

Estructura Nuclear

con

Fermionic Molecular Dynamics

- estados en el continuo -

A. Cribeiro Santalla, T. Neff, R. Roth, H. Feldmeier



- Introducción y Motivación
- *Fermionic Molecular Dynamics*
- Más allá del campo medio
- Estados en el continuo
- Conclusiones y Perspectivas

Introducción y Motivación

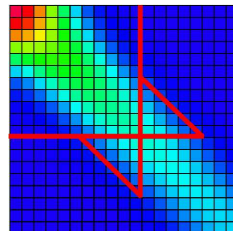
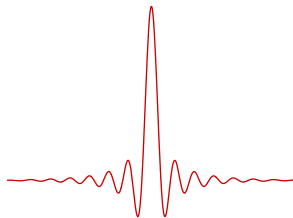
Física Nuclear Teórica en el GSI

- El GSI (Gesellschaft für Schwerionenforschung):
Centro para la Investigación con Iones Pesados
 - experimentos
 - teoría
 - ☞ *Fermionic Molecular Dynamics* (FMD)



Interés en la Estructura Nuclear

- Descripción del núcleo atómico
 - microscópica
 - *ab initio*
 - obtención de propiedades nucleares
 - ☞ niveles de energía, radios medios, deformaciones, densidades...
- Astrofísica nuclear
 - $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ nucleares determinan evolución estelar
 - Influencia en nucleosíntesis estelar
 - Parámetros de modelos estelares
 - ☞ velocidades de reacciones a baja energía



Nueva aplicación de FMD

- Estados en el continuo
 - Parámetros de resonancias
 - *phase shifts* en colisión elástica

Fermionic Molecular Dynamics

El Sistema Nuclear

Objetivo

- Núcleo como sistema de muchos cuerpos
 - grados de libertad nucleónicos
 - sistema cuántico no relativista
 - modelo microscópico
 - una única interacción

Principios

- Mecánica cuántica

$$\tilde{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

- Principio variacional \Rightarrow estado fundamental

$$\min(\langle\Psi|\tilde{H}|\Psi\rangle/\langle\Psi|\Psi\rangle)$$

Aproximaciones de FMD

- Estado

- Campo medio
- Hartee-Fock \Rightarrow determinante de Slater
- respeta estadística cuántica
- estados nucleónicos localizados

- Interacción

- UCOM
- efectiva
- corrección a tres cuerpos
- derivada de interacciones realistas

Limitaciones

- Sólo estado fundamental
- Espacio de Hilbert limitado
- No posee los números cuánticos apropiados

Fermionic Molecular Dynamics

El Modelo

Representación FMD

- Estado *many-body* (fermiones)

$$|Q\rangle = \mathcal{A}(|q_1\rangle \otimes |q_2\rangle \otimes \dots \otimes |q_A\rangle)$$

- Estado de cada partícula:

$$|q_k\rangle = |a_k, \vec{b}_k\rangle \otimes |\chi_k\rangle \otimes |\xi_k\rangle$$

- Base no ortogonal

⇒ tiempo de cómputo crece con A^4

Interacción Nucleón-Nucleón

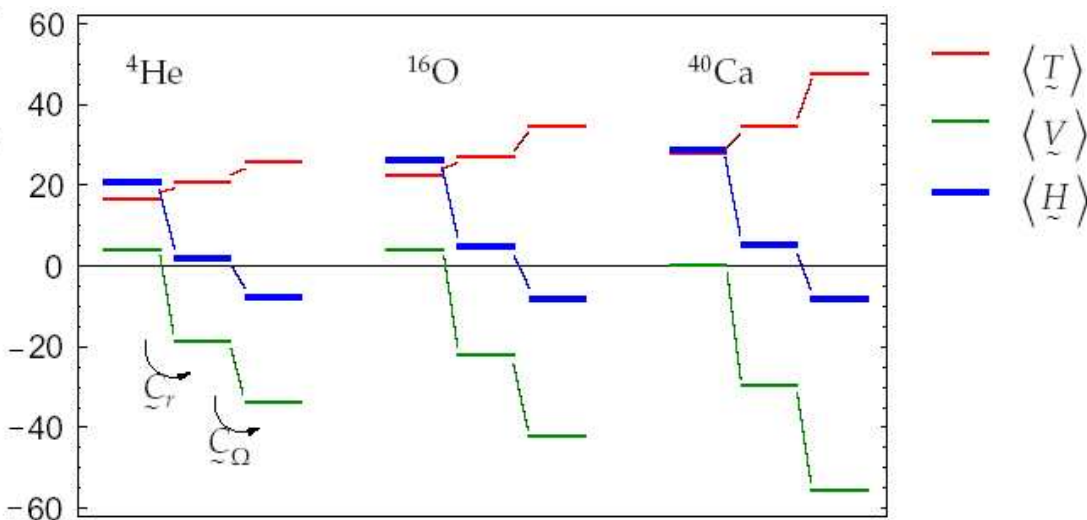
- Derivada de interacciones realistas

- intercambio de mesones: Bonn
- fenomenológicas: Argonne
- Describen *phase shifts* nucleón-nucleón y propiedades del deuterón

- Interacción efectiva

- reproduce muchas propiedades nucleares
- correlaciones de corto alcance no descritas por determinantes de Slater

energy [A MeV]



- UCOM: $\tilde{H} \Rightarrow \tilde{C}^\dagger \tilde{H} \tilde{C}$, $\tilde{C}^\dagger \tilde{C} = \mathbb{1}$

- Adapta interacción a determinantes de Slater
- Incluye explícitamente correlaciones de corto alcance (radiales y tensoriales)
- Término efectivo corrige ausencia de fuerzas y correlaciones a tres cuerpos

- Simple FMD
- **Perform Variation**

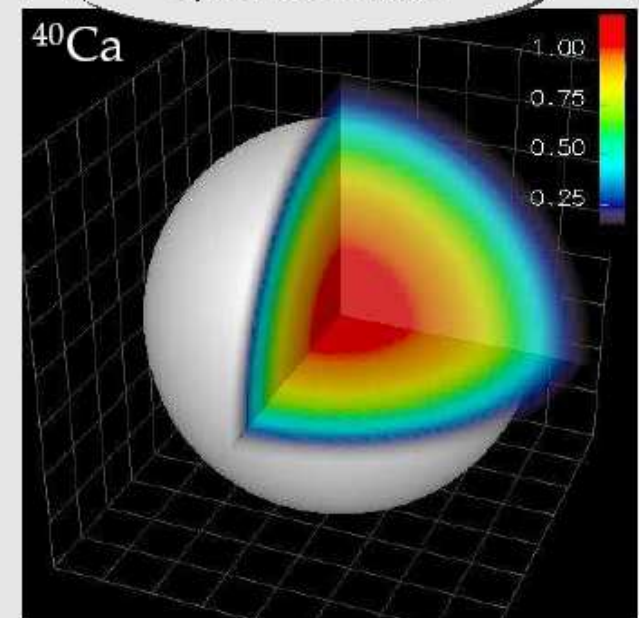
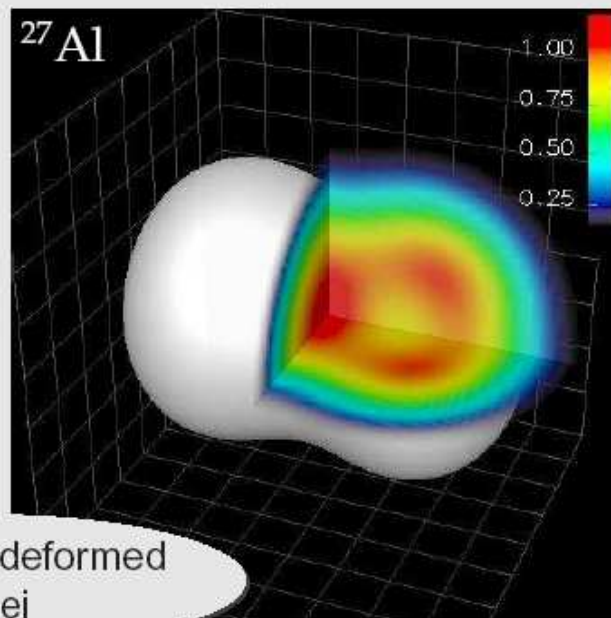
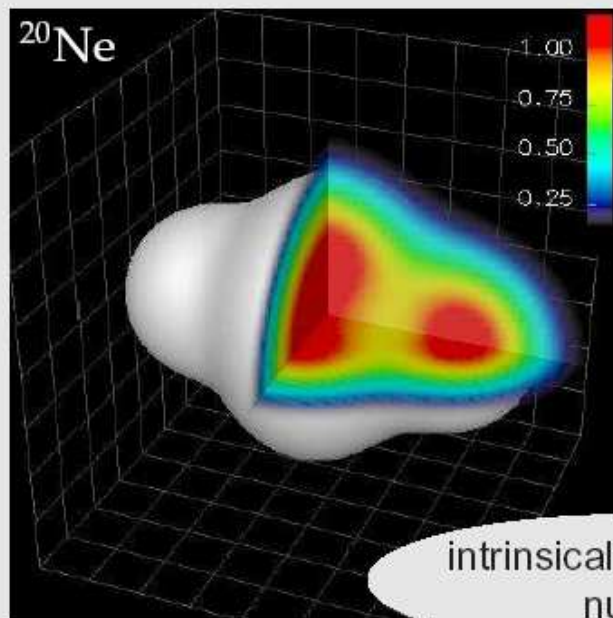
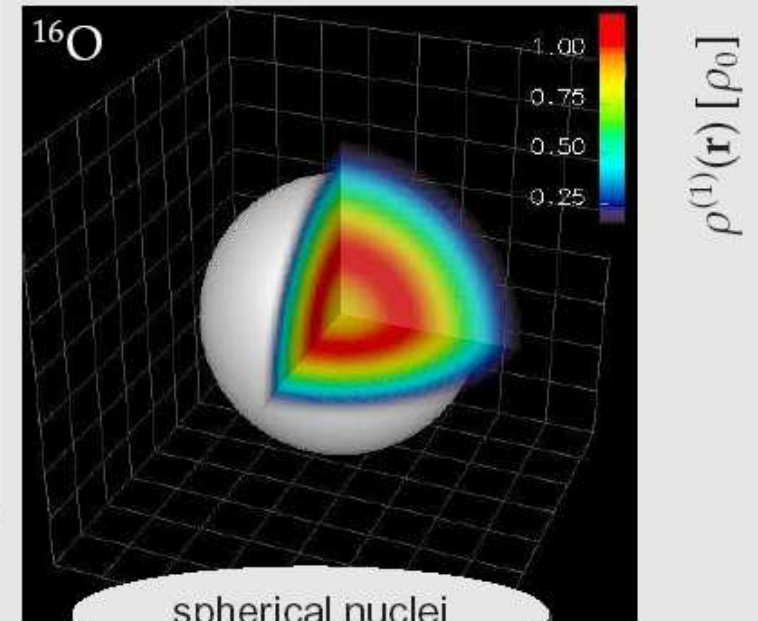
Minimization

➔ minimize Hamiltonian with respect to all single-particle parameters q_k

$$\min_{\{q_k\}} \frac{\langle Q | \hat{H} - T_{cm} | Q \rangle}{\langle Q | Q \rangle}$$

➔ this is a Hartree-Fock calculation in our particular single-particle basis

➔ the mean-field may break the symmetries of the Hamiltonian



Más allá del Campo Medio

Métodos

Projection After Variation (PAV)

- ➔ Restaurar simetrías del Hamiltoniano rotas por el campo medio
 - Rotacional \Rightarrow Momento angular
 - De inversión \Rightarrow Paridad
 - **Traslacional \Rightarrow Centro de masas**

$$|J^\pi M; Q\rangle = \tilde{P}^\pi \sum_K \tilde{P}_{MK}^J c_K |Q\rangle$$

$$\tilde{P}_{MK}^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d^3\Omega D_{MK}^{J*}(\Omega) \tilde{R}(\Omega)$$

$$\sum_{K'} \langle Q | \tilde{H} \tilde{P}_{KK'}^J | Q \rangle \cdot c_{K'} = E_K^J \sum_{K'} \langle Q | \tilde{P}_{KK'}^J | Q \rangle \cdot c_{K'}$$

Multiconfiguration Mixing

- ➔ Ampliar el espacio de Hilbert
 - Conjunto de estados FMD
 - proyectados PAV (es, en cierto modo, Multiconf.)
 - El problema determina los estados a considerar
- ➔ Diagonalizar \tilde{H} en el nuevo espacio de Hilbert

$|Q_a\rangle$ obtenidos por variación con ligaduras

- dipolares, cuadrupolares, ...

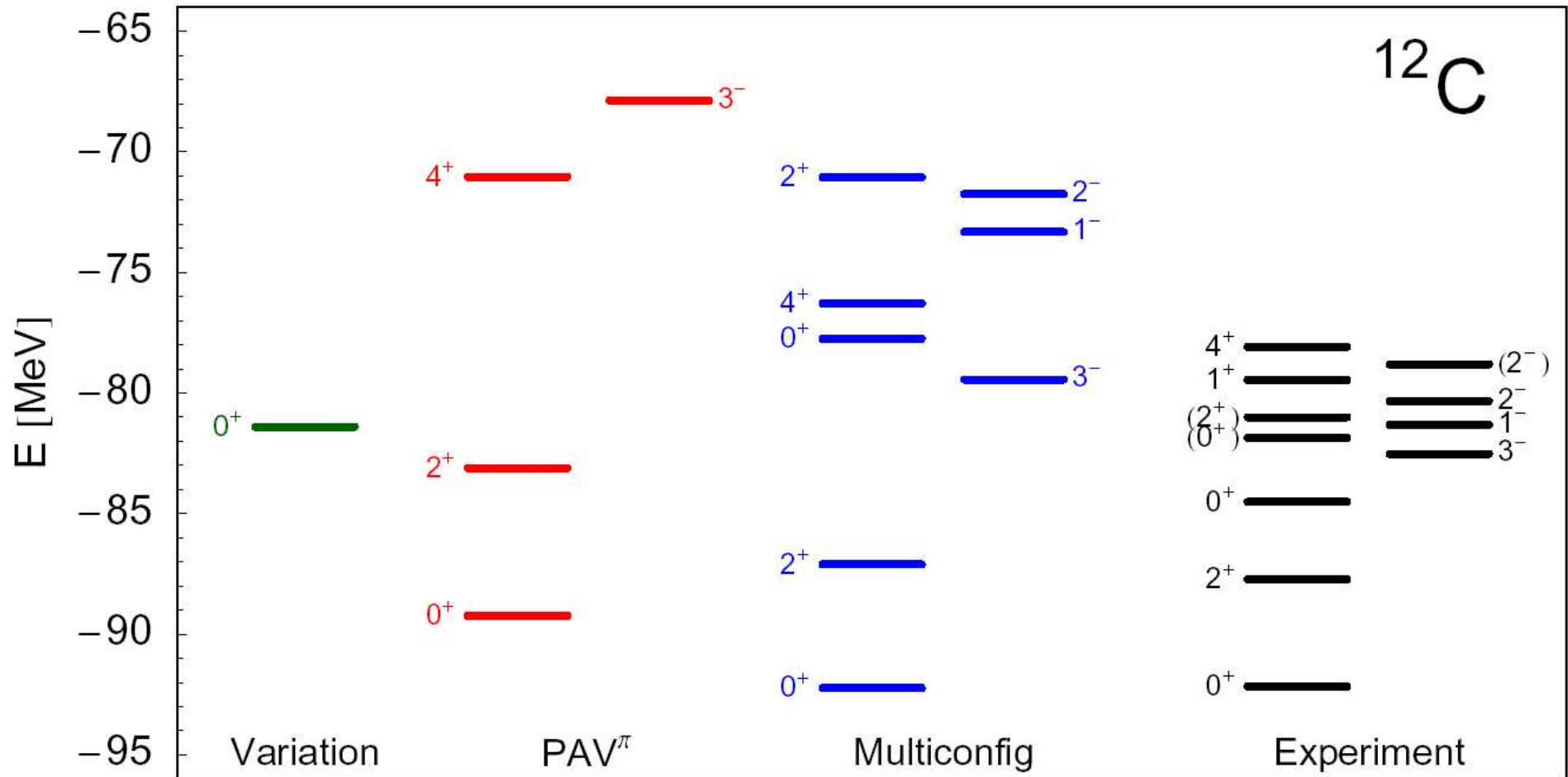
$$|\Psi\rangle = \sum_a \Psi_a |J^\pi M; Q_a\rangle$$

$$\begin{aligned} \sum_a \langle J^\pi M; Q_b | \tilde{H} | J^\pi M; Q_a \rangle \cdot \Psi_a &= \\ &= E_{Kb}^{J^\pi} \sum_a \langle J^\pi M; Q_b | J^\pi M; Q_a \rangle \cdot \Psi_a \end{aligned}$$

Limitación: no trata el continuo

Más allá del Campo Medio

Resultados

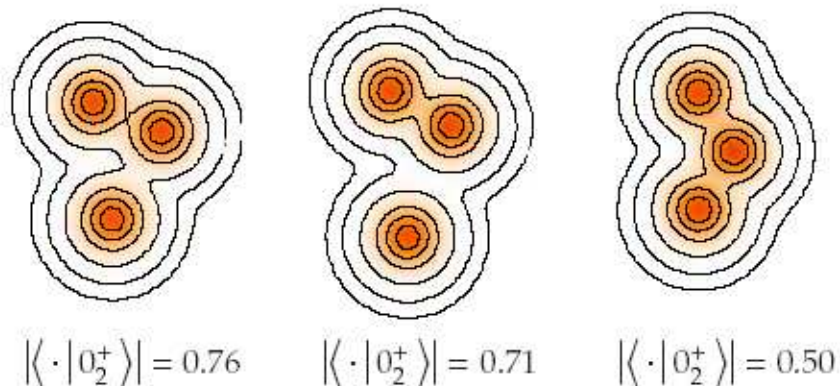


PAV y Multiconfig resultan en bandas rotacionales y vibratoriales y mejoran el nivel fundamental

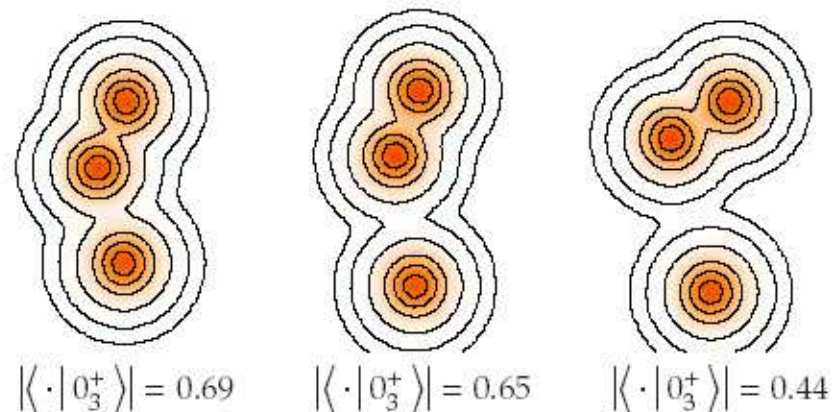
Más allá del Campo Medio

Resultados

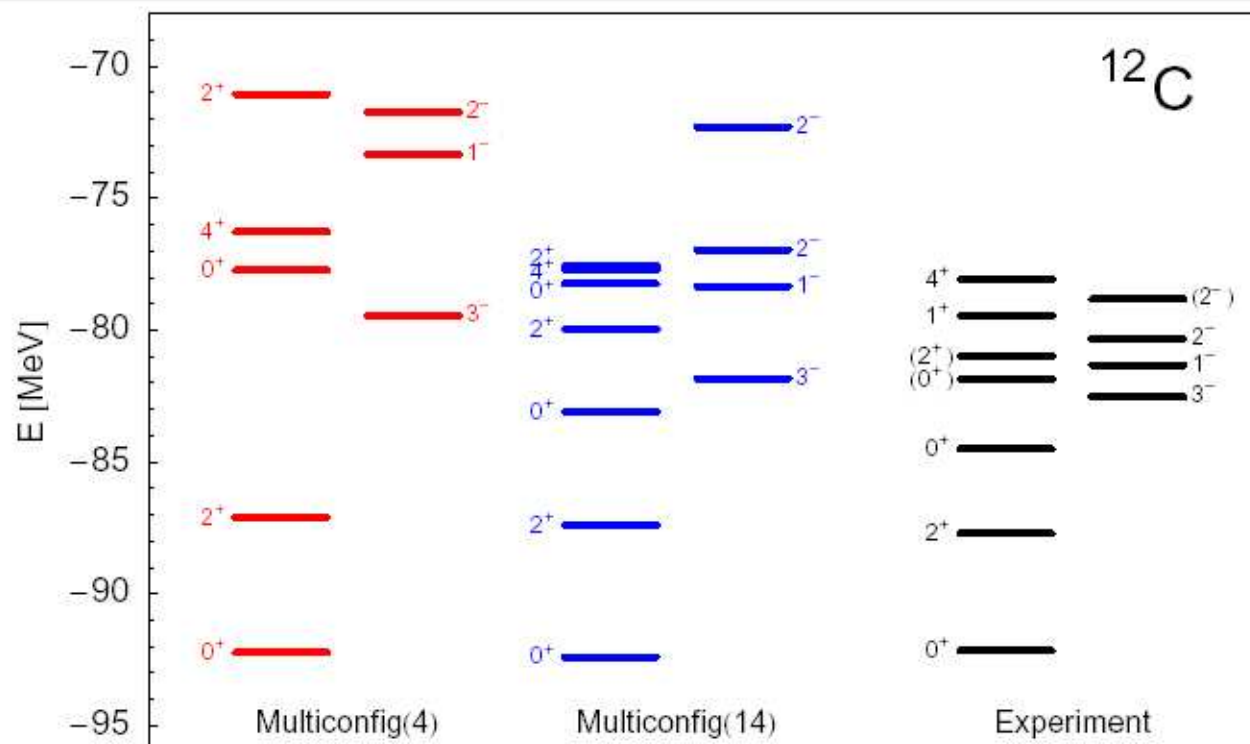
0_2^+ state



0_3^+ state



	Multiconfig	Experiment
E_b [MeV]	92.4	92.2
r_{charge} [fm]	2.52	2.47
$B(E2)(0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ [$e^2 \text{fm}^4$]	42.9	39.7 ± 3.3
$M(E0)(0_1^+ \rightarrow 0_2^+)$ [fm^2]	5.67	5.5 ± 0.2
$r_{rms}(0_1^+)$ [fm]	2.38	
$r_{rms}(0_2^+)$ [fm]	3.42	
$r_{rms}(0_3^+)$ [fm]	3.85	
$r_{rms}(2_1^+)$ [fm]	2.44	
$r_{rms}(2_2^+)$ [fm]	3.64	
$r_{rms}(2_3^+)$ [fm]	3.63	
$Q(2_1^+)$ [$e\text{fm}^2$]	5.85	
$Q(2_2^+)$ [$e\text{fm}^2$]	-23.65	
$Q(2_3^+)$ [$e\text{fm}^2$]	5.89	



Estados en el Continuo

Extendiendo FMD

Intereses

- Determinación de parámetros de resonancias y *phase shifts* de colisiones elásticas

Método

- Imposición de condiciones de contorno en el problema de autovalores

Complicaciones

- Estados completamente antisimetrizados
- Base *many-body* no ortogonal

Soluciones

- Representación de coordenada colectiva
- Condiciones de contorno lineales y homogéneas

Estados en el Continuo

Formulación del Problema

Espacio Modelo

- Conjunto de estados *many-body* **no ortogonales** y **antisimetrizados** $\{ | J^\pi M; Q_i \rangle; i = 1, 2, \dots \}$
- Números cuánticos apropiados para los canales asintóticos
- Cubre el espacio de Hilbert asociado al proceso: distancia media entre clusters D_i

$$| \text{contorno 1} \rangle + \dots + | \text{contorno 2} \rangle + \dots + | \text{contorno } D_i \rangle + \dots$$

Problema de Autovalores

- Estado de prueba $|\Psi\rangle = \sum_i \Psi_i | J^\pi M; Q_i \rangle$
- Ecuación de Schrödinger *many-body*

$$\tilde{H} |\Psi\rangle = Z |\Psi\rangle$$

- Con condiciones de contorno

multiconfiguration calculations

Condiciones de Contorno

- $|\Psi\rangle$ describe clusters para $r \leq R$
- Imponer el comportamiento asintótico

$$\langle r | \Psi \rangle \underset{r > R}{\propto} \langle r | w \rangle$$

$$\langle r | \Psi \rangle ?$$

representación de coordenada colectiva

condiciones de contorno homogéneas y lineales



problema de autovalores modificado

Estados en el Continuo

Ecuaciones Lineares y Homogéneas

Condiciones de Contorno para un Sistema Many-Body

Representación de Coordenada Colectiva

$$\langle \beta(r) | \Psi \rangle \stackrel{r \gg R}{\propto} \langle r | w \rangle$$

Punto de Evaluación Único

$$\frac{\langle \beta(R) | \dot{B}^s | \Psi \rangle}{\langle \beta(R) | \Psi \rangle} = \frac{\langle R | \dot{B}^s | w \rangle}{\langle R | w \rangle}, \quad s = 1, 2, \dots$$

Condiciones de Contorno Lineares y Homogéneas

$$\sum_j \left(\langle \beta(R) | \dot{B}^s | J^\pi M; Q_j \rangle - \frac{\langle R | \dot{B}^s | w \rangle}{\langle R | w \rangle} \langle \beta(R) | J^\pi M; Q_j \rangle \right) \Psi_j = 0$$

$$\sum_{j=1} H_{ij} \Psi_j = Z \sum_{j=1} N_{ij} \Psi_j$$

$$\Psi_l = \sum_{j=1}^n C_{lj} \Psi_j, \quad l = n+1, n+2, \dots$$

Problema de Autovalores Modificado

➔ Sustituir coeficientes en el problema de autovalores

$$\sum_{j=1}^n H_{ij} \Psi_j + \sum_{l=n+1} H_{il} \Psi_l = Z \left(\sum_{j=1}^n N_{ij} \Psi_j + \sum_{l=n+1} N_{il} \Psi_l \right) \Rightarrow \sum_{j=1}^n H_{ij}^{BC} \Psi_j = Z \sum_{i=1}^n N_{ij}^{BC} \Psi_j$$

$$Z = E - i \frac{\Gamma}{2}$$

Estados en el Continuo

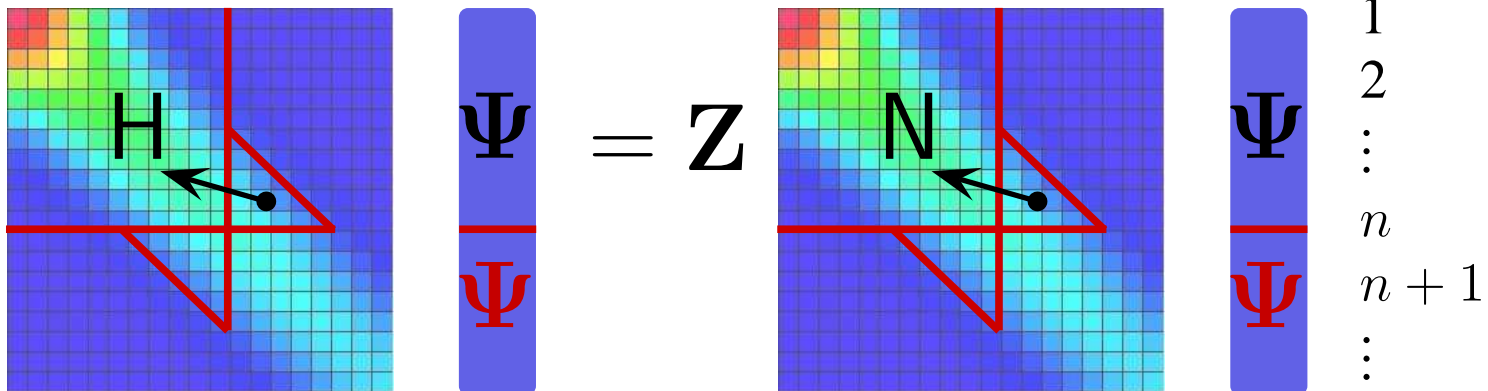
Interpretación Gráfica

Espacio de Hilbert Limitado

- Solución válida sólo en una cierta región
- La descripción falla cerca del contorno

Implicaciones de una Base No Ortogonal

- Solapamientos no nulos
- Los elementos de matriz forman una banda



Consecuencias

- Información perdida por el corte → incluirla imponiendo condiciones de contorno
- Necesidad de varias condiciones de contorno → fijar varias derivadas

Estados en el Continuo

Aplicación a FMD

Coordenada Colectiva

$$\tilde{B} = \frac{1}{A^2} \sum_{i < j=1}^A (\tilde{\vec{x}}(i) - \tilde{\vec{x}}(j))^2$$

Comportamiento Asimptótico

- Onda de Coulomb
- Onda libre
- *scattering state*
- Resonancia (Gamov)

Base

Aproximación *frozen state*:
clusters en estado
fundamental

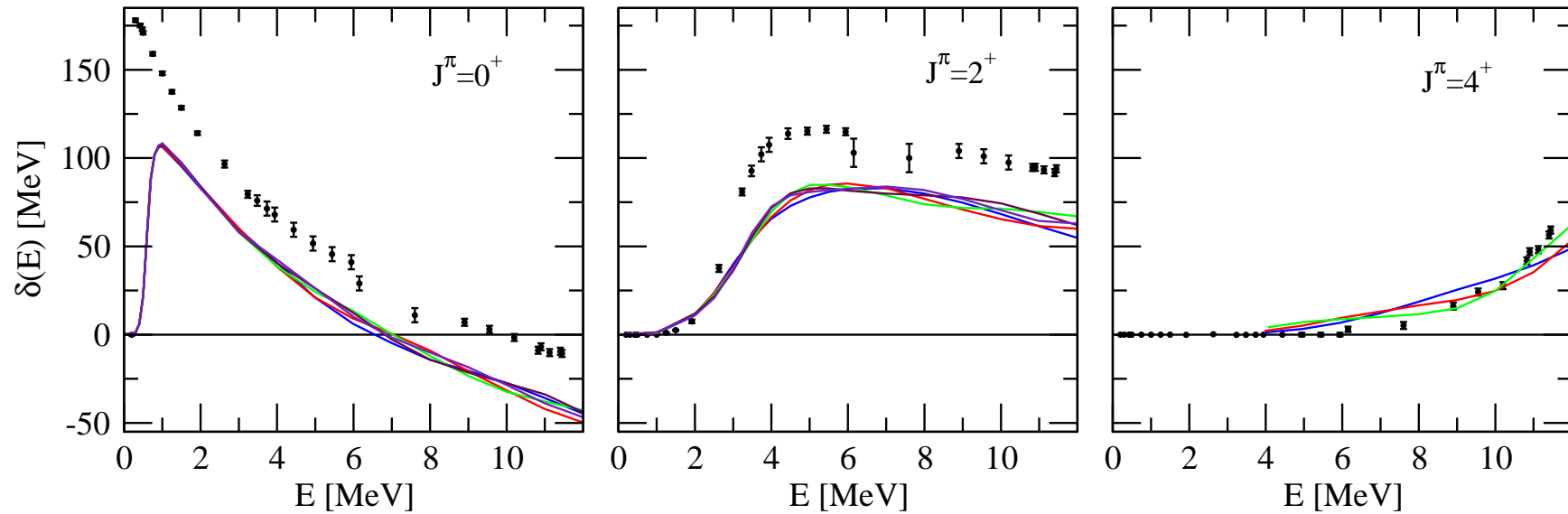
Resonancias en ${}^8\text{Be}$

		$J^\pi = 0^+$		$J^\pi = 2^+$		$J^\pi = 4^+$	
		E [MeV]	Γ [MeV]	E [MeV]	Γ [MeV]	E [MeV]	Γ [MeV]
	Experiment	0.09204(5)	$5.57(25) \cdot 10^{-6}$	3.12(1)	1.513(15)	11.44(15)	≈ 3.5
Volkov (α - α)	CLD	0.60	0.25	3.07	2.38	11.60	6.99
	CSM	0.59	0.24	3.07	2.39	11.60	7.04
	Phase Shift	0.60	0.25	3.07	2.38	11.60	7.00
	FMD (Gamov)	0.59	0.25	3.08	2.39	11.59	6.94
AV18-based	FMD (Gamov)	0.273(3)	0.0130(5)	2.71(2)	2.38(2)	-	-

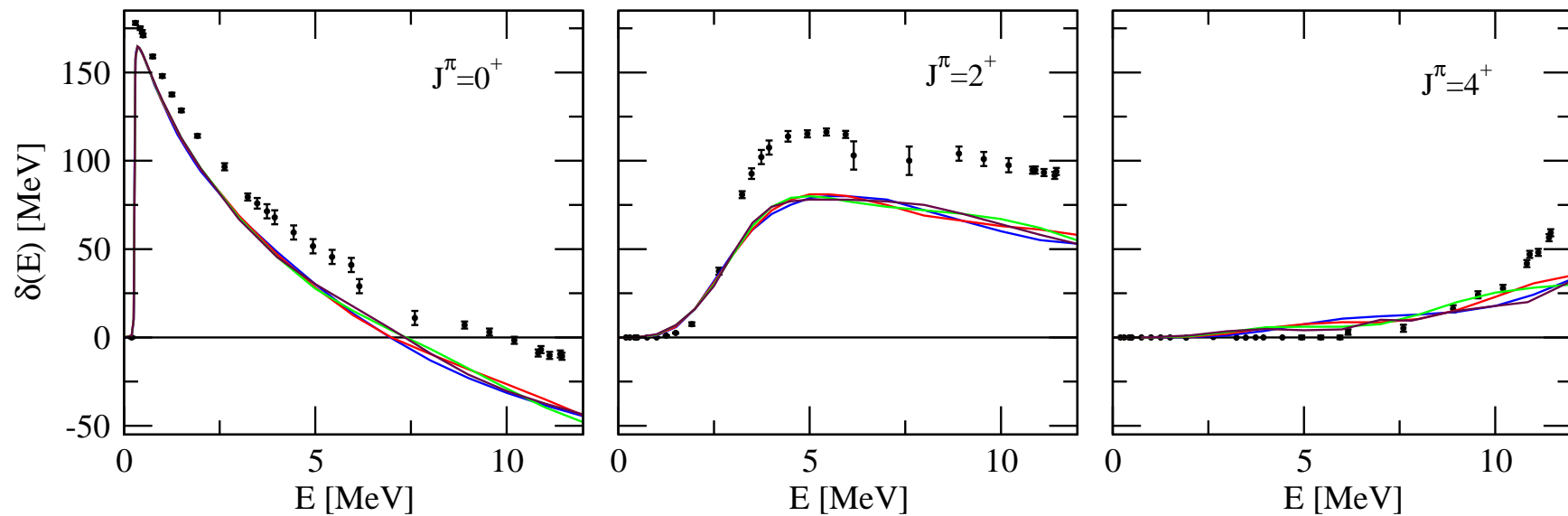
Estados en el Continuo Aplicación a FMD

Phase shifts en ^8Be

Volkov



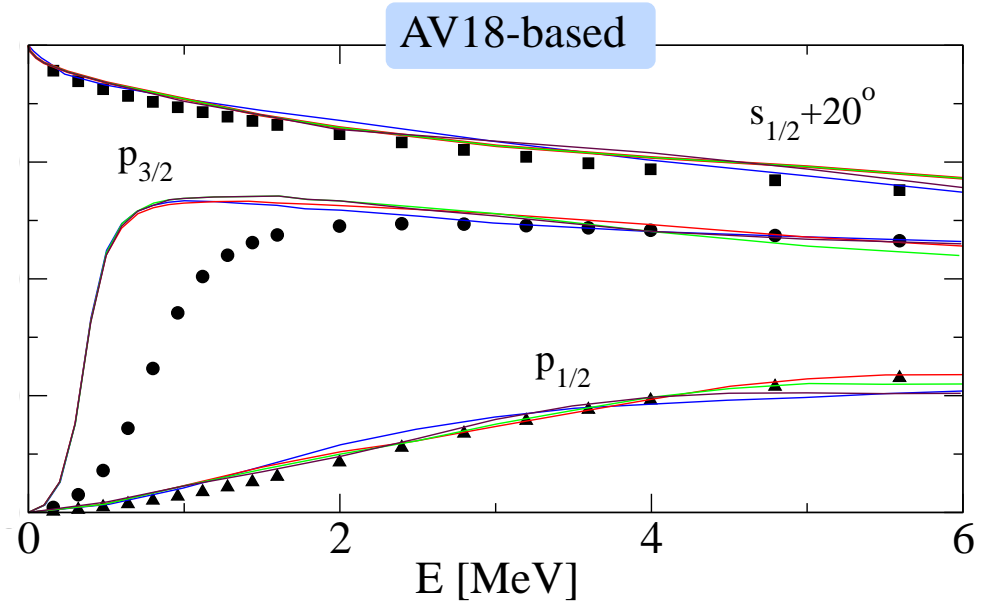
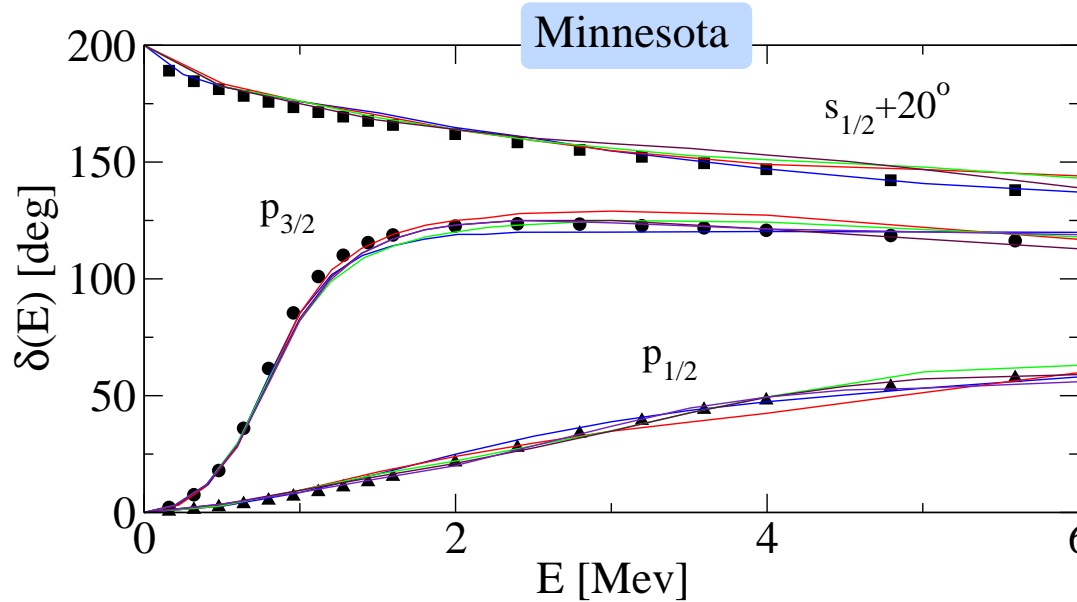
AV18-based



Estados en el Continuo Aplicación a FMD

Resonancias en ${}^5\text{He}$

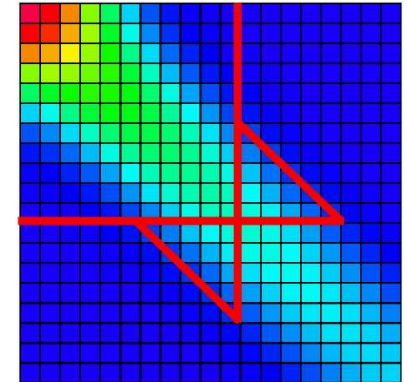
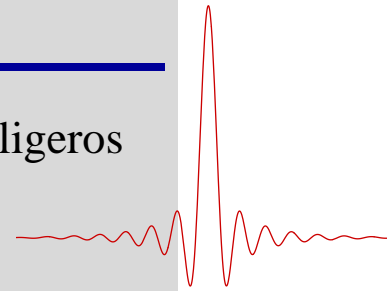
	$J^\pi = 3/2^-$		$J^\pi = 1/2^-$		
	E [MeV]	Γ [MeV]	E [MeV]	Γ [MeV]	
Experiment	0.798	0.648	2.07	5.57	
Minnesota (n- α)	CLD	0.78	0.64	2.01	5.42
	Phase Shift	0.78	0.64	1.98	5.45
	S-Matrix, RGM	0.76	0.63	1.89	5.20
	FMD (Gamov)	0.79	0.68	2.20	5.38
AV18-based	FMD (Gamov)	0.37	0.23	1.6	4.9



Conclusiones y Perspectivas

Conclusiones

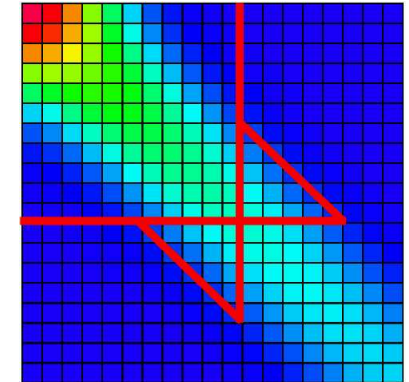
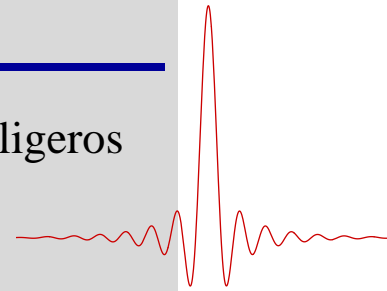
- ➔ Descripción microscópica consistente y unificada de núcleos ligeros
 - ✓ Base FMD muy adecuada y flexible
 - ✓ misma interacción basada en interacción realista
- ➔ Importancia de PAV, VAP y multiconfig
 - ✓ Energías de ligadura y radios bien descritos
- ➔ Estados en el continuo
 - ✓ Imposición de condiciones de contorno
 - Problema microscópico *many-body*
 - Antisim \Rightarrow Representación de coordenada colectiva
 - No ortog \Rightarrow Condiciones de contorno lineales y homogéneas
 - ✓ Obtención de resonancias y *phase shifts*
 - Validez confirmada por comparación a otros trabajos
 - Primeros resultados en FMD con interacción realista



Conclusiones y Perspectivas

Conclusiones

- ➔ Descripción microscópica consistente y unificada de núcleos ligeros
 - ✓ Base FMD muy adecuada y flexible
 - ✓ misma interacción basada en interacción realista
- ➔ Importancia de PAV, VAP y multiconfig
 - ✓ Energías de ligadura y radios bien descritos
- ➔ Estados en el continuo
 - ✓ Imposición de condiciones de contorno
 - Problema microscópico *manv-body*
 - Antisim \Rightarrow Representac
 - No ortog \Rightarrow Condicione
 - ✓ Obtención de resonancias y
 - Validez confirmada por
 - Primeros resultados en l



Perspectivas

- ➔ Estudio sistemático de núcleos ligeros
- ➔ Proyección en centro de masas
- ➔ en el continuo
 - mejor espacio de Hilbert (polarización, mejores estados nucleón)
 - Núcleos de interés en Astrofísica
 - Reacciones $A(a,b)B$ y canales acoplados
 - Potenciales núcleo-núcleo derivados de interacción nucleón-nucleón (con representación de coordenada colectiva)