

# Undersøgelse af den korrelerede gaussmetode i forbindelse med lette kerner

Andreas Torp Hammer\*  
Institut for Fysik og Astronomi, Aarhus Universitet, Danmark

3. april 2018

Vejleder:  
Dmitri Vladimir Fedorov

---

\*e-mail: 20115286@post.au.dk

### Abstract

When calculating the properties of light nuclei in low energy physics then the models are phenomenological and the free parameters are determined from fitting two nucleon scattering data and the properties of the deuteron to the models. As the scattering data often include very high energies it seems likely that it isn't too useful to low energy physics. On the other hand the models can't really reproduce the properties of light nuclei, aside from the deuteron, without including things like phenomenological three body forces.

In this thesis it is investigated whether it's possible to disregard the scattering data and instead build a model solely from the properties of light nuclei by using the correlated gaussian method. In this method a basis of gaussians are chosen which then are used to fit the energies and radii of several light nuclei. The entire thing is then minimised and the basis of gaussians gets more and more optimised per iteration. The reason being that the basis can be reused as the start for the next iteration due to the starting parameters only being slightly perturbed between iterations.

It was found that this method was possible and that without including any three body forces the binding energies of the deuteron, triton, and the helion was able to be reproduced within 15 to 20% of the experimental values. Furthermore the binding energy of the alpha particle was found within 1% of the experimental value. The rms radii were determined to a poorer accuracy, between 20 and 60%, albeit that is not surprising given that accuracy of the energies was given precedence in the minimisation.

## Resumé

Når lette kernerens egenskaber skal udregnes i lavenergifysik så er modellerne fænomenologiske og de frie parametre er bestemt ud fra tonukleonsspredningsdata samt deutronens egenskaber. Da spredningsdataene ofte inkluderer meget høje energier synes det sandsynligt, at det ikke er alt for brugbart for lavenergifysik. På den anden side kan modellerne ikke reproducere lette kernerens egenskaber, på nær deutronens, uden at inkludere fænomenologiske ting som trelegeme kræfter.

I denne afhandling undersøges det, hvorvidt det er muligt at se bort fra spredningsdata og i stedet bygge en model udelukkende fra lette kernerens egenskaber ved hjælp af den korrelerede gaussmetode. I denne metode dannes der en basis af gaussfunktioner, der benyttes til at bestemme energierne og radierne af flere lette kerner. Det hele bliver så minimeret og gaussfunktionsbaseren bliver mere og mere optimeret per iteration. Dette er fordi basisen kan genbruges som startpunkt for den næste iteration, da startparametrene kun ændres lidt mellem iterationer.

Det viste sig at metoden var mulig. Uden at inkludere nogen trelegeme kræfter kunne bindingsenergiene for deutronen, tritonen og helionen bestemmes til en præcision af 15 til 20%. Ydermere fandtes bindingsenergien af alfapartiklen til en præcision af 1% af eksperimentalværdien. Rms-radierne bestemtes til dårligere nøjagtighed, mellem 20 or 60%, men dette var ikke overraskende, da energiernes nøjagtighed vægtedes højest i minimeringen.

# Indhold

<b>Indhold</b>	<b>4</b>
<b>1 Indledning</b>	<b>5</b>
<b>2 Teori</b>	<b>7</b>
2.1 Kernekraefter . . . . .	7
2.2 Korreleret gaussmetode . . . . .	8
<b>3 Resultater</b>	<b>12</b>
3.1 Konvergens . . . . .	12
3.2 Resultater . . . . .	19
<b>4 Konklusion</b>	<b>22</b>
<b>Litteratur</b>	<b>24</b>

# 1 Indledning

En vigtig del af kernefysik er kernekræfterne. I modsætning til coulombkraften mellem elektrisk ladede partikler, kan kernekræfterne desværre ikke udledes fra den fundamentale teori, QCD, da denne er ikke perturbativ ved lave energier. Der må derfor benyttes fænomenologiske nukleon–nukleon potentialer.[4]

Disse potentialer vil typisk indeholde central-, spin–spin-, tensor-, spin–orbit-samt andre kræfter med forskellige modelformfaktorer. Eksempelvis gaussiske, yukawa, eksponentielle, eller andre. Disse formfaktorer indeholder adskillige frie parametre, der bestemmes ud fra eksperimentielle data.[3]

Der findes mange forskellige fænomenologiske sæt af nukleon–nukleon potentialer, hver med forskellige formfaktorer og forskellige parametersæt. De er alle bestemt ud fra data fra tonukleonssystemer, altså nukleon–nukleon spredning og deutronen, da numeriske beregninger af tre- og firenukleonssystemer er svære. Særligt under fastsættelsen af parametrene fra de eksperimentielle data, hvor bindingsenergiene af fånukleonssystemerne må beregnes adskillige gange.[3]

Disse potentialer kan oftest beskrive spredningsdata op til meget høje energier – på hundrede af MeV skalaen. For lavenergifysik med fånukleonssystemer er dette dog nok irrelevant. Potentialerne fejler derimod med hensyn til at reproducere korrekte bindingsenerier for tre- og firenukleonssystemer med mindre der tilføjes en yderligere fænomenologisk trepartikelskraft.[4]

Det er derfor interessant at ofre de for lavenergifysik antageligt irrelevante højenergispredningsdata for i stedet at benytte data fra tre- og firepartikelssystemer til bestemmelse af potentialerne. Dette kunne give en bedre beskrivelse af bundne fånukleonssystemer. Særligt da der er indikationer på, at kernekræfterne i lavenergiregimet måske er uafhængige af formfaktorerne.[2]

Bestemmelse af potentialer ud fra tre- og firenukleonsdata har hidtil været anset for upraktisk, da der under parameterbestemmelsen numerisk skal beregnes tre- og firelegemesystemer tusindvis af gange. Disse systemer værende helionen, altså helium–3, tritonen, samt alfapartiklen. Dette er svært.

Der er dog en metode, der kan gøre denne idé mere praktisk. Nemlig den korrelerede gaussmetode. I denne metode bruges det meste af tiden på basisoptimering, hvorimod potentialerne kun er ændret en lille smule for hver iteration af parameterbestemmelsen. Den optimerede basis fra foregående iteration kan derfor genbruges, hvilket gør de gentagne fålegemeberegninger hurtige nok, til at være praktiske.

Denne idé vil i denne afhandling forsøges implementeret. Ved hjælp af den korrelerede gaussmetode vil grundtilstandsegenskaberne for deutronen, helionen, tritonen, samt alfapartiklen forsøges bestemt. Det vil derved vise sig, om denne idé overhovedet er praktisk, samt hvor vidt den overhovedet kan reproducere de eksperimentielle data til rimelig præcision.

Som en første approksimation vil kun de vigtigste central- og spin-spin kræfter blive benyttet.[3] for n-n, n-p, samt p-p-kræfter. Ydermere antages det, at n-n og p-p-kræfterne er ens på nær coulombkraften. De benyttede potentialer vil have gaussiske formfaktorer, med styrke og rækkevidde som frie parametre. Disse benyttes, da de er bedre for the korrelerede gaussmetode.

I alt vil der være otteparametre i beskrivelsen af kræfterne – fire styrker og fire rækkevidder. Disse parametre vil simultant forsøges bestemt ud fra de eksperimentielt bestemte bindingsenergier og rms-radier for deutronen, tritonen, helionen, samt alfapartiklen. Det vil altså være en otteparametersminimisering. Da dette er en undersøgelse af, hvorvidt metoden overhovedet virker, vil potentialerne udelukkende bestemmes ud fra grundtilstandsparametrene. Spredningsdata ses der altså bort fra.

Det vil i teoriafsnittet forklares, hvordan fånukleonssystemerne blev beregnet, samt hvordan kræfternes frie parametre bestemtes. I resultatsafsnittet ses der først på den numeriske stabilitet og konvergens for metoden. Derefter præsenteres resultaterne, og det diskuteres, hvilken betydning disse resultater har, samt hvilke forbedringer, der kunne laves.

## 2 Teori

### 2.1 Kernekræfter

Til beskrivelsen af fånukleonssystemer benyttes fænomenologiske potentialer, da potentialer udledt fra mesonteori ikke kan give reproducere de eksperimentielle data med høj nøjagtighed. Potentialet mellem to nukleoner skal være en skalar for at være invariant under rotation og reflektion af koordinataksene. Det skal også være hermitisk og må ikke være eksplicit tidsafhængigt. Det skal også være invariant når tiden vendes. Ydermere skal der være ladningsbevarelse, ladningssymmetri, og ladningsuafhængighed. Det skal også være symmetrisk under ombytning af to nukleoner. Under antagelse af, at det skal afhænge lineært af nukleonspin, isospin, og impuls kan det vises, at det kun kan indeholde følgende led.[3]

$$1, \quad \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2, \quad (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}), \quad (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}), \quad (2.1)$$

hvor  $\vec{\sigma}_i$  er spin for nukleon i,  $\vec{r}$  er afstanden mellem de to nukleoner, mens  $\vec{p}$  er deres relative, lineære impuls. Disse led skal så hver ganges med

$$1 \quad (2.2)$$

eller

$$\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2, \quad (2.3)$$

hvor  $\vec{\tau}_i$  er isospin for kerne i.

Vekselvirkningspotentialet kan således skrives som[3]

$$V(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}, \vec{\tau}) = [V_c(r) + W_c(r)\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2] + [V_{cs}(r) + W_{cs}(r)\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2](\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (2.4)$$

$$+ [V_t(r) + W_t(r)\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2](3(\vec{\sigma}_1 \cdot \hat{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \hat{r}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \quad (2.5)$$

$$+ [V_{LS}(r) + W_{LS}(r)\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2](\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}), \quad (2.6)$$

hvor indeksene c, cs, t, og LS er central, spin-spin, tensor og spin-orbit.  $\hat{r}$  er en enhedsvektor pegende i samme retning som  $\vec{r}$ . Dette udtryk ligner det, der kommer fra bosonfeltteorier på nær, at det har potentialdybden og de geometriske parametre som frie parametre.[3] Der kan også indføres kvadratiske led.[2]

For  $V$  og  $W$  kan forskellige potentialer benyttes. Firkantet brønd

$$V(r) = -V_0 (r \leq r_0), \quad V(r) = 0 (r > r_0), \quad (2.7)$$

gaussisk

$$V(r) = -V_0 e^{-\mu^2 r^2}, \quad (2.8)$$

eksponentiel

$$V(r) = -V_0 E^{-\mu r}, \quad (2.9)$$

Yukawa

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (2.10)$$

for at give nogle få eksempler. Der findes andre potentialer, der også kunne benyttes. Ydermere kunne de alle tilføjes en hårdt frastødende kerne for  $r \leq r_c$  for  $r_c \approx 0.5 \text{ fm}$ . [3]

I denne afhandling ses der kun på central og spin-spin ligesom der ses bort fra isospinafhængigheden. Potentialet bliver således

$$V(\vec{r}, \vec{\sigma}) = V_c(r) + V_{cs}(r)(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2), \quad (2.11)$$

hvor gaussfunktionerne fra formel (2.8) benyttes for  $V_c$  og  $V_{CS}$ .

For spinfunktionerne benyttes de eksperimentielt fastslåede spinfunktioner. Disse varierer altså ikke. De er for deutronen

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \uparrow_1 \uparrow_2 \quad (2.12)$$

helionen

$$\frac{\uparrow_1}{\sqrt{2}} (\uparrow_2 \downarrow_3 - \downarrow_2 \uparrow_3), \quad (2.13)$$

hvor partikel 1 er neutronen og 2 og 3 protonerne. Tritonen

$$\frac{\uparrow_1}{\sqrt{2}} (\uparrow_2 \downarrow_3 - \downarrow_2 \uparrow_3), \quad (2.14)$$

hvor partikel 1 er protonen og 2 og 3 neutronerne. Alfapartiklen

$$\frac{1}{2} (\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2) (\uparrow_3 \downarrow_4 - \downarrow_3 \uparrow_4), \quad (2.15)$$

hvor 1 og 2 er protonerne og 3 og 4 neutronerne. [3]

## 2.2 Korreleret gaussmetode

Den benyttede metode er den korrelerede gaussmetode. Metoden går ud på, at der benyttes gaussfunktioner til at beregne både potentialer og kerner. Dette er



ønskværdigt, da gaussfunktioner er rare at regne på i og med, at de forbliver gaussfunktioner, når der eksempelvis integreres over dem. De benyttede gaussfunktioner er givet ved  $\exp -\vec{r}^T A \vec{r}$ , hvor  $\vec{r}$  er en vektor af N dimensioner indeholdende rumkoordinaterne for kernen, mens  $A$  er kvadratisk, N-dimensionel, symmetrisk, positiv-definit korrelationsmatrix. Hele bølgefunktionen er så  $|G\rangle = |g\rangle|\chi\rangle$ , hvor  $|g\rangle$  er gaussfunktionen og  $|\chi\rangle$  spinfunktionen.

Overlappet af to gaussfunktioner er givet ved formel (2.16). For at beregne energien skal den kinetiske samt den potentielle energi udregnes. Disse findes fra matrixelementerne i formel (2.18) til (2.25), hvor der huskes at tilføjes spinoverlappet da  $\langle G_i|H|G_j\rangle = \langle g_i|K|g_j\rangle\langle\chi_i|\chi_i\rangle + \langle g_i|V_C|g_j\rangle\langle\chi_i|\chi_j\rangle + \langle g_i|V_{CS}|g_j\rangle\langle\chi_i|\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2|\chi_j\rangle$ , hvor  $\sigma_1$  og  $\sigma_2$  er spinoperatorerne for to nukleoner. Da gaussfunktionerne ikke er forskudte, skrives de på den form de har, når forskydningsvektoren er nul.[5] Overlappet mellem to gaussfunktioner.

$$\langle g'|g\rangle = \left( \frac{\pi^N}{\det(B)} \right)^{\frac{3}{2}} \equiv M, \quad (2.16)$$

hvor  $B = A' + A$ . Overlappet mellem to spinfunktioner er  $\frac{1}{2}$ , hvis de begge er op eller ned, mens det er 0 ellers.

$$\langle\chi|\chi\rangle \equiv M_{\text{spin}} \quad (2.17)$$

Den kinetiske energi mellem to nukleoner.

$$K = 6 \text{trace}(A' \Lambda A B^{-1}) M M_{\text{spin}}, \quad (2.18)$$

hvor  $\Lambda$  er en symmetrisk positiv-definit matrix givet ved

$$\Lambda_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_k} \Omega_{ik} \Omega_{jk}. \quad (2.19)$$

$m_k$  er massen af nukleon k og  $\Omega$  er Jakobitransformationsmatricen givet ved

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{m_1}{M_2} & \frac{m_2}{M_2} & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{m_1}{M_{N-1}} & \frac{m_2}{M_{N-1}} & \frac{m_3}{M_{N-1}} & \dots & -1 \\ \frac{m_1}{M_N} & \frac{m_2}{M_N} & \frac{m_3}{M_N} & \dots & \frac{m_N}{M_2} \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

hvor

$$M_k = \sum_{i=1}^k m_i.$$

Massemidpunktets energi kan der ses bort fra, da alle potentialerne afhænger af de relative koordinater og derved er uafhængige af massemidpunktet.[1] Den potentielle energi fra den centrale del er, uden coulombkraften, givet ved

$$V_{\text{pot,c}} = \left( \frac{1}{1 + \gamma v^\top B^{-1} v} \right)^{\frac{3}{2}} MM_{\text{spin}} \quad (2.21)$$

$$= \left( \frac{1}{1 + \frac{\gamma}{\beta}} \right)^{\frac{3}{2}} MM_{\text{spin}} \quad (2.22)$$

$$= \left( \frac{\beta}{\beta + \gamma} \right)^{\frac{3}{2}} MM_{\text{spin}}, \quad (2.23)$$

hvor  $\gamma = \mu^2 = \frac{1}{b^2}$ , hvor  $b$  er rækkevidden af gaussfunktionen.  $\beta = v^\top B^{-1} v$  og  $v$  er Jakobitransformationen af vektoren  $w$ , der har alle komponenter lig nul på nær  $w_i = 1$  for enlegemepotentialer og  $w_i = -w_j = 1$  for tolegemepotentialer. Den potentielle energi for spin-spindelen af potentialet er givet ved

$$V_{\text{pot,s}} \left( \frac{\beta}{\beta + \gamma} \right)^{\frac{3}{2}} M \langle \chi | \frac{1}{4} (\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}) | \chi \rangle, \quad (2.24)$$

hvor  $\sigma_{ai}$  er paulimatricen for koordinat  $i$  for nukleon  $a$ .  $\gamma$  er forskellig fra  $\gamma$  i formel (2.21), da  $b_s$  og  $b_c$  er to forskellige frie parametre. Coulombkraften.[5]

$$V_{\text{Coulomb}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\beta} M_{\text{spin}} \quad (2.25)$$

Til udregningen af energierne for kernerne i denne afhandling skabtes der en række forskellige  $A$ -matricer, og derved gaussfunktioner, der alle var tilfældigt stokastisk genererede. Den måde de skabtes på var, at en positiv-definit symmetrisk matrix blev rank-1 opdateret, således at den nye matrix også var positiv-definit symmetrisk. Til opdateringen benyttedes de Jakobitransformerede  $w$  vectorer fra før. Altså  $A' = A + \delta^2 v v^\top$ , hvor  $\delta$  var et tilfældigt tal genereret med en eksponentiel tilfældighedsgenerator.

Bindingsenergien for kernens grundtilstand beregnedes så og lagredes. Derefter blev den første  $A$ -matrix udskiftet med en ny, tilfældigt skabt, matrix. Energien beregnedes på ny, og hvis denne var lavere end den lagrede energi blev den gamle  $A$ -matrix overskrevet med den nye. Ellers forkastedes den nye matrix. Dernæst blev der igen tilfældigt skabt en ny  $A$ -matrix for den samme gaussfunktion. Der skabtes altså tilfældige afprøvningsgaussfunktioner, der blev sammenholdt med de allerede eksisterende gaussfunktioner for at se, om afprøvningsgaussfunktionen gav en lavere bindingsenergi og derved skulle indsættes i basen af gaussfunktioner i stedet for den allerede eksisterende gaussfunktion. Dette blev gjort  $N_{\text{prøve}}$  gange. Alle gaussfunktioner blev gennemløbet således.

Efter hvert gennemløb startedes der forfra med at prøve  $N_{\text{prøve}}$  nye  $A$ -matricer for hver enkelt gaussfunktion. I alt var der  $N_{\text{gennemløb}}$  gennemløb. Der var altså tre centrale parametre for, hvor grundning beregningen af bindingsenergien var:  $N_{\text{prøve}}$ ,  $N_{\text{gennemløb}}$ , samt  $N_{\text{gauss}}$ . Ydermere blev det afprøvet, hvorvidt alle gaussfunktionerne overlappede for meget og derved ophørte med at være lineært uafhængige.[6] I tilfælde af at overlappet mellem afprøvningsgaussfunktionen og en hvilken som helst anden gaussfunktion blev for stort, forkastedes afprøvningsgaussfunktionen.

Alt dette fodredes så til minimeringsrutinen fra Gnu Scientific Library, GSL,[6] hvor versionen uden numerisk beregnede afledte benyttedes, hvilket er Nelder-Meads simplexalgoritme. Den måde rutinen fungerer på er, at der dannes en simplex der derefter, gennem reflektioner, forlængelser, samt krympning, itereres over indtil minimum findes. Det var en hovedfunktion, der blev minimeret. Denne hovedfunktion beregnede bindingsenergies og rms-radier for deuteronen, tritonen, helionen samt alfapartiklen på samme tid og så returnerede den

$$10 \left( (E_D - E_{\text{eksp,D}})^2 + (E_T - E_{\text{eksp,T}})^2 + (E_{\text{H3}} - E_{\text{eksp,H3}})^2 + (E_{\text{alfa}} - E_{\text{eksp,alfa}})^2 \right) \\ + (R_D - R_{\text{eksp,D}})^2 + (R_T - R_{\text{eksp,T}})^2 + (R_{\text{H3}} - R_{\text{eksp,H3}})^2 + (R_{\text{alfa}} - R_{\text{eksp,alfa}})^2, \quad (2.26)$$

hvor  $E$  var bindingsenergies og  $R$  radierne. Da minimering i ottedimensionelt rum er svært, prioriteredes præcisionen af energiesne højere end præcisionen af radierne.

De gamle  $A$ -matricer blev brugt som udgangspunkt for beregningen af nye  $A$ -matricer i hver iteration. Dette var effektivt, da der i hver iteration kun er små perturbationer til de frie parametre, hvorfor den gamle basis allerede vil være god. Der startes derfor i et godt udgangspunkt i hver iteration, hvilket er vigtigt, thi startes der for langt fra minimum kan minimeringsrutinen ikke nødvendigvis finde minimum. Og da det er stokastiske  $A$ -matricer, kan simplexen risikere at køre den forkerte vej qua stokastiske variationer. Af samme grund blev antallet af gennemløb og afprøvningsgausser fordoblet for den første iteration, således at der ville være et ekstra godt udgangspunkt for de senere iterationer.

## 3 Resultater

### 3.1 Konvergens

Der blev lavet konvergensgrafer for  $N_{\text{prøve}}$ ,  $N_{\text{gennemløb}}$ , samt  $N_{\text{gauss}}$  for derved at finde de værdier af disse variabler, hvor bindingsenergien var konvergeret. Som det ses på Figur 1, så konvergerede deuteronen når der benyttedes 5 gaussfunktioner. Derimod krævede helionen og tritonen omkring 20 gaussfunktioner, før de konvergerede, som det ses på Figur 2 og Figur 3. Alfapartiklen derimod var hurtigere og konvergede med omkring 10 gaussfunktioner som det ses på Figur 4.

For antallet af afprøvningsgausser ses det på Figur 5 så konvergerede deuteronen efter omkring 21 afprøvningsgausser. Som det ses på Figur 6 og Figur 7 tog tritonen og helionen omkring 36 afprøvningsgausser førend de konvergerede, mens alfapartiklen iden lå i midten of konvergerede efter omkring 26 afprøvningsgausser som det ses på Figur 8.

På Figur 9 ses det, at deuteronen konvergerede efter omkring 25 gennemløb. Tritonen og helionen derimod krævede omkring 75, som det ses på Figur 10 og Figur 11. Igen lå alfapartiklen midt imellem med en konvergering efter omkring 50 gennemløb som det ses på Figur 12.

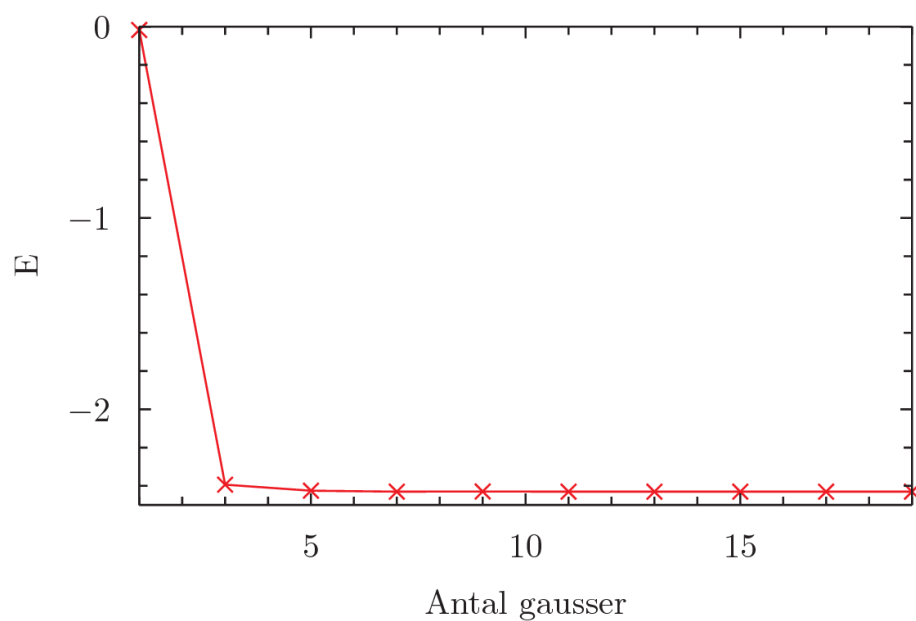
Da alle kernerne beregnes på samme tid i hovedfunktionen må der skulle benyttes 20 gaussfunktioner, 75 gennemløb og 36 afprøvningsgausser for at alle kernerne er konvergerede. Deuteronen konvergerer konsekvent hurtigst, hvilket ikke er mærkeligt, da det er en tonukleonskerne, mens alle de andre kerner har flere nukleoner. Ligeledes kommer coulombkraften heller ikke i spil for deuteronen, hvilket også kan have spillet en rolle på den hurtigere konvergens, da potentialet var simplere.

Det var til gengæld overraskende, at alfapartiklen konvergerede hurtigere end tritonen og helionen. Dette kunne skyldes, at alfapartiklen er dobbeltmagisk og derved har en simplere rumbølgefunktion end tritonen og helionen. Derudover er alfapartiklens spinfunktion også symmetrisk i den forstand, at den under ombytning af protoner med neutroner og neutroner med protoner forbliver den samme. Altå ikke ment at den ikke er antisymmetrisk, for det er den, men at hvis neutronerne blev omdannet til protoner og protonerne til neutroner, ville spinfunktionen forblive den samme.

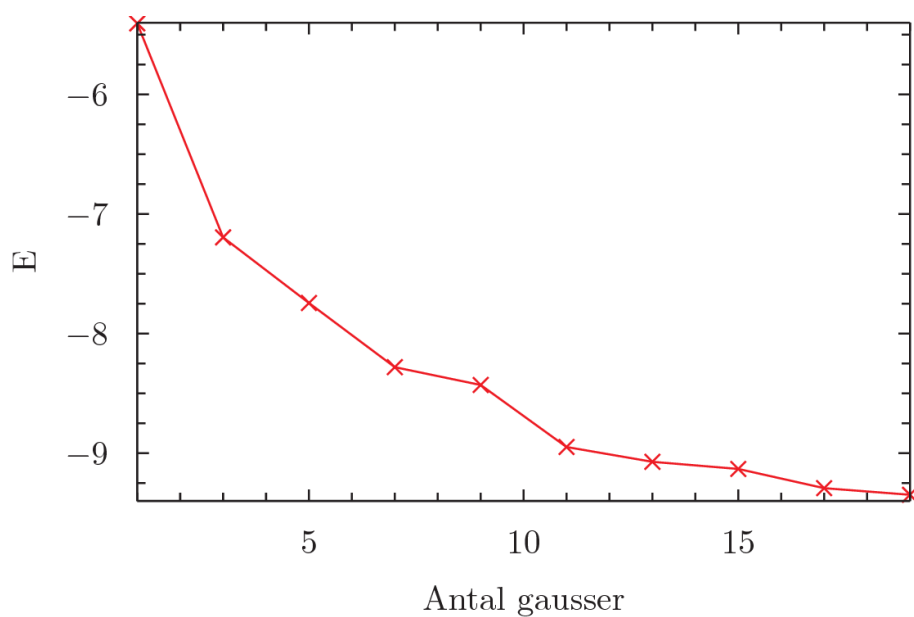
Det skal også noteres, at da metoden var stokastisk, kan konvergensens godt ligge længe ude, end den lader til. Med andre ord, bindingsenergien kunne godt falde en smule mere længere ude. Dette ser ikke ud til at være tilfældet, men det kan ikke afvises at det sker uden for det parameterområde, der afsøgte.

Det noteres, at konvergensgraferne ikke konvergerer til fuldstændig de samme energier, som blev fundet med minimeringsrutinen. Dette skyldes at minime-

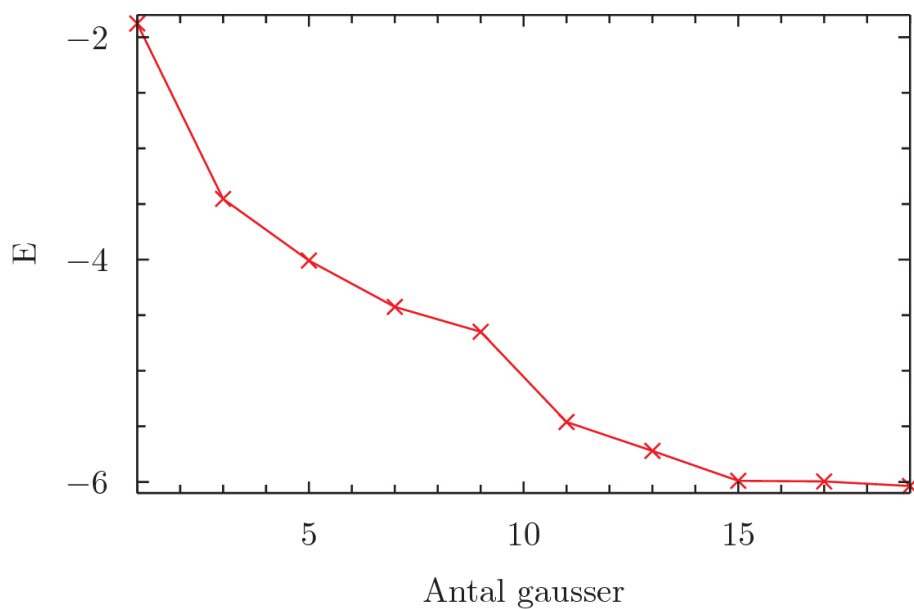
ringsrutinen laver tusindvis af beregninger og derfor ender op med en rigtig godt optimeret basis, hvorimod basisen af  $A$ -matricer aldrig bliver lige så god i konvergensberegningerne, da der ikke bliver lavet lige så mange nye basiser, da der ikke er iterationer.



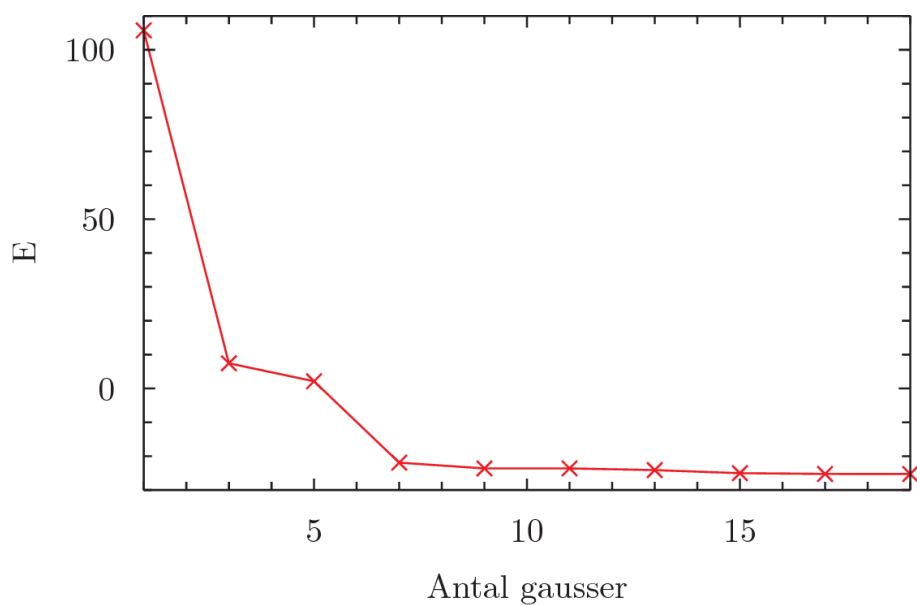
Figur 1: Konvergens af bindingsenergien for deuteronen som funktion af hvor mange gaussfunktioner der benyttes i bindingsenergiberegningen.



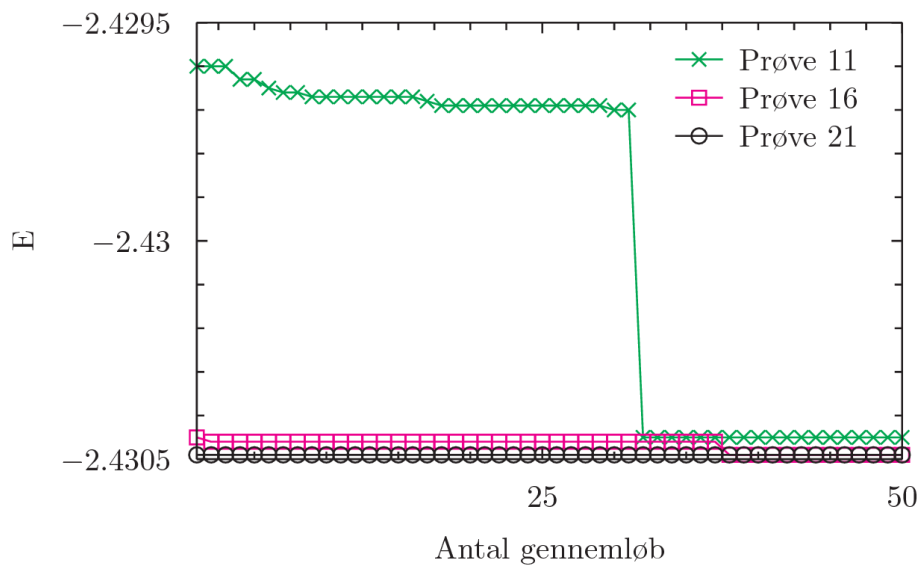
Figur 2: Konvergensten af bindingsenergien for tritonen som funktion af hvor mange gausssfunktioner der benyttes i bindingsenergiberegningen.



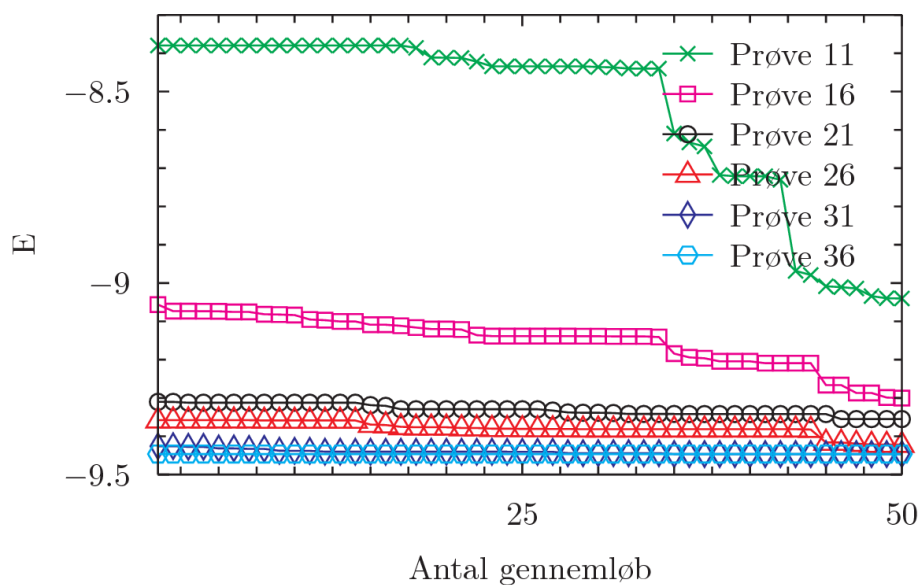
Figur 3: Konvergensten af bindingsenergien for helionen som funktion af hvor mange gausssfunktioner der benyttes i bindingsenergiberegningen.



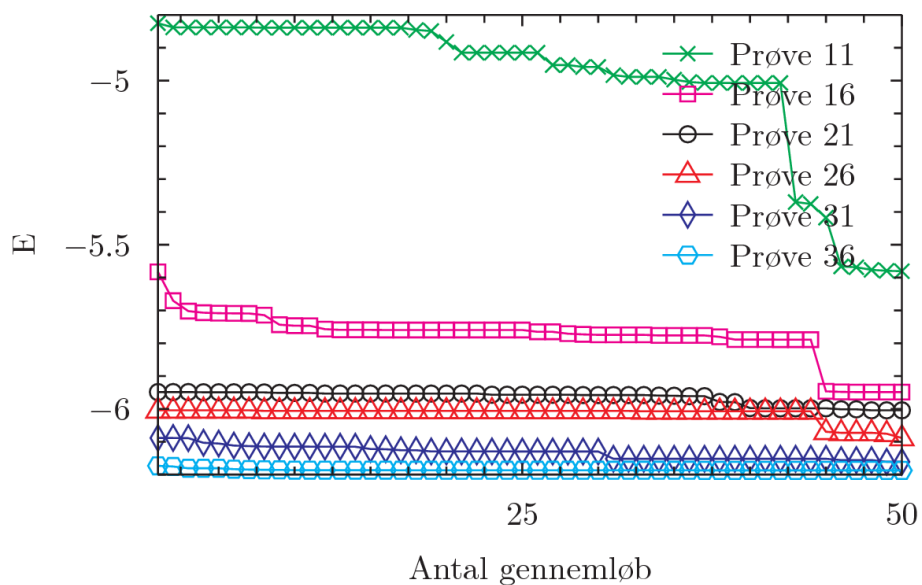
Figur 4: Konvergensten af bindingsenergien for alfapartiklen som funktion af hvor mange gausfunktioner der benyttes i bindingsenergiberegningen.



Figur 5: Konvergensten af bindingsenergien for deuteronen som funktion af hvor mange afprøvningsgausser der benyttes i bindingsenergiberegningen. Prøve X betyder, at der benyttedes X afprøvningsgausser.

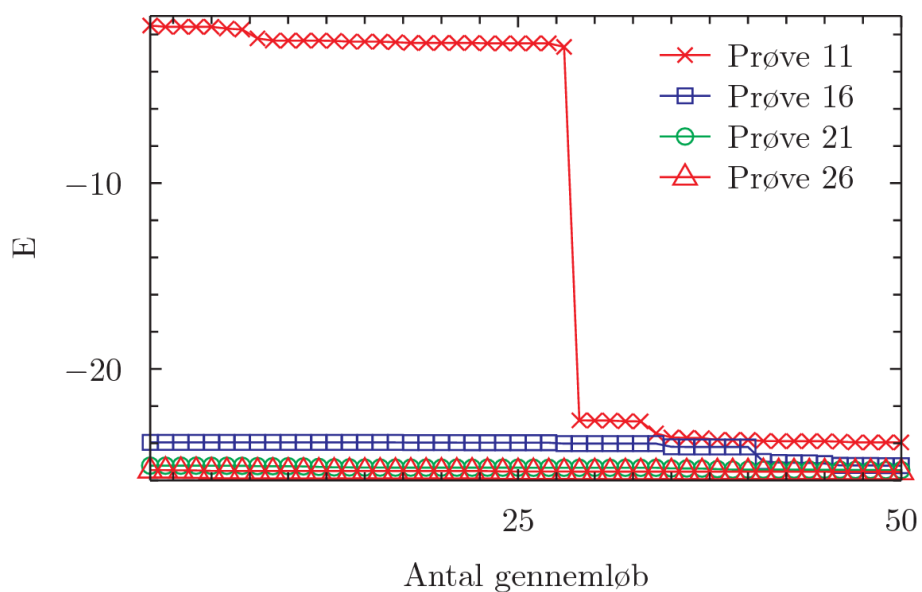


Figur 6: Konvergenen af bindingsenergien for tritonen som funktion af hvor mange afprøvningsgausser der benyttes i bindingsenergiberegningen. Prøve X betyder, at der benyttedes X afprøvningsgausser.

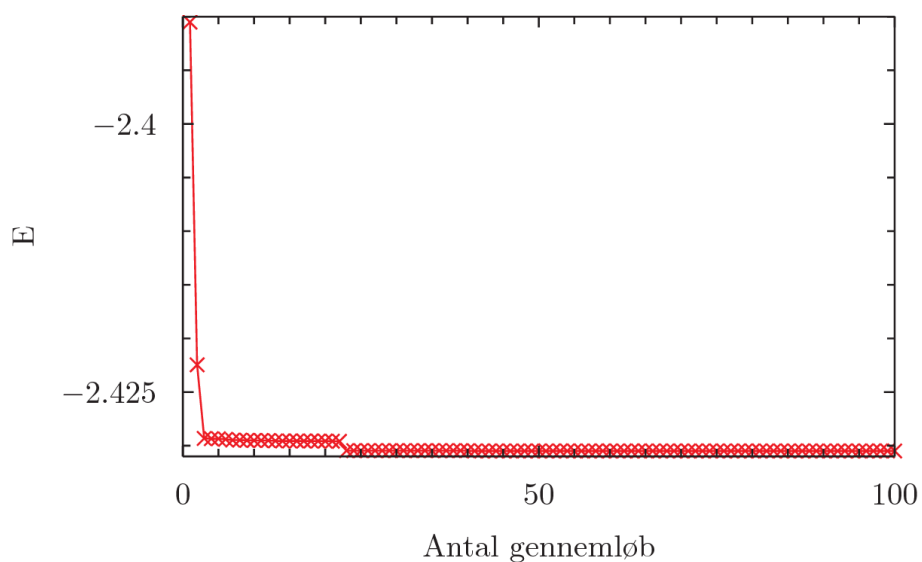


Figur 7: Konvergenen af bindingsenergien for helionen som funktion af hvor mange afprøvningsgausser der benyttes i bindingsenergiberegningen. Prøve X betyder, at der benyttedes X afprøvningsgausser.

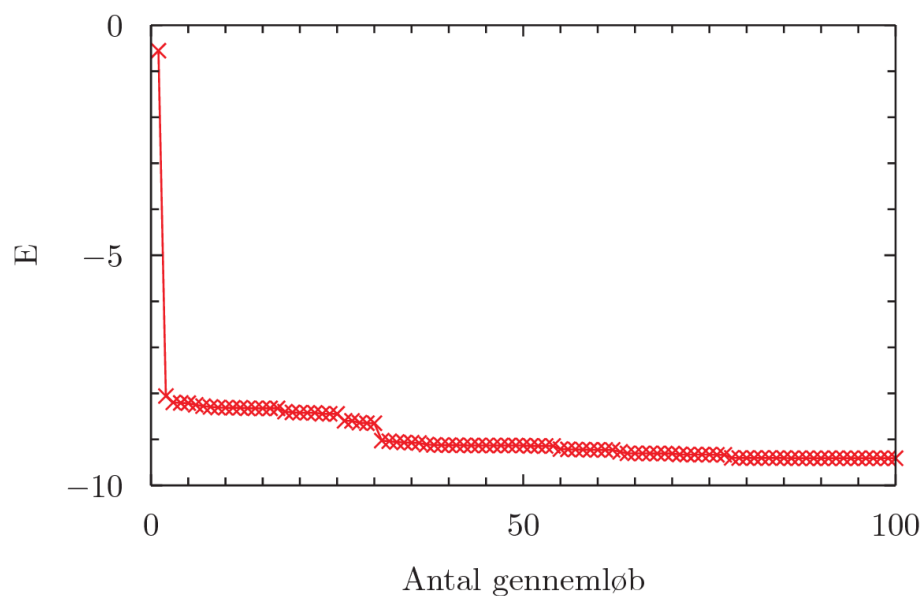




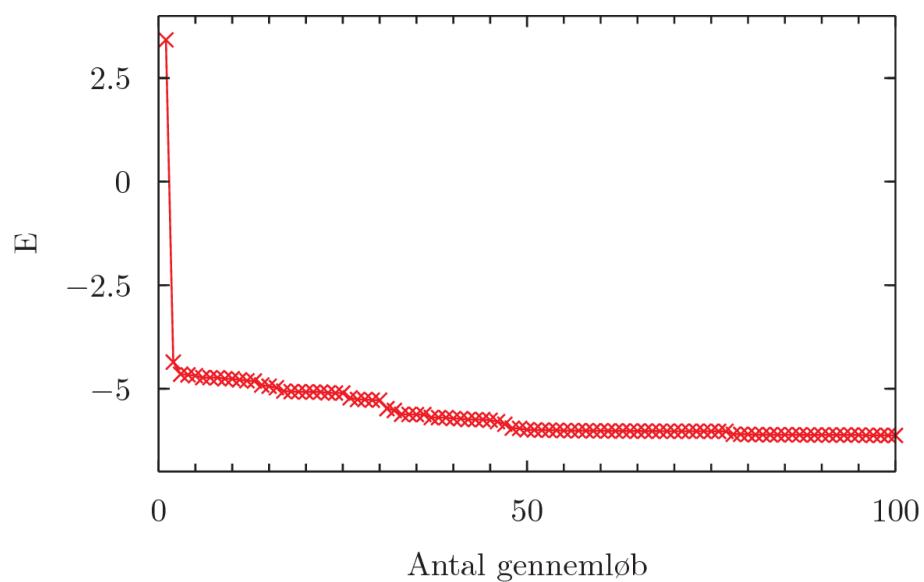
Figur 8: Konvergenen af bindingsenergien for alfapartiklen som funktion af hvor mange afprøvningsgausser der benyttes i bindingsenergiberegningen. Prøve X betyder, at der benyttedes X afprøvningsgausser.



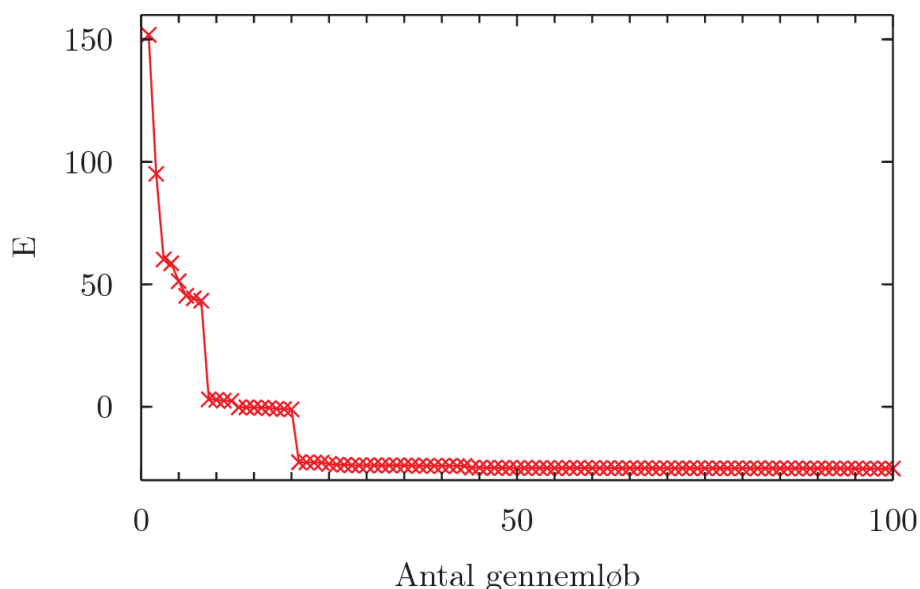
Figur 9: Konvergenen af bindingsenergien for deuteronen som funktion af hvor mange gennemløb der benyttes i bindingsenergiberegningen.



Figur 10: Konvergensen af bindingsenergien for tritonen som funktion af hvor mange gennemløb der benyttes i bindingsenergiberegningen.



Figur 11: Konvergensen af bindingsenergien for helionen som funktion af hvor mange gennemløb der benyttes i bindingsenergiberegningen.



Figur 12: Konvergen af bindingsenergien for alfapartiklen som funktion af hvor mange gennemløb der benyttes i bindingsenergiberegningen.

## 3.2 Resultater

I tabel 1 ses de fundne værdier for styrkerne og bredderne i gaussfunktionerne fra Formel (2.8). Det noteres, at mens der var forholdsvis stor variation for styrkerne og bredderne for de dele af potentialerne, der ikke omfattede spin, så gav spindelen meget ens styrker og bredder for neutron proton vekselvirkningen samt neutron neutron og proton proton vekselvirkningerne. Dette er ikke så underligt, da både protoner og neutroner er fermioner med samme spin.

I tabel 2 ses det, at det var muligt at beregne grundtilstandsbindingsenergier, der nogenlunde passede med de eksperimentielle værdier. Det ses dog også, at den procentielle afvigelse er stor – særligt for deuteronen. Dette kommer ikke som en overraskelse, da der eksempelvis ikke toges højde for tensorkræfter eller spin orbit. Og da der ikke var nogen tensorkræfter, blev der ikke taget højde for D-bølger. Det ses også, at radierne beregnedes til betydeligt dårligere præcision end energierne. Dette var dog forventeligt, da præcision i energien vægtedes ti gange højere i minimeringsrutinen.

Det noteres, at alfapartiklens energi blev overordentlig god, samt at helionen og tritonen er sværere at beregne energier for end alfapartiklen, hvilket også fremgår af konvergensgraferne. Helionen og tritonen konvergerer langsomt og giver større procentiel afvigelse fra de eksperimentielle værdier. Hvorfor alfapartiklen kom inden for 1% af den eksperimentielle værdi, mens bindingsener-

gjerne for de andre kerner afveg betydeligt mere, kan ikke besvares på nuværende tidspunkt.

Derudover er en ottedimensionelt minimisering noget der er svært, hvorfor der skal benyttes gode startværdier for parametrene. Det er ikke utænkeligt, at videre ændren på startværdierne kunne give endnu bedre resultater. Den måde startværdierne blev ændret på var, at der til at starte med blev lavet et kvalificeret gæt. Derefter blev minimeringen kørt. De parameterverdier der fandtes ved minimeringen benyttedes så som startværdier for den næste minimering. Dette gjordes mange gange og startværdierne forfinedes konstant. Med der var tidspunkter, hvor minimeringsrutinen alligevel syntes, at startværdierne var dårlige. I disse tilfælde endte nogle af bindingsenergiene med at være ufysiske. Dette vedblev dog ikke, og efterhånden som startværdierne blev bedre, forsvandt de ufysiske energier igen. Det er derfor ikke utænkeligt, at endnu bedre resultater kunne opnås, hvis startværdierne forfinedes endnu mere.

Bedre overensstemmelse med de eksperimentielle værdier ville muligvis kunne nås, hvis der eksempelvis toges højde for spredningsdata. Ligeledes ville det kunne give noget, hvis minimeringsrutinen gik fra at være stokastisk til at være deterministisk, når den kom tæt på minimum.

Der kunne også benyttes andre formfaktorer. Eksempelvis ville det være oplagt have både en hårdt frastødende kerne og en tiltrækkende lomme. Der kunne også inkluderes flere kerner i minimeringen hvilket måske ville gøre energierne bedre, omend det ville også gøre selve minimeringen sværere.

Tabel 1: De fundne styrker og rækkevidder i MeV og  $\text{fm}^{-1}$ .

	n-p vekselvirkning	n-n samt p-p vekselvirkning
Styrker	-72.2694	-39.3479
Breder	1.49531	1.07012
Styrker spin	-58.3492	-59.7553
Breder spin	0.196373	0.133271

Tabel 2: De fundne grundtilstandsenergier i MeV og radier i fm. Den relative afvigelse er i procent.

	Energi	Eksp. energi	Radius	Eksp. radius	Afvigelse energi	Afvigelse radius
Deuteron	-2.6961	-2.2246	2.5935	1.963	21.2	32.1
Triton	-9.673	-8.482	2.57	1.63	14.0	57.7
Helion	-6.540	-7.718	2.77	1.97	15.3	40.6
Alfa	-28.49	-28.28	2.12	1.671	0.743	21.2

## 4 Konklusion

Tonukleonspotentialer er almindeligvis bestemt ud fra tonukleonspredningsdata samt deuterons egenskaber. Disse potentialer kan normalt ikke beskrive bindingsenergiene for tre- og firenukleonsystemer korrekt uden tilføjelsen af en fænomenologisk trepartikelskraft, der bestemmes gennem bindingsenergiene af tritonen, helionen, samt alfapartiklen.

I denne afhandling forsøgte det at bestemme et simpelt set af nukleon-nukleon potentialer direkte fra bindingsenergiene og rms-radierne af deuteronen, helionen, tritonen, samt alfapartiklen. Spredningsdata sås der helt bort fra. Idéen er, at sådanne potentialer er bedre egnede til at undersøge bundne og lave-energiegenskaber af lette kerner. Ligesom trepartikelskraften ikke nødvendigvis behøves.

Sådanne bestemmelser kræver adskillige beregninger af tre- og firenukleonsystemer i en minimiseringsrutine. Dette er numerisk svært og lader til ikke at have været forsøgt før. Det er blevet vist her i afhandlingen, at den korrelerede gaussmetode er mulig. Dette skyldes at for hver iteration af minimeringsrutinen ændres potentialerne kun lidt, mens den optimerede basis af gaussfunktioner fra forrige iteration kan genbruges. Der skal derfor kun en lille smule optimering til, før end den gamle basis er optimeret til perturbationerne i potentialerne.

Det antages at nukleon-nukleonpotentialerne,  $n-n$ ,  $n-p$ , samt  $p-p$ , har den central og spin-spindele med gaussiske formfaktorer. Ligeledes antages det, at  $p-p$ -potentialer er lig  $n-n$ -potentialer plus coulombkraften. Der er dergot to uafhængige central- og to uafhængige spin-spinpotentialer hver med en gaussisk formfaktor med to parametre. Altså otte parametre i alt.

Disse otte parametre bestemmes således at potentialerne reproducerer de otte eksperimentalværdier – bindingsenergi og rms-radier af deuteronen, tritonen, helionen, samt alfapartiklen. Det er en ottedimensionel minimeringsrutine, hvor Nelder-Meadmetoden er benyttet. Denne benytter en simplex, der gennem et antal iterationer bevæger sig tættere og tættere på minimum. Denne metode tolerer funktioner med stokastiske fejl, hvilket er vigtigt, da den gaussiske basis fandtes stokastisk.

Det antages at de undersøgte kerner havde faste spinfunktioner med korrekt samlet spin og antisymmetri. Rumbølgefunktionerne er så symmetriske.

Det er blevet vist, at denne komplicerede minimeringsrutine faktisk er praktisk mulig samt at potentialmodellen kan reproducere bindingsenergi af deuteronen, tritonen, helionen, samt alfapartiklen inden for en relativ afvigelse på 15 til 20%. Alfapartiklen havde dog en afvigelse på under 1%. Rms-radierne kan reproduceres inden for en relativ afvigelse på 20 til 60%. Afvigelsen for radierne kunne skyldes, at energierne vægtedes ti gange højere end radierne under minimiseringen.

Dette er kun første undersøgelse af metoden, og det ser us til, at den er lovende og kan undersøges yderligere. Næste skridt kunne være at inkludere tensor- og spin-orbitpotentialer. Der kunne også vælges en mere realistisk formfaktor med en frastødende kerne og en tiltrækkende lomme. Lavenergidata for tolegemesystemer kunne også inkluderes i minimiseringsrutinen.

Det kan derfor konkluderes, at det er muligt at bestemme en model for nukleon-nukleonpotentialer ud fra egenskaber ved bundne tilstande af lette kerner – deutronen, tritonen, helionen, samt alfapartiklen – hvis der benyttes korrelerede gaussfunktioner og en Nelder-Meadoptimeringsalgoritme.

## Litteratur

- [1] Jim Mitroy, Sergiy Bubin, Wataru Horiuchi, et al. Theory and application of explicitly correlated gaussians. *Reviews of modern physics*, 85, 2013.
- [2] Domenico Logoteta, Ignazio Bombaci, og Alejandro Kievsky. Nuclear matter properties from localchiral interactions with  $\Delta$  isobar intermediate states. *Physical Review C* 94, 064001, 2016.
- [3] P. E. Hodgson, E. Gadioli, og E. Gadioli Erba. *Introductory Nuclear Physics*, side 202-263. Oxford University Press, 2003 genoptryk.
- [4] Dmitri Vladimir Fedorov. Privat korrespondence.
- [5] Dmitri Vladimir Fedorov. Analytic matrix elements with shifted correlated gaussians. *arXiv:1702.06784v1 [nucl-th]*, 2017.
- [6] The GSL Team. GSL-manual. [http://www.gnu.org/software/gsl/manual/html\\_node/index\\_old.html](http://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/index_old.html). Set 2. april 2018.