

$$\int e^{-\frac{N(\beta+\beta')}{2} \mathbf{r}_{\text{cm}}^2} \mathbf{r}_{\text{cm}}^2 d\mathbf{r}_{\text{cm}} = \frac{3}{N(\beta + \beta')} \int e^{-\frac{N(\beta+\beta')}{2} \mathbf{r}_{\text{cm}}^2} d\mathbf{r}_{\text{cm}} \quad (4.98)$$

miatt

$$\langle \Psi_{\text{Sl}} | \mathbf{r}_{\text{cm}}^2 | \Psi_{\text{Sl}} \rangle = \frac{3}{N(\beta + \beta')} \langle \Psi_{\text{Sl}} | \Psi_{\text{Sl}} \rangle \quad (4.99)$$

végeredményre vezet. A mag anyagsugara ezek után $\langle \Psi_{\text{Sl}} | \overline{R_M^2} | \Psi_{\text{Sl}} \rangle^{1/2}$.

A mag töltéssugarát az anyagsugárból a

$$\langle \Psi_{\text{Sl}} | \overline{R_C^2} | \Psi_{\text{Sl}} \rangle^{1/2} = \left(\langle \Psi_{\text{Sl}} | \overline{R_M^2} | \Psi_{\text{Sl}} \rangle + \overline{R_p^2} \right)^{1/2} \quad (4.100)$$

formula alapján származtathatjuk, ahol $\overline{R_p^2}$ a proton négyzetes töltéssugara (általában 0.81 fm^2 -nek választják).

A mag töltésdeformációját jellemző elektromos kvadrupólmomentum operátora [47]

$$Q = e \sum_{i=1}^N g_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\text{cm}})^2 Y_{20}(r_i - \widehat{r}_{\text{cm}}), \quad (4.101)$$

ahol a g faktor protonra 1, neutronra 0. A (4.101) kifejezésből a tömegközéppont koordinátáját nehéz lenne leválasztanunk éppen ezért használjuk fel, hogy valamely \mathbf{r} vektorra

$$\mathbf{r}^2 Y_{20}(\widehat{r}) = 3z^2 - r^2. \quad (4.102)$$

Ekkor a

$$Q = e \sum_{i=1}^N g_i \left(3(z_i - z_{\text{cm}})^2 - (r_i - r_{\text{cm}})^2 \right) \quad (4.103)$$

kifejezésben elvégezve a négyzetre emelést és az összegzést, a

$$Q = e \sum_{i=1}^N g_i (3z_i^2 - r_i^2) - e(3z_{\text{cm}}^2 - r_{\text{cm}}^2) N_p \quad (4.104)$$

alakot kapjuk, ahol N_p a protonok száma (feltételeztük, hogy a proton- és neutroneloszlás tömegközéppontja egybeesik). Felhasználva (4.102)-t, (4.104) a

$$Q = e \sum_{i=1}^N g_i \mathbf{r}_i^2 Y_{20}(\hat{r}_i) - e N_p \mathbf{r}_{\text{cm}}^2 Y_{20}(\hat{r}_{\text{cm}}) \quad (4.105)$$

alakba írható. Az $\mathbf{r}_i^2 Y_{20}(\hat{r}_i)$ operátor egytest-mátrixelemét a (4.93) formulához hasonlóan

$$\delta_{i_i' i_i} \delta_{s_i s_i'} \frac{(\beta_i \beta_i')^{3/4}}{\pi^{3/2}} \int e^{-r_1(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0)^2 + c} \mathbf{r}_i^2 Y_{20}(\hat{r}_i) d\mathbf{r}_i \quad (4.106)$$

alakba írhatjuk, majd felhasználva (4.61)-et a

$$\langle \varphi_i | \mathbf{r}_i^2 Y_{20}(\hat{r}_i) | \varphi_i' \rangle = \mathbf{r}_0^2 Y_{20}(\hat{r}_0) \langle \varphi_i | \varphi_i' \rangle \quad (4.107)$$

végeredményhez jutunk (az $\mathbf{r}_0^2 Y_{20}(\hat{r}_0)$ kifejezés a tenzorkölcsönhatásnál részletezett módon átírható az egyes \mathbf{s} vektorok szférikus komponenseit tartalmazó alakba). Az $\mathbf{r}_{\text{cm}}^2 Y_{20}(\hat{r}_{\text{cm}})$ operátornak Slater-determinánsok közötti mátrixelemét azonos méretparaméterű klaszterek esetén a (4.97)-(4.98)-nál leírt gondolatmenetet követve számíthatjuk ki. Mivel (4.61) alapján

$$\int e^{-\frac{N(\beta+\beta')}{2} \mathbf{r}_{\text{cm}}^2} \mathbf{r}_{\text{cm}}^2 Y_{20}(\hat{r}_{\text{cm}}) d\mathbf{r}_{\text{cm}} = 0, \quad (4.108)$$

így

$$\langle \Psi_{\text{Sl}} | \mathbf{r}_{\text{cm}}^2 Y_{20}(\hat{r}_{\text{cm}}) | \Psi_{\text{Sl}} \rangle = 0. \quad (4.109)$$

Az előzőekben kiszámolt mátrixelemeket a (4.7) illetve (4.10) formákba helyettesítve, továbbá áttérve az

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_B - \mathbf{s}_A, \quad \mathbf{S} = \frac{A\mathbf{s}_A + B\mathbf{s}_B}{N}, \quad (4.110)$$

$$\mathbf{s}' = \mathbf{s}'_B - \mathbf{s}'_A, \quad \mathbf{S}' = \frac{A'\mathbf{s}'_A + B'\mathbf{s}'_B}{N} = 0 \quad (4.111)$$

koordinátákra, olyan összegeket kapunk, amelyeknek egyes tagjai exponenciális függvények, az exponensben az \mathbf{s} , \mathbf{s}' és \mathbf{S} kvadratikus kifejezésével, az exponens előtti szorzófaktor pedig ugyanezen változók szférikus komponenseinek a szorzata. Ilyen alakú általános tagon kell elvégezni a (3.36) impulzusvetítést, a (3.59) tetszőleges relatív mozgási γ paraméterre való áttérést és a (3.47-48) impulzusmomentum-vetítést. A közölt formulák egy része Varga Kálmántól származik.

Vegyük fel az általános tagot

$$G_1(\mathbf{s}, \mathbf{s}', \mathbf{S}) = s_+^{n_+} s_-^{n_-} s_0^{n_0} s_+^{n'_+} s_-^{n'_-} s_0^{n'_0} S_+^{N_+} S_-^{N_-} S_0^{N_0} \exp\left(-a\mathbf{S}^2 + \mathbf{x}\mathbf{S} + C\right) \quad (4.112)$$

alakban, ahol a $+$, $-$ és 0 indexek a $+1$, -1 és 0 szférikus indexet jelölik, \mathbf{x} és C egy \mathbf{s} -től és \mathbf{s}' -től függő vektor, illetve skalár. Az impulzusvetítés (4.112)-nek \mathbf{S} szerinti integrálását jelenti, ami

$$\int G_1(\mathbf{s}, \mathbf{s}', \mathbf{S}) d\mathbf{S} = (-1)^{N_++N_-} s_+^{n_+} s_-^{n_-} s_0^{n_0} s_+^{m'_+} s_-^{m'_-} s_0^{m'_0} \times \frac{\partial^{N_++N_-+N_0}}{\partial x_-^{N_+} \partial x_0^{N_0} \partial x_+^{N_-}} \int \exp\left(-a\mathbf{S}^2 + \mathbf{x}\mathbf{S} + C\right) d\mathbf{S} \quad (4.113)$$

alakban írható (felhasználtuk, hogy $\mathbf{x}\mathbf{S} = -x_+S_- + x_0S_0 - x_-S_+$). A (4.113)-beli integrál értéke

$$\left(\frac{\pi}{a}\right)^{3/2} \exp(\mathbf{x}^2/4a). \quad (4.114)$$

Ezt kell differenciálnunk az \mathbf{x} szférikus komponensei szerint, felhasználva, hogy $\mathbf{x}^2 = -2x_+x_- + x_0^2$. Elemi számolás után a végeredmény

$$\int G_1(\mathbf{s}, \mathbf{s}', \mathbf{S}) d\mathbf{S} = \exp(\mathbf{x}^2/4a) \left(\frac{\pi}{a}\right)^{3/2} s_+^{n_+} s_-^{n_-} s_0^{n_0} s_+^{m'_+} s_-^{m'_-} s_0^{m'_0} \times \sum_{k=0}^{\text{int}(\frac{N_0}{2})} \frac{N_0!}{(N_0 - 2k)!k!} (2x_0)^{N_0-2k} \left(\frac{1}{4a}\right)^{N_0-k} \times \sum_{i=0}^{\min(N_+, N_-)} \frac{(-1)^i N_+! N_-!}{(N_+ - i)! (N_- - i)! i!} x_-^{N_- - i} x_+^{N_+ - i} \left(\frac{1}{2a}\right)^{N_+ + N_- - i}. \quad (4.115)$$

Mivel \mathbf{x} az \mathbf{s} és \mathbf{s}' mennyiségektől függ, a (4.115) alak szintén felírható általános tagok összegeként, ahol most az általános tag

$$G_2(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = s_+^{n_+} s_-^{n_-} s_0^{n_0} s_+^{m'_+} s_-^{m'_-} s_0^{m'_0} \exp\left(-u\mathbf{s}^2 - u'\mathbf{s}'^2 - w\mathbf{s}\mathbf{s}'\right) \quad (4.116)$$

alakú (az n_+ , n_- stb. hatványkitevők természetesen nem azonosak a (4.112)-beliekkel). A tetszőleges γ -ra való áttérés az

$$I = \int \int e^{-\frac{a}{2}(\mathbf{s}-\mathbf{t})^2} G_2(\mathbf{t}, \mathbf{t}') e^{-\frac{a'}{2}(\mathbf{s}'-\mathbf{t}')^2} d\mathbf{t} d\mathbf{t}' \quad (4.117)$$

kettős vektorintegrál elvégzését jelenti. Az exponens előtti szférikus komponenseket a (4.113)-hoz hasonlóan deriválásokkal származtathatjuk:

$$I = \exp\left(-\frac{a}{2}\mathbf{s}^2 - \frac{a'}{2}\mathbf{s}'^2\right) (-1)^{n_++n_-+n'_++n'_-} \frac{\partial^{n_++n_-+n_0+n'_++n'_-+n'_0}}{\partial x_-^{n_+} \partial x_+^{n_-} \partial x_0^{n_0} \partial x_-^{n'_+} \partial x_+^{n'_-} \partial x_0^{n'_0}} \int \int \exp(\mathbf{x}\mathbf{t} + \mathbf{x}'\mathbf{t}' - v\mathbf{t}^2 - v'\mathbf{t}'^2 - w\mathbf{t}\mathbf{t}') d\mathbf{t} d\mathbf{t}', \quad (4.118)$$

ahol $\mathbf{x} = a\mathbf{s}$, $\mathbf{x}' = a'\mathbf{s}'$, $v = u + a/2$ és $v' = u' + a'/2$. A (4.118)-ban szereplő integrál értéke

$$\left(\frac{4\pi^2}{4vv' - w^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{1}{4vv' - w^2}(v\mathbf{x}^2 + v'\mathbf{x}'^2 - w\mathbf{x}\mathbf{x}')\right). \quad (4.119)$$

Az exponenciális függvényen elvégezve a differenciálásokat, a következő alakot kapjuk

$$\begin{aligned}
I &= \exp\left(-\frac{a}{2}\mathbf{s}^2 - \frac{a'}{2}\mathbf{s}'^2\right) (-1)^{n_++n_-+n'_++n'_-} \left(\frac{4\pi^2}{4vv' - w^2}\right)^{3/2} \\
&\times \sum_{k_+=0}^{n_+} \sum_{k_-=0}^{n_-} \sum_{k_0=0}^{n_0} \sum_{k'_+=0}^{n'_+} \sum_{k'_-=0}^{n'_-} \sum_{k'_0=0}^{n'_0} \binom{n_+}{k_+} \binom{n_-}{k_-} \binom{n_0}{k_0} \binom{n'_+}{k'_+} \binom{n'_-}{k'_-} \binom{n'_0}{k'_0} \\
&\times f_1(k_+, k_-, k_0) f_2(k'_+, k'_-, k'_0) f_3(k_+, k_-, k_0, k'_+, k'_-, k'_0), \tag{4.120}
\end{aligned}$$

ahol

$$\begin{aligned}
f_1(k_+, k_-, k_0) &= \exp(A\mathbf{x}^2) \sum_{k=0}^{\text{int}(\frac{k_0}{2})} \sum_{i=0}^{\min(k_+, k_-)} (-1)^{i+k_++k_-} \frac{k_0! k_+! k_-!}{(k_0 - 2k)! k! (k_+ - i)! (k_- - i)! i!} \\
&\times 2^{k_++k_-+k_0-2k-i} A^{k_++k_-+k_0-k-i} x_-^{k_- - i} x_0^{k_0-2k} x_+^{k_+ - i}, \tag{4.121}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_2(k'_+, k'_-, k'_0) &= \exp(B\mathbf{x}'^2) \sum_{k=0}^{\text{int}(\frac{k'_0}{2})} \sum_{i=0}^{\min(k'_+, k'_-)} (-1)^{i+k'_++k'_-} \frac{k'_0! k'_+! k'_-!}{(k'_0 - 2k)! k! (k'_+ - i)! (k'_- - i)! i!} \\
&\times 2^{k'_++k'_-+k'_0-2k-i} B^{k'_++k'_-+k'_0-k-i} x'_-{}^{k'_- - i} x'_0{}^{k'_0-2k} x'_+{}^{k'_+ - i}, \tag{4.122}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f_3(k_+, k_-, k_0, k'_+, k'_-, k'_0) &= \\
&(-1)^{n_++n_-+n'_++n'_- - k_+ - k_- - k'_+ - k'_-} C^{n_++n_-+n_0+n'_++n'_-+n'_0 - k_+ - k_- - k_0 - k'_+ - k'_- - k'_0} \\
&\times \sum_{i=0}^{\min(n'_+ - k'_+, n_- - k_-)} \binom{n'_+ - k'_+}{i} \frac{(n_- - k_-)!}{(n_- - k_- - i)!} (-1)^i C^{-i} x_-^{n_- - k_- - i} x_+^{n'_+ - k'_+ - i} \\
&\times \sum_{j=0}^{\min(n'_- - k'_-, n_+ - k_+)} \binom{n'_- - k'_-}{j} \frac{(n_+ - k_+)!}{(n_+ - k_+ - j)!} (-1)^j C^{-j} x_+^{n_+ - k_+ - j} x_-^{n'_- - k'_- - j} \\
&\times \sum_{k=0}^{\min(n'_0 - k'_0, n_0 - k_0)} \binom{n'_0 - k'_0}{k} \frac{(n_0 - k_0)!}{(n_0 - k_0 - k)!} C^{-k} x_0^{n_0 - k_0 - k} x_0^{n'_0 - k'_0 - k}. \tag{4.123}
\end{aligned}$$

Bevezettük az

$$A = \frac{v'}{4vv' - w^2}, \quad B = \frac{v}{4vv' - w^2}, \quad C = \frac{w}{4vv' - w^2} \tag{4.124}$$

jelöléseket.

A (4.120) kifejezés egy tagja szintén felírható (4.116) általános alakban. Az impulzusmomentum-vetítéshez helyettesítsük be a (4.38) sorfejtést. Ekkor a (4.116) általános alak impulzusmomentum-vetítése a következő formára vezet (a bra oldalon $\{LM\}$, a ket oldalon $\{L'M'\}$ állapotot feltételezve):

$$I = \int \int Y_{LM}^*(\hat{s}) G(\mathbf{s}, \mathbf{s}') Y_{L'M'}(\hat{s}') d\hat{s} d\hat{s}'$$

$$\begin{aligned}
&= \exp(-us^2 - u's'^2)4\pi \left(\sqrt{\frac{4\pi}{3}}s\right)^{n_++n_-+n_0} \left(\sqrt{\frac{4\pi}{3}}s'\right)^{n'_++n'_-+n'_0} \sum_{lm} i_l(-wss') \\
&\quad \times \int \int Y_{lm}(\hat{s})Y_{lm}^*(\hat{s}')Y_{LM}^*(\hat{s})Y_{11}(\hat{s})^{n_+}Y_{1-1}(\hat{s})^{n_-}Y_{10}(\hat{s})^{n_0} \\
&\quad \quad Y_{11}(\hat{s}')^{n'_+}Y_{1-1}(\hat{s}')^{n'_-}Y_{10}(\hat{s}')^{n'_0}Y_{L'M'}(\hat{s}')d\hat{s}d\hat{s}'. \tag{4.125}
\end{aligned}$$

Csatoljuk össze az azonos argumentumú gömbfüggvényeket (az $\{lm\}$ indexűeket kivéve)

$$Y_{LM}(\hat{s})Y_{11}(\hat{s})^{n_+}Y_{1-1}(\hat{s})^{n_-}Y_{10}(\hat{s})^{n_0} = \sum_{i=0}^{n_++n_-+n_0+L} \sum_{j=-i}^i F(n_+, n_-, n_0, L, M, i, j)Y_{ij}(\hat{s}) \tag{4.126}$$

alakúvá, ahol az F függvényeket a [46]-beli

$$\begin{aligned}
Y_{l_1m_1}(\hat{s})Y_{l_2m_2}(\hat{s}) &= \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{m=-l}^l \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)} \right]^{1/2} \\
&\quad \times \langle l_1 0 l_2 0 | l 0 \rangle \langle l_1 m_1 l_2 m_2 | l m \rangle Y_{lm}(\hat{s}) \tag{4.127}
\end{aligned}$$

formula sorozatos alkalmazásával könnyen kiszámíthatjuk. Felhasználva (4.126)-ot, (4.125) végeredménye

$$\begin{aligned}
I &= \exp(-us^2 - u's'^2)4\pi \left(\sqrt{\frac{4\pi}{3}}s\right)^{n_++n_-+n_0} \left(\sqrt{\frac{4\pi}{3}}s'\right)^{n'_++n'_-+n'_0} \\
&\quad \times (-1)^M \sum_{k=0}^{\min(n_++n_-+n_0+L, n'_++n'_-+n'_0+L')} i_k(-wss') \\
&\quad \times \sum_{j=-i}^i (-1)^j F(n_+, n_-, n_0, L, -M, k, -j)F(n'_+, n'_-, n'_0, L', M', k, j). \tag{4.128}
\end{aligned}$$

Ezek után két 0s klasztert tartalmazó tetszőleges klaszterkonfiguráció GCM kerneleinek eltolt Gauss-bázison történő számításához minden szükséges segédeszközzel rendelkezünk.

4.3 A magfüggvények számítása temperált Gauss-bázison

Mint az előző alfejezetben láttuk, egy háromklaszter-konfiguráció esetén, ha a relatív mozgást eltolt Gauss-függvények kombinációival írjuk le, úgy az impulzusmomentumvetítés csak jelentős problémák árán oldható meg. Háromtest-számolásokban eltolt Gauss-függvények mellett használnak oszcillátorfüggvényeket, pl. [48] és origóra centrált, különböző szélességű, úgynevezett temperált Gauss-függvényeket is pl. [42,49,50]. Mi ez utóbbiakat fogjuk használni.

A normált, jó impulzusmomentumhoz tartozó temperált Gauss-függvények

$$\chi_i(\boldsymbol{\rho}) = \left(\frac{2^{l+1}(2\nu_i)^{l+3/2}}{\sqrt{\pi}(2l+1)!!} \right)^{1/2} \rho^l e^{-\nu_i \rho^2} Y_{lm}(\hat{\rho}) \tag{4.129}$$

alakúak. Itt tehát a generátorkoordináták a ν_i paraméterek. A (4.129) függvények a

$$\Gamma(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{s}, \nu) = \left(\frac{2\nu}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\nu(\boldsymbol{\rho}-\mathbf{s})^2} \quad (4.130)$$

eltolt Gauss-függvényekből a

$$\chi_i(\boldsymbol{\rho}) = \int \Gamma(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{s}, \nu) \Phi_{ilm}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} \quad (4.131)$$

integráltranszformációval származtathatók [42], ahol

$$\phi_{ilm}(\mathbf{s}) = \frac{1}{(2(2l+1)!!)^{1/2}} \frac{\nu^{(l+3)/2}}{\pi} \left(\frac{2\sqrt{\nu\nu_i}}{\nu-\nu_i}\right)^{l+3/2} s^l \exp\left(-\frac{\nu\nu_i}{\nu-\nu_i}\mathbf{s}^2\right) Y_{lm}(\hat{\mathbf{s}}). \quad (4.132)$$

Ezek szerint az eltolt Gauss-bázisú kerneleinkből temperált Gauss-bázisú kerneleket úgy kaphatunk, ha minden relatív mozgási \mathbf{s} koordinátában alkalmazzuk a (4.131) transzformációt. Ha a bra és ket oldalon is egy-egy háromkvaszter-konfiguráció áll, akkor négy ilyen koordináta van, jelölje ezeket $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3$ és \mathbf{s}_4 . Az előző alfejezetben felírt eltolt Gauss-bázisú impulzusvetített kernelek általános tagja egy ilyen esetben

$$N'(\mathbf{s}) = \left(\prod_{i=1}^4 s_{i+}^{n_{i+}} s_{i-}^{n_{i-}} s_{i0}^{n_{i0}}\right) e^{-\frac{1}{2}\mathbf{s}\underline{A}'\mathbf{s}} \quad (4.133)$$

alakú, ahol \mathbf{s} a $\{\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3, \mathbf{s}_4\}$ összességet jelöli, és

$$\mathbf{s}\underline{A}'\mathbf{s} = \sum_{1 \leq i < j} A'_{ij} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j. \quad (4.134)$$

A (4.133) tagokon kijelölve a négyszeres (4.131) transzformációt, továbbá a (4.133)-beli szférikus komponensekben lévő gömbfüggvényeket hozzácsatolva a (4.132)-beli gömbfüggvényekhez, egy összeget kapunk, amelynek általános tagja

$$N(\mathbf{s}) = \mathcal{N} \int d\mathbf{s}_1 \int d\mathbf{s}_2 \int d\mathbf{s}_3 \int d\mathbf{s}_4 s_1^{2n_1} s_2^{2n_2} s_3^{2n_3} s_4^{2n_4} \mathcal{Y}_{l_1 m_1}(\mathbf{s}_1) \mathcal{Y}_{l_2 m_2}(\mathbf{s}_2) \mathcal{Y}_{l_3 m_3}(\mathbf{s}_3) \mathcal{Y}_{l_4 m_4}(\mathbf{s}_4) \times e^{-\frac{1}{2}\mathbf{s}\underline{A}\mathbf{s}} \quad (4.135)$$

alakú, ahol

$$\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{s}) = s^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{s}}). \quad (4.136)$$

Az \mathcal{N} tartalmazza az összes együtthatót, az \underline{A} mátrixot pedig úgy kapjuk \underline{A}' -ből, hogy a (4.132)-beli és (4.133)-beli exponenseket összevonjuk. A (4.135) integrál részletes vizsgálatát Varga Kálmán végezte el. E szerint úgy végezhetjük el legkönnyebben az integrálást, hogy az exponens előtti tagokat deriválásokkal származtatjuk exponenciális függvényekből. Így például

$$s_1^{2n_1} s_2^{2n_2} s_3^{2n_3} s_4^{2n_4} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{s}\underline{A}\mathbf{s}} = (-2)^{n_1+n_2+n_3+n_4} \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3+n_4}}{\partial A_{11}^{n_1} \partial A_{22}^{n_2} \partial A_{33}^{n_3} \partial A_{44}^{n_4}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{s}\underline{A}\mathbf{s}} \quad (4.137)$$

Az $\mathcal{Y}_{lm}(\hat{s})$ függvények eleget tesznek a következő azonosságoknak [51]:

$$(\mathbf{bs})^l = \sum_{m=-l}^l C_{lm} b^{l-m} \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{s}), \quad (4.138)$$

ahol

$$\mathbf{b} = (1 - b^2, i(1 + b^2), -2b) \quad (4.139)$$

és

$$C_{lm} = (-2)^l l! \left(\frac{4\pi}{(2l+1)(l+m)!(l-m)!} \right)^{1/2}. \quad (4.140)$$

Ezeket felhasználva

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{s}) &= \frac{1}{C_{lm}(l-m)!} \frac{\partial^{l-m}}{\partial b^{l-m}} (\mathbf{bs})^l \Big|_{b=0} \\ &= \frac{1}{C_{lm}(l-m)!} \frac{\partial^{l-m}}{\partial b^{l-m}} \frac{\partial^l}{\partial \beta^l} e^{\beta(\mathbf{bs})} \Big|_{\beta=0, b=0} \end{aligned} \quad (4.141)$$

alakba írható. Felhasználva (4.137)-et és (4.141)-et, (4.135) a következő formában írható fel:

$$N(\mathbf{s}) = \mathcal{N} \left(\prod_{i=1}^4 \frac{(-2)^{n_i}}{C_{l_i m_i}} \frac{\partial^{l_i - m_i}}{\partial b^{l_i - m_i}} \frac{\partial_i^{l_i}}{\partial \beta_i^{l_i}} \frac{\partial^{n_i}}{\partial A_{ii}^{n_i}} \right) \int d\mathbf{s} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{s} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{s} + \mathbf{B} \mathbf{s}} \Big|_{\beta_i=0, b_i=0}, \quad (4.142)$$

ahol $\mathbf{B} = \{\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \mathbf{B}_3, \mathbf{B}_4\}$ és $\mathbf{B}_i = \beta_i \mathbf{b}_i$. Az integrál értéke

$$\int d\mathbf{s} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{s} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{s} + \mathbf{B} \mathbf{s}} = (2\pi)^6 (\det A)^{-3/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{B} \underline{\mathbf{C}} \mathbf{B} \right), \quad (4.143)$$

ahol $\underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{A}}^{-1}$. A differenciálásokat hosszadalmas, de elemi számolásokkal elvégezve végeredményül egy zárt formához juthatunk [52].

A (4.19) egyrésze-cske-függvények megválasztása után a (4.5), (4.7) és (4.10) formulák kiértékelése, az egy- és kéttest-mátrixelemek behelyettesítése, és az impulzusvetítés formulájába való helyettesítés teljesen általánosan elvégezhető, nem tartalmaz olyan paramétert, amelynek esetleg több különböző értékére is számolni akarnánk (ellentétben például a tetszőleges relatív mozgási paraméterre való áttéréssel, vagy az impulzusmomentum-vetítéssel). Noha ezek elemi műveletek, rendkívül hosszadalmasak és sok hibalehetőséggel terheltek. Éppen ezért R. Beck és F. Dickmann kezdeményezte a REDUCE algebrai programozási nyelv használatát elvégzésükre. Két 0s héjú klaszternek csak centrális kölcsönhatást tartalmazó modelljére Kruppa András fejlesztett ki egy REDUCE nyelvű programrendszert, amit az ő közreműködésével én fejlesztettem tovább egy nem centrális kölcsönhatást is tartalmazó többkonfigurációs, többklaszteres modell esetére.

Míg a hagyományos – úgynevezett imperatív – programnyelvek (pl. FORTRAN) aktuális numerikus értékekkel rendelkező változókon értelmezett műveleteket engednek meg, addig az algebrai (más néven szimbolikus vagy funkcionális) nyelvek szimbolikus (numerikus értékkel nem rendelkező) változókon értelmezett függvényeljárások egymás utáni alkalmazásaira épülnek. Ezáltal például az $(x+y)^2$ hatványozás, egy ilyen függvény

differentiálása és integrálása formálisan, x és y konkrét értékek behelyettesítése nélkül elvégezhető. Az algebrai nyelvek különösen alkalmasak például polinomok rendezésére, algebrai kifejezések együtthatóinak leolvasására, függvények behelyettesítésére stb. Éppen ezek azok a tulajdonságok, amelyek jól hasznosíthatók a GCM kernelek számításánál. Az általunk kidolgozott programrendszer bemenő adatoként a bra és ket oldali klaszterek számát és az egyes klasztereken belüli spin-izospin konfigurációt kell megadnunk, kimenő adatként pedig – egy FORTRAN szubrutin formájában – az impulzusvetített GCM kernelek általános alakjának a konkrét esetre specifikált együtthatóit kapjuk. Ezek után egy FORTRAN program végzi el a tetszőleges γ paraméterre való áttérés és az impulzusmomentum-vetítés (mint fentebb láttuk szintén jól algoritmizálható) műveletét.

5. fejezet

A ${}^6\text{Li}$ atommag alapállapotának vizsgálata

Ebben a fejezetben a ${}^6\text{Li}$ atommag alapállapotának vizsgálatát mutatjuk be egy $\{\alpha+p+n\}$ többkonfigurációs háromklaszteres modell keretében, az [53] munkánk alapján.

5.1 Előzmények

A p -héjú magok közül az egyik elméletileg legtöbbet vizsgált mag a ${}^6\text{Li}$ (lásd például [54] referenciáit). A vizsgálatokban használt modellek három fő csoportba sorolhatók: héjmodell, háromtest-modell és klasztermodell. A héjmodellbeli leírásnak, amely főleg a 70-es években virágzott, az a fő problémája a tömegközépponti korrekciók szükségességén [55] túl, hogy túlságosan sztatikusnak tűnik ilyen kis tömegszámú magra, s nem képes a nukleonok közti korrelációk kielégítő figyelembevételére. Ennek ellenére igen sok héjmodell-számítás létezik, amelyek az $A = 6$ magok térfigati tulajdonságaitól kezdve, a ${}^6\text{He}$ β -bomlásán át a ${}^6\text{Li}$ μ -befogásáig számtalan dolgot leírnak, jórészt legfeljebb csak kvalitatíve helyes eredménnyel. A háromtest- ($\alpha + p + n$) modellek jelentős előrelépést jelentenek, mivel bemenő adatként csak a proton-neutron és az α -nukleon kölcsönhatásra van szükségük. A hattest-feladatból az α -részecske szerkezetnélküliségének feltételezésével nyert háromtest-probléma dinamikája mind variációs [50], mind Fagyeyev- [56] módszerrel kiválóan tárgyalható, ugyanakkor éppen ez a feltételezett szerkezetnélküliség az, ami komoly problémákhoz vezet. Van ugyan a belső szabadsági fokok eliminálásának egy olyan módja, amely korrektül kezeli a Pauli-elvet, és ez a mód majdnem egyértelmű is [48], a háromtest-modellek művelői azonban nem ezt követik, s így modelljeik sértik a Pauli-elvet. Felmerülhet ezek után a kérdés, hogy mi az oka a makroszkopikus háromklasztermodellek nagy sikerének. A válasz valószínűleg a kölcsönhatások megválasztásának módjában rejlik. A modell a ${}^6\text{Li}$ leírására olyan kölcsönhatásokat használ, amelyeket független nukleon-nukleon ($p + n$) és α -nukleon ($\alpha + n$, $\alpha + p$) kísérleti adatokhoz illeszt (ily módon a ${}^6\text{Li}$ leírása paraméterfüggetlen), minden egyes kéttest-konfiguráció esetén, minden parciális hullámban egymástól függetlenül. Tudva, hogy a makroszkopikus $\alpha + n$ klasztermodell kölcsönhatása a mikroszkopikus leírásból ugyanúgy származtatható, mint az $\alpha + p + n$ modellé, joggal remélhetjük, hogy az alrendszeres pontos leírása a ${}^6\text{Li}$ -ra is jó

eredményeket szolgáltat. Így, mivel a makroszkopikus modell a kétklaszter-alrendszerek leírása tekintetében jóval könnyebb helyzetben van, mint a mikroszkopikus (ott pontatlanabban reprodukálhatók egyszerre a kísérleti eredmények ugyanazzal a nukleon-nukleon potenciállal), nem meglepő, hogy eredményeik többé-kevésbé egyformán jók a ${}^6\text{Li}$ tekintetében, a makroszkopikus modellek fentebb említett problémái ellenére.

Van azonban a részecskék megkülönböztethetlenségének olyan hatása is, amely a dinamikai leírás korrektségétől független. Ezt makroszkopikus háromtest-számításokban külön korrekcióként figyelembe lehet venni. Kimutatható például [48], hogy az $s^{d\alpha}$ spektroszkópiai faktor (ami a deuteronnak a ${}^6\text{Li}$ -ból való távozását eredményező direkt reakciók leírásában játszik szerepet) értéke a fenti korrekciót végrehajtva mintegy 30%-kal megnő.

A ${}^6\text{Li}$ szerkezetének leírására minden bizonnyal a klasztermodell a legalkalmasabb. A nagyszámú klasztermodell-számítás többféleképpen csoportosítható. Az energetikai számítások célja annak tesztelése, hogy az egyes konfigurációk ($\alpha + d$, $\alpha + d^*$, $\alpha^* + d$, ${}^5\text{He}+p$, ${}^5\text{Li}+n$ stb.) milyen mértékben járulnak hozzá a ${}^6\text{Li}$ kötési energiájához. A tapasztalat szerint a legfontosabb komponens az $\alpha + d$, e mellett, mivel a deuteronklaszter sokkal könnyebben deformálódik, mint az α (a deuteron kötési energiája 2.22 MeV, míg az α -részecskéé 28.3 MeV), a d^* gerjesztett deuteronállapotok bevétele is fontos. Ezt főleg Tang és munkatársai vizsgálták meg alaposan a lélegző klaszterekkel lényegében azonos pszeudo-állapotokat tartalmazó modelljükben [57]. A [58] munka szerzői úgy találták, hogy a ${}^5\text{He}+p$ és ${}^5\text{Li}+n$ konfigurációk csak nagyon kis mértékben járulnak hozzá a kötési energiához. Hasonló következtetésre jutottak a [45] cikkben is, ahol a ${}^7\text{Li}$ -et vizsgálták egy $\{\alpha + d + n\}$ háromklaszter-konfigurációt is tartalmazó modellben. Ott is azt találták, hogy azok a kéttest-klaszterizációk, amelyek p -héjú klasztert is tartalmaznak, csak igen kis mértékben növelik a kötési energiát. Ezzel szemben a háromklaszter-konfiguráció sokkal fontosabbnak mutatkozott. A lélegző klaszterek modelljében végzett számítások [15] rámutattak arra, hogy ez a modell a kötési energia tekintetében a használt altérben ($S_\alpha = 0$, $S_d = 1$, $l_{\alpha d} = 1$, $J_{6\text{Li}}^\pi = 1^+$) gyakorlatilag teljesnek tekinthető. Ehhez elegendő az α -részecskénél 3, a deuteronnál pedig 5, a szabad klaszterek energiájában optimalizált lélegző módus figyelembevétele. Mint egyszerűen belátható, a deuteron lélegző módusai ekvivalensek egy olyan p és n közötti relatív mozgási függvénnyel, amely 5 darab Gauss-függvény szuperpozíciója, és az egyes $\exp(-\gamma_i r_{pn}^2)$ Gauss-függvények γ paramétere $\gamma_i = \beta_i/4$ kapcsolatban van a lélegző módusok β paraméterével. Így a ${}^6\text{Li}$ leírása a lélegző klaszterek modelljében egy olyan $\alpha + (p+n)$ háromklaszter-modellbeli leírásnak felel meg, amelyben $l_1(=l_{pn}) = l_2(=l_{\alpha(pn)}) = 0$, és az α -részecskének lélegző módusai is vannak.

A fragmentációs számolások [40,59] célja annak felderítése, hogy az egyes nemortonális klaszterkonfigurációk milyen (relatív) súllyal szerepelnek a ${}^6\text{Li}$ alapállapotában (és néhány alacsony gerjesztett állapotban). A klaszterizáció súlyának leírására a 3. fejezetben bemutatott csomósodás mértéke szolgál. Ha fizikai mennyiségeket számolunk az energetikai számítás eredményeként adódó hullámfüggvénnyel, jó ha tudjuk, hogy a számolandó mennyiségek értéke mennyire modelfüggő. A fragmentációt jellemző mennyiségek tekintetében az [59] cikkben végeztek igen alapos vizsgálatokat, amelyeknek legfőbb tanulsága, hogy a spektroszkópiai faktor és a csomósodás mértéke (továbbá ezen mennyiségek amplitúdója) a szeparációs energiától és a szabad klaszterek méretétől függ, a használt kölcsönhatástól, illetve a használt modelltől (lélegző, befagyasztott lélegző,

a klasztereket egy-egy különböző β méretparaméterrel leíró hagyományos RGM-szerű, azonos β paramétert használó hagyományos GCM-szerű) való függés igen csekély, ha a szeparációs energia és a klaszterek sugara jó. Másik fontos tanulság [40], hogy egy lélegző klaszteres számításban a gerjesztett klasztereket tartalmazó komponensek súlya is nagy. Például 3 α és 5 deuteron módus esetén az alapállapotú $\alpha_0 d_0$ konfiguráció súlya 91.5%, míg a gerjesztett deuteronot tartalmazó $\alpha_0 d_i$ komponensek súlya rendre 13.1%, 38.9%, 7.3% és 0.03%. Még a gerjesztett α -részecskét tartalmazó komponensek súlya is jelentős pl. az $\alpha_1 d_0$ komponensé 20.9%. Mivel ezek az alapállapotú konfigurációval erősen átfednek, egyenként egyik sem nagyon fontos, együttesen azonban igen.

A klasztermodellek tesztelésének fontos területe az elektromágneses tulajdonságok vizsgálata. Az eredmények a szeparációs energiától és a ${}^6\text{Li}$ mag méretétől függenek leginkább, így reális eredményt olyan modelltől várhatunk, amely ezeket a mennyiségeket pontosan reprodukálja. A klasztermodellbeli elektromágneses számolások eredményeinek nagy része a ${}^6\text{Li}$ -on történő elektronszórás kísérletek eredményeinek értelmezésére irányul. Ennek fő oka az, hogy az elektron (mivel lepton) nem vesz részt az erős kölcsönhatásban, így az általa kiváltott reakció mechanizmusa sokkal tisztább, mint például nukleon-mag szórás esetén. A számítások nagy része az elektromágneses jellemzők (töltéssugár, töltésalakfaktorok, átmeneti erősségek stb.) közül legfeljebb egyet-kettőt tud egyszerre reprodukálni. A lélegző klaszterek modelljében végzett számításokkal mindezek a jellemzők egyszerre igen jól reprodukálhatók [60]. Az alakfaktorok esetében ez csak egy bizonyos impulzusátadásig igaz, nagy impulzusátadások esetén a modellnek az egymáshoz nagyon közeli nukleonok viselkedését is jól kellene leírnia. Úgy tűnik, hogy a klasztermodell túlságosan közel engedi kerülni egymáshoz a nukleonokat. Ezen, a rövidtávú nukleon-antikorrrelációt szimuláló faktoroknak (Jastrow-faktor) a hullámfüggvénybe építésével segíthetnénk [10], azonban akkor a Slater-determinánsos leírást fel kellene adnunk. Létezik egy-két olyan számítás, amely látszólag képes reprodukálni az alakfaktorokat a nagy impulzusátadási tartományokban is [61], lehetséges azonban, hogy ez csak a véletlen műve. Erről a ${}^6\text{Li}$ kvadrupólmomentuma kapcsán a 4.5. alfejezetben ejtünk néhány szót.

A klasztermodellekkel (és minden más modellel) szembeni legnagyobb kihívás kísérleti eredmények kiértékelése, átfogó elemzése és interpretációja e modellek segítségével. A ${}^6\text{Li}(e, e'p)$ reakciónak a lélegző klaszterek modelljében való elemzését végezte el a közelmúltban Lovas Rezső, Kruppa András és J. B. J. M. Lanen [62]. Ez a reakció azért állítja nagy próba elé az elméleti leírást, mert a végállapotban hátramaradó 5 nukleon, amelyet a továbbiakban ${}^5\text{He}$ -nek fogunk nevezni, kontinuumállapotban van. A klasztermodellbeli számolás célja a ${}^5\text{He}+p$ spektroszkópiái amplitúdó meghatározása volt. Ezt használták aztán fel a reakciódinamikai (DWIA) számításokhoz bemenő adatként. A ${}^5\text{He}$ kontinuum állapotú, így az $s^{5\text{He}p}$ spektroszkópiái faktor a folytonos $E_{5\text{He}}$ energia függvénye lesz (differenciális spektroszkópiái faktor). Mivel a kísérlet igen széles $E_{5\text{He}}$ energiatartományt fogott át, beleértve a $d+t$ küszöböt is, egy $\{[\alpha+n, d+t]_{S=1/2}, [d+t]_{S=3/2}\}$ típusú klasztermodellt használtak. (Mivel a modell csak centrális kölcsönhatást tartalmazott, az $S=1/2$ és $S=3/2$ komponensek nem voltak összecsatolódva.) Az eredmények közül most csak a számunkra fontosakat emeljük ki. Noha a klasztermodell eredményeire épülő reakciósámítások igen jól reprodukálták a kísérleti impulzuseloszlásokat, az elméletileg számolt $s^{5\text{He}p}$ spektroszkópiái faktor a $d+t$ küszöbnél kisebb energiákon mintegy kétszere-

sen felülmúlta a kísérleti értéket. Ezzel szemben a küszöb fölött a kísérletekkel való egyezés igen jó. Mivel itt az $S = 3/2$ komponens a modellben tisztán a $\{d + t\}$ -ből származik, ez egyben azt is jelenti, hogy a ${}^5\text{He}$ -nek a $d + t$ küszöb fölötti állapota jól leírható tisztán $d + t$ konfigurációval is. A $s^{5\text{He}p}$ értékére a makroszkopikus klasztermodellek a kísérlethez közelebbi (kisebb) eredményeket adnak. Itt a mikroszkopikus és makroszkopikus modellek közti eltérést nem magyarázhatja az $s^{\alpha d}$ -hez hasonló antiszimmetrizálási korrekció [62]. A [62] cikkben felmerült az a lehetőség, hogy a mikroszkopikus modell által figyelembe venni nem tudott klaszterizációk okozhatják az eltérést. Ugyanis az $s^{5\text{He}p}$ különböző impulzuszómomentumhoz és spinhez tartozó $g^{5\text{He}p}$ amplitúdófüggvények lineáris kombinációjaként előálló függvény normanégyzete. Így egyes újabb (LS) komponensek bevétele destruktív interferencia révén csökkentheti $s^{5\text{He}p}$ -t. A legvalószínűbb jelölt erre a szerepre az $S_{6Li} = 0, L_{6Li} = 1$ klaszterizáció volt. Ez a komponens a modellben meglévő komponenshez centrális kölcsönhatás révén nem kapcsolódhat. Így célul tűztük ki egy olyan modell megvalósítását, amely ezt a komponenset is be tudja venni. A feladatot ennél általánosabban fogalmaztuk meg. A makroszkopikus háromtest-modellek legjelentősebb előnye a mikroszkopikus leíráshoz képest az, hogy az impulzuszómomentum-konfigurációk tekintetében sokkal jobban kimerítik a 3 részecske relatív mozgásának Hilbert-terét, mint a lélegző klaszterek modelljének egyetlen $l_{pn} = l_{\alpha d} = L_{6Li} = 0, S_{6Li} = 1$ konfigurációja. Éppen ezért egy olyan mikroszkopikus dinamikai háromklaszter-modellt dolgoztunk ki, amely az $\alpha(pn)$, $(\alpha n)p$ és $(\alpha p)n$ konfigurációkat, és ezeken belül az összes lényeges impulzuszómomentum-kombinációt képes kezelni. Ehhez a centrális kölcsönhatást természetesen ki kellett egészítenünk egy tenzor- és spin-pálya kölcsönhatási taggal.

5.2 Modellter, kölcsönhatás

A mikroszkopikus, multikonfigurációs, többklaszteres modellünk próbafüggvénye különböző klaszterizációk szuperpozíciója, amelyek különböző, klaszterek közötti Jacobi-koordinátarendszerhez tartoznak. A ${}^6\text{Li}$ modelljében egy általános tag

$$\Psi_{S,(l_1 l_2)L}^{(12)3} = \mathcal{A} \left\{ \left[\Phi_S[\chi_{l_1}^{12}(\boldsymbol{\rho}_1)\chi_{l_2}^{(12)3}(\boldsymbol{\rho}_2)]_L \right]_{JM} \right\} \quad (5.1)$$

alakú, ahol az 1, 2, 3 indexek az α, p, n cimkék permutációjának egy elemét jelölik, \mathcal{A} a klaszterek közötti antiszimmetrizátor, $\Phi_{SM_S} = [(\Phi^1 \Phi^2) \Phi^3]_{SM_S}$ a klaszterek belső állapotai Φ^i hullámfüggvényéből áll elő, a relatív mozgást leíró $\chi(\boldsymbol{\rho})$ -k a

$$\boldsymbol{\rho}_1 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad (5.2)$$

$$\boldsymbol{\rho}_2 = \mathbf{r}_3 - \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (5.3)$$

Jacobi-koordináták függvényei (m_i a klaszterek tömege) és $[]_{jm}$ jelöli az impulzuszómomentum csatolásokat. Míg a Φ^p és Φ^n függvények nem mások, mint spin-izospin sajátállapotok, a Φ^α függvény

$$\Phi^\alpha = \sum_i^{N_\alpha} c_i \phi_{\beta_i}, \quad (5.4)$$

alakban áll elő, ahol a ϕ_{β_i} -k különböző β_i méretparaméterű harmonikus oszcillátoros belső állapotok, amelyek 0s egyrészecske pályákból épülnek fel. A (5.4)-beli kombinációs együtthatókat az α -részecske belső Hamilton-operátorának a (5.4) próbafüggvénnyel való diagonalizálásából nyerjük. A klaszterek közötti $\chi_{lm}(\boldsymbol{\rho}_i)$ függvényeket temperált Gauss-függvények szerint fejtjük ki:

$$\chi_{lm}(\boldsymbol{\rho}_i) = \sum_k^{N_i} C_k \Gamma_{kl}^{(i)}(\boldsymbol{\rho}_i). \quad (5.5)$$

Ekkor mint a 4.3. fejezetben láttuk, valamennyi szükséges mátrixelem analitikusan számolható.

A ${}^6\text{Li}$ -ot tehát a $(pn)\alpha$, $(\alpha p)n$ és $(\alpha n)p$ konfigurációk szuperpozíciójaként írjuk le, az α -részecske spinje és izospinje nulla. A ${}^6\text{Li}$ alapállapota $J^\pi = 1^+$ spin-paritású állapot. Mivel $S_\alpha = 0$ miatt a ${}^6\text{Li}$ -beli teljes belső impulzuszómomentum (S) csak 0 vagy 1 lehet, az L teljes pálya-impulzuszómomentum lehetséges értékei $L = 0, 1, 2$. Ezekhez kell megválasztanunk az l_1, l_2 értékeket úgy, hogy $l_1 + l_2$ a pozitív paritás miatt páros legyen. Energetikailag nyilván a lehetséges legkisebb l_i -hez tartozó konfigurációk fognak dominálni. A $(\alpha p)n$ és $(\alpha n)p$ konfigurációknál az (αp) illetve (αn) alrendszer a héjmodellben egy nukleont tartalmaz a p -héjon, így nyilvánvalóan itt az $l_1 = 1$ választás kedvező energetikailag. Mindezek figyelembevételével próbafüggvényünk a következő alakú:

$$\begin{aligned} \Psi^{\alpha pn} = & \Psi_{1,(00)0}^{(pn)\alpha} + \Psi_{1,(20)2}^{(pn)\alpha} + \Psi_{1,(02)2}^{(pn)\alpha} + \Psi_{0,(11)1}^{(pn)\alpha} \\ & + \Psi_{1,(11)0}^{(\alpha p)n} + \Psi_{1,(11)1}^{(\alpha p)n} + \Psi_{1,(11)2}^{(\alpha p)n} + \Psi_{0,(11)1}^{(\alpha p)n} \\ & + \Psi_{1,(11)0}^{(\alpha n)p} + \Psi_{1,(11)1}^{(\alpha n)p} + \Psi_{1,(11)2}^{(\alpha n)p} + \Psi_{0,(11)1}^{(\alpha n)p}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Az azonos S, L -hez tartozó komponensek erősen nemortogonálisak, egyrészt mivel egy-egy komponens magában is közel teljes, másrészt az antiszimmetrizáció miatt. Az (5.6) bázis magában foglalja valamennyi korábban használt mikroszkopikus modell $\alpha + d$, $\alpha + p + n$, ${}^5\text{He} + p$ és ${}^5\text{Li} + n$ típusú komponenseit (pl. [58,63]), a relatív mozgás tekintetében pedig bővebb, mint a variációs makroszkopikus bázisok [50], ahol csak a $(pn)\alpha$ konfigurációk vannak meg. A modell legfeljebb csak a háromtest-felhasadásban szerepet játszó térbeli tartományban lehet kevésbé rugalmas, mint a Fagyjev-modellek [56,64,65,66], ez a tartomány azonban valószínűleg nem játszik szerepet a ${}^6\text{Li}$ alapállapotában.

Modellünk lehetővé teszi, hogy az α -részecske alapállapota (α_0) mellett bevegyünk néhány $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ lélegző módust is, ezáltal próbafüggvényünk

$$\Psi = \Psi^{\alpha_0 pn} + \Psi^{\alpha_1 pn} + \dots \quad (5.7)$$

alakot ölt. A lélegző módusok az α -részecske alapállapotára vonatkozó diagonalizálási procedúrából nyerhető gerjesztett állapotok, amelyek mintegy az α -részecske disztorcióját veszik figyelembe. Ilyen módon az állapotteret tekintve modellünk nem marad el az α -disztorciós modellek [2,40,43,59,62,67] mögött.

A numerikus számításokból az derült ki, hogy a (5.6) próbafüggvény az adott altéren már túlteljessé válik, e miatt numerikus instabilitások lépnek fel. Ezt kiküszöbölendő, elhagytuk az energiában legkevésbé fontos $\{(pn)\alpha; S, (l_1 l_2)L=1, (02)2\}$ és $\{(\alpha p)n; S, (l_1 l_2)L$

	N	Paraméterek (fm^{-2})
β	2	0.303, 0.646
$\gamma_{(pn)}$	9	0.0101, 0.0256, 0.0620, 0.147, 0.341, 0.757, 2.91, 6.51, 13.82
γ^a	6	0.0548, 0.1728, 0.32, 0.54, 1, 3.16

^aMinden relatív mozgásra kivéve pn -t.

2. táblázat: A bázisfüggvények paraméterei.

$=1, (11)1\}$ tagot. Ezeknek a komponenseknek a súlyát 0.2%-nál kisebbnek becsüljük. A $\{\beta_i\}$, $\{\gamma_{1i}\}$ és $\{\gamma_{2i}\}$ paraméterhalmazok valamely folytonos β , γ_1 és γ_2 generátorkoordináták diszkretizált értékei, amelyekből véges számút tartunk meg. Az α -részecske lélegző módusaira, a pn -beli relatív mozgásra és az összes többi relatív mozgásra rendre 2, 9 illetve 6 darab paramétert tartottunk meg. A β és a $\gamma_{(pn)}$ paraméterek értékeit az α és d energiák minimalizálásából határoztuk meg, a többi γ paramétert pedig [50]-ből vettük, ahol hasonló bázist használtak a makroszkopikus $\alpha + p + n$ modellbeli $(pn) + \alpha$ relatív mozgás leírására. Próbaszámításaink mutatják, hogy az (energiában optimalizált) 3-dimenziós α -bázis csak mintegy 0.005 és 0.02 MeV-vel mélyítené az α illetve ${}^6\text{Li}$ energiáját a fenti kétdimenzióshoz képest. A 9 $\gamma_{(pn)}$ paraméter szükségtelenül soknak tűnhet (az [59] hivatkozásban a deuteronra 5 paraméter elegendőnek bizonyult) azért használtunk több paramétert, hogy számításainkat összehasonlíthassuk [50]-nel. A β és γ paraméterek értékei a 2. táblázatban találhatóak.

A kétklaszter-alrendszerek leírása az eddigiekkel analóg módon történik. Az (5.1) alakkal összhangban

$$\Phi_{(12)[(S_1 l_1) I_1]} = \mathcal{A} \left\{ \left[\phi_{(12)(S_1)} \tilde{\chi}_{l_1}^{12}(\boldsymbol{\rho}_1) \right]_{I_1 M_1} \right\}, \quad (5.8)$$

ahol $\phi_{(12)(S_1 M_{S_1})} = [\Phi^1 \Phi^2]_{S_1 M_{S_1}}$. A deuteron hullámfüggvénye egy S_1 -re vonatkozó összegzést is tartalmaz

$$\Phi_d = \Phi_{(pn)[(10)1]} + \Phi_{(pn)[(12)1]}, \quad (5.9)$$

(a továbbiakban használni fogjuk a ${}^{2S+1}L_J$ spektroszkópiai jelölést is, e szerint (5.9) a ${}^3S_1 - {}^3D_1$ csatolt állapotot jelenti), míg az ötnukleon-hullámfüggvényben az α állapotokra összegzünk, például

$$\Phi_{\alpha n} = \Phi_{(\alpha_0 n)[(\frac{1}{2} l_1) I_1]} + \Phi_{(\alpha_1 n)[(\frac{1}{2} l_1) I_1]}. \quad (5.10)$$

Ha egyébként mást nem mondunk, az alrendszerek bázisainak paraméterei mindig megegyeznek a háromklaszter-bázis paramétereivel.

A modelltér definiálása után térjünk rá a kölcsönhatás megválasztására. A kölcsönhatástól elvárjuk, hogy többé-kevésbé jól leírja az α -részecske térfogati tulajdonságait, valamint az $\alpha + p$, $\alpha + n$ és $p + n$ rendszereket a fenti paraméterhalmazokkal megadott altereken. Ahhoz, hogy a (5.6) hullámfüggvény egyes LS komponensei összecsatolódjanak, a centrális kölcsönhatás mellett tenzor- és spin-pálya erőket is be kell vennünk a leírásba. A következő alakot választottuk:

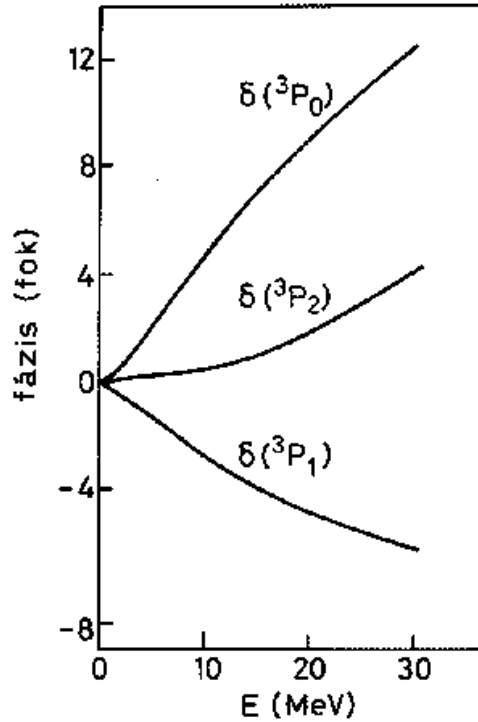
$$V_{12}(r) = (W + MP^r + BP^\sigma - HP^\tau) \sum_{i=1,2} V_i e^{-r^2/a_i^2}$$

$$\begin{aligned}
& +(W_T + M_T P^r) r^2 \sum_{i=3,4} V_i e^{-r^2/a_i^2} [3(\boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{r})/r^2 - \boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2] \\
& + V_5 e^{-r^2/a_5^2} \hbar^{-2} \mathbf{1}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2),
\end{aligned} \tag{5.11}$$

ahol a P -k a tér-, spin- és izospinkicserélő operátorok, $W + M + B + H = 1$, $W_T + M_T = 1$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, $\boldsymbol{\sigma}$ a nukleonok Pauli-féle spinmátrixa, $\mathbf{1}$ pedig két nukleon mozgásának relatív pálya-impulzusmomentuma. A fenti kölcsönhatás mátrixelemeinek számítását a 4. fejezetben mutattuk be.

Következő feladatunk a kölcsönhatás paramétereinek megválasztása. Annak érzékeltetésére, hogy csak az adott (a kölcsönhatás által megengedett) altérre optimalizált erő lehet működőképes, végeztünk egy próbaszámítást. Egy [59]-beli centrális erőt, ami kiválóan leírja az α -részecske és a deuteron, valamint a ${}^6\text{Li}$ térfogati tulajdonságait, kiegészítettünk egy szintén klasztermodell-számolásban használt tenzor [68] és spin-pálya [69] taggal, majd csak a $(pn)\alpha$ konfigurációkat megtartva meghatároztuk a ${}^6\text{Li}$ energiáját. Ez mintegy 10 MeV-vel mélyebbnek adódott a kísérleti értéknél. Nyilvánvaló, hogy az $[S, (l_1 l_2) L] = [1, (00) 0]$ altérre szerkesztett centrális kölcsönhatás nem működhet a bővebb altérben. Magának a (5.9) állapotú csatolt ${}^3S_1 - {}^3D_1$ deuteronnak az energiája is jónéhány MeV-vel mélyebb a kelletténél. Az irodalomban csak néhány olyan számolás van, amely nem centrális erőket is tartalmaz [69,70,71,72,73,74], ezeknek túlnyomó része azonban nem törekszik a szabad klaszterek térfogati tulajdonságainak (energia, RMS-sugár) hű reprodukálására (az α -energiában például 1-2 MeV eltérések vannak a kísérlettől). Mivel mi fragmentációs mennyiségeket is számolni akarunk, amelyek érzékenyen függenek a szeparációs energiától és a klaszterek sugarától, ezek az erők szóba sem jöhetnek. A [72] cikkben, ahol nincs spin-pálya kölcsönhatás, történik némi kísérlet az energiák pontos reprodukálására, azonban az ottani számolásban megítélésünk szerint hibának kell lennie. A szerzők ugyanis a deuteronnak egy csonkított $\varphi_d = \varphi_{[(10)1]}^{(\gamma^0)} + c\varphi_{[(12)1]}^{(\gamma^2)}$ hullámfüggvénnyel leírt modelljében a γ^0 és γ^2 paramétereket optimalizálva azt találják, hogy a csatolatlan esetben ($c = 0$) $E_d^0 = -0.2$ MeV, míg csatolt esetben $E_d^c = -2.1$ MeV. Ezzel szemben mi azt kaptuk, hogy E_d^0 valóban -0.2 MeV, azonban ha ugyanazon paramétereket használjuk, ugyanabban a modellben $E_d^2 = -5.15$ MeV adódik. Döntőbíróként a csatolt deuteron problémáját numerikus integrálással megoldó [75,76] kódot hívtuk segítségül. Mivel ez a $p - n$ relatív mozgás tekintetében csonkítatlan problémát oldja meg, a 2. táblázatbeli teljesnek tekinthető γ paraméterhalmazt használtuk. Az egyezés kitűnő. Ebből nyilvánvaló, hogy [72]-ban a tenzorerő bevételekor valamilyen hibát követnek el.

Mivel az irodalomban ezek szerint nem találtunk céljainknak megfelelő kölcsönhatást, magunk konstruáltunk egyet. A spin-pálya kölcsönhatás paramétereit [69]-ből vettük ($V_5 = -224.8$ MeV, $a_5 = 0.707$ fm), a centrális és tenzor tagot több lépésben optimalizáltuk a szabad klaszterek térfogati tulajdonságaihoz (energia, RMS-sugár) és a kétklaszter-rendszerek szórási fázisaihoz. Azért, hogy a modell továbbfejleszthető legyen, bevettük az optimalizációba a tritont (t), valamint a szingulett (1S_0) deuteron is. Erre az optimalizációra az ad lehetőséget, hogy, mint azt [59]-ben kimutatták, az egyes szabad klaszterek, illetve kétklaszter-rendszerek dinamikája a kicserélődési paramétereknek csak bizonyos kombinációit tartalmazza, míg a ${}^6\text{Li}$ az összes paraméterre érzékeny. Nevezetesen az α és a t leírása csak a $W + M$ kombinációtól, az ${}^3S_1 - {}^3D_1$ deuteron a $W + M + B + H$ kombinációtól, míg a szingulett deuteron a $W + M - (B + H)$ -től függ. A $p + n$ szórás



5. ábra: A $p + n$ szórás 3P_J -beli fázistolásai.

1P_1 állapotának a dinamikája a $W + H - (M + B)$ kombinációtól függ, a 3P_J ($J = 0, 1, 2$) szórási állapot pedig $W + B - (M + H)$ -től. Végül az $\alpha + N$ ($N = p$ vagy n) szórás csak a $4W - M + 2B - 2H$ -ra érzékeny. Az optimalizáció során a d, t és α szabad klasztereket különböző β méretparaméterű ϕ_β 0s harmonikus oszcillátoros belső állapotok szuperpozíciójaként írtuk le. Ezek a kifejtések (5.4)-hez hasonlóak, azonban itt a bázisok olyan nagyok voltak, hogy a β értékek által kifizített altéren közel teljesnek voltak tekinthetők. Ezáltal elkerültük azt, hogy minden egyes optimalizációs lépésben a meghatározott új erőparaméterekhez újra optimalizáljuk a klaszterek β méretparamétereit. A deuteronnál a D -állapotoknak egy hasonló halmazát is bevettük a leírásba. A $V_1, V_2, V_3, V_4, a_1, a_2, a_3, a_4$ és $W + M$ értékét a d, t és α , valamint a szingulett deuteron kísérleti energia- és RMS-sugár-értékeihez való egyidejű illesztéssel határoztuk meg, miközben a deuteronon belüli D -állapot keveredés súlyát 4% körül tartottuk (ez utóbbi adat a mezonkicszerélődési áramok miatt kísérletileg nem mérhető egyértelműen [77], a becült érték 3 és 7% közt van). Ez után tértünk át az α -klaszter 2. táblázatbeli kisebb méretparaméter-halmazára, amelyet a most már meglévő erőhöz energiainimalizálással optimalizáltuk. Ez az α -részecske kötési energiáját mintegy 20 keV-vel csökkentette. A potenciál kicszerélődési paramétereire a $W + M + B + H = 1$ kikötés és a $W + M$ fenti illesztése két feltételt jelent. Az

$$\omega = W + H - M - B \quad (5.12)$$

kombinációtól, mint említettük, a 1P_1 -beli $n + p$ szórás függ. Mivel ebben a parciális hullámban $S = 0$ miatt a spin-pálya- és tenzorero nem játszik szerepet célszerű ω értékét a kísérleti $p+n$ fázistoláshoz illeszteni. A centrális kölcsönhatás utolsó szabad paraméteréül

i	1	2	3	4	5
V_i (MeV)	105.16	-31.56	338.28	-3.54	-224.8
a_i (fm)	0.4	2.2	0.3	2.2	0.707
Kicserélődési paraméterek		W	M	B	H
1) η az $\alpha + n$ -beli $p_{3/2}$, $p_{1/2}$ átlaghoz illesztve		0.4051	0.6386	-0.0425	-0.0012
2) η az $\alpha + n$ -beli $p_{3/2}$ -hoz illesztve ^a		0.4328	0.6109	-0.0148	-0.0288
3) η az $\alpha + n$ -beli $p_{1/2}$ -hez illesztve		0.3697	0.6739	-0.0779	0.0342
4) Mesterséges ^b		0.8474	0.1962	-0.5401	0.4964

$W_T = 0.3$, $M_T = 0.7$.

^aa ${}^6\text{Li}$ -hoz legjobb

^b ω megváltoztatva úgy, hogy nagy $(S, L) = (0, 1)$ komponenst produkáljon a ${}^6\text{Li}$ -ban, η újra illesztve a ${}^6\text{Li}$ energiájához.

3. táblázat: Potenciálparaméterek.

az

$$\eta = 4W - M + 2B - 2H. \quad (5.13)$$

kombinációt választottuk, amire mint említettük az $\alpha + p$ és $\alpha + n$ szórás érzékeny, ott is leginkább a p-hullám (és itt a tenzorkölcsönhatás sem ad járulékot). Hogy kiküszöböljük a spin-pálya tag hatását is, η -t a számított $P_{3/2}$ és $P_{1/2}$ $\alpha + n$ fázistolás súlyozott átlagának a kísérlethez való illesztésével határoztuk meg. Nem rendelkezünk még a tenzorkölcsönhatás kicserélődési paraméteréről (a kettőből egyet már lerögzített a $W_T + M_T = 1$ feltétel). Az eddigi néhány mikroszkopikus számolás során egy kivétellel [73] mindig tiszta Serbertípusú ($W_T = M_T = 0.5$) keveredést tételeztek fel. Egy ilyen erő azonban csak a páros L -ű állapotokon tud hatni. Mivel nekünk páratlan impulzusmomentumú relatív mozgási állapotaink is vannak, ez a választás nyilván nem jó. Az 5. ábrán feltüntettük a kísérletek fenomenologikus elemzésével nyerhető $p + n$ 3P_J ($J = 0, 1, 2$) szórási fázistolásokat [78] (kis energiákon ez nyilván csak illesztés, hiszen ott ezek a parciális hullámok nem gerjesztődnek). Azért mutatjuk be ezt az ábrát, mert nagyon szépen mutatja, hogy a nukleon-nukleon kölcsönhatásnak kell tartalmaznia egy tenzoriális tagot. Tisztán spin-pálya kölcsönhatás ugyanis csak $J = 0, 1, 2$ sorrendű nívófelhasadást tudna előidézni, itt viszont $J = 1, 2, 0$ a sorrend. A W_T paraméterünket úgy választottuk meg, hogy reprodukálja ezt az anomális nívósortrendet.

	E^d	r^d	$E_{(S=0)}^d$	E^t	r^t	E^α	r^α
Elmélet	-2.203	2.341	-0.976 ^a	-8.389	1.959	-28.306	1.740
Kísérlet	-2.225	2.095	-0.066 ^b	-8.482	1.70	-28.296	1.674

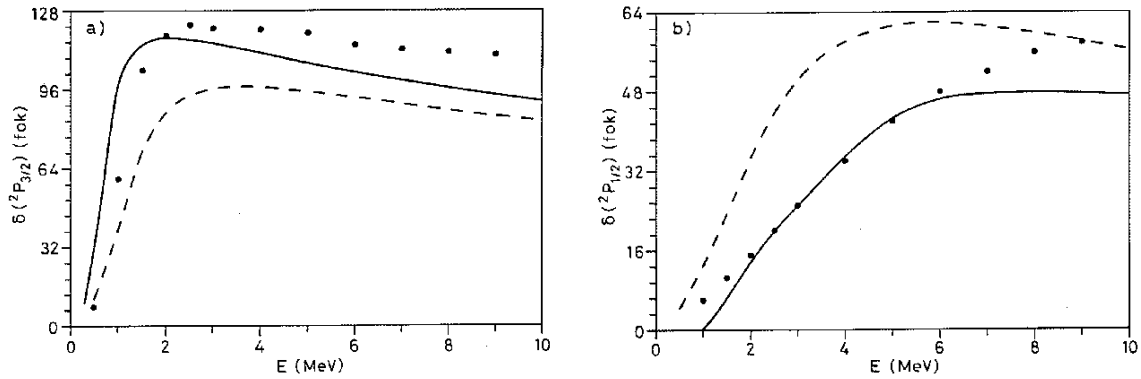
Ezek a jellemzők függetlenek az η paraméter értékétől.

A deuteron D-hullámú komponensének súlya: 4.11%.

^aKötött állapot.

^bAntikötött állapot.

4. táblázat: A szabad klaszterek energiái (MeV-ben) és RMS-sugarai (fm-ben).



6. ábra: Az $\alpha+n$ szórás 2P_J -beli fázistolásai (a jelölések magyarázatát lásd a szövegben).

A nyert potenciálparamétereket a 3. táblázat tartalmazza (a kicserélődési paraméterek közül az 1) paraméterhalmaz). A d, t és α kísérletekkel összehasonlított térfogati jellemzői a 4. táblázatban találhatók. Noha az egyezés elfogadható, kevésbé kielégítő, mint ami tisztán centrális kölcsönhatással nyerhető [2,59]. Mint megfigyelhető, valamennyi klaszter egy kissé nagyobb méretű, mint kellene. Úgy tűnik, hogy a jelenlegi modell azért durvább a szabad klaszterek leírása tekintetében, mint a régi, mert benne a klaszterek belső mozgásának leírása kevésbé konzisztens. A probléma az, hogy míg a deuteron D -állapotú komponensének súlyára kirótt feltétel miatt a tenzorkölcsönhatás jelentős szerepet játszik a deuteron kötésében, addig modellünk nem teszi lehetővé, hogy a többi klaszter kötéséhez hozzájáruljon. Az azonban közös a két modellben, hogy a szingulett deuteron mindkettő (helytelenül) beköti. A valóságban a szingulett deuteron nem más mint egy $p+n$ szórásban megjelenő antikötött állapot $k = -i\gamma$ hullámszámmal [79,80] s így negatív energiával. Csak a szórási fázisból dönthető el, hogy a modell kötött vagy antikötött állapotot eredményez-e.

Amit centrális kölcsönhatás nem tud produkálni, de a jelenlegi igen, az a kvadrupólmomentum. A deuteron kvadrupólmomentumára 0.43 efm^2 értéket kapunk, míg a kísérleti érték 0.28 efm^2 . Ha az erőt mesterségesen megváltoztatjuk (erősebbé tesszük) úgy, hogy a korrekt kötési energiát adja, a kvadrupólmomentum 0.28 efm^2 -re, míg az RMS-sugár 2.138-ra csökken.

A nyert fázistolások kvalitatíve helyesek, de nem tökéletesek. Itt csak a $P_{3/2}$ és $P_{1/2}$ $\alpha+n$ fázistolásokat mutatjuk be, amelyek minden bizonnyal a legfontosabbak (6. ábra). A pontok a [81]-beli kísérleti értékeket jelölik. A szaggatott vonalak a 3. táblázatbeli 1) paraméterekkel való számolás eredményei, míg a folytonos vonalak a 2) (a) ábra) illetve 3) (b) ábra) paraméterekkel történt számolások eredményei. Noha a választott spin-pálya kölcsönhatás egy másik centrális erővel együtt jól adja a felhasadást [69], és ezt a mi programunk is tudja reprodukálni, ugyanaz a spin-pálya csatolás nem ad elég felhasadást a mi centrális kölcsönhatásunkkal (a 3. táblázat 1) paramétereire tartozó η). Az ezekhez a fázistolásokhoz külön-külön illesztett η értékek (a 2) és 3) paraméterek a 3. táblázatban) jobban reprodukálják a kísérleti értékeket, de még mindig kevésbé pontosan, mint a korábbi centrális kölcsönhatást tartalmazó modell [62].

5.3 Energetikai és fragmentációs tulajdonságok

A klaszterrendszerhez optimalizált kölcsönhatás (az 1)-es kicserélődési paraméterekkel) a ${}^6\text{Li}$ alapállapotú energiáját -30.923 MeV-nek adja, míg a kísérleti érték -31.994 MeV. Az eltérés abba a nagyságrendbe esik, mint a centrális erőknél [2], a megfelelő előjellel, az esetlegesen beveendő újabb komponensek ugyanis mélyíténék az elméleti energiát. Az energiahány valamelyest nagyobb, mint az, amit a legrealisztikusabb makroszkopikus háromtest-modellek adnak. Ezek kötési energiája a háromklaszter-disszociációs küszöbhez viszonyítva tipikusan $0.2\text{--}0.5$ MeV-vel kevesebb a kelleténél [65,82,84,85].

Mindkét modelltől hiányoznak bizonyos háromklaszter-effektusok, amelyek a ${}^6\text{Li}$ kötésienergia-hiányát módosíthatják. A mikroszkopikus modell a makroszkopikushoz képest tartalmaz disztorziós és Pauli-kicserélődési háromtest-effektusokat.

Az α -részecske lélegző disztorziójának járulékát kiszámíthatjuk, ha összehasonlítjuk a disztorziós modell energiáját a befagyasztott modellel. Ez utóbbi csonkított bázisú számításnak felel meg, ugyanis a befagyasztott modell azt jelenti, hogy a (5.7) kifejezés helyett (5.6)-ot használjuk mint próbafüggvényt. A számítást a 2) kicserélődési paraméterekkel hajtottuk végre, ami az $\alpha + n$ $P_{3/2}$ parciális hullámának fázistolásához optimális és a ${}^6\text{Li}$ energiájára a kísérlethez közeli $E_{6\text{Li}} = -32.043$ MeV értéket adja. (Ez az alrendszer szemponjtjából nem a legjobb paraméterhalmaz, mert távolról sem optimális a $P_{1/2}$ fázistolásra.) Mint az 5. táblázatból látható, az α -részecske ${}^6\text{Li}$ -beli disztorziója 0.109 MeV-vel mélyíti a kötési energiát. Végrehajtva egy hasonló számolást a ${}^5\text{He}$ -re az álkötött-állapotú közelítésben [22], a teljes és befagyasztott modellek közti energiakülönbségre 0.007 MeV-et kapunk (5. táblázat). Ez azt mutatja, hogy a ${}^6\text{Li}$ -beli disztorziós effektusok (az α -részecskének két nukleon jelenlétében történő torzulása) nem a kéttest-disztorziók összege, hanem háromtest-effektusok. Mivel a makroszkopikus modellek által használt kölcsönhatások a kéttest-alrendszerek tulajdonságaihoz vannak illesztve, csak a kismértékű kéttest-disztorziókat tudják figyelembe venni, így a hiányzó kötési energia egy részéért valószínűleg a háromtest-disztorziós effektusok hiánya tehető felelőssé.

Mint kimutatható, a Pauli-elv figyelembevétele a klasztermodellben egy effektív háromtest-erő megjelenését eredményezi (pl. [48]), ami erősen függ a klaszterek közötti kéttest-erők energiahéjon kívüli (off-shell) viselkedésétől [86]. Így a Pauli-kicserélődési effektusoknak a kötési energiához történő hozzájárulása is a kétklaszter-erők off-shell viselkedésétől függ, ami viszont nem ismeretes a makroszkopikus modellekben használt kölcsönhatások esetén. Feltételezhetően a Pauli-hatások taszító jellegűek, így elhanyagolásuk mélyíti a ${}^6\text{Li}$ energiáját. Ez talán magyarázatot ad arra, hogy a makroszkopikus

	$E_{5\text{He}}$	$E_{5\text{He}} - E_{\alpha}$	$E_{6\text{Li}}$	$E_{6\text{Li}} - E_{\alpha}$
Teljes modell	-27.354^{a}	0.952	-32.043	-3.737
Befagyasztott modell	-27.347^{a}	0.959	-31.934	-3.628
Kísérlet	-27.41	0.89	-31.994	-3.697

^aKötött állapotú közelítés.

5. táblázat: A ${}^5\text{He}$ és ${}^6\text{Li}$ alapállapotú energiája (MeV).

S, L	Lehman ^a	Bang ^b	Kukulin ^c	Danilin ^d	Micr. ^e
1,0	0.9178	0.928	0.9554	0.9304	0.9462
1,1	0.0050	0.007	0	0.0024	0.0020
1,2	0.0371	0.012	0.0338	0.0338	0.0391
0,1	0.0401	0.053	0.0108	0.0334	0.0127

^a [87] a [65] erővel.

^b [84] a [88] erővel.

^c [50] a [89] erővel.

^d [85] a [90] erővel.

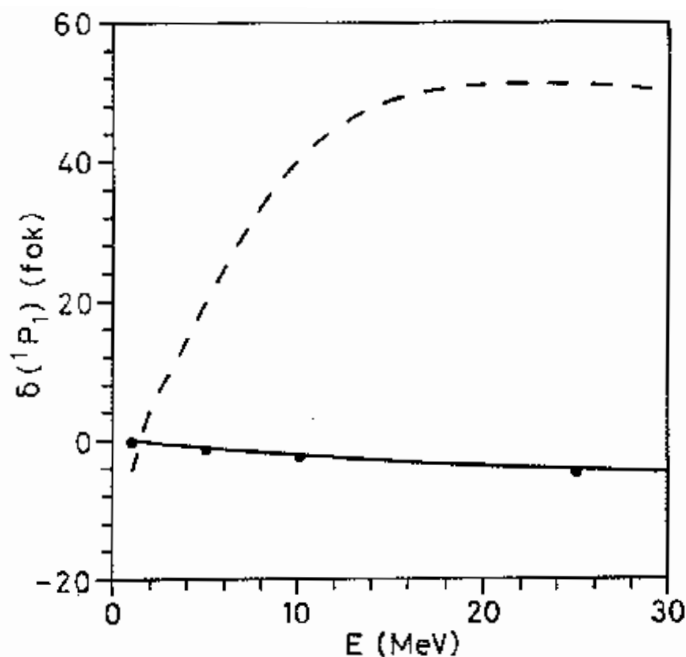
^e Jelen modell; a 3. táblázatbeli erő a 2) paraméterekkel.

6. táblázat: Az (S, L) komponensek súlya a ${}^6\text{Li}$ alapállapotában.

modellbeli kötési energia hiánya miatt kisebb a mikroszkopikusénál.

A további háromtest-effektusok az $\alpha +$ két nukleon konfigurációnak más konfigurációkba szerveződésében nyilvánulnak meg. A legvalószínűbb jelölt erre a szerepre a $t + \tau (= {}^3\text{He})$ klaszterizáció. Ennek a komponensnek az energiához való járulékát nem könnyű megbecsülni. Az antiszimmetrizáció miatt ugyanis az $\alpha + d$ típusú klaszterizáció a $t + \tau$ alterének nagy részét tartalmazza (ki lehet mutatni például, hogy ha egy $l_{\alpha d} = l_{t\tau} = 0$ modellben a klaszterek méretparaméterei azonosak, és a relatív mozgást is ezekkel konzisztens harmonikusoszillátor-függvény írja le, akkor az antiszimmetrizáció folytán az $\alpha + d$ és $t + \tau$ hullámfüggvény-komponensek egymással egyenlők [11]). A $t + \tau$ komponens szerepének tisztázására kibővítettük modellünket az $\{\alpha + p + n, t + \tau\}$ állapotterre. Mivel $S_t = S_\tau = 1/2$, a $J^\pi = 1^+$ állapot az $(S, L) = (1, 0)$ és $(1, 2)$ komponensekből épülhet fel. Ezeket bevéve a (5.6) próbafüggvénybe, azt találtuk, hogy a ${}^6\text{Li}$ kötési energiája mintegy 0.6 MeV-vel nőtt. Ez meglepően nagy érték, figyelembe véve azt, hogy az $\alpha + p + n$ altér gyakorlatilag teljes. Ha a kötési energiához való hozzájárulás ilyen jelentős, akkor ennek a $t + \tau$ spektroszkópiái faktorban is meg kell mutatkoznia. Valóban azt találtuk, hogy $s_{t\tau}$ mintegy 15%-kal megnőtt. A makroszkopikus háromtest-modellekben mintegy 0.2–0.5 MeV hiányzik a ${}^6\text{Li}$ kötési energiájából. Ha figyelembe vennék a $t + \tau$ konfigurációt, feltehetően túlkötnék a ${}^6\text{Li}$ -ot. Ez is egy jelzés lehet arra nézve, hogy az ott használt effektív erők off-shell viselkedése nem tökéletes.

A 6. táblázatban négy makroszkopikus modell eredményeivel együtt bemutatjuk a különböző (S, L) komponensek súlyát a ${}^6\text{Li}$ alapállapotában. A $(S, L) \neq (1, 0)$ komponensek súlyát valamennyi modell egybehangzóan néhány százalék körülnek adja. Ezen belül azonban eltérés mutatkozik az $(S, L) = (0, 1)$ komponens súlyát illetően: míg három modell 4% körüli eredményt ad, addig a mi számolásunk [50,82]-vel összhangban 1% körül van. Ehhez a komponenshez mindhárom klaszterizáció ad járulékot, mégpedig mind az $(l_1, l_2) = (1, 1)$ kvantumszámokkal. Próbaszámolásaink megerősítik azt a meglehetősen plauzibilis feltételezést, hogy ezen komponens súlya gyakorlatilag csak a nukleon–nukleon kölcsönhatás $S = 0, L = 1$ (singlet–odd) komponensétől, azaz az ω paraméter értékétől függ. Az alacsonyenergiás 1P_1 fázistolás illesztése a mi kölcsönhatásunkkal kiválóan mondható (7. ábra, folytonos vonal), hasonlóan [50]-hez, ahol a [89]-beli erőt használták. Így a többi számolásban a fenti komponens 4% körüli súlyát vagy a nem megfelelő



7. ábra: A $p + n$ szórás 1P_1 -beli fázistolása a 3. táblázatbeli 1) (folytonos vonal) illetve 4) (szaggatott vonal) paraméterekkel; kísérlet: [91].

kölcsönhatás használata, vagy a $(0, 1)$ komponens nem kielégítő kezelése okozhatja. Nevezetesen a [65] cikkben egyáltalán nincs singlet-odd erőkomponens, míg [84]-ben a $(0, 1)$ komponens csak az $(\alpha p)n$ és $(\alpha n)p$ klaszterizációkban van jelen, ott is valószínűleg csak közelítőleg [87]. Éppen ezért úgy hisszük, hogy e komponens súlyának 1% körül kell lennie.

Mindazonáltal ellenőrzési céllal végeztünk egy számolást, amelyben ω értékét mesterségesen úgy állítottuk be, hogy e komponens nagy (6.49%) súlyát eredményezze. Ezen – a 3. táblázatban mesterségesnek nevezett – erővel számolt fázistolás a 7. ábrán szaggatott vonallal látható.

A hullámfüggvény egyes komponenseire meghatároztuk a 3. fejezetben definiált klaszterizáció mértékét (S_μ). Jelen esetben a μ altér a $(pn)\alpha_i$, $(\alpha_i p)n$ és $(\alpha_i n)p$ klaszterizációk valamelyikét jelöli és ezen belül egy meghatározott $S, (l_1 l_2)L$ impulzuszórájú állapotot. Az S_μ -re vonatkozó formulák Lovas Rezsőtől származnak, és az A Függelékben található.

A (5.6), (5.7) hullámfüggvény egyes klaszterizációira vonatkozó eredmények a 7. táblázatban található. Látható, hogy egy adott (S, L) -hez tartozó, különböző komponensek súlyai meglepően közel vannak egymáshoz. Összevetve az 6. és 7. táblázatot megállapítható, hogy a fő komponenseket $((S, L) = (1, 0), (S, L) = (1, 2))$ gyakorlatilag teljesen kimeríti a $(pn)\alpha_0$ partíció. Például az $(S, L) = (1, 0)$ altérben a $(pn)\alpha_0$ klaszterizáción kívüli komponensek súlya csak $0.9462 - 0.9414 = 0.0048$. A legjelentősebb klaszterizációknak $\{(pn)\alpha; 1, (00)0\}$, $\{(\alpha p)n; 1, (11)0\}$ és $\{(\alpha n)p; 1, (11)0\}$ meglehetősen nagy az átfedésük, míg a kisebb járulékot adó klaszterizációk lényegében ekvivalenseknek tűnnek. A 8. táblázat az energia megváltozását mutatja az egyes komponensek kikapcsolásakor.

Partíció	Klaszterizáció $S, (l_1 l_2)L$	A klaszterizáció súlya	
		$\alpha = \alpha_0$	$\alpha = \alpha_1$
$(pn)\alpha$	1,(00)0	0.9414	0.4614
$(pn)\alpha$	1,(20)2	0.0376	0.0002
$(pn)\alpha$	1,(02)2	0.0030 ^a	0.0006 ^a
$(pn)\alpha$	0,(11)1	0.0119	0.00005
$(\alpha p)n$	1,(11)0	0.8575	0.0254
$(\alpha p)n$	1,(11)1	0.0016 ^a	0.00006 ^a
$(\alpha p)n$	1,(11)2	0.0036	0.0003
$(\alpha p)n$	0,(11)1	0.0123	0.00008
$(\alpha n)p$	1,(11)0	0.8550	0.0252
$(\alpha n)p$	1,(11)1	0.0019	0.00008
$(\alpha n)p$	1,(11)2	0.0035	0.0003
$(\alpha n)p$	0,(11)1	0.0123	0.00008

^aElhagyva a bázisból. Vö. 5.2. fejezet

7. táblázat: A klaszterizációk súlya a ${}^6\text{Li}$ alapállapotában.

lása során (az α_0 -hoz és az α_1 -hez tartozó komponenseket egyszerre hagytuk el). Látható, hogy az energia minden komponensnél csak kis mértékben változik ami szintén azt mutatja, hogy modellterünk gyakorlatilag teljes.

Az egyes klaszterizációs komponensek szerepére jobban rávilágít a 9. táblázat. Ez azoknak a számításoknak az eredményét mutatja, amelyek során egymás után kikapcsoltuk az összes komponenset. Láthatjuk, hogy az energiaváltozások az utolsó lépést kivéve meglehetősen kicsik. Ez azt mutatja, hogy jelenlegi modellünk az eddigiekhez [2,40,59,62] képest egy jelentős ($\{(pn)\alpha; 1, (20)2\}$), és számos kisebb komponenset tartalmaz. Az egyes (S, L) komponensek súlyának figyelemreméltó stabilitása az egyes komponensek kikapcsolása során.

Partíció	Kikapcsolt komponens $S, (l_1 l_2)L$	Energia (MeV)
	Nincs kikapcsolt komponens	-32.043
$(pn)\alpha$	1,(00)0	-31.397
$(pn)\alpha$	1,(20)2	-30.500
$(pn)\alpha$	0,(11)1	-32.043
$(\alpha p)n$	1,(11)0	-32.010
$(\alpha p)n$	1,(11)2	-32.034
$(\alpha p)n$	0,(11)1	-32.037
$(\alpha n)p$	1,(11)0	-31.999
$(\alpha n)p$	1,(11)1	-31.956
$(\alpha n)p$	1,(11)2	-32.034
$(\alpha n)p$	0,(11)1	-32.038

8. táblázat: A ${}^6\text{Li}$ alapállapotának energiaváltozása az egyes klaszterizációs komponensek kikapcsolása során.

Kikapcsolt komponens Partíció	$S, (l_1 l_2)L$	Energia (MeV)	Az (SL) komponensek súlya			
			(10)	(11)	(12)	(01)
Nincs kikapcsolt komponens		-32.043	0.9462	0.0020	0.0391	0.0127
$(\alpha p)n, (\alpha n)p$	1,(11)2	-31.982	0.9453	0.0021	0.0391	0.0135
$(\alpha p)n, (\alpha n)p$	0,(11)1	-31.940	0.9479	0.0023	0.0391	0.0107
$(\alpha n)p$	1,(11)1	-31.852	0.9491	0	0.0393	0.0116
$(\alpha p)n, (\alpha n)p$	1,(11)0	-31.732	0.9492	0	0.0399	0.0108
$(pn)\alpha$	0,(11)1	-31.574	0.9595	0	0.0405	0
$(pn)\alpha$	1,(20)2	-29.348	1	0	0	0

9. táblázat: A ${}^6\text{Li}$ alapállapotú energiájának és az egyes (S, L) komponensek súlyának változása a klaszter-komponensek fokozatos kikapcsolása során.

lása során (az adott (S, L) -hez járulékot adó utolsó klaszterizáció kikapcsolásáig) újra csak a különböző klaszterizációk nagyfokú átfedésének a következménye.

5.4 A ${}^6\text{Li}$ sugara és kvadrupólmomentuma

A ${}^6\text{Li}$ RMS-töltéssugarára 2.763 fm-t kaptunk, a kísérleti érték 2.56 fm [54]. Ez a megnövekedett sugár annak a következménye, hogy maguknak a szabad klasztereknek a mérete is nagyobb a kelleténél. Az elméleti anyagsugár 2.643 fm-nek adódott.

A ${}^6\text{Li}$ kvadrupólmomentumára 0.246 $e \text{ fm}^2$ értéket kaptunk, míg a kísérleti érték $-0.064 e \text{ fm}^2$ [54]. Ezt az eltérést a deuteronnak a ${}^6\text{Li}$ -on belüli összehúzódása [40] miatt nem lehet egyszerűen a deuteron túl nagy kvadrupólmomentumának számlájára írni.

A ${}^6\text{Li}$ kvadrupólmomentumát ezidáig egyetlen egy maroszkopikus vagy mikroszkopikus számolásban sem tudták reprodukálni. A közelmúltban azonban elég pontos értéket kaptak [61] egy olyan modell keretében amely a $(pn)\alpha$ -beli $\{S, (l_1 l_2)L\} = \{1, (00)0\}$, $\{1, (20)2\}$ és $\{1, (02)2\}$ konfigurációkat, valamint a gyakorlatilag elhanyagolható súlyú $\{1, (22)2\}$ komponenst tartalmazta. Mivel a mi modellünkben az energiához való csekély hozzájárulása miatt a $\{1, (02)2\}$ komponens is hiányzott, végeztünk egy próbaszámolást amelyben bevettük ezt a komponenst is. Azt találtuk, hogy a kvadrupólmomentum mindössze 0.229 $e \text{ fm}^2$ -re csökkent. A változás meglehetősen kicsi, mert a $(pn)\alpha$ -beli $\{1, (02)2\}$ komponens kihagyásakor őt a vele erősen átfedő egyéb komponensek gyakorlatilag teljes mértékben képviselik. Tovább vizsgálva az eltérés okát, végeztünk egy számítást egy olyan modellben, amely csak a $(pn)\alpha$ -beli $\{S, (l_1 l_2)L\} = \{1, (00)0\}$, $\{1, (20)2\}$ és $\{1, (02)2\}$ konfigurációkat tartalmazott. Ez a [61]-beli modelltől csak a lényegtelen $\{1, (22)2\}$ komponensben tér el. A kvadrupólmomentum értéke $-0.18 e \text{ fm}^2$ -nek adódott. A $\{1, (20)2\}$ komponensnek ebben a korlátozott modellben való szerepét ellenőrzendő elhagytuk ezt a komponenst, ami a kvadrupólmomentumra 0.297 $e \text{ fm}^2$ értéket eredményezett. Ez valóban megerősíti e komponens szerepét, azonban rávilágít arra, hogy [61]-ben a túlságosan korlátozott modelltől miatt növekedett meg a $\{1, (20)2\}$ komponens súlya. Így az, hogy ott a kvadrupólmomentumra a kísérlethez közeli értékeket kaptak valószínűleg csak a véletlen műve, és kételyt ébreszt az elektromágneses alakfaktorokra nyert kiváló

eredmények iránt is.

Időközben megvizsgálták a ${}^6\text{Li}$ kvadrupólmomentumának kérdését a [92] preprintben egy olyan modellben amely a [50,82,83] makroszkopikus háromtest-modellek mikroszkopikus kiterjesztésének tekinthető. A kvadrupólmomentum náluk is pozitívnak adódott, azonban mintegy egy nagyságrenddel nagyobbak a mi eredményünkénél. Magyarázatul a szerzők az α -klaszter D -állapotának modellbeli hiányát nevezték meg mint lehetséges hibaforrást.

5.5 Spektroszkópiai faktorok

A $c \equiv c_1 + c_2 \equiv (\tilde{1}\tilde{2}) + \tilde{3}$ kéttest-fragmentáció spektroszkópiai faktora a

$$g_c(\mathbf{r}) = \langle \Psi_{\mathbf{r}}^c | \Psi \rangle \quad (5.14)$$

amplitúdófüggvény normanégyzete:

$$s_c = \int d\mathbf{r} |g_c(\mathbf{r})|^2. \quad (5.15)$$

Az $[(I_1 S_2) I, l_2] J$ csatolási sémában a $\Psi_{\mathbf{r}}^c$ függvényt

$$\Psi_{\mathbf{r}}^c = \mathcal{A} \left\{ \left[[\Phi_{c_1(I_1)} \phi_{c_2(S_2)}]_{I \delta_{l_2}}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}_2) \right]_J \right\} \quad (5.16)$$

definiálja, ahol

$$\delta_{lm}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}) = r^{-2} \delta(r - \rho) Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{\rho}}). \quad (5.17)$$

A c_1 index a (5.8)-beli kvantumszámokat jelöli, $\Phi_{c_1(I_1)}$ pedig

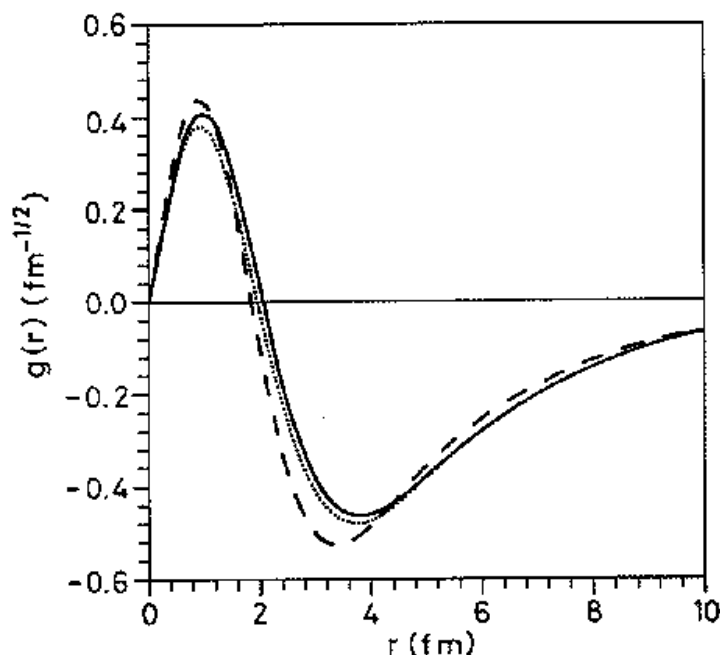
$$\Phi_{c_1(I_1)} = \sum_{\text{mixing}} \mathcal{A} \left\{ \left[\phi_{(\tilde{1}\tilde{2})(S_1)} \tilde{\chi}_{l_1}^{\tilde{1}\tilde{2}}(\boldsymbol{\rho}_1) \right]_{I_1} \right\} \quad (5.18)$$

alakú, ahol az összegzés $\tilde{1} + \tilde{2} = p + n$ esetén az l_1 kvantumszámon, $\tilde{1} + \tilde{2} = \alpha + n$ esetén pedig az α -állapotokon fut végig.

A spektroszkópiai amplitúdó valójában két háromklaszter-állapot fedése. A számítások egyszerűsítése érdekében célszerű ezt kifejezni a GCM normalási kernel elemeivel. Ez azonban a (5.16)-beli delta-függvény miatt nem triviális feladat. Az általunk használt módszer, amit Lovas Rezső dolgozott ki, a B Függelékben található.

Az $\alpha + d$ és ${}^5\text{He} + p$ spektroszkópiai faktorokat számoltuk ki. Az eredmények a 10. táblázatban találhatók.

A [56]-beli $\alpha + d$ spektroszkópiai faktor 0%-os illetve 4%-os deuteron D -állapotú keverés esetén 0.632 illetve 0.654. Az előbbi értéket a Pauli-korrektciók 0.847-re módosítják [48]. Egy hasonló korrekció a 4%-os modell esetén 0.87 körüli értéket eredményezne. Ez az érték jó összhangban van a mostani becslésünkkel, ami 0.883. A korábbi mikroszkopikus klasztermodellbeli számításokból adódó legvalószínűbb eredmény 0.93 volt [2,40,59,62]. Az ettől való mostani eltérés legfőbb oka bizonyára az, hogy mind a ${}^6\text{Li}$, mind a szabad d klaszter nagyobb a kelleténél. Emiatt egyrészt a ${}^6\text{Li}$ hullámfüggvénye térben kiterjedtebb,



8. ábra: Az $\alpha + d$ spektroszkópiai amplitúdók (a jelölések magyarázatát lásd a szövegben).

ami csökkenti a ${}^6\text{Li}$ és a kéttest-alrendszer hullámfüggvényének a fedését. Másrészt a nagyobb méretű szabad d klaszter a ${}^6\text{Li}$ -on belül erősebben összehúzódik [40], ami szintén csökkenti a spektroszkópiai amplitúdót. Ez utóbbi effektus hatásának tesztelésére az erőparaméterek kismértékű módosításával egy 2.138 fm RMS-sugarú (és -2.230 MeV energiájú, 4.1% D -állapotot tartalmazó, valamint $0.28 e \text{ fm}^2$ kvadrupólmomentumú) deuteronot konstruáltunk. Az ezzel számolt spektroszkópiai amplitúdó $s^{d\alpha}=0.901$ -et eredményezett.

Ezen két értékhez tartozó amplitúdófüggvényeket a 8. ábrán hasonlítottuk össze a [40]-beli függvénnyel (folytonos vonal: a 3. táblázatbeli 1) paraméterekkel számolva; pontozott vonal: a fent említett módosított erővel számolva; szaggatott vonal: [40]-beli függvény). Úgy tűnik, hogy a nódus helyzete a klaszterek méretétől függ. Például a pontozott vonal (a jelenlegi ${}^6\text{Li}$ számolás a jó méretű deuteronnal) nódusa kifelé tolódott el a [40]-ból vett szaggatott vonalhoz képest a jelenlegi modell túl nagy α -sugara miatt. Mint említettük a $l_{pn} = l_{d\alpha} = 0$ modellben a $d + t$ küszöb alatti ${}^5\text{He}+p$ spektroszkópiai faktor mintegy kétszeresen felülmúlja a kísérleti értéket.

Ebben a tartományban az $\alpha + n$ végállapot $P_{3/2}$ és $P_{1/2}$ parciális hullámú komponense dominál, így a $(S_{\alpha n}, l_{\alpha n})I_{\alpha n} = (\frac{1}{2}, 1)_{\frac{3}{2}}$ és $(\frac{1}{2}, 1)_{\frac{1}{2}}$ kvantumszámokhoz tartozó spektroszkópiai faktorokat számoltuk ki.

A ${}^5\text{He}$ $\frac{3}{2}^-$ és $\frac{1}{2}^-$ állapotainak leírására a 3. táblázatbeli 2) illetve 3) paramétereket használtuk. Mivel ezek bomló állapotok, leírásukra a pseudo-kötöttállapot közelítést [62] használtuk, ami azt jelenti, hogy négyzetesen integrálható függvényekkel közelítettük a pozitív energiához tartozó szórási állapot hullámfüggvényének egy szakaszát (lásd 2.4. fejezet). Az energiákat a bázis hatósugarának finom "hangolásával" a $\frac{3}{2}^-$ és $\frac{1}{2}^-$ rezonan-

Modell	$s_{[(10)1,0]1}^{d\alpha}$	$s_{[(3/2,1/2)1,1]1}^{5\text{Hep}} + s_{[(3/2,1/2)2,1]1}^{5\text{Hep}}$	$s_{[(1/2,1/2)0,1]1}^{5\text{Hep}} + s_{[(1/2,1/2)1,1]1}^{5\text{Hep}}$
$(pn) + \alpha, l_1 = l_2 = 0^a$	0.930	0.436	0.283
$(pn) + \alpha, l_1 = l_2 = 0^b$	0.930	0.415	0.280
$\alpha + p + n^c$	0.883	0.044+0.456=0.500	0.113+0.241=0.354
$\alpha + p + n^d$		0.015+0.406=0.421	0.093+0.337=0.430

^aEltolt Gauss-bázison számolva a [40,62]-beli erőkkal.

^bTemperált Gauss-bázison számolva a [40]-beli erővel.

^cA 3. táblázatbeli 2) erőparaméterekkel számolva.

^dA 3. táblázatbeli mesterséges 4) paraméterekkel számolva.

10. táblázat: A ${}^6\text{Li}$ -beli $s_{[(I_1 S_2)I, l_2]J}^{(\bar{1}2)\bar{3}}$ fragmentációk spektroszkópiai faktorai.

ciaenergiákhoz állítottuk be. Az így számolt spektroszkópiai faktorok csak az adott rezonancia járulékát tartalmazzák, így valamivel kisebbek, mint az energiafüggő úgynevezett differenciális spektroszkópiai faktor teljes energiára való integrálja. Arra azonban mindenképpen alkalmasak, hogy eldöntsük, vajon a ${}^6\text{Li}$ -ba bevett új komponensek csökkentik-e a spektroszkópiai faktor értékét, mint azt [62]-ben feltételezték.

Megismételtük a [62]-beli számolást az ottani paraméterekkel. Az eredményül kapott érték (2. sor a 10. táblázatban) valamelyest eltér a [62]-belitől (1. sor). Ennek oka egyrészt az, hogy a pszeudo-kötöttállapot közelítés hullámfüggvényének aszimptotikus viselkedése függ a bázistól, másrészt [62]-ben ez az energiatartomány $\{\alpha + n, d + t\}$ csatolt állapottal volt leírva. A 3. sorban a jelenlegi modell eredményei láthatók. A spektroszkópiai faktorok értékei nemhogy csökkentek volna, hanem kissé még nőttek is. Így tehát a [62]-beli feltételezés téves volt.

Az 5.3. fejezetben azt találtuk, hogy modellünk és a [84,85,87] makroszkopikus modellek közti egyetlen lényeges eltérés a $(S, L) = (0, 1)$ komponens súlyában van. A [62]-beli cikkben feltételezték, hogy a ${}^5\text{He}+p$ spektroszkópiai faktorban lényeges szerepet játszik ez a komponens. Érdeemes megvizsgálni, hogy vajon a makroszkopikus modellek kísérlethez közelebbi eredménye nem ennek a komponensnek a rossz kezeléséből származik-e. A 10. táblázat utolsó sora egy olyan számolás eredménye, ahol az erőparaméterek megválasztásával mesterségesen megnöveltük a $(S, L) = (0, 1)$ komponens súlyát. Mint látható az egyes parciális hullámokhoz tartozó spektroszkópiai faktorok kissé megváltoztak, az összegük azonban gyakorlatilag ugyanaz maradt (0.500+0.354=0.854-ről 0.421+0.430=0.851-re változott).

Összefoglalásul tehát elmondhatjuk, hogy a hullámfüggvénybe bevett újabb komponensek nem csökkentették le a ${}^5\text{He}+p$ spektroszkópiai faktor értékét. Így a makroszkopikus modellektől, valamint a kísérletektől való eltérés okát valami másban kell keresnünk, olyasmiben, ami közös a régi [62] és az új modellben.

5.6 Következtetések

A mikroszkopikus dinamikai klasztermodellt alkalmaztuk az egyik legtökéletesebb háromklaszter-rendszerre. Célunk kettős volt. Egyrészt a modelltér bővítésével meg akar-

tuk szüntetni a ${}^5\text{He}+p$ spektroszkópiai faktorában a különböző leírásokban jelentkező ellentmondást, másrészt látni akartuk a mikroszkopikus többklaszter leírás korlátait. Az eredmények alapján úgy tűnik, hogy az utóbbi célt sikerült elérni.

A klasztermodell szellemének megfelelően modellünkben a klaszterek belső állapotát egyrészezske-állapotokból építettük fel. A nem centrális erők bevétele és a klaszterek közötti relatív mozgás állapotterének kibővítése lehetővé teszi, hogy a háromklaszter-dinamikát a háromtest-modellek szigorával kezeljük. Olyan kölcsönhatást konstruáltunk, amely többé-kevésbé jól leírja az alrendszeret, majd ezt a kölcsönhatást használtuk a háromklaszter-modellben. Az alrendszerek leírása most kevésbé tökéletes, mint az egyszerűbb centrális erő esetén, mivel a $p + n$ rendszer realiztikusabb kezelése mellett az α -részezske leírása továbbra is 0s Slater-determinánsokkal történt. Ennek ellenére az alrendszerekhez optimalizált erőt csak kis mértékben kellett módosítanunk, hogy a ${}^6\text{Li}$ energiáját megkapjuk.

Rámutatunk arra, hogy a ${}^6\text{Li}$ alapállapotában fontos szerepet játszik a $t + \tau$ klaszterizáció. Ennek a komponensnek a bevétele egy gyakorlatilag teljes $\{\alpha + p + n\}$ modellbe mintegy 20%-kal megnövelte a kétnukleon szeparációs-energiát.

Modellünkben a ${}^6\text{Li}$ kissé nagyobb méretű a kelletténél, a kvadrupólmomentuma pedig, noha kicsi, hibás előjelű. Így a kvadrupólmomentum [61]-beli reprodukálása egy néhány klaszterizációt tartalmazó modellben mindenképpen ellenőrző számításokat igényel egy nagyobb állapotterén.

Jelenlegi modellünk sem tudta a ${}^5\text{He}+p$ spektroszkópiai faktorának értékét helyrehozni, azonban segítségével megmutattuk, hogy a probléma nem a relatív mozgási tér csonkításából, vagy egyes impulzusmomentum-komponensek elhanyagolásából ered. A probléma okát jelenleg a következőben látjuk. Ki lehet mutatni, hogy a ${}^6\text{Li}$ -ből történő protonkiütés spektroszkópiai faktorára egy összszabály érvényes [62], ami szerint a ${}^6\text{Li}$ tetszőleges állapotából tetszőleges ${}^5\text{He}$ -végállapotba való átmenetek spektroszkópiai faktorainak összege 3. Ez az összszabály ráadásul modelltől független, csak kvantummechanikai alapokat tételez fel. Az a tény, hogy a modellünk által számított érték a $d + t$ küszöb alatti $\alpha + n$ energiáknál nagyobb a kísérleti eredménynél, azt a következményt vonja maga után, hogy nagyobb energiáknál a helyzetnek éppen fordítottnak kell lennie. Ilyen módon az elméleti érték viselkedése az “ $\alpha + n$ kontinuum disztorciójaként” interpretálható. Ezen azt értjük, hogy a spektroszkópiai erősség alacsony energiás többletét a nagyobb energiánál meglévő hiánya kompenzálja. A szórási fázis hasonló összenyomódási effektusát figyelhetjük meg a 6. ábrán. (A szórási fázis nulla és végtelen közötti változását a fenti összszabályhoz hasonló módon a Levinson-tétel határozza meg.) Ilyen effektus, ha kisebb mértékben is, de a [62] modellben is megfigyelhető volt, ellentétben a [65] makroszkopikus modellel, amelyben nem lép fel. Ezek után nagyon valószínű, hogy a spektroszkópiai faktorbeli diszkrepancia a kölcsönhatásnak ugyanazon hiányosságából ered, amely az $\alpha + n$ fázis hibáját okozza.

A klaszteralrendszereket jól leíró kölcsönhatásra erős megszorítást jelent az, hogy a kölcsönhatás szoros kapcsolatban áll a klaszterek belső állapotát leíró állapottérrel. Például, mint emítettük, az 3S_1 állapotú deuteron teljesen más erő képes jól leírni, mint a csatolt ${}^3S_1 - {}^3D_1$ állapotút. A makroszkopikus modellekre, lévén, hogy nincs belső állapot, ilyen megszorítás nincs. Éppen ezért könnyebben tudják reprodukálni a szórási fázisokat.

A mikroszkopikus modellekben bonyolultabb függvényalakú kölcsönhatás valószínűleg javítana a helyzeten, az igazi megoldás azonban a klaszterek belső állapotának realisztikusabb leírása lenne. Ehhez a Slater-determinánsos megközelítést fel kellene adnunk, ami tovább bonyolítaná a már egyébként is meglehetősen nehéz számításokat.

A $(pn)\alpha$ partícióon kívüli komponensek bevételeivel teszteltük a mikroszkopikus és a makroszkopikus [50,82,83] modellek által egyaránt használt $(pn)\alpha$ modellek alkalmasságát. Úgy találtuk, hogy a $(\alpha n)p$ és $(\alpha p)n$ komponensek szolgáltatva állapotér-bővítést a ${}^6\text{Li}$ alapállapota csak kis mértékben használja ki, ami igazolja a tiszta $(pn)\alpha$ bázisok használatának jogosságát.

Az egyetlen jelentős ($\gg 1\%$) $(S, L) \neq (1, 0)$ komponens, amit találtunk az $[S, (l_{pn}l_{d\alpha})L] = [1, (20)2]$. Ez ellentmond néhány makroszkopikus modell eredményének, amelyek a $(S, L) = (0, 1)$ komponensre 3–5% körüli értéket adnak [84,85,87]. Úgy véljük, hogy ezekben a munkákban a nukleon-nukleon relatív mozgás singlet-odd komponensének nem kielégítő kezelése okozza ezen komponens nagy súlyát.

A ${}^6\text{Li}$ mikroszkopikus modelljében a következő lépés az α -részecske belső állapotának realisztikusabb leírása lehet, ami túlmutat az $\alpha + p + n$ képen.

5.A Függelék: A klaszterizáció mértékének számítása

A (5.7) próbafüggvény (5.1) tagjait (5.5)-nek (5.1)-be való helyettesítésével kaphatjuk. Ekkor a próbafüggvény $\nu = \{(12)3; S_\nu, (l_{\nu_1}l_{\nu_2})L_\nu\}$ altérbe eső komponense

$$\Psi_{S_\nu, (l_{\nu_1}l_{\nu_2})L_\nu}^{(12)3} = \sum_{ii'} C_i C_{i'} \psi_{\nu ii'} \quad (5.19)$$

alakban írható, ahol

$$\psi_{\nu ii'} = \mathcal{A} \left\{ \left[\Phi_{\nu(S_\nu)} \left[\Gamma_{i l_{\nu_1}}^{(1)}(\rho_{\nu_1}) \Gamma_{i' l_{\nu_2}}^{(2)}(\rho_{\nu_2}) \right]_{L_\nu} \right]_{JM} \right\}. \quad (5.20)$$

Ily módon minden ν altér a nemortogonális $\{\psi_{\nu ii'}\}$ függvények szerint van kifejtve. Azaz a teljes hullámfüggvény

$$\Psi = \sum_{\nu ii'} F_{\nu ii'} \psi_{\nu ii'} \quad (5.21)$$

alakú. Az $F_{\nu ii'}$ együtthatókat a magszerkezeti számolásból nyerjük.

A 3.3. fejezetben megadtuk a klaszterizáció mértékét a GCM normálási kernelekkel kifejező összefüggést. Ezt általánosíthatjuk többklaszter-rendszerre. Egy μ háromklaszteres konfigurációra a

$$S_\mu = \sum_{\nu\rho} \sum_{ii'jj'kk' ll'} F_{\nu ii'}^* N_{\nu ii'; \mu jj'} [N_{\mu\mu}]_{(jj'); (kk')}^{-1} N_{\mu kk'; \rho ll'} F_{\rho ll'} \quad (5.22)$$

kifejezést nyerjük, ahol

$$N_{\mu ii'; \nu jj'} = \langle \psi_{\mu ii'} | \psi_{\nu jj'} \rangle = \langle \Gamma_{i l_{\mu_1}}^{(1)} \Gamma_{i' l_{\mu_2}}^{(2)} | \hat{A}_{\mu\nu} | \Gamma_{j l_{\nu_1}}^{(1)} \Gamma_{j' l_{\nu_2}}^{(2)} \rangle. \quad (5.23)$$

Itt az $\hat{A}_{\mu\nu}$ integráloperátort a magfüggvénye definiálja:

$$A_{\mu\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = \left\langle \mathcal{A} \left\{ \left[\Phi_{\mu(S_\mu)} [\delta_{l_{\mu_1}}(\mathbf{r}_1 - \boldsymbol{\rho}_{\mu_1}) \delta_{l_{\mu_2}}(\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\rho}_{\mu_2})]_{L_\mu} \right]_J \right\} \right| \\ \times \left| \mathcal{A} \left\{ \left[\Phi_{\nu(S_\nu)} [\delta_{l_{\nu_1}}(\mathbf{r}'_1 - \boldsymbol{\rho}_{\nu_1}) \delta_{l_{\nu_2}}(\mathbf{r}'_2 - \boldsymbol{\rho}_{\nu_2})]_{L_\nu} \right]_J \right\} \right\rangle. \quad (5.24)$$

A $N_{\mu i i'; \nu j j'}$ mátrixelemek éppen a (diszkretizált) GCM normálási kernel elemei, amelyek egy megszerkezeti számítás során rendelkezésre állnak.

5.B Függelék: A spektroszkópiai amplitúdó formulája

A (5.16)-beli $\Psi_{\mathbf{r}}^c$ függvényt a háromklaszter-állapothoz hasonló alakba írhatjuk, ha felhasználjuk (5.18)-at, és újra csatoljuk az impulzusmomentumokat

$$\Psi_{\mathbf{r}}^c = \sum_{\text{mixing}} (-1)^{I_1 - I - S_1} [(2I_1 + 1)(2I + 1)]^{1/2} \sum_{S,L} (-1)^S [(2S + 1)(2L + 1)]^{1/2} \\ \times W(l_1 S_1 I S_2; I_1 S) W(S l_1 J l_2; I L) \mathcal{A} \left\{ \left[\left[\phi_{c_1(S_1)} \phi_{c_2(S_2)} \right]_S [\tilde{\chi}_{l_1}^{\tilde{1}\tilde{2}}(\boldsymbol{\rho}_1) \delta_{l_2}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}_2)]_L \right]_J \right\}, \quad (5.1)$$

ahol W a Racah-együtthatót jelöli. Behelyettesítve ezt (5.14)-be, a következő kifejezést kapjuk:

$$g_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = \sum_{\text{mixing}} (-1)^{I_1 - I - S_1} [(2I_1 + 1)(2I + 1)]^{1/2} \sum_{S,L} (-1)^S [(2S + 1)(2L + 1)]^{1/2} \\ \times W(l_1 S_1 I S_2; I_1 S) W(S l_1 J l_2; I L) \sum_{\nu} \delta_{L\nu L} \delta_{S\nu S} \langle \tilde{\chi}_{l_1}^{\tilde{1}\tilde{2}}, \mathbf{r} | \hat{A}_{\mu\nu} | \chi_{l_{\nu_1}}^{12}, \chi_{l_{\nu_2}}^{(12)3} \rangle, \quad (5.2)$$

ahol a c kétklaszteres tagozódáshoz tartozó μ háromklaszteres fragmentáció $\mu = \{(\tilde{1}\tilde{2})\tilde{3}; S, (l_1 l_2)L\}$ alakú. A (5.2) egyenletben a Dirac-féle jelölést használtuk ahol $|\mathbf{r}\rangle$ a második változó térbeli koordinátájához tartozó absztrakt vektor.

A (5.2) összeg egy tagja, illetve a hozzá tartozó spektroszkópiai faktor, a lényegtelen indexeket elhagyva,

$$g(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \chi \rangle, \quad (5.3)$$

$$s = \int d\mathbf{r} \langle \chi | \hat{A} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{A}^2 | \chi \rangle \quad (5.4)$$

alakban írható ($\hat{A} = \langle \tilde{\chi}_{l_1}^{\tilde{1}\tilde{2}} | \hat{A}_{\mu\nu} | \chi_{l_{\nu_1}}^{12} \rangle$ stb.) Feladatunk ezek után az, hogy, ezeket a mennyiségeket a $\langle \tilde{\Gamma}_i | \hat{A} | \tilde{\Gamma}_j \rangle$ tagokkal kifejezzük (itt $\tilde{\Gamma}_i$ és $\tilde{\Gamma}_j$ temperált Gauss-függvények).

Oldjuk meg a $\langle \tilde{\Gamma}_i | \tilde{\Gamma}_j \rangle$ pozitív definit mátrix

$$\sum_j \langle \tilde{\Gamma}_k | \tilde{\Gamma}_j \rangle c_j^{(i)} = a_i c_k^{(i)} \quad (5.5)$$

sajátértékegyenletét. A sajátvektorok

$$\sum_k c_k^{(i)*} c_k^{(j)} = \delta_{ij}, \quad (5.6)$$

ortonormáltsága miatt az

$$|i\rangle = a_i^{-1/2} \sum_j c_j^{(i)} |\tilde{\Gamma}_j\rangle \quad (5.7)$$

egyrészesekés állapotvektorok szintén ortonormált rendszert alkotnak. Ha a $\{\tilde{\Gamma}_j\}$ bázist úgy választjuk meg, hogy kellőképpen lefedje a fizikailag érdekes térbeli tartományt, akkor $\{|i\rangle\}$ úgy tekinthető mint egy közel teljes ortonormált rendszer, tehát

$$1 \approx \sum_i |i\rangle\langle i| = \sum_i a_i^{-1} \sum_{jk} c_j^{(i)} |\tilde{\Gamma}_j\rangle \langle \tilde{\Gamma}_k| c_k^{(i)*}. \quad (5.8)$$

Behelyettesítve ezt (5.3)-be \hat{A} elé és (5.4)-ba a két \hat{A} operátor közé, az alábbi kifejezéseket nyerhetjük:

$$g(\mathbf{r}) \approx \sum_{ijkl} a_i^{-1} c_j^{(i)} \tilde{\Gamma}_j(\mathbf{r}) c_k^{(i)*} \langle \tilde{\Gamma}_k | \hat{A} | \Gamma_l \rangle F_l = \sum_{ijkl} a_i^{-1} c_j^{(i)} \tilde{\Gamma}_j(\mathbf{r}) c_k^{(i)*} N_{kl} F_l, \quad (5.9)$$

$$s \approx \sum_{ijklm} F_i^* \langle \Gamma_i | \hat{A} | \tilde{\Gamma}_k \rangle c_k^{(j)} a_j^{-1} c_l^{(j)*} \langle \tilde{\Gamma}_l | \hat{A} | \Gamma_m \rangle F_m = \sum_{ijklm} F_i^* (N^\dagger)_{ik} c_k^{(j)} a_j^{-1} c_l^{(j)*} N_{lm} F_m, \quad (5.10)$$

ahol $|\chi\rangle = \sum_i F_i |\Gamma_i\rangle$ és $N_{ij} = \langle \tilde{\Gamma}_i | \hat{A} | \Gamma_j \rangle$. A $\{\tilde{\Gamma}_i\}$ és $\{\Gamma_j\}$ bázisokat célszerű a magszerkezeti számolásban a μ illetve ν komponensben használt $\{\Gamma_{i\mu}^{(2)}\}$ illetve $\{\Gamma_{j\nu}^{(2)}\}$ bázissal azonosnak választani. Ekkor az N_{ij} mátrix és az F_i együtthatók éppen $N_{\mu i' \nu j' j'}$ -nel illetve $F_{\nu i i'}$ -el egyeznek meg. Így a magszerkezeti számolás eredményei mellett csak a (5.5) sajátértékprobléma megoldására van szükségünk.

6. fejezet

A $d(t, n)\alpha$ magreakció polológiai vizsgálata

A 2. fejezetben említettük, hogy a szóráselméletben elfogadott vélemény szerint a szórási mátrixnak mint a többlevelű Riemann-felületen értelmezett függvénynek azok a pólusai okoznak kísérletileg mérhető effektusokat, amelyek a fizikai síkhoz legközelebbi Riemann-síkon fekszenek. Jelenleg két olyan eset ismeretes, amelyek gyaníthatóan kivételt jelentenek ezalól, amennyiben a fizikai effektust feltehetően az S -mátrixnak egy árnyékpólusa okozza. Ezek egyike a részecskefizikában ismeretes: az f_0 (975 MeV) rezonancia, amely a $\pi\pi$ és $K\bar{K}$ csatornában gerjesztődik [93]. A másik a ${}^5\text{He}$ $\frac{3}{2}^+$ -os állapotán mint közbenső magon keresztül lezajló $d+t\rightarrow\alpha+n$ termonukleáris reakció. A feltételezett árnyékpólus-szerkezetre mindkét esetben fenomenologikus analízisekből következtettek. Bizonyítéknak azonban csak az volna elfogadható, ha az árnyékpólust a dinamikai feladat megoldásában megtalálnánk, és hatását abban lokalizálnánk. Erre a részecskefizikai példában nem volt mód. A magfizikai példára vonatkozó számításokat mutatjuk be ebben a fejezetben.

6.1 Előzmények

Az asztrofizikai nukleosintézisben és a 14 MeV-es neutrongenerátorok működésében is kulcsszerepet játszik a $d+t\rightarrow\alpha+n$ magreakció. Ez a reakció a két protont és három neutront tartalmazó ötnukleon-rendszeren, a ${}^5\text{He}$ -ön mint közbenső magon megy végbe. A ${}^5\text{He}$ nem stabil képződmény, valamennyi állapotából elbomlik. Számunkra a 16.76 MeV gerjesztési energián lévő nagyon keskeny (mintegy 100 keV szélességű) $\frac{3}{2}^+$ spinparitású rezonanciaállapot az érdekes. Ez az állapot mind a $d+t$, mind az $\alpha+n$ gerjesztési függvényében érezteti hatását, továbbá ez a felelős a $d+t\rightarrow\alpha+n$ reakció nagy hatáskeresztmetszetéért. Mivel ez az állapot tömegközépponti energiában csak mintegy 64 keV-vel van a $d+t$ küszöb fölött (ez a deuteron bombázó energiában mintegy 107 keV-nek felel meg) a $d+t$ szórásban legnagyobb valószínűséggel az $L=0$ relatív impulzusmomentumú parciális hullám gerjesztődik. Ekkor $[L, (S_d, S_t)S]J = [0, (1, \frac{1}{2})\frac{3}{2}]^{\frac{3}{2}}$. Kis valószínűséggel a $[2, (1, \frac{1}{2})\frac{3}{2}]^{\frac{3}{2}}$ és a $[2, (1, \frac{1}{2})\frac{1}{2}]^{\frac{3}{2}}$ állapotok is szerepet játszhatnak a $d+t$ konfigurációban. A továbbiakban ezekre az állapotokra az ${}^4S(d)$, ${}^4D(d)$, ${}^2D(d)$ spektroszkópiai jelöléssel is fogunk hivatkozni. Hogy milyen ezeknek a komponenseknek a

hatása, az maga is fontos kérdés. Az $\alpha+n$ csatornában $\frac{3}{2}^+$ állapotot csak $[L, (S_\alpha, S_n)S]J = [2, (0, \frac{1}{2})\frac{1}{2}]^{\frac{3}{2}}$ (${}^2D(n)$) konfiguráció adhat. Ezek után fölöttébb meglepő a $d+t \rightarrow \alpha+n$ reakció nagy hatáskeresztmetszete, mivel az ehhez legnagyobb járulékot adó $d+t$ -beli $L=0$ parciális hullámot az $\alpha+n$ -beli $L=2$ végállapottal csak a nukleon-nukleon kölcsönhatás gyenge, tenzoriális része köti össze.

A fenti reakció kísérletileg is alaposan tanulmányozott folyamat. Az E_d laboratóriumi energia 8-250 keV tartományában (ez a tömegközépponti rendszerben 4.8-150 keV tartományt jelent) vannak igen pontos mérések, elsősorban a Los Alamosi Ionnyaláb Berendezésnek köszönhetően (lásd pl. [94]). A mérések célja egyrészt a hatáskeresztmetszeti adatok minél pontosabbá tétele, másrészt ezeket az adatokat felhasználva a reakció forró plazmabeli viselkedésének jobb megértése, a jövő fúziós reaktorai számára. Ezek a kérdések legkönyebben az

$$S(E_d) = E_d \sigma(E_d) \exp(2\pi\eta(E_d)) \quad (6.1)$$

asztrfizikai S-faktor bevezetésével tanulmányozhatók. Itt E_d a deuteron bombázó energiája, σ a teljes reakció-hatáskeresztmetszet, η pedig a Sommerfeld-paraméter:

$$\eta = \frac{\mu Z_A Z_B e^2}{k_d \hbar^2}, \quad (6.2)$$

ahol μ a redukált tömeg, e az elemi töltés, k_d pedig az E_d energiához tartozó hullámszám. Az (6.1) S-faktort a Breit-Wigner-rezonanciaformával illesztve a rezonancia helye és szélessége kiolvasható. Másrészt, S segítségével egy egyensúlyi Maxwell-Boltzmann-plazma reaktivitása a hőmérséklet függvényében megadható [94]. Az S-faktor alacsony energiás viselkedése asztrfizikai szempontból is fontos, a nulla energiára extrapolált értéke kapcsolatos a Nap neutrínofluxusának máig megoldatlan problémájával. Nagyon alacsony energián (~ 10 keV alatt) az elektronárnyékolási folyamatok meghamisítják a kísérleti eredményeket, a valódi S-faktor árnyékolási korrekciók segítségével kapható meg [95].

Több száz kísérlet adatainak R-mátrix elemzésével úgy találták, hogy a reakció hatáskeresztmetszete egyetlen Breit-Wigner-alakkal igen jól leírható [54]. Valójában azonban a rezonanciaparaméterek meghatározása egy bonyolult R-mátrix illesztésből nem könnyű feladat, igazán megbízható paramétereket csak az S-mátrix pólusszerkezetének felderítésével kaphatunk. A Humblet-Rosenfeld magreakcióelméletben [96] az S-mátrix pólusai és reziduumaik közvetlenül az R-mátrix paramétereiből számolhatók. Ezt felhasználva a [97] cikkben megvizsgálták az S-mátrix pólusszerkezetét egy kétszatornás (${}^2D(n)$, ${}^4S(d)$) és egy négyzatornás (${}^2D(n)$, ${}^4S(d)$, ${}^4D(d)$, ${}^2D(d)$) modellben. A $d+t$ küszöb fölött két pólust találtak, egyet a $[BB]$ síkon (négyzatornás esetben a három $d+t$ csatorna küszöbe megegyezik, így a $d+t$ csatorna karaktere mindhárom csatornára ugyanaz, jelen esetben $[BBBB]$), ami a $d+t$ küszöb fölött a fizikai síkhoz legközelebbi sík, egyet pedig a fizikai síktól távoli $[BT]$ (négyzatornás esetben $[BT]$) síkon (a Riemann-síkok definícióját és jelölését lásd a 2. fejezetben). Ez utóbbi pólus a [20] szóhasználatával élve árnyékpólus. A pólusok pozícióit az 11. táblázat tartalmazza. A [97] munka szerzői eredményüket a következőképpen interpretálták. A $[BB]$ pólus az $\alpha+n$ szórás teljes hatáskeresztmetszetében jelentkező csúcsért felelős. Laboratóriumi rendszerben a 22.124 MeV pozíció és a 74 keV szélesség jó összhangban van az egyik legutóbbi szórás kísérletből kapott [98] 22.133 ± 0.01 MeV és 76 ± 12 keV értékekkel. Az árnyékpólus hatása még

Modell	Konvencionális pólus	Árnyékpólus
2 csatornás	48.10–i37.08	78.94–i8.26
4 csatornás	46.97–i37.10	81.57–i3.64

11. táblázat: Póluspozíciók [97]-ban (keV).

érdekesebb. Noha ez egy valós tengelyhez nagyon közeli pólus, mivel a fizikai síktól távoli síkon található, azt várnánk, hogy nincs hatása mérhető fizikai mennyiségekre. A (2.56) formula alapján azonban a $[BT]$ síkon lévő pólus az S -mátrix S_{11} elemének a fizikai síkon található zérushelyével áll egyértelmű kapcsolatban. Mivel ez az S_{11} -beli zérushely közel fekszik a valós energiatengelyhez, $|S_{11}|$ értéke a pólusenergiához közeli valós energiákon is kicsi lesz. Mivel a fizikai sík valós energiatengelyén S unitér, ez azt eredményezi, hogy az $|S_{12}|^2$ -tel arányos reakcióhatáskeresztmetszet a valós energiának a pólusenergia valós része melletti elhaladása során az elméletileg lehetséges maximális ($|S_{12}|^2$ -nek 1-hez közeli értékéhez tartozó) értéket veszi fel. Azaz a fizikai síktól távoli síkon fekvő pólus felelős a reakció hatáskeresztmetszetében jelentkező csúcsért. Ezekből az eredményekből, továbbá abból, hogy a pólusok mely síkokon fekszenek, [97]-ben arra a következtetésre jutottak, hogy a ${}^5\text{He}$ mag $\frac{3}{2}^+$ -os állapotában az $\alpha + n$ konfiguráció dominál (vö. a (2.58)-nál mondottakkal).

Ez rendkívül meglepő eredmény, ugyanis azt várnánk, hogy az $\alpha + n$ küszöbhez képest ilyen magas gerjesztési energián, a $d + t$ küszöb fölött, az $\alpha + n$ klaszterizáció szerepe jelentéktelenné válik. Mint az előző fejezetben említettük a ${}^6\text{Li}(e, e'p)$ reakció analízise is arra az eredményre vezetett, hogy a ${}^5\text{He}$ végállapotban az $\alpha + n$ klaszterizáció elhagyása a $d + t$ küszöb fölött nagyon jó közelítéssel megtehető.

A [97] cikk eredményei inspirálták [99] szerzőit arra, hogy részletesen megvizsgálják a pólusok és árnyékpólusok észlelhető hatásait csatolt csatornás rendszerekben. Modellpotenciálként egytagú szeparábilis potenciálokat választottak. Egy n -csatornás esetben ez impulzustérben az

$$V_{\alpha\beta}(p, p') = f_{\alpha}(p)\lambda_{\alpha\beta}f_{\beta}(p') \quad \alpha, \beta = 1, 2, \dots, n \quad (6.3)$$

alakot jelenti. Az alakfaktorok Yamaguchi típusúak voltak

$$f_{\alpha}(p) = \frac{p^{l_{\alpha}}}{(1 + p^2/b_{\alpha}^2)^{l_{\alpha}+1}}, \quad (6.4)$$

ahol l_{α} az α csatorna impulzusmomentuma. Ekkor az S -mátrix és az $S_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + 2iT_{\alpha\beta}$ összefüggéssel értelmezett $T_{\alpha\beta}$ átmeneti mátrix egyszerűen számítható. A (6.3) és (6.4)-beli λ és b paraméterek megválasztásával gyakorlatilag tetszőleges póluselhelyezkedések szimulálhatók. Eredményeik közül két, számunkra lényegeset emelünk ki.

Egyrészt rámutattak arra, hogy egy sokcsatornás szórás problémában azt, hogy egy rezonanciaállapotban melyik csatorna a domináns (melyik csatornából származik a rezonancia), csak a zérus csatolási határeset vizsgálatával dönthetjük el. Ez a 2. fejezetben leírtak szellemében azt jelenti, hogy zérus csatolási határesetben meg kell néznünk, hogy a pólusok Riemann-síkokon való elhelyezkedését jellemző karaktorsorozatoknak melyik

csatornához tartozó karaktere B minden pólusra. Ez az a csatorna, ahonnan a rezonancia ered. Növelve a csatolási erősséget, az egyes síkokon lévő pólusok eltolódnak egymáshoz képest, és – mint [99]-ben demonstrálták – a valós energiatengelyt keresztezve síkot is válthatnak. Ilyen módon a reális csatolási erősségek mellett nyerhető póluspozíciók nem biztos, hogy azt a csatornát választják ki, ahonnan a rezonancia valójában ered. Például a fentebb részletezett [97]-beli analízis $[BB]$ és $[BT]$ síkja azt sugallta a szerzőknek, hogy a rezonancia az első $(\alpha + n)$ csatornából ered. Ez azonban csak akkor igaz, ha a csatolási erősségnek a zérus erősségtől a fizikai értékre való növelése során a pólusok nem, vagy páros számszor váltottak Riemann-síkot.

Másrészt megvizsgálták azt, hogy a pólusok elhelyezkedése milyen hatással van a fizikai mennyiségekre, például a fázistolásra. Különböző impulzusmomentumú csatornák csatolásait vizsgálva az alábbi általános tapasztalat szűrhető le. Tegyük fel, hogy egy kétcsatornás esetben zérus csatolás esetén egy pólus és egy árnyékpólus található a $[BB]$ és $[TB]$ síkokon (tehát a rezonancia jelen esetben a második csatornából ered) Változtatva a csatolási erősséget az 9. (a) ábrán látható pólustrajektóriát nyerjük. A valós energiatengelyen lévő rövid függőleges vonalak a csatornaküszöböket jelölik (0 MeV és 1 MeV), zérus csatolási határesetben a pólusok a tömött ponttal jelzett helyen találhatóak. (A 2. fejezetben mondottak értelmében, mivel a pólusok a k síkon a képzetes tengelyre szimmetrikusan helyezkednek el, az E síkon minden pólus a komplex konjugáltjával együtt lép fel.) A 9. (b) és 9. (c) ábrák az első, illetve második csatornabeli elasztikus szórási fázisokat mutatják. Megfigyelhető, és általános szabályként is kimondható, hogy adott csatolási erősségnél abban a csatornában, amelynek karaktere a fő és az árnyékpólus esetén megegyezik, a fázistolás a 90° -on áthajló közel 180° -ot növekvő görbe. Abban a csatornában pedig, amelyben a pólusok karaktere különböző, a fázistolás a 0° körül marad, és növekvő, valamint csökkenő szakaszt egyaránt tartalmaz.

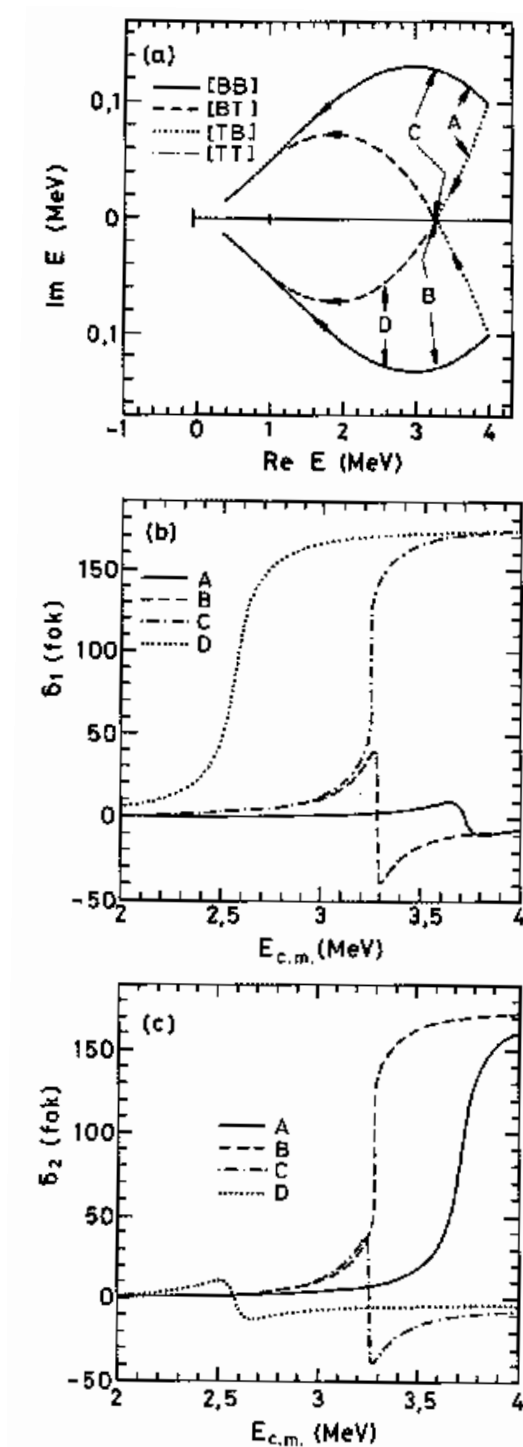
A szórási fázisoknak ezt a viselkedését kvalitatíve könnyen megérthetjük. Tegyük fel ugyanis, hogy egy egycsatornás problémában a k síkon a valós k tengelyhez közel van egy $\bar{k} = \kappa - i\gamma$ pólus. Ez azt jelenti, hogy az $F(k)$ Jost-függvénynek \bar{k} -ban zérushelye van, ezért a valós k tengelyen jól közelíthető egy

$$F(k) \approx \left. \frac{dF}{dk} \right|_{\bar{k}} (k - \bar{k}) \quad (6.5)$$

alakkal. Mivel (2.34) és (2.28) alapján a δ fázistolás nem más, mint $F(k)$ negatív fázisa, felírható

$$\delta(k) = -\arg \left(\left. \frac{dF}{dk} \right|_{\bar{k}} \right) - \arg(k - \bar{k}) = \delta_{bg} + \delta_{res}(k) \quad (6.6)$$

alakban, ahol δ_{bg} a háttér-, míg δ_{res} a rezonanciafázis. Ekkor mivel $\bar{k} = \kappa - i\gamma$ ($\kappa, \gamma > 0$), ha k elhalad κ mellett, a δ_{res} fázis közel 180° -ot nő. Ha $\bar{k} = \kappa + i\gamma$ ($\kappa, \gamma > 0$), akkor a rezonanciafázis közel 180° -ot csökken. Visszatérve a kétcsatornás esetre a 9. (a) ábra D pontjának megfelelő helyen az első csatornában a fő pólus (M) és az árnyékpólus (S) a $k_1^M = \kappa_1^M - i\gamma_1^M$ ($\kappa_1^M, \gamma_1^M > 0$), illetve a $k_1^S = \kappa_1^S - i\gamma_1^S$ ($\kappa_1^S, \gamma_1^S > 0$) helyen található. Ez a fentiek szellemében egy növekvő fázistoláshoz vezet. A második csatornában a két pólus a $k_2^M = \kappa_2^M - i\gamma_2^M$ ($\kappa_2^M, \gamma_2^M > 0$), illetve a $k_2^S = \kappa_2^S + i\gamma_2^S$ ($\kappa_2^S, \gamma_2^S > 0$) helyen található (ez utóbbi a $-\kappa_2^S - i\gamma_2^S$ pólusnak a képzetes k tengelyre vonatkozó tükröképe). Ezek



9. ábra: Pólusok és árnyékpólusok hatása a szórési fázisokra (a jelölések magyarázatát lásd a szövegben).

együtt egy növekvő és csökkenő szakaszt egyaránt tartalmazó fázistolást eredményeznek. A pólusok elhelyezkedésének és az elasztikus fázisoknak ez a kapcsolata lehetőséget ad arra, hogy a szórési fázisokból a pólusok várható elhelyezkedésére következtessünk.

A [99] cikk fő tanulsága az volt, hogy csak akkor érthetjük meg a $d+t \rightarrow \alpha+n$ reakció valódi természetét, ha a problémát zérus csatolási határesetben vizsgáljuk. Ez csak elméleti módszerekkel tehető meg, ugyanis a valóságban a csatornacsatolások nem kapcsolhatók ki. Ezidáig két cikkben vizsgálták a problémát, azonban mindkettő csak fenomenologikus szintig jutott el.

A [100] cikkben a kísérleti asztrofizikai S-faktorhoz való illesztés paramétereiből egy effektív hatótávolságú közelítésben (effective range approximation) meghatározták az S -mátrix pólusait. A csatornacsatolást egy abszorpciós paraméter bevételel vették figyelembe. Azt találták, hogy ezen paramétert változtatva a nulla értéktől (zérus csatolási határeset) a fizikai esetet megvalósító értékig, a fő és az árnyékpólus mindvégig a $[BB]$ illetve $[TB]$ síkon marad. A kísérlethez illesztett abszorpciós paraméterértéknél a fő pólus $E_M = (47 - i36)$ keV míg az árnyékpólus $E_S = (77 - i14)$ keV energián volt található. Utóbbi [97]-tel ellentétben a $[TB]$ síkon.

A [101] cikkben az úgynevezett rezonanciacsatolós modellt (RCCM) használták. Ez sok tekintetben hasonló a [99] által használt szeparábilis potenciálos módszerhez, de elveiben sokkal megalapozatlanabb annál. Szerzői szerint az RCCM a reakció jellemzőit a csatornacsatolástól különválasztva kezeli. Ezzel összhangban a Hamilton-operátort

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & 0 & V_1 \\ 0 & H_2 & V_2 \\ V_1^\dagger & V_2^\dagger & H_3 \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

alakban veszi fel, ahol H_1 és H_2 az egyes csatornákon belüli szabad mozgást (!) leíró Hamilton-operátorok, H_3 az ötnukleon-rendszer rezonanciájának (bare resonance) Hamilton-operátora:

$$H_3 = E_b | b \rangle \langle b |, \quad (6.8)$$

míg V_1 és V_2 az $\alpha + n$ illetve $d + t$ csatornáknak a ${}^5\text{He}^*$ rezonanciaállapotához való csatolását írják le. A (6.7) Hamilton-operátor nyilván valamiféle kétlépcsős folyamatot akarna modellezni, de megítélésünk szerint az a feltételezés, hogy a két (egyébként szabad mozgást leíró) csatorna közvetlenül nem, csak a ${}^5\text{He}^*$ állapoton keresztül van összekötve, fogalmilag rendkívül zavaró (például, ha $V_1 = V_2 = 0$ -t tételezünk fel, az egyes csatornáknak egyáltalán nem a valódi fizikai $\alpha + n$ illetve $d + t$ állapotok vannak jelen, mivel H_1 és H_2 a szabad mozgás Hamilton-operátorai, így rezonanciaállapotok nem is lehetnek jelen). A modell paramétereit a $d + t$ szórás amplitudóhoz, az asztrofizikai S-faktorhoz és a 90° -nál mért $d + t$ szórás és a tiszta Coulomb-szórás differenciális szórás hatáskeresztmetszeteinek arányához illesztették. Eredményül azt kapták, hogy a fő pólus a $[BB]$ síkon $E_M = (47 - i37)$ keV energiánál, az árnyékpólus pedig a $[BT]$ síkon $E_S = (82 - i3.4)$ keV energiánál található. A csatolási erősséget csökkentve az árnyékpólus síkot vált és átkerül a $[TB]$ síkra. Zérus csatolásnál a két pólus $E_0 = (61 - i19)$ keV energián található a $[BB]$ és $[TB]$ síkokon. Ez azt jelenti, hogy a ${}^5\text{He} \frac{3}{2}^+$ állapota a $d + t$ csatornából ered. Az, hogy a számítás az R-mátrix-analízisből nyert rezonanciaparamétereket ilyen pontosan reprodukálja nem meglepő, hiszen a modell a valódi folyamat dinamikájából gyakorlatilag semmit sem tartalmaz, s így egyszerűségénél fogva könnyen illeszthető a kísérleti adatokhoz. Ezen túlmenően az illesztés ugyanazzal az adathalmazzal történt, mint [97]-ben.

Noha a fenti fenomenologikus modellek a probléma sok részletét tisztázták, nem adtak választ néhány fontos kérdésre. Például, hogy megjelenik-e az árnyékpólus az ötnukleon-problémának egy mikroszkopikus dinamikai leírásában, illetve, hogy mi a szerepe a ${}^4D(d)$ és ${}^2D(d)$ csatornáknak. További érdekes kérdés, hogy vajon összhangban vannak-e a mért $d + t$ és $\alpha + n$ szórási fázisok a pólusok elhelyezkedésével. Mindezeket a kérdéseket egy csatolt csatornás mikroszkopikus dinamikai klasztermodell keretében vizsgáltuk meg.

6.2 A használt kölcsönhatás

Mint az előzőekben már többször hangsúlyoztuk, a mikroszkopikus klasztermodell az effektív nukleon-nukleon kölcsönhatás paramétereit az adott altéren figyelembe veendő klaszteralrendszerek tulajdonságaihoz való illesztésből nyeri. A kölcsönhatás konstruálása során különböző szempontokat vehetünk figyelembe. Ha fontos, hogy a klaszterek energiáját (és ezzel a szeparációs energiákat) pontosan reprodukáljuk (például fragmentációs vagy elektromágneses mennyiségek számítása során), akkor a szórási adatokhoz való illesztésben kisebb pontossággal is megelégedhetünk. Ha viszont a szórási fázisok a fontosak, akkor megeshet, hogy a térfogati tulajdonságokat nem tudjuk kellő pontossággal reprodukálni. Mint az előző fejezetben rámutattunk, rövidtávú nukleon-nukleon antikorrrelációt nem tartalmazó leírás esetén valószínűleg nem lehet olyan kölcsönhatást konstruálni, amely mind a térfogati, mind a szórási adatokat pontosan visszaadná. Mivel most egy magreakciót szóráselméleti keretek között akarunk leírni, nyilvánvalóan a szórási adatokat pontosan reprodukáló potenciálok közül kell választanunk. A Tang és munkatársai által használt centrális, úgynevezett minnesotai kölcsönhatást [102] széleskörben használják. Ez a kölcsönhatás lehetővé teszi a képlékeny deuteronklaszter torzulásait figyelembe venni képes lélegző modell használatát. A minnesotai kölcsönhatás

$$V_{ij} = \left[\frac{1}{2}(1 + P_{ij}^\sigma)V_{ij}^t + \frac{1}{2}(1 - P_{ij}^\sigma)V_{ij}^s \right] \left[\frac{1}{2}u + \frac{1}{2}(2 - u)P_{ij}^r \right] + V_{\text{Coul}} \quad (6.9)$$

alakú, ahol P_{ij}^σ és P_{ij}^r a spin-, illetve térkicserélő operátor, u a kicserélődési paraméter, a V_{ij}^t tripllett és V_{ij}^s szingulett potenciálok pedig Gauss alakúak

$$V_{ij}^t = -V_0^t \exp(-r_{ij}^2/a_t^2), \quad (6.10)$$

$$V_{ij}^s = -V_0^s \exp(-r_{ij}^2/a_s^2). \quad (6.11)$$

A (6.9) alak átírható a következő formára

$$V_{ij} = (W_t + M_t P_{ij}^r + B_t P_{ij}^\sigma - H_t P_{ij}^r)V_{ij}^t + (W_s + M_s P_{ij}^r + B_s P_{ij}^\sigma - H_s P_{ij}^r)V_{ij}^s, \quad (6.12)$$

ahol

$$W_t = \frac{1}{4}u, \quad M_t = \frac{1}{4}(2 - u), \quad B_t = \frac{1}{4}u, \quad H_t = \frac{1}{4}(2 - u), \quad (6.13)$$

$$W_s = \frac{1}{4}u, \quad M_s = \frac{1}{4}(2 - u), \quad B_s = -\frac{1}{4}u, \quad H_s = -\frac{1}{4}(2 - u). \quad (6.14)$$

Mint az előző fejezetben említettük, a szabad klaszterek energiája csak a $W + M$, illetve a deuteron esetén, a $W + M + B + H$ kombinációtól függ. A (6.12)-(6.14) összefüggésekből nyilvánvaló, hogy a szabad klaszterek energiája nem függ u -tól. A (6.10)-(6.11)-beli konstansokat az effektív kétnukleon hatótávolság-paramétereikhez illesztve [102]-ban az

$$V_0^t = 66.92 \text{ MeV}, \quad a_t = 1.552 \text{ fm} \quad (6.15)$$

$$V_0^s = 29.05 \text{ MeV}, \quad a_s = 1.851 \text{ fm} \quad (6.16)$$

értékeket kapták.

Az egyes klasztereket egy-egy méretparaméterrel írjuk le, kivéve az egyébként tiszta 3S_1 állapotú deuteron, amelyet 3 paraméterrel. Ezeket a klaszterek belső Hamilton-operátorainak diagonalizálásával kapjuk (energiában optimalizált paraméterek). Ezek az α , t , τ (${}^3\text{He}$) és d esetén rendre

$$\beta_\alpha = 0.514 \text{ fm}^{-2}, \quad (6.17)$$

$$\beta_t = 0.378 \text{ fm}^{-2}, \quad (6.18)$$

$$\beta_\tau = 0.367 \text{ fm}^{-2}, \quad (6.19)$$

$$\beta_d^1 = 0.07284 \text{ fm}^{-2}, \quad \beta_d^2 = 0.3657 \text{ fm}^{-2}, \quad \beta_d^3 = 1.4696 \text{ fm}^{-2}. \quad (6.20)$$

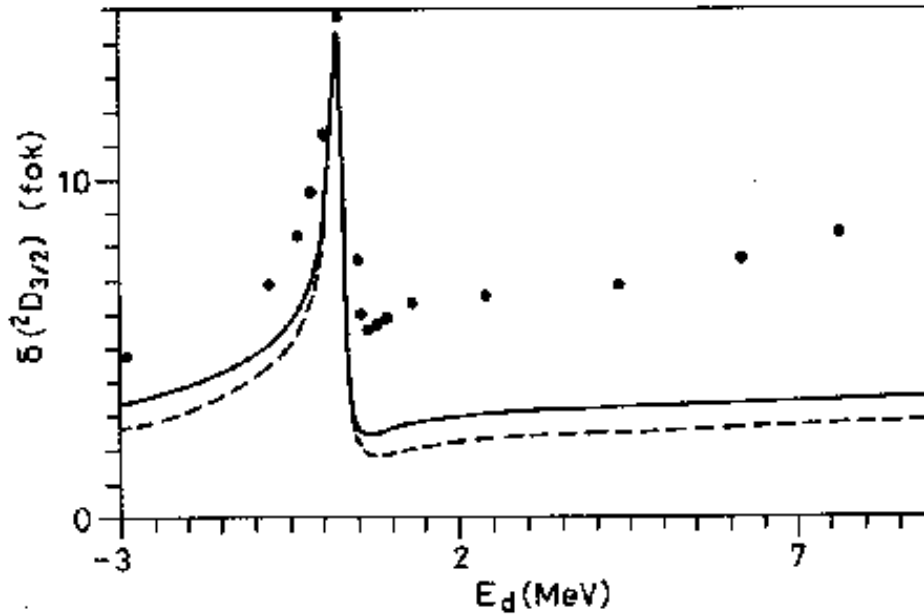
Az ezekhez tartozó energiák -26.61 MeV, -4.79 MeV, -3.96 MeV és -2.20 MeV, szemben a kísérleti -28.3 MeV, -8.48 MeV, -7.72 MeV és -2.22 MeV értékekkel. Mint látjuk, jelentősek az eltérések, azonban a szórási fázis kevésbé érzékeny a szeparációs energiákra. Az energiáknak a kísérleti értékektől való eltérése a csatornaküszöbök egymástól való távolságát fogja eltolni, például $E_{d+\tau} - E_{\alpha+p} = 20.45$ MeV szemben a kísérleti értékkel, ami 18.35 MeV. Hogy ezt az eltolódást kiküszöböljük, az energiákat mindig a megfelelő csatornaküszöbtől fogjuk mérni. Például az előbbi esetben a $d + \tau$ küszöb fölötti fázistolásokat a $d + \tau$ küszöbenergiához viszonyítjuk.

Hátra van még az u paraméter megválasztása. Ennek optimális értéke a leírásba beveendő csatornáktól függ. Például egy egycsatornás $\alpha + n$ szórás esetén az $l = 1$ parciális hullámban az $u = 0.97$ esetén kapjuk a kísérletekhez legjobban illeszkedő fázistolásokat, míg ugyanebben a parciális hullámban a $\{\alpha + n, d + t\}_{S=1/2}$ csatolt csatornás esetben $u = 0.95$ az optimális érték [102].

A fenti kölcsönhatást kiegészítve egy spin-pálya taggal az α -nukleon szórási fázisok a különféle (S, L) komponensekben kiválóan reprodukálhatók [69]. Az (5.11) alakú spin-pálya kölcsönhatás optimális paramétereit [69]-ban a centrális kölcsönhatás három különböző u paraméterértékére adták meg. Ezek közül mi az $u=0.95$ -höz tartozó $V_0^{SO} = -224.8$ MeV és $a_{SO} = 0.707$ fm paramétereket választottuk.

Tenzorkölcsönhatásként a [68] cikkben használt alakot vettük. Ez két tagból áll $V_{01}^T = -100.94$ MeV, $a_T^1 = 0.977$ fm és $V_{02}^T = -1.18$ MeV, $a_T^2 = 2.219$ fm paraméterekkel. Ez a kölcsönhatás képes a $d + \tau \rightarrow \alpha + p$ reakció kvalitatíve helyes leírására [68, 103]. A [68]-beli kicserélődési paraméterek ($W_T = 0.5$, $M_T = -0.5$) azonban hibásak, páros L -ű parciális hullámok esetén egyáltalán nem adnának járulékot. A helyes értékek $W_T = 0.5$, $M_T = 0.5$.

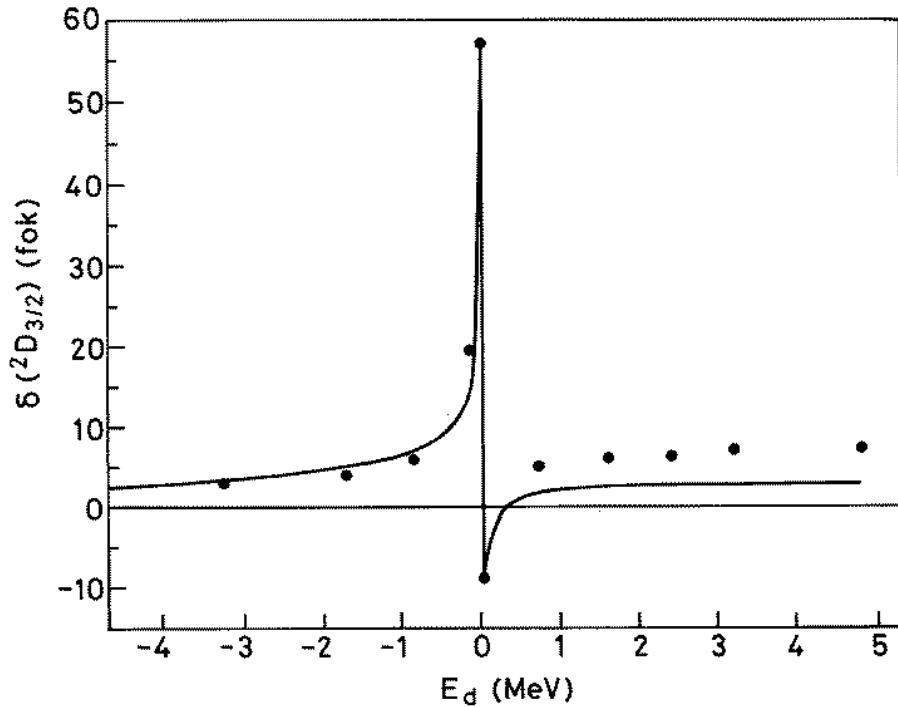
A fenti kölcsönhatást használta G. Blüge és K. Langanke [70]-ben a ${}^5\text{Li}$, [71]-ben pedig a ${}^5\text{He}$ alacsony energiájú spektrumának és a $d + \tau \rightarrow \alpha + p$ illetve $d + t \rightarrow \alpha + n$ reakció



10. ábra: Az $\alpha + p$ szórás ${}^2D_{3/2}$ -beli fázistolása (kísérlet: [104]; szaggatott vonal: [70]; folytonos vonal: jelen számolás).

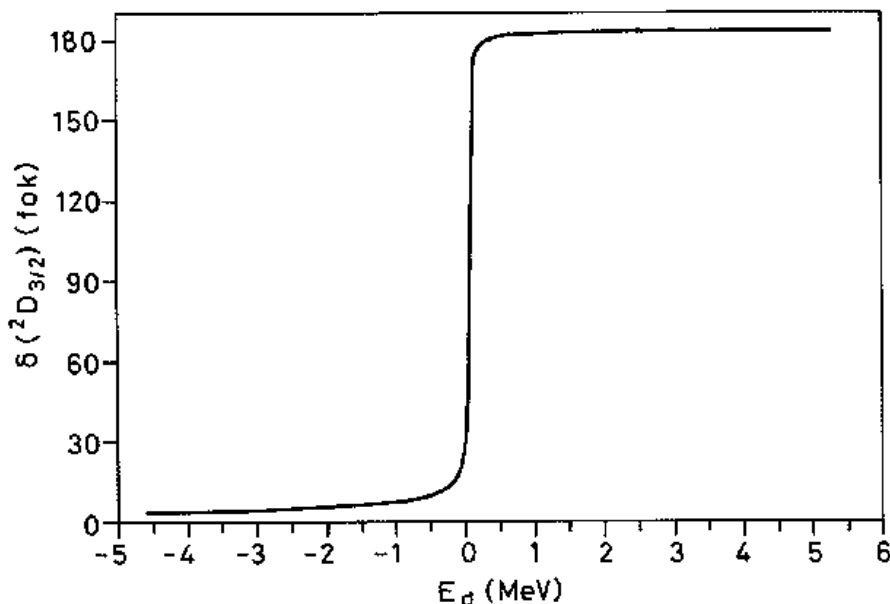
asztrfizikai S-faktorának meghatározására az említett négycsatornás modellben. Azt találták, hogy az $u=0.835$ választás adja a legjobb egyezést a kísérleti eredményekkel. Ezekben a munkákban a csatolt csatornás problémához tartozó RGM csatolt integro-differenciálegyenlet-rendszerét oldották meg az egyenletek numerikus integrálásával, a szórási aszimptotikát explicite beépítve az egyes csatorna-hullámfüggvényekbe. Próbaként mi is végeztünk számolásokat ugyanezen paraméterekkel. A kerneleket most is a GCM technikával számoltuk ki, a többcsatornás szórási problémát pedig a 3. fejezetben részletezett Kamimura-féle variációs módszerrel oldottuk meg. Az egyes csatornáknál a különböző parciális hullámú rugalmas szórási fázisok elég jól megegyeznek a [70]-beli fázisokkal, az egyezés azonban nem tökéletes. A 10. ábrán példaként bemutatjuk a $\alpha + p$ -beli ${}^2D_{3/2}(p)$ szórási fázist. Mint látható, a [70] cikkbeli eredménytől való eltérés maximálisan $0.5-1^\circ$ körüli, de a mi számolásunk a kísérletekhez közelebb esik. Az eltérésnek számos oka lehet. Először is a dinamikai egyenletrendszert más módszerrel oldottuk meg. Ezen kívül mindkét módszerben fellépnek bizonyos paraméterek (nálunk ilyen a csatornasugár, a relatív mozgási Gauss-függvény γ paramétere), amelyekről – ha kis mértékben is – de függhetnek az eredmények. Másrészt a [70] cikkben is találtunk egy-két zavaró pontatlanságot, ami magyarázhatja az eltérést. Egyrészt [70]-ben a küszöbenergiák különbségét 20.15 MeV-nek adják meg, míg a használt paraméterekkel ez valójában 20.45 MeV. Másrészt nem specifikálják, hogy a [69]-beli spin-pálya kölcsönhatások közül melyiket használták. Mindezek alapján úgy véljük, hogy a [70] eredményeitől való csekély eltérés ellenére ezen összehasonlítás számításaink korrektségét támasztja alá.

Ami a ${}^5\text{He}$ -re vonatkozó eredményeket illeti, a [71] cikkben a szerzők közlik, hogy a ${}^5\text{Li}$ leírásához képest egyetlen paraméternek, a tenzorkölcsönhatás a_T^1 paraméterének 0.977 fm-ről 1.01 fm-re való módosításával ugyancsak jól le tudják írni az alacsony energi-



11. ábra: Az $\alpha + n$ szórás ${}^2D_{3/2}$ -beli fázistolása [71]-ben (a pontok a [105]-beli analízis eredményei).

ájú spektrumot és a reakció asztrofizikai S-faktorát. Eredményeik közül itt is a ${}^2D_{3/2}(n)$ fázist mutatjuk be a 11. ábrán. Itt jegyezzük meg, hogy noha a $d+t \rightarrow \alpha+n$ reakció az egyik legjobban vizsgált reakció a magfizikában, az egyes parciális hullámok kísérleti fázisanalízisei az általunk vizsgált tartományban az [54] összesítés tanúsága szerint meglehetősen hiányosak. Nevezetesen az $\alpha + n$ rugalmas szórásra egyetlen fázisanalízist találtunk [105], amely az $\alpha + p$ és $\alpha + n$ szórási információk fenomenologikus elemzésével készült (ezt tüntettük fel a 11. ábrán). A $d+t$ szórási fázisra a minket érdeklő energiákon egyetlen egy publikált kísérleti eredményt sem találtunk, noha számos helyen hivatkoznak a Los Alamos-i csoport nem publikált vagy publikálandó adataira (pl. [97,101,106]). A [71]-beli paramétereket használva mi a 12. ábrán látható fázistolást kaptuk. A használt modellek különbségeiről ugyanazokat lehet elmondani, mint a ${}^5\text{Li}$ esetén. A [71] szerzői a csatornaküszöbök távolságára 19.7 MeV-et adnak meg, holott ez az ő paramétereikkel valójában 19.6 MeV. Az is zavaró, hogy a klaszterek méretparamétereiként a ${}^5\text{Li}$ -beli paramétereket nevezik meg, holott a Tangék által megadott triton illetve τ méretparaméter különböző [102]. Azonban mindezen bizonytalanságoktól együttvéve is csupán csekély eltérést várnánk. A 11. és 12. ábra szórási fázisai ezzel szemben minőségileg különböznek. Ha visszaemlékszünk az árnyékpólusoknak a szórási fázistolásra gyakorolt hatásáról mondottakra (6.1. fejezet), akkor arra a következtetésre juthatunk, hogy a fázistolásoknak ez a minőségileg eltérő viselkedése a dinamikai problémában megjelenő árnyékpólusoknak a két esetben különböző Riemann-síkokon való elhelyezkedéséből eredhet. Ezt a feltevésünket azonban csak úgy tudjuk ellenőrizni, ha a fenti többcsatornás problémát a komplex energiasíkon oldjuk meg.



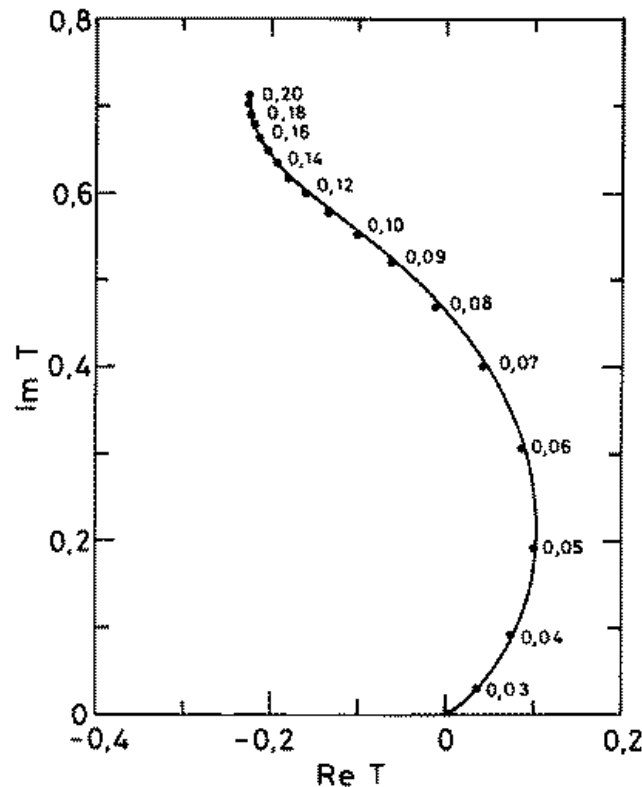
12. ábra: Az $\alpha + n$ szórás ${}^2D_{3/2}$ -beli fázistolása a mi modellünkben.

6.3 Póluskeresés

Feladatunk tehát az, hogy egy csatolt csatornás szórási probléma S -mátrixának pólusait a különböző Riemann-síkokon megkeressük. Megoldási módszerként a 2.4. fejezetben vázolt direkt módszerek bármelyikét használhatjuk, nyilván azokat célszerű választani, amelyek a klasztermodell keretei között viszonylag egyszerűen megvalósíthatók. Mi a Kohn-Hulthén-féle variációs elven alapuló, a 3.4. fejezetben részletezett Kamimura-féle módszert általánosítottuk komplex energiákra.

Az általánosítás a következő két megfontoláson alapul. Míg valós energián a $(\widehat{H} - E)\Psi = 0$ alakú egyenletnek minden E energiánál van szórási határfeltételű megoldása, addig ugyanezen egyenletnek komplex E energiákon tisztán kifutó aszimptotikájú, az S -mátrix pólusához tartozó megoldása csak bizonyos energiáknál létezik. A $(\widehat{H} - E)\Psi = 0$ egyenlet aszimptotikus részének viszont bármely komplex E -nél van tisztán befutó illetve kifutó megoldása, ezek a Coulomb-függvények. Tételezzük tehát fel egy pillanatra, hogy értelmezzük az egyenletnek $h^-(k, r) - S(E)h^+(k, r)$ aszimptotikájú megoldásait tetszőleges komplex E -re. Ekkor az $S(E)$ függvénynek nincsen fizikai tartalma, kivéve annál az E energiánál, amelynél $S(E)$ -nek pólusa van. Ekkor ugyanis a fenti módon konstruált megoldás éppen a keresett tisztán kifutó aszimptotikájú megoldás lesz. Ha tehát az adott probléma esetén a komplex energiához tartozó $S(E)$ “ S -mátrixoknak” találunk egy olyan sorozatát, amely a valódi problémához tartozó S -mátrixnak valamely komplex energián lévő pólusához konvergál, akkor ezzel éppen a probléma tisztán kifutó aszimptotikájú megoldásait határoztuk meg.

A következő probléma a szükséges mátrixelemek komplex energiákon való kiszámítása. Mivel a módszerben fellépő függvények mindegyike analitikus a Riemann-felületen (ha a k síkot az egylevelű E síkra képeznénk le, a nem kölcsönös egyértelműség miatt függvényeink



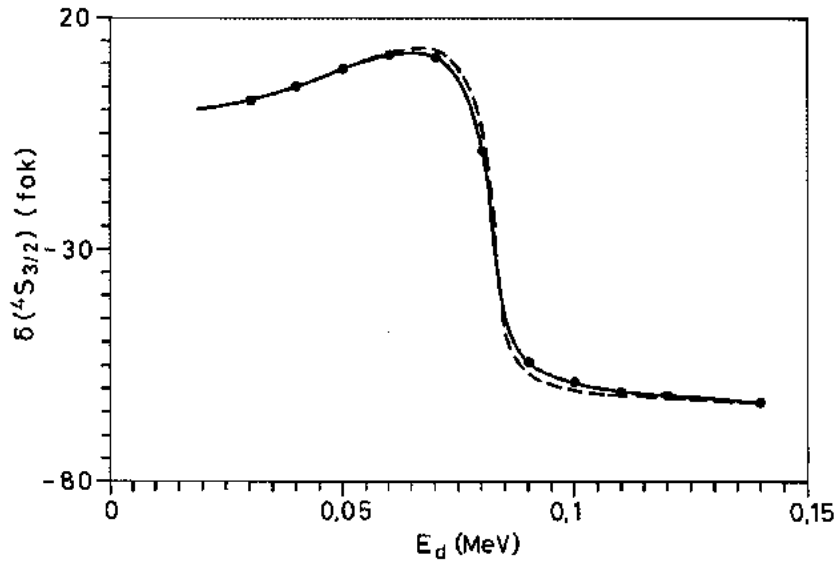
13. ábra: A $d + t$ szórás ${}^4S_{3/2}$ -beli T-mátrixa ([101]-ből átvéve).

nem lennének analitikusak), a 2.2. fejezetben leírt módon analitikusan folytathatók minden olyan Riemann-síkon lévő komplex E energiára, amely elérhető a fizikai síkról. Az analitikus folytatás eredménye nem más, mint a függvények helyettesítési értéke E -ben.

Ezek szerint egy sokcsatornás szórás probléma tisztán kifutó megoldásait Kamimura módszerével úgy kereshetjük meg, hogy valamennyi mátrixelemet komplex energiaértékekre számolunk ki, majd megkeressük a komplex energiához tartozó “ S -mátrix” pólusait.

Első lépésként próba gyanánt meghatároztuk egy $d + \tau$ egycsatornás szórásban alacsony energián (≈ 200 keV) megjelenő keskeny rezonancia paramétereit a szórás fázisból (a 2.4.-ben leírt indirekt módszerrel), és a direkt póluskereséssel megkeresett komplex rezonanciaenergiából. Igen jó egyezést kaptunk.

A $d+t \rightarrow \alpha+n$ probléma négycsatornás modelljében két pólust találtunk. Egyet a $[BB]$ síkon $E = 41.88 - i31.78$ keV energiánál, egyet pedig a $[BT]$ síkon $E = 71.33 - i5.20$ keV energiánál. A pólusok elhelyezkedése összhangban van [97] eredményével (vö. 11. táblázat), de az egyezés nem tökéletes. Megvizsgálva a teljes reakcióhatáskeresztszemet azt találtuk, hogy ennek 63 keV-nél van a maximuma, ami jól egyezik a [54]-ben megadott 107 keV laboratóriumi energiához tartozó 64.2 keV-vel. A póluspozíciók eltérésének okát csak úgy deríthetjük fel, ha megvizsgáljuk, hogy modellünk további független adatokat hogyan tud reprodukálni. A [101] cikkben közölnek egy ábrát, ami a $d + t$ szórás adatok R-mátrix-illesztéséből nyert komplex T mátrixot ábrázolja. Ez látható a 13. ábrán. Ha



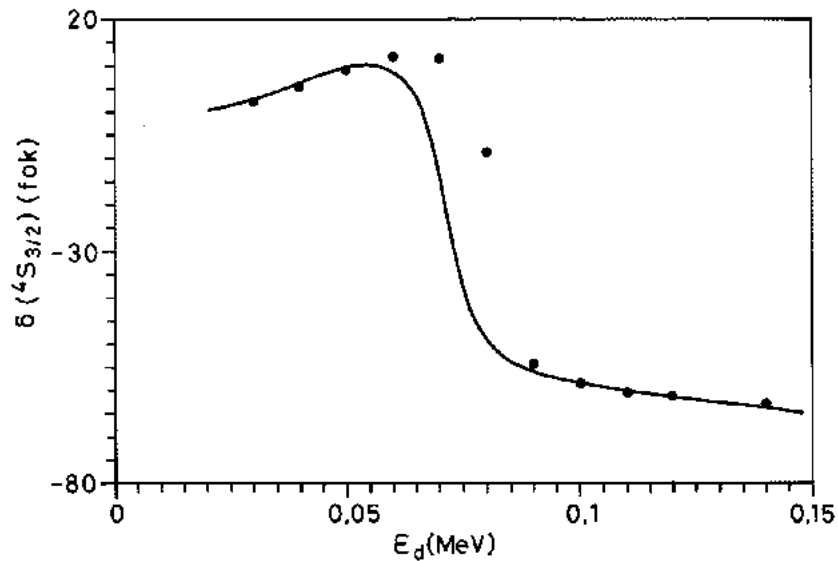
14. ábra: A $d+t$ szórás, T-mátrixból kinyert, ${}^4S_{3/2}$ -beli fázistolása (folytonos vonal: a pontokra illesztve; szaggatott vonal: a 13. ábrán lévő illesztéshez tartozó görbe).

felhasználjuk a

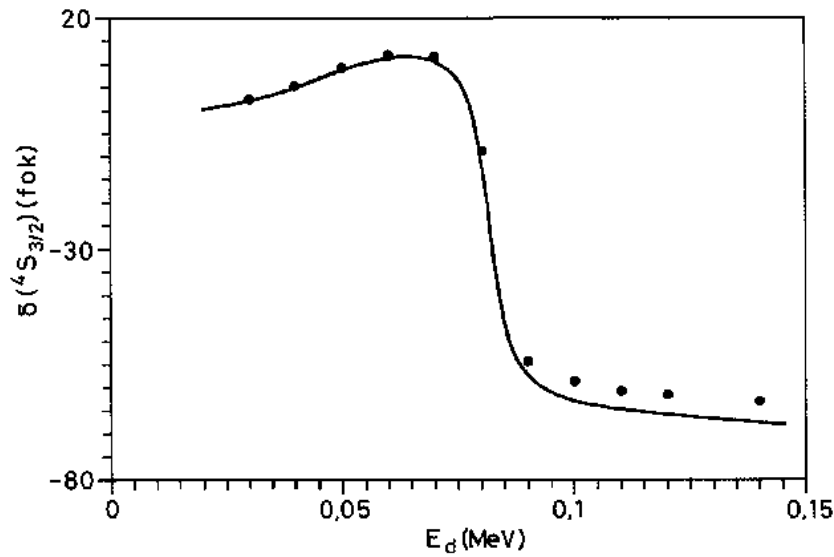
$$T(E) = \frac{S_{22}(E) - 1}{2i} \quad (6.21)$$

összefüggést (ahol S_{22} a $d+t$ csatornabeli mátrixelemet jelöli), kinyerhetjük az S_{22} mátrixelemet, abból pedig, az

$$S_{22}(E) = \eta(E) \exp(2i\delta_2(E)) \quad (6.22)$$

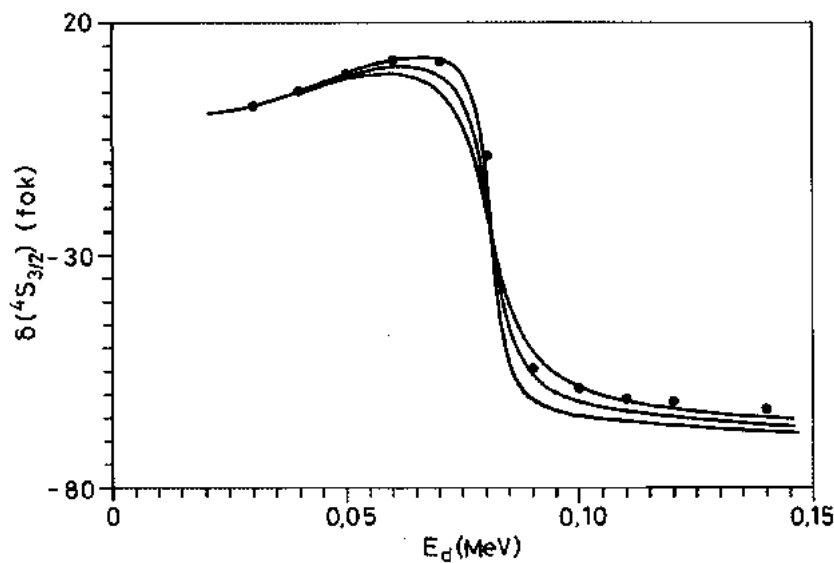


15. ábra: A $d+t$ szórás ${}^4S_{3/2}$ -beli fázistolása modellünkben, a [71]-beli kölcsönhatással (a pontok a T-mátrixból kinyert értékeket jelölik).

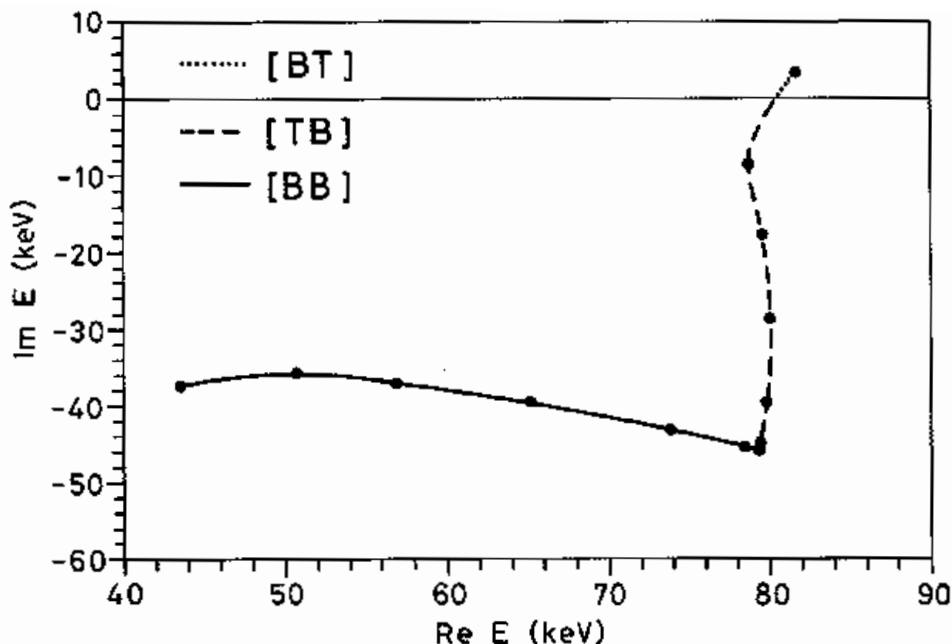


16. ábra: A $d + t$ szórás ${}^4S_{3/2}$ -beli fázistolásának legjobb illesztése modellünkben.

összefüggéssel, az elasztikus $d + t$ fázistolást, amit a 14. ábrán láthatunk. A mérési adatokból nyerhető (folytonos vonal) és a [101]-beli illesztéshez tartozó (szaggatott vonal) fázist egyaránt feltüntettük. A 15. ábrán a mérési adatok mellett a modellünkben számolt δ_{dt} -t mutatjuk be. Mint látható, a fázistolás viselkedése jó összhangban van a póluspozíciók és fázisok kapcsolatáról a 6.1. alfejezetben írottakkal. Megfigyelhető azonban, hogy a rezonancia pozíciója mintegy 10 keV-vel el van tolódva. Ahhoz, hogy ezt az eltolódást helyrehozzuk a kölcsönhatást kell kissé megváltoztatni. Úgy találtuk, hogy a rezonanciapozíció az u paraméter értékére érzékeny leginkább. Előfordulhat azonban, hogy u -t megváltoztatva az árnyékpólus átkerül a $[TB]$ síkra. Mivel a pólusok helyzete



17. ábra: A $d + t$ szórás ${}^4S_{3/2}$ -beli fázistolása különböző erőparaméterekkel.



18. ábra: Pólustrajektóriák (folytonos vonal: konvencionális pólus, szaggatott és pontozott vonal: árnyékpólus).

a csatornacsatolástól érzékenyen függ, az u változtatásával együtt a tenzorkölcsönhatás egyik komponensének erősségét is módosítottuk. Az elérhető legjobb illesztés a 16. ábrán látható. Ekkor $u=0.811$ és $V_{T0}^1=-112.94$ MeV. Az illeszkedés kielégítő, de nem tökéletes. A rezonáns tartományban azonban körülbelül ugyanolyan jó, mint a [101] munkában (14. ábra). A kölcsönhatás megváltoztatása a reakció-hatáskeresztszmet maximumát mintegy 2–3 keV-vel eltolta nagyobb energiák felé. Az új erőparaméterekkel számolt póluspozíciók: $E = 43.51 - i37.40$ keV a [BB] síkon és $E = 81.70 - i3.380$ keV a [BT] síkon. Látható, hogy igen jó az egyezés a 11. táblázatbeli fenomenologikus értékekkel, csak a fő pólus energiájának valós része kisebb a kelleténél mintegy 3.5 keV-vel. A fenti potenciálparamétereken kívül más u, V_{T0}^1 kombinációkat is kipróbálva úgy találtuk, hogy ha a $d + t$ fázis rezonáns részének pozíciója jó, akkor a fázistolások jónéhány fokos eltérései ellenére a póluspozíciók átlagosan legfeljebb ± 0.5 keV-et változnak. A legérzékenyebb ebből a szempontból az árnyékpólus képzetes része ami ± 1 keV-et is változott. A különböző erőparaméterekkel nyert fázisgörbéket a 17. ábrán láthatjuk. A fázisoknak az a tulajdonsága, hogy ha a maximumnál jó az illeszkedés, akkor a minimumnál rossz és fordítva, azt sugallja, hogy kölcsönhatásunk off-shell viselkedése nem tökéletes.

A ${}^5\text{He } \frac{3}{2}^+$ -os állapotában domináns konfiguráció felderítéséhez fokozatosan kikapcsoltuk a csatornacsatoló tenzorkölcsönhatást. Első lépésben $V_{T0}^2=0$ értékkel számoltunk, majd a $V_{T0}^1=-100$ MeV, -80 MeV, -50 MeV, -20 MeV és 0 MeV értékeken haladtunk végig. A nyert pólustrajektóriákat a 18. ábrán láthatjuk (a [BT] síkon a $-k^*$ -hoz tartozó konjugált pólust tüntettük fel). Zérus csatolási határesetben a két pólus a [BB] és [TB] síkokon található $E_0=79.34-i45.78$ keV energiánál. A rezonanciaállapot tehát a $d + t$ csatornából ered.

A ${}^4D(d)$ és ${}^2D(d)$ csatornák szerepének tisztázására egyenként és együttesen is ki-

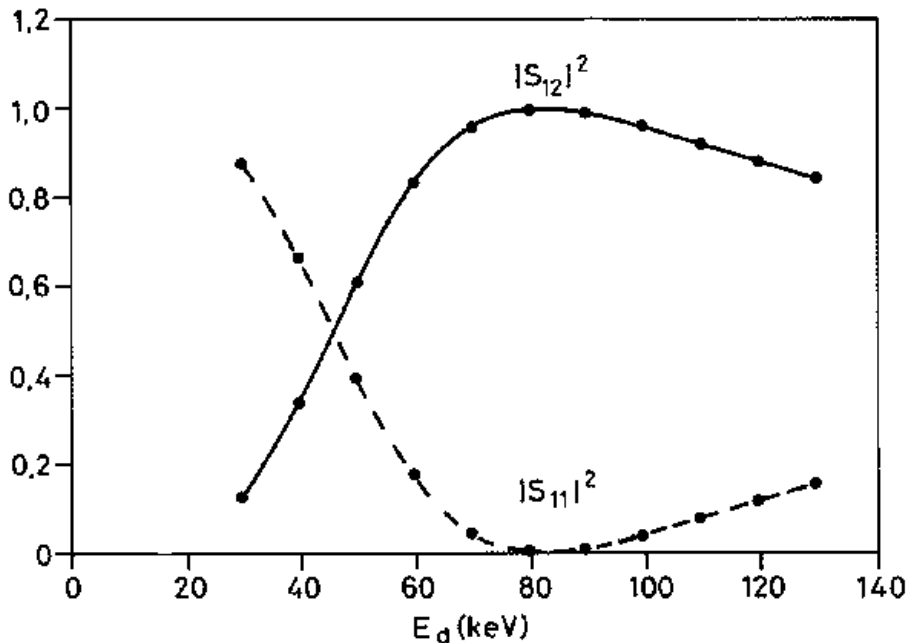
Kikapcsolt csatorna	Konvencionális pólus	Árnyékpólus
Nincs kikapcsolt csatorna	43.51–i37.40	81.70–i3.38
$^4D(d)$	49.84–i43.69	91.82–i9.14 ^a
$^2D(d)$	48.73–i44.89	94.367–i7.73 ^a
$^4D(d)$ és $^2D(d)$	53.83–i51.45	102.23–i20.30 ^a

^aA $[TB]$ síkon.

12. táblázat: A póluspozíciók (keV) megváltozása a csatornák kikapcsolása során

kapcsoltuk őket. A póluspozíciók megváltozását a 12. táblázat mutatja. Látható, hogy a két konfiguráció szerepe nagyjából azonos: bármelyiket elhagyva az árnyékpólus átkerül a $[TB]$ síkra. Ez persze csak azt jelenti, hogy ilyen esetben modellünk paramétereit újra kellene illeszteni a kísérleti adatokhoz. Azonban ez a síkváltás mindenféleképpen rávilágít arra, hogy a a reakciónak egy valóságú modelljébe a fenti komponenseket is be kell vennünk, ellentétben $[100,101]$ -gyel.

Teszt célzattal megkerestük az $S_{11}(E)$ függvény zérushelyét a fizikai síkon. Ez a küszöbenergiák különbségét levonva nagy pontossággal ugyanannál az energiánál adódott, mint az árnyékpólus $[BT]$ -n. Ez az eredmény a 6.1. alfejezetben leírtak alapján megerősíti azt, hogy modellünk a többcsatornás szóráselmélet dinamikáját helyesen kezeli. Az $|S_{11}(E)|^2$ és $|S_{12}(E)|^2$ függvényeknek a fizikai sík valós energiatengelyén való viselkedését láthatjuk a 19. ábrán. Ez meggyőzően demonstrálja, hogy az $|S_{12}(E)|^2$ -tel arányos reakció-hatáskeresztmetszetben jelentkező csúcsot valóban az árnyékpólus okozza.



19. ábra: Az S -mátrix $|S_{11}|^2$ és $|S_{12}|^2$ elemei a fizikai sík valós energiatengelyén.

6.4 Következtetések

A mikroszkopikus dinamikai klasztermodellt a többcsatornás szóráselmélet keretei között alkalmaztuk az ötnukleon-rendszer (${}^5\text{He}$) $\frac{3}{2}^+$ állapotának polológiai vizsgálatára. Azt találtuk, hogy a [71] cikk kölcsönhatásával (amit a [105]-beli $\alpha + n$ fázistoláshoz és a kísérleti asztrofizikai S -faktorhoz illesztettek) számolva modellünk a reakció-hatáskeresztmetszetet jól, a [101]-beli $d+t$ fázist kissé pontatlanul reprodukálta. Kissé megváltoztatva az erőparamétereket, a kísérleti $d+t$ szórási fázis elég pontosan illeszthető. Ekkor a póluspozíciók közel esnek a fenomenologikusan megállapított értékekhez. A pólusok Riemann-síkokon való elhelyezkedése a 6.1. alfejezet szellemében azt jelenti, hogy az $\alpha+n$ csatornában növekvő elasztikus fázistolást kell kapnunk. Az újraillesztett paraméterekkel nyerhető fázistolás vonalvastagságon belül megegyezik a 12. ábrán bemutatottal. Ezek után úgy hisszük, hogy a [105]-beli fázisanalízisnek az $\alpha+n$ szórás $D_{3/2}$ parciális hullámára megadott fázisgörbéje hibás. Erre nézve az irodalomban találtunk is egy jelzést. A [107] cikkben az $\alpha+n$ szórás $D_{3/2}$ -beli polarizációját vizsgálták az energia függvényében, és úgy találták, hogy a [105]-beli fázistolásból kielemezhető polarizációs adatok a rezonanciatartományban más mérésektől eltérően viselkednek. Ennek valószínűleg az lehet az oka, hogy a [105]-beli fázisanalízis, mint említettük, egy $\alpha+n$ és $\alpha+p$ szórási adatokat tartalmazó kompilációval történt. A 10. ábrán látható $\alpha+p$ szórási fázis pedig több, egymással igen jól egyező mérés alapján kvalitatíve valóban a [105] által megadott, 11. ábrán látható módon viselkedik. Hozzávéve ehhez azt, hogy a $d+\tau$ elasztikus szórási fázis körülbelül 250 keV-en egy rövid szakaszon több mint 80° -ot emelkedő “hagyományos” rezonanciastruktúrát mutat [108], nagy biztonsággal állítható, hogy az $\{\alpha+p, d+\tau\}$ rendszerben a $[BB]$ és $[TB]$ síkokon található egy-egy pólus. Így valószínűleg a [105]-beli $\alpha+p$ adatok túlsúlya okozta azt, hogy az $\alpha+n$ fázisra az $\alpha+p$ -hez hasonló eredményt kaptak.

A nukleon-nukleon kölcsönhatás tulajdonságai közül az egyik legfontosabb a töltésfüggetlenség. Noha léteznek kísérleti eredmények, amelyek ennek ellentmondani látszanak [78], az általános felfogás továbbra is alapvetőnek tartja a töltésfüggetlenséget. A ${}^5\text{He}$ és ${}^5\text{Li}$ tükörmagok fent vázolt eltérő pólusstruktúrája a problémának érdekes tesztelési lehetőségét tenné lehetővé. Ha ugyanis tudnánk találni egy olyan kölcsönhatást, amely a ${}^5\text{He}$ és ${}^5\text{Li}$ -beli szórási adatokat (rugalmas szórási fázisok, reakció-hatáskeresztmetszet) egyformán jól leírja, akkor kikapcsolva a Coulomb-kölcsönhatást, a két rendszernek ugyanolyan pólusstruktúrát kellene mutatnia. Ha nem így lenne, akkor ez újabb bizonyítéka volna a töltésfüggetlenség sérülésének.

A többcsatornás szórás dinamikai problémáját a Kamimura-féle módszer [42] komplex energiákra való általánosításával oldottuk meg. Noha a módszer minden tekintetben önkonzisztensnek bizonyult (pl. az S -mátrix unitaritása automatikusan 4–6 jegyre teljesül, az S_{11} $[BT]$ síkon lévő pólusa és a P síkon lévő zérushelye nagyon pontosan egybeesik), nem lenne minden tanulság nélküli más módszerrel is megoldani a feladatot.

A 2.4. fejezetben ismertetett komplex skálázás nagy előnye az, hogy bármilyen létező programhoz aránylag kis erőfeszítéssel adaptálható. Nem triviális kérdés viszont az, hogy vajon alkalmas-e a komplex skálázás arra, hogy többcsatornás esetben különböző Riemann-síkokon pólusokat keressünk és a megtalált pólusok karakterét azonosítsuk. Ezeket a kérdéseket tudomásunk szerint még nem vizsgálták meg. Csak egy-két tapasztalati

tény ismeretes arra nézve, hogy bizonyos esetekben az elforgatott csatornakontinuumok “abszorbeálnak” már feltárult rezonanciákat stb. [109].

A módszer működési mechanizmusát többcsatornás esetben éppen ezért egy olyan modellben vizsgáltuk, amelynek egyszerűsége és áttekinthetősége biztosította feltevéseink könnyű ellenőrizhetőségét. Modellünk egy kétállapotú targetból és egy bombázó részecskéből állt és valamennyi kölcsönhatás egytagú szeparábilis alakú volt. A részletek mellőzésével csak a legfontosabb eredményt említjük meg. Numerikus példákkal bizonyítottuk, hogy a többcsatornás komplex skálázásban mindazok a pólusok feltárhatók, amelyek a fizikai síkról elérhető Riemann-síkokon fekszenek, és a pólusok karaktere egyértelműen azonosítható [110].

A konkrét fizikai példára ($d+t \rightarrow \alpha+n$) való alkalmazás azonban komoly nehézségekbe ütközött. Ennek oka az, hogy a pólusoknak a küszöbhez való közelsége miatt a Gamow-függvény lokalizációja még nagy elforgatási szögek mellett is igen nagy bázist igényel. Csatornánként (a lélegző módusokat is beleértve összesen 10 csatornánk van) mintegy 100 bázisállapotra van szükség. A teljes probléma számításigénye többszörösen meghaladta a rendelkezésünkre álló számítógépkapacitást. Ennek ellenére a részeredmények biztatóak.

7. fejezet

Összefoglalás

A dolgozatban a mikroszkopikus dinamikai klasztermodell néhány alkalmazását mutattam be a magszerkezet és a magreakciók leírására. Az elért eredményeim a következők:

1. Olyan számítógépes algebrai (REDUCE, LISP) és numerikus (FORTRAN) programrendszert dolgoztam ki, amely tetszőleges mag elvben tetszőleges számú 0s héjú klasztert tartalmazó többkonfigurációs mikroszkopikus klasztermodellbeli vizsgálatot teszi lehetővé realiztikus effektív nukleon-nukleon kölcsönhatás jelenlétében.
2. Realisztikus effektív nukleon-nukleon kölcsönhatást konstruáltam, amellyel a vizsgált magok tulajdonságai leírhatók. Ez a szokásos centrális tagokon kívül tartalmaz tenzor- és spin-pálya tagot is, amely elengedhetetlen egyes deformált magok és magreakciók leírásában.
3. A fentieket felhasználva a ${}^6\text{Li}$ mag alapállapotát egy olyan $\{\alpha + p + n\}$ típusú többkonfigurációs mikroszkopikus modell keretében írtuk le, amely a klaszterek relatív mozgásának dinamikáját megkísérli a makroszkopikus háromtest-modellek szigorúval kezelni. Éppen ezért modellünk az $\alpha(pn)$ partíció mellett tartalmazza az $(\alpha p)n$ és $(\alpha n)p$ tagozódásokat és valamennyi tagozódáson belül az összes lényeges impulzusmomentum-konfigurációt. Ezen kívül a modell képes számot adni az α -részecskének a nukleonok jelenlétében bekövetkező disztorciójáról.
- 3.a) Modellünkben a klaszter-alrendszerek (α , deuteron, $p + n$, $\alpha + n$, $\alpha + p$) tulajdonságainak (energia, magsugár, szórási fázisok) reprodukálása kielégítő, de nem tökéletes. A probléma az, hogy az α -részecske szokásos 0s belső állapota nem teszi lehetővé, hogy a tenzorerő szerepet játsszon leírásában.
- 3.b) Modellünkben az alrendszerek leírásához legjobb kölcsönhatással a ${}^6\text{Li}$ kötési energiája mintegy 1 MeV-vel kevesebbnek adódott a kelleténél. Úgy találtuk, hogy ezért nagyrészt háromtest-erők felelősek. Nevezetesen a $t+{}^3\text{He}$ klaszterizáció bevétele abba a leírásba, amelynek bázisa az $\{\alpha + p + n\}$ altéren gyakorlatilag teljes, a kötési energiát mintegy 0.6 MeV-vel megnövelte. Ez a háromklaszter szeparációs energia tekintetében mintegy 20%-os növekedést jelent.

- 3.c)** Miután az erőparamétereket kis mértékben módosítottuk, hogy a korrekt kötési energiát kapjuk, kiszámítottuk a ${}^6\text{Li}$ néhány jellemzőjét. Úgy találtuk, hogy sugara valamivel nagyobb, mint a kísérleti érték, kvadrupólmomentuma pedig, noha kicsi, ahogy lennie kell, rossz előjelű. Kimutattuk, hogy a kvadrupólmomentum szempontjából jelentős az $\alpha(pn)$ $[[l_{pn}l_{\alpha(pn)}]L]S^J = [[(02)2]1]1$ komponens szerepe, amely az energia szempontjából jelentéktelennek bizonyult. Demonstráltuk, hogy a kvadrupólmomentum értékét csak olyan modellben lehet korrektnek elfogadni, amely a konfigurációk tekintetében gyakorlatilag teljes.
- 3.d)** A ${}^6\text{Li}$ alapállapotában az $(SL) = (1, 0)$, $(1, 1)$, $(1, 2)$ és $(0, 1)$ komponensek súlyára rendre 94.6%, 0.2%, 3.9% és 1.3% adódott. Az $(1, 2)$ komponens gyakorlatilag a $\alpha(pn)$ partícióból származik, a többi nagyban átfedő konfigurációk szuperpozíciójából. A $(0, 1)$ komponens súlyát néhány makroszkopikus háromtest-modell 4% körülinek jósolja. Rámutattunk arra, hogy ennek oka valószínűleg az, hogy a nukleon-nukleon kölcsönhatás singlet-odd (1P_1) komponensét ezek a modellek hibásan kezelik.
- 3.e)** Kiszámítottuk az $\alpha + d$ és ${}^5\text{He} + p$ spektroszkópiai faktorokat. Az $\alpha + d$ -re kapott 0.9 körüli értékek realiztikusaknak tűnnek, azonban a ${}^5\text{He} + p$ spektroszkópiai faktorára a kísérleti értéknek mintegy a kétszeresét kaptuk, ugyanúgy, mint a hagyományos $\alpha + d$ modell keretében. Kimutattuk, hogy ennek oka nem az $\alpha + d$ modellbeli relatív mozgási tér csonkítása vagy egyes impulzusmomentum-komponensek elhagyása. A probléma feltételezésünk szerint az, hogy modellünk az alacsonyenergiás kontinuumot összenyomja. Úgy tűnik, hogy ez az effektus minden olyan modellben fellép, amely 0s belső állapot feltételezésével képes reprodukálni az α -részecske térfogati tulajdonságait. (Azok a modellek, amelyekben a fenti összenyomódási effektus nem lép fel, az α -részecske kötési energiáját mintegy 2–3 MeV-vel kevesebbnek adják a kísérleti értéknél.)
- 4.** A ${}^5\text{He}$ $\frac{3}{2}^+$ -os állapotát egy $d + t$ -beli ${}^4S_{3/2}(d)$, ${}^4D_{3/2}(d)$ és ${}^2D_{3/2}(d)$ valamint az $\alpha + n$ -beli ${}^2D_{3/2}(n)$ konfigurációkból felépülő mikroszkopikus csatolt csatornás modell keretében vizsgáltam. Ez az állapot mint közbenső mag fontos szerepet játszik a $d+t \rightarrow \alpha+n$ termonukleáris reakcióban. Közelmúltbeli kísérletek fenomenologikus analízisei azt jósolták, hogy a reakció nagy hatáskeresztmetszetéért egy egzotikus objektum, a reakció dinamikáját tartalmazó S -mátrixnak egy úgynevezett árnyékpólusa a felelős. Az árnyékpólusok az S -mátrixnak mint a többlevelű energiafelületen értelmezett komplex függvénynek azok a pólusai, amelyek az adott energián a fizikai energiasíkhhoz nem a legközelebbi síkon fekszenek. A magfizikában ez az első olyan rezonancia, amelynél az árnyékpólus járulékának lényeges szerepét gyanították. Bizonyítéknak azonban csak az árnyékpólusnak a dinamikai feladat megoldásában való megkeresése fogadható el.
- 4.a)** Egy eredetileg szórási állapotok csatolt csatornás leírására kidolgozott módszert általánosítottam komplex energiákra oly módon, hogy az egyes energiasíkokon való póluskeresés és a pólusok sík szerinti azonosítása lehetővé vált.

- 4.b)** Egy irodalomban közölt kölcsönhatást használva a $d+t \rightarrow \alpha+n$ reakció-hatáskeresztmetszet maximumát igen jól reprodukáltam, az $\alpha+n$ -beli ${}^2D_{3/2}(n)$ szórásifázis viszont minőségileg különbözött az irodalomban fellelhető egyetlen kísérleti analízis eredményétől. A $d+t$ -beli ${}^4S_{3/2}(d)$ szórásifázisra egyetlen egy publikált adatot sem találtam a szóbanforgó energiatartományban, azonban a kísérleti T-mátrixillesztésekből kielemeztem néhány adatot. Úgy találtam, hogy a modellből nyerhető fázis rezonáns tartománya mintegy 10 keV-vel el van tolódva a kísérleti értékekhez képest.
- 4.c)** A kölcsönhatás két paraméterét újra illesztve ez az eltolódás megszüntethető. Ekkor az S -mátrixnak két pólusát találtam a $d+t$ küszöb fölött. Egyiket a fizikai síkhoz legközelebbi síkon, $E=43.51-i37.40$ keV energiánál (konvencionális pólus), a másikat a fizikai síktól kissé távolabbi síkon, $E=81.70-i3.38$ keV energiánál (árnyékpólus). Ezek a paraméterek jól egyeznek a kísérletekből nyerhető fenomenologikus értékekkel (lásd 11. táblázat).
- 4.d)** A csatornák közti csatolást fokozatosan kikapcsolva az árnyékpólus átkerült a fizikai síktól legtávolabbi energiasíkra. Ezzel igazoltam, hogy a pólusok a $d+t$ csatornából erednek, a $\frac{3}{2}^+$ -os állapotban a $d+t$ -beli ${}^4S_{3/2}$ konfiguráció dominál. Demonstráltam, hogy a reakció-hatáskeresztmetszet a valós energia függvényében a pólusenergia valós része melletti elhaladás során felveszi a lehetséges maximumhoz közeli értékét, azaz a $d+t \rightarrow \alpha+n$ reakció nagy hatáskeresztmetszetéért az árnyékpólus felelős.
- 4.e)** A póluspozíciók alapján arra a következtetésre jutottam, hogy az $\alpha+n$ rugalmas szórásra vonatkozó irodalmi $\delta({}^2D_{3/2})$ fázisadatok hibásak. Megadtam a modellünkből nyerhető fázisfüggvényt a fenti parciális hullámban.

A dolgozatban bemutatott valamennyi számítást én végeztem, általam írott számítógépprogramok segítségével, kivéve a szórásifázis problémát valós energiákon megoldó programot, amit Kruppa András volt szíves rendelkezésemre bocsátani. Az 5. fejezetbeli eredmények értékelésében Lovas Rezsőnek nagy szerepe volt, a 6. fejezet eredményeinek interpretációja teljes mértékben tőlem származik.

Summary

In this thesis the dynamical microscopic cluster model has been applied to the description of the low-energy structure and reactions of two light nuclear systems. The results are as follows:

1. A family of algebraic (REDUCE, LISP) and numerical (FORTRAN) computer codes has been developed to handle nuclei that consist, in principle, of any number of 0s-wave clusters, in the framework of a multiconfiguration microscopic cluster model with realistic effective nucleon-nucleon interactions.
2. A realistic effective nucleon-nucleon interaction has been constructed, which is able to give a good overall description of the properties of the nuclei in question. Beyond the usual central terms, it contains tensor as well as spin-orbit terms, which are indispensable to the understanding of some deformed nuclei and nuclear reactions.
3. Using these tools, we investigated the ground state of ${}^6\text{Li}$ in a multiconfiguration microscopic $\{\alpha + p + n\}$ model by describing the dynamics of the intercluster motion with the rigour of macroscopic three-body models. In addition to the $\alpha(pn)$ partition, our model contains the $(\alpha p)n$ and $(\alpha n)p$ clusterizations. All angular momentum configurations of any significance are taken into consideration. Beyond that, the model can take into account the distortion of the α particle in the presence of other particles.
 - 3.a) Our model reproduces the properties (energies, radii, scattering phase shifts) of the cluster subsystems (α , deuteron, $p + n$, $\alpha + n$, $\alpha + p$) satisfactorily but not perfectly. The reason is that the 0s intrinsic state of the α cluster prevents the tensor force from playing any role in the description of α .
 - 3.b) Using an interaction fitted to the subsystems, we found that the binding energy of ${}^6\text{Li}$ is less than it should be by about 1 MeV. It is suspected that this lack of energy is caused mainly by three-body forces. Indeed, the inclusion of the $t+{}^3\text{He}$ clusterization in the virtually complete $\{\alpha + p + n\}$ subspace increases the binding energy by about 0.6 MeV. This means a 20% increase of the three-cluster separation energy.
 - 3.c) Slightly readjusting the force parameters so as to obtain the correct binding energy, we calculated some properties of ${}^6\text{Li}$. We found that its radius is somewhat larger than the experimental value, while the quadrupole moment is small as it should be,

but has a wrong sign. We pointed out that the $\alpha(pn)$ $[[l_{pn}l_{\alpha(pn)}]L]S]J = [[(02)2]1]1$ component, which hardly contributes to the energy, is important from the point of view of the quadrupole moment. We demonstrated the sensitivity of the value of the quadrupole moment to the degree of completeness of the model space.

- 3.d)** We found the weights of the $(SL) = (1, 0), (1, 1), (1, 2)$ ground-state clusterizations to be 94.6%, 0.2%, 3.9% and 1.3%. The $(1, 2)$ component comes predominantly from the $\alpha(pn)$ partition, while the others come from a superposition of highly overlapping configurations. Some of the macroscopic models predict the weight of the $(0, 1)$ component to be about 4%. We suspect that this is due to the incorrect handling of the singlet-odd (1P_1) component of the nucleon-nucleon interaction in those models.
- 3.e)** We calculated the $\alpha + d$ and $^5\text{He}+p$ spectroscopic factors. The values for $\alpha + d$ seem to be realistic, but for $^5\text{He}+p$ they are a factor of 2 too high in agreement with the conventional $\alpha + d$ model. We guess that the problem is neither in the truncation of the relative-motion space in the $\alpha + d$ model, nor in the omission of some angular-momentum components, but in the fact that our model compresses the low-energy continuum. This effect seems to appear in all models that reproduces the bulk properties of the α particle assuming a pure 0s intrinsic state. (In contrast, the models that do not produce such a compression effect give α particle binding energies by about 2-3 MeV less than the experimental value.)
- 4.** We studied the $\frac{3}{2}^+$ state of ^5He in a microscopic coupled-channel model which includes the $^4S_{3/2}(d)$, $^4D_{3/2}(d)$, and $^2D_{3/2}(d)$ states in the $d + t$ component, and the $^2D_{3/2}(n)$ state in the $\alpha + n$ component. This state of the intermediate system plays a significant role in the $d+t \rightarrow \alpha+n$ thermonuclear reaction. Phenomenological analyses of recent experiments predicted that an exotic object, a shadow pole of the S -matrix of the reaction is responsible for the large reaction cross section. The shadow poles are those poles of the S -matrix, defined as a complex function on the multisheeted energy surface, which are located on sheets not adjacent, at the resonance energy, to the physical sheet. This is the first example in nuclear physics where a shadow pole was suspected to have a significant role. But as a final proof, only the localization of the shadow pole in a dynamical model of the reaction can be accepted.
- 4.a)** To be able to identify the poles on the various energy sheets, we generalized, to complex energies, a method originally invented for the coupled-channel description of scattering states.
- 4.b)** Using a published interaction, we reproduced the maximum of the $d+t \rightarrow \alpha+n$ reaction cross section fairly well but the $^2D_{3/2}(n)$ phase shift of $\alpha + n$ was in sharp contradiction with the result of the single experimental analysis published so far. We could not find experimental data for the $^4S_{3/2}(d)$ of $d + t$ in the energy range of interest, but we derived some from experimental T-matrix analyses. It was revealed that the resonant part of our phase shift is shifted with respect to the experimental curve by about 10 keV.

- 4.c)** By readjusting two of the potential parameters, this shift was eliminated. We found two poles of the S -matrix above the $d + t$ threshold. One of them is on the sheet adjacent to the physical one at an energy of $E=43.51-i37.40$ keV (conventional pole), while the other is on a more remote sheet at $E=81.70-i3.38$ keV (shadow pole). These values coincide well with the phenomenological ones gained from experiment (see table 11.).
- 4.d)** Switching off the channel coupling step by step, the shadow pole walks onto the sheet most remote from the physical one. This proves the $d + t$ origin of the poles: the $\frac{3}{2}^+$ is dominated by the ${}^4S_{3/2}$ configuration of $d + t$. We demonstrated that the reaction cross section, as a function of energy, goes through its maximum value, close to the one allowed by the unitarity, as the physical energy passes through the real part of the pole energy. This means that the shadow pole is responsible for the large $d+t \rightarrow \alpha+n$ reaction cross section.
- 4.e)** Based on the pole positions, we concluded that the data published so far for the $\alpha + n$ elastic scattering phase shift in the ${}^2D_{3/2}$ wave are not correct. We believe that our phase shift curve is not far from the correct one.

Köszönetnyilvánítás

A dolgozatban bemutatott eredmények megszületését a TMB által adott ösztöndíj tette lehetővé. Ezen kívül OTKA pályázatokból is támogatásban részesültem.

Köszönetemet fejezem ki témavezetőmnek, Lovas Rezsőnek a felmerült problémák megoldásában nyújtott segítségéért. A dolgozat sok ötletét és elképzelését tartalmazza.

Külön köszönettel tartozom Gyarmati Borbálának, aki munkámat mindvégig figyelemmel kísérte és tanácsaival segítette. A dolgozat igen alapos átolvasásába sok munkát fektetett, számos hasznos módosítást javasolt, amit szintén köszönök.

Köszönetet mondok Kruppa Andrásnak azért, hogy megismertette velem az algebrai programozás alapjait, továbbá számos elvi és gyakorlati probléma megoldásában nyújtott segítségéért, programjainak rendelkezésemre bocsátásáért.

A dolgozat tartalmazza Pál Károly és Varga Kálmán néhány eredményét, amiért ezúton mondok köszönetet.

Sokat tanultam a Papp Zoltánnal folytatott beszélgetésekből, vitákból.

Köszönöm Végh Lászlónak és Lévai Gézának a dolgozattal kapcsolatos hasznos megjegyzéseit.

A szép kivitelű ábrák Vad Erzsébet munkáját dicsérik.

Végül, de nem utolsósorban szeretnék köszönetet mondani szüleimnek biztatásukért, erkölcsi támogatásukért.

Ajánlom ezt a dolgozatot szeretett bátyám emlékének.

Irodalomjegyzék

- [1] Bencze Gy., *A kvantummechanikai N-részecske szórásprobléma integrálegyenletei*, Doktori értekezés, Budapest, 1974.
- [2] A. T. Kruppa, R. G. Lovas, R. Beck és F. Dickmann, Phys. Lett. B **179**, 317 (1986).
- [3] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (Springer, New York, 1982).
- [4] J. R. Taylor, *Scattering Theory* (John Wiley, New York, 1972).
- [5] V. de Alfaro és T. Regge, *Potential Scattering* (North Holland, Amsterdam, 1965).
- [6] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky és J. Horáček *Theory of Resonances* (Kluwer Academic, Dordrecht, 1989).
- [7] A. M. Badalyan, L. P. Kok, M. I. Polikarpov és Yu. A. Simonov, Phys. Rep. **82**, 31, (1982).
- [8] Marx Gy., *Kvantummechanika* (Műszaki, Budapest, 1971).
- [9] K. Wildermuth és W. McClure *Cluster Representation of Nuclei* (Springer, Berlin, 1966).
- [10] K. Wildermuth és Y. C. Tang *A Unified Theory of the Nucleus* (Academic, New York, 1977).
- [11] Y. C. Tang, *Topics in Nuclear Physics*, szerk. T. T. S. Kuo és S. S. M. Wong (Lecture Notes in Physics 145., Springer, Berlin, 1981) 571. o.
- [12] Prog. Theor. Phys. Suppl. **62**, (1980).
- [13] Y. C. Tang, M. LeMere és D. R. Thompson, Phys. Rep. **47**, 167 (1978).
- [14] Lovas R., *Nukleoncsomók atommagokban és magreakciókban*, Doktori értekezés, Debrecen, 1987.
- [15] Kruppa A., *A generátorkoordinátás modell általánosításai és alkalmazásuk a ${}^6\text{Li}$ és ${}^8\text{Be}$ atommagra*, Kandidátusi értekezés, Debrecen, 1988.
- [16] Riesz F. és Szőkefalvi-Nagy B., *Funkcionálanalízis* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1988).
- [17] B. Mulligan, L. G. Arnold, B. Bagchi és T. O. Krause, Phys Rev. C **13**, 2131, (1976).
- [18] M. Abramowitz és I. A. Stegun (szerk.), *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1964).

- [19] B. A. Fuksz és B. V. Sabat, *Komplex változós függvények és néhány alkalmazásuk* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1976).
- [20] R. J. Eden és J. R. Taylor Phys. Rev. **133**, B1575 (1964).
- [21] Gyarmati B., *A Gamow-állapotokról*, Kandidátusi értekezés, Debrecen, 1971.
- [22] R. G. Lovas és M. A. Nagarajan, J. Phys. A **15**, 2383 (1982).
- [23] A. U. Hazi és H. S. Taylor, Phys. Rev. A **1**, 1109 (1970).
- [24] G. F. Filippov, Riv. Nuovo Cim. **12**, 1 (1989).
- [25] H. A. Yamani és L. Fishman, J. Math. Phys. **16**, 410 (1975).
- [26] B. G. Giraud, M. V. Mihailović, R. G. Lovas és M. A. Nagarajan, Ann. Phys. (N. Y.) **140**, 29 (1982).
- [27] I. P. Okhrimenko, Few-Body Systems **2**, 169 (1987).
- [28] A. Csótó, B. Gyarmati és A. T. Kruppa, Few-Body Systems **11**, 149 (1991).
- [29] Y. K. Ho, Phys. Rep. **99**, 1 (1983).
- [30] Proceedings of the Sanibel Workshop Complex Scaling, 1978 [Int. J. Quantum Chem. **14**, 343 (1978)].
- [31] M. Reed és B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics* (Academic, New York, 1978).
- [32] J. Aguilar és J. M. Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 269 (1971); E. Balslev és J. M. Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 280 (1971); B. Simon, Commun. Math. Phys. **27**, 1 (1972).
- [33] E. Brändas és P. Froelich, Phys. Rev. A **16**, 2207 (1977); R. Yaris és P. Winkler, J. Phys. **B11**, 1475 (1978).
- [34] E. Balslev, *Resonances*, szerk. E. Brändas és N. Elander (Lecture Notes in Physics 325., Springer, Berlin 1989) 35. o.
- [35] A. Csótó, B. Gyarmati, A. T. Kruppa, K. F. Pál és N. Moiseyev, Phys. Rev. A **41**, 3469 (1990).
- [36] Gyarmati B., *A potenciál szeparálható közelítése és alkalmazásai a mag- és atomfizikában*, Doktori értekezés, Debrecen, 1985.
- [37] H. A. Bethe és M. E. Rose, Phys. Rev. **51**, 283 (1937).
- [38] N. Wiener, *The Fourier Integral and Certain of its Applications* (Dover, New York, 1969).
- [39] Lovas R., Fizikai Szemle **37**, 141 (1987).
- [40] R. Beck, F. Dickmann és R. G. Lovas, Ann. Phys. (N. Y.) **173**, 1 (1987).
- [41] Kruppa A., ATOMKI Riport X/23 (1985).
- [42] M. Kamimura, Prog. Theor. Phys. Suppl. **68**, 236 (1980).
- [43] R. Beck, F. Dickmann és A. T. Kruppa, Phys. Rev. C **30** 1044, (1984).

- [44] R. Beck, *Kernforschungszentrum Karlsruhe, Report KfK 3261* (1981).
- [45] R. Beck, R. Krivec és M. V. Mihailović, *Nucl. Phys.* **A363**, 365 (1981).
- [46] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North Holland, Amsterdam, 1961).
- [47] T. Mertelmeier és H. M. Hofmann, *Nucl. Phys.* **A459**, 387 (1986).
- [48] K. Varga és R. G. Lovas, *Phys. Rev. C* **43**, 1201 (1991).
- [49] M. Kamimura, *Phys. Rev. A* **38**, 621 (1988).
- [50] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky, V. T. Voronchev és P. B. Sazonov, *Nucl. Phys.* **A453**, 365 (1986).
- [51] H. Hackenbroich, *Z. Phys.* **231**, 216 (1970).
- [52] K. Varga, Nem publikált eredmény.
- [53] A. Csótó és R. G. Lovas, *Dynamical microscopic three-cluster description of ${}^6\text{Li}$* , *Phys. Rev. C*, megjelenőben.
- [54] F. Ajzenberg-Selove, *Nucl. Phys.* **A413**, 1 (1984).
- [55] D. R. Lehman és W. C. Parke, *Phys. Rev. C* **28**, 364 (1983).
- [56] D. R. Lehman és M. Rajan, *Phys. Rev. C* **25**, 2743 (1982).
- [57] H. Kanada, T. Kaneko és Y. C. Tang, *Phys. Rev. C* **38**, 2013 (1988).
- [58] R. Krivec és M. V. Mihailović, *J. Phys. G* **8**, 821 (1982).
- [59] R. G. Lovas, A. T. Kruppa, R. Beck és F. Dickmann, *Nucl. Phys.* **A474**, 451 (1987).
- [60] A. T. Kruppa, R. Beck és F. Dickmann, *Phys. Rev. C* **36**, 327 (1987).
- [61] M. Unkelbach és H. M. Hofmann, *Few-Body Systems* **11**, 143 (1991).
- [62] R. G. Lovas, A. T. Kruppa és J. B. J. M. Lanen, *Nucl. Phys.* **A516**, 325 (1990).
- [63] R. Beck, F. Dickmann és R. G. Lovas, *Nucl. Phys.* **A446**, 703 (1985).
- [64] K. Hahn, E. W. Schmid és P. Doleschall, *Phys. Rev. C* **31**, 325 (1985).
- [65] D. R. Lehman, M. Rai és A. Ghovanlou, *Phys. Rev. C* **17**, 744 (1978).
- [66] W. C. Parke és D. R. Lehman, *Phys. Rev. C* **29**, 2319 (1984).
- [67] H. Kanada, T. Kaneko, S. Saito és Y. C. Tang, *Nucl. Phys.* **A444**, 209 (1985).
- [68] P. Heiss és H. H. Hackenbroich, *Phys. Lett.* **30B**, 373 (1969).
- [69] I. Reichstein és Y. C. Tang, *Nucl. Phys.* **A158**, 529 (1970).
- [70] G. Blüge és K. Langanke, *Phys. Rev. C* **41**, 1191 (1990).
- [71] G. Blüge és K. Langanke, *Few-Body Systems* **11**, 137 (1991).
- [72] A. Hasegawa és S. Nagata, *Prog. Theor. Phys.* **45**, 1786 (1971).
- [73] T. Kaino, *Nucl. Phys.* **A460**, 559 (1986).
- [74] H. Furutani, H. Kanada, T. Kaneko, S. Nagata, H. Nishioka, S. Okabe, S. Saito, T. Sakuda és M. Seya, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **68**, 193 (1980).

- [75] L. Lovitch és S. Rosati, Phys. Rev. **140**, B877 (1965).
- [76] L. Lovitch és S. Rosati, Comput. Phys. Commun. **2**, 353 (1971).
- [77] J. L. Friar, Phys. Rev. C **20**, 325 (1979).
- [78] V. G. J. Stoks, P. C. van Campen, T. A. Rijken és J. J. de Swart, Phys. Rev. Lett. **61**, 1702 (1988).
- [79] H. A. Bethe és P. Morrison, *Elementary Nuclear Theory* (John Wiley & Sons, New York, 1956).
- [80] Györgyi G., *Elméleti magfizika* (Műszaki, Budapest, 1965).
- [81] R. A. Arndt és L. D. Roper, Phys. Rev. C **1**, 903 (1970).
- [82] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky, V. T. Voronchev és P. B. Sazonov, Nucl. Phys. **A417**, 128 (1984).
- [83] V. I. Kukulin, V. T. Voronchev, T. D. Kaipov és R. A. Eramzhyan, Nucl. Phys. **A517**, 221 (1990).
- [84] J. Bang és C. Gignoux, Nucl. Phys. **A313**, 119 (1979).
- [85] B. V. Danilin, M. V. Zhukov, A. A. Korshennikov és L. V. Chulkov, Yad. Fiz. **53**, 71 (1991).
- [86] S. Nakaichi-Maeda és E. W. Schmid, Z. Phys. A **318**, 171 (1984).
- [87] D. R. Lehman és W. C. Parke, Few-Body Systems **1**, 193 (1986).
- [88] R. de Tournell, B. Rouben és D. W. L. Sprung, Nucl. Phys. **A242**, 445 (1975).
- [89] R. V. Reid, Ann. Phys. (N. Y.) **50**, 411 (1968).
- [90] D. Gogny, P. Pires és R. de Tournell, Phys. Lett. **32B**, 591 (1970).
- [91] R. A. Arndt, R. H. Hackman és L. D. Roper, Phys. Rev. C **15**, 1002 (1977).
- [92] R. A. Eramzhyan, V. I. Kukulin, G. G. Ryzhikh és Yu. M. Tchuvil'sky, Australian National University Preprint ANU-ThP-3/92 (1992).
- [93] Particle Data Group, Phys. Lett. B **204**, 1 (1988).
- [94] R. E. Brown, N. Jarmie és G. M. Hale, Phys. Rev. C **35**, 1999 (1987).
- [95] Gy. Bencze, Nucl. Phys. **A492**, 459 (1989).
- [96] J. Humblet és L. Rosenfeld, Nucl. Phys. **26**, 529 (1961).
- [97] G. M. Hale, R. E. Brown és N. Jarmie, Phys. Rev. Lett. **59**, 763 (1987).
- [98] B. Haesner, W. Heeringa, H. O. Klages, H. Dobiash, G. Schmalz, P. Schwarz, J. Wilczynski és B. Zeitnitz, Phys. Rev. C **28**, 995 (1983).
- [99] B. C. Pearce és B. F. Gibson, Phys. Rev. C **40**, 902 (1989).
- [100] B. M. Karnakov, V. D. Mur, S. G. Pozdnyakov és V. S. Popov, JETP Lett. **51**, 399 (1990).
- [101] L. N. Bogdanova, G. M. Hale és V. E. Markushin, Phys. Rev. C **44**, 1289 (1991).

-
- [102] F. S. Chwieroth, Y. C. Tang és D. R. Thompson, *Phys. Rev. C* **9**, 56 (1974).
- [103] G. Blüge, K. Langanke, H. G. Reusch és C. Rolfs, *Z. Phys. A* **333**, 219 (1989).
- [104] G. R. Plattner, A. D. Bacher és H. E. Conzett, *Phys. Rev. C* **5**, 1158 (1972).
- [105] B. Hoop és H. H. Barschall, *Nucl. Phys.* **83**, 65 (1966).
- [106] G. M. Hale és D. C. Dodder, *Nuclear Cross Sections for Technology*, szerk. J. L. Fowler, C. H. Johnson és C. D. Bowman (National Bureau of Standards, Washington D. C., 1980), National Bureau of Standards Special Publication **594**, 650. o.
- [107] P. W. Lisowski, R. L. Walter, G. G. Ohlsen és R. A. Hardekopf, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 809 (1976).
- [108] B. Jenny, W. Gruebler, P. A. Schmelzbach, V. König és H. R. Bürgi, *Nucl. Phys.* **A337**, 77 (1980).
- [109] M. A. Natiello és A. R. Engelmann, *Resonances*, szerk. E. Brändas és N. Elander (Lecture Notes in Physics 325., Springer, Berlin 1989) 329. o.; E. Brändas, M. Rittby és N. Elander, ugyanott, 345. o.
- [110] A. Csótó, Nem publikált eredmény.