

# **Kuantum Monte Carlo Yaklaşımında Pariteye Bağlı Nükleer Seviye Yoğunluğu Hesaplamaları**

**Proje No: 110R004**

Yrd. Doç. Dr. Cem ÖZEN

Eylül 2013

İSTANBUL

## **ÖNSÖZ**

Bu proje, TÜBİTAK (EEEAG 100R004) desteği ile, 01.10.2010-01.10.2012 tarihleri arasında Kadir Has Üniversitesi öğretim görevlisi Yard. Doç. Dr. Cem Özen tarafından yürütülmüş ve demir bölgesinde yer alan bazı orta kütleli çekirdeklerin parite izdüşümlü seviye yoğunluklarının mikroskopik bir yöntem olan Kabuk Modeli Kuantum Monte Carlo metodunu kullanarak hesaplanmasını konu edinmiştir. Projede İstanbul Üniversitesi Fizik Bölümü yüksek lisans öğrencisi Enes Akyüz bursiyer olarak yer almıştır.

Projede ele alınan hesaplamalar, Yard. Doç. Dr. Cem Özen tarafından modife edilmiş Caltech/Oak Ridge Shell Model Monte Carlo programı kullanılarak Kadir Has Üniversitesi Yüksek Performanslı Bilgisayar Sisteminde gerçekleştirilmiştir.

Proje ekibi olarak, projeye danışman olarak destek sağlayan Prof. Dr. Hitoshi Nakada'ya (Chiba Üniversitesi, Japonya), Prof. Dr. Karlheinz Langanke'ye (GSI, Darmstadt, Almanya) ve Prof. Dr. Yoram Alhassid'e (Yale Üniversitesi, A.B.D.) teşekkür ederiz.

## İÇİNDEKİLER

ŞEKİL LİSTELERİ.....	4
TABLO LİSTELERİ.....	4
ÖZET.....	5
ABSTRACT.....	6
1 GİRİŞ.....	7
2 GENEL BİLGİLER.....	8
2.1 Nükleer Seviye Yoğunluğu.....	8
2.2 Fenomenolojik Seviye Yoğunluğu Modelleri.....	9
3 GEREÇ ve YÖNTEM.....	10
3.1 Kabuk Modeli Monte Carlo Yöntemi.....	10
3.1.1 Formalizm.....	10
3.1.2 Model Uzayı ve Efektif Hamiltonyen.....	12
3.1.3 Monte Carlo İşaret Problemi.....	13
3.1.4 Parite Projeksiyonu.....	13
3.1.5 Toplam ve Parite İzdüşümlü Seviye Yoğunluğu.....	14
3.2 Hesaplama Kaynakları.....	14
3.2.1 Bilgisayar Kodları.....	14
3.2.2 Bilgisayar Platformları.....	15
4 BULGULAR.....	15
4.1 Temel Enerji Seviyesinin Saptanması.....	15
4.2 Parite Projeksiyonu, Toplam ve Pariteye Bağlı Termal Enerji.....	17
4.3 Hamiltonyen Parametrizasyonu.....	18
4.4 Toplam ve Pariteye-bağlı Seviye Yoğunluğu Hesaplamaları.....	19
4.5 $J=2$ Açısal-momentumlu Seviyelerin Pariteye Bağlı Seviye Yoğunlukları.....	22
4.6 Tek-çift Ni İzotopları.....	23
4.7 Kapalı ve yarı-kapalı Kabuk Konfigürasyonuna Sahip Çekirdekler.....	25
5 TARTIŞMA.....	27
6 SONUÇ.....	30
REFERANSLAR.....	31

## FIGÜR LİSTELERİ

Figür 1: Çift-çift 58-60-62-64Ni izotoplarının temel enerji düzeyinin saptanması.....	16
Figür 2: 60Ni çekirdeğinde parite projeksiyonu.....	18
Figür 3: 60Ni çekirdeğinde toplam seviye yoğunluğunun uyarılma enerjisine göre grafiği...19	
Figür 4: Çift-çift 58-60-62-64Ni çekirdeklerinde toplam seviye yoğunluğu hesaplamaları ve mevcut deneysel verilerle kıyaslanması.....	20
Figür 5: Çift-çift 58-60-62-64Ni çekirdeklerinde pariteye bağlı seviye yoğunluğu hesaplamaları.....	21
Figür 6: Çift-çift 58-60-62-64Ni çekirdeklerinde $J^\pi=2^\pm$ seviyelerinin yoğunlukları.....	23
Figür 7: Tek-çift 57-59-61-63-65Ni çekirdeklerinde toplam seviye yoğunluğu hesaplamaları.24	
Figür 8: Tek-çift 57-59-61-63-65Ni çekirdeklerinde pariteye bağlı seviye yoğunluğu hesaplamaları.....	25
Figür 9: 40Ca çekirdeğinde toplam seviye yoğunluğu hesaplamaları.....	26

## TABLO LİSTELERİ

Tablo 1: Hesaplamalarda kullanılan bilgisayar platformu.....	15
Tablo 2: Çift-çift Ni izotoplarında temel uyarılma ve ilk uyarılma enerjilerinin vibrasyonel ve rotasyonel band yaklaşımında tahmini değerleri.....	17

## ÖZET

Atom çekirdeklerinin en temel istatistiksel niceliklerinden biri olan seviye yoğunluğu, nükleer reaksiyon oranlarının hesaplanmasında merkezi bir öneme sahiptir. Astrofiziksel s, r ve rp gibi nükleosentez süreçleri, nükleer atık dönüştürülmesi ve yeni nesil nükleer reaktörlerinin tasarımı gibi istatistiksel nükleer reaksiyon modellemesine dayalı çeşitli uygulama alanlarında, seviye yoğunluklarının hassas şekilde tahmin edilmesine ihtiyaç duyulmaktadır. Seviye yoğunluğunun, nükleer enerji seviyelerini karakterize eden bir kuantum sayısı olan pariteye göre dağılımı, parite ihlali yapan süreçler ve nötron yakalama reaksiyonlarını açıklamak açısından özel bir öneme sahiptir.

Seviye yoğunluğu konusunda deneysel veriye sahip çekirdeklerin sayıca azlığı yanında verilerin de çoğunlukla çok düşük bir enerji aralığı ile nötron rezonans enerjisi ile sınırlı olması sebebiyle, nükleer seviye yoğunlukları çoğunlukla fenomenolojik formüller bazen de mikroskopik metodlar yoluyla teorik olarak hesap edilebilmektedir. Bu kapsamda, seviye yoğunluğu hesapları için özellikle uygun olan Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) yaklaşımı, gerek kabuk etkileri gerekse model uzayı dahilinde mümkün olan tüm nükleon-nükleon korrelasyonlarını hesaba katması açısından en gerçekçi mikroskopik metod kabul edilmektedir.

Bu projede, özellikle astrofiziksel uygulamalar açısından önemli olan ve demir bölgesinde yer alan çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  çekirdekleri ele alınmış, toplam ve parite izdüşümlü seviye yoğunlukları KMMC yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Teorik toplam seviye yoğunlukları, deneysel verilerden ekstre edilen toplam seviye yoğunluklarını başarıyla türetmiştir. Ele alınan bu çekirdeklere ve enerji aralıklarında, zıt pariteye sahip seviye yoğunluklarının birbirleriyle dengeli olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Projenin en belirgin hedefi ise literatürde yer alan bir deney-teori uyumsuzluğunu çözmek olmuştur;  $^{58}\text{Ni}$  çekirdeğinin  $J=2$  açısız momentum kanalında zıt pariteli seviye dağılımlarının deneyle özdeş şekilde dengeye ulaşmış olduğu gösterilmiştir. Ana hedeflerine ulaşan proje, KMMC yöntemini sınırlayan teknik zorluklara sahip tek-çift çekirdeklere ( $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$ ) ve kapalı/yarı-kapalı kabuk konfigürasyonuna sahip çekirdeklere ( $^{40}\text{Ca}$  ve  $^{44}\text{Ca}$ ) de uygulanmıştır. Bu proje kapsamı dışında yer alan teorik çalışmalarla desteklenmesi gereken bu uygulamalar faydalı ön sonuçlar üretmiştir. Bu çekirdeklerle ilgili çalışmalar yeni uluslararası ortak bilimsel iş birlikleri ve projelere temel hazırlamıştır.

**Anahtar Kelimeler:** nükleer fizik, seviye yoğunluğu, parite, nükleer reaksiyonlar, kabuk modeli, Monte Carlo yöntemleri, nükleer astrofizik, nükleosentez

## ABSTRACT

Nuclear level density which is one of the most fundamental statistical properties of atomic nuclei, play an essential role in the calculation of nuclear reaction rates. Application areas such as the s, r and rp nucleosynthesis processes, the transmutation of nuclear waste and the design of new generation nuclear reactors require accurate estimations of nuclear level densities. The distribution of nuclear levels with respect to their parity quantum number is specifically important for describing parity-violating processes and neutron-capture reactions.

Experimentally, only a small fraction of all nuclei possess level density data which is, in general, restricted to the level counting data at low energies and the neutron resonance data at the neutron separation energy; thus, estimation of nuclear level densities often relies on phenomenological formulae or microscopic methods. In this context, the Shell Model Monte Carlo (SMMC) method—a particularly suitable approach for the calculation of level densities with the shell effects and all possible nucleon-nucleon correlations within the model space included—is widely regarded as the most realistic microscopic method available.

In this project, total and parity-dependent level densities of astrophysically important even-even iron-region nuclei,  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  have been studied using the SMMC approach and their total and parity-projected level densities have been calculated. The theoretical total level densities are found to be in very good agreement to the experimental total level densities extracted from available data. Moreover; in these nuclei and energy intervals of interest, it is seen that densities of levels with opposite parities are equilibrated with each other. The most significant achievement of the project has been the resolution of a conflict in experiment-theory comparison regarding the distribution of levels in the  $J=2$  angular-momentum channel in  $^{58}\text{Ni}$ ; we have established that these distributions are also in equilibrium in perfect accordance with the experimental result. Having successfully completed the main goals of the project, we have extended these applications also to the study of odd-even nuclei ( $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$ ) and closed/semi-closed nuclei ( $^{40}\text{Ca}$  ve  $^{44}\text{Ca}$ ), both of which present serious technical limitations to the applicability of the SMMC method. In these applications, we have reached at useful preliminary results which needs to be supported by theoretical studies beyond the scope of the current project. However; we expect that these studies present new opportunities for international collaborations and projects in the future.

**Key Words:** nuclear physics, level density, parity, nuclear reactions, shell model, Monte Carlo methods, nuclear astrophysics, nucleosynthesis

## 1 GİRİŞ

Nükleer enerji seviyelerinin temel bir özelliği olan parite, istatistiksel dağılımı itibariyle parite ihlali yapan nükleer süreçlerin açıklanmasında ve nötron yakalama reaksiyonlarında önemli bir rol oynar. Bu açıdan toplam seviye yoğunluğu kadar parite-izdüşümlü seviye yoğunluğu da, astrofiziksel nükleosentez reaksiyon hesaplamaları ve nükleer atıkların dönüştürülmesine yönelik yenilikçi reaktör tasarımları gibi uygulamalarda son derece ihtiyaç duyulan bir niceliktir.

Nükleer fiziğin ilk günlerinden beri önemli bir araştırma konusu olan seviye yoğunluğu gerek deneysel gerekse teorik inceleme açısından son derece sınırlayıcı zorluklarla karşılaşılan bir konudur. Toplam seviye yoğunluğu üzerine direkt ve eksiksiz deneysel veriler, kararlı çekirdeklere mahsus olmak üzere, sadece düşük uyarılma enerjileri ve nötron rezonans enerjisi ile sınırlıdır. Bu sebeple, toplam seviye yoğunluğunun keyfi bir uyarılma enerjisindeki değeri mevcut deneysel verilerden lokal veya global bir parametrizasyon yoluyla kuantife edilen fenomenolojik formüller yoluyla elde edilmektedir. Bu yaklaşımlarda yaygın olarak kullanılan bir yaklaşım, pozitif ve negatif parite açısından seviye yoğunluklarının dengeli olarak dağıldıkları varsayımdır. Sınırlı sayıda olmakla beraber, yeni deneysel veriler bu varsayımın yeterince düşük uyarılma enerjilerinde geçerli olmayabileceğine işaret etmektedir. Bu sebeple, teorik açıdan, fenomenolojik formüller yerine, seviye yoğunluğuna tesir eden etkenler olan tek-cisim uyarıları yanında kabuk etkileri ve nükleonlar arası korrelasyonları da üniter şekilde hesaba katan gerçekçi mikroskopik yöntemlere ihtiyaç vardır.

Kadir Has Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi öğretim üyesi Yard. Doç. Dr. Cem Özen'in yürüttüğü ve İstanbul Üniversitesi Fizik Bölümü yüksek lisans öğrencisi Enes Akyüz'ün bursiyer olarak çalıştığı bu projede, orta kütleli bazı çekirdeklerin toplam ve pariteye bağlı seviye yoğunlukları, çekirdeklerin termal ve istatistiksel özelliklerini açıklamada son derece başarılı mikroskopik bir yöntem olan Kabuk Modeli Monte Carlo yöntemi ve parite projeksiyon teknikleri kullanılarak ele alınmıştır.

## 2 GENEL BİLGİLER

### 2.1 Nükleer Seviye Yoğunluğu

DeneySEL nükleer yapı fiziğinde spektroskopik yöntemlerce irdelenebilen enerjilerde, ayrıık uyarılmış seviyelerinin her biri enerjilerine ilave olarak açısal momentum ve parite kuantum sayıları ile karakterize edilirler [Bohr 69]. Ancak; seviyelerin yoğunluğunun giderek arttığı ve süreklilik değerlerine ulaştığı daha yüksek uyarılma enerjilerinde, deneySEL olarak böylesi bir çözünürlüğe ulaşmak mümkün değildir. Dolayısıyla; süreklilik rejiminde anlamlı olan fiziksel nicelikler, uyarılmış halleri sahip oldukları kuantum sayılarına göre nitelendirebilen yoğunluklar olacaktır.

En genel anlamda, nükleer uyarılmış durumlar, tek-cisim ve kollektif serbestlik dereceleri cinsinden ele alınabilir. Kollektif uyarımlara özgü enerji skalasından çok daha yüksek enerjilerde (yani  $E \gg E_c$ ), kollektif uyarımlar tek-cisim uyarımlarından bağımsız olarak ele alınıp tek-cisim uyarımları üzerine inşa edilmiş ilave serbestlik dereceleri gibi düşünülebilir; öyle ki, bu enerjilerde toplam seviye yoğunluğu,

$$\rho(E) = \int dE_i \rho_i(E_i) \sum_c \delta(E - E_i - E_c) \quad (1)$$

ifadesi ile nitelendirilebilir [Maino 90]. Yukarıda  $c$ , bir  $E_i$  uyarılma enerjisindeki içsel seviyelerin üzerine inşa edilen kollektif uyarılmış halleri karakterize eden indekstir. Adiyabatik limit olarak da adlandırılan bu ( $E \gg E_c$ ) limitte, toplam seviye yoğunluğu,  $\rho$ ,

$$\rho(E) \approx \rho_i(E) Z_c(\beta) \quad (2)$$

ifadesi ile yaklaşıtırılabilir. Formül 2'deki  $Z_c(\beta) = \sum_c e^{-\beta E_c}$  ifadesi bir  $\beta = 1/T$  ters sıcaklığındaki kollektif uyarımları karakterize eden kanonik bölüşüm fonksiyonudur.

Nükleer seviye yoğunluğu üzerine yapılan teorik araştırmalar söz konusu olduğunda, tek-cisim uyarılmış hallerinin istatistiği üzerine yaygın bir literatür bulunmasına rağmen, kollektif uyarımlar hakkında bilinenlerin genel olarak sınırlı olduğu görülecektir [Capote 09]. Bu durum tek-cisim uyarımlarını açıklamanın kollektif uyarımları açıklamaya göreceli olarak çok daha kolay olmasından kaynaklanmaktadır. Daha spesifik olursak, kollektif uyarımlar nükleon-nükleon korrelasyonlarının bir sonucu olarak ortaya çıkan çok-cisim fenomenleridir [Ring 80]; bu yüzden gerçekçi bir şekilde irdelenebilmeleri için kuantum mekaniksel çok-cisim probleminin çözülmesi gerekmektedir. Yeterince hafif çekirdekleri hariç tutacak olursak, bu tür çalışmaları çok zor ve hatta imkansız kılan faktör, olası nükleon-nükleon korrelasyonlarının sayıca olağanüstü büyük olmasından kaynaklı hesaplama zorluklarıdır [Caurier 05]. Bu türden hesaplamaların gerçekleştirilebilmesi ancak Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) olarak bilinen güçlü bir stokastik kuantum çok-cisim tekniğinin geliştirilmesi ile mümkün olmuştur [Johnson 92, Koonin 97]. KMMC yönteminde, nükleer yapı fiziğinin birleşik teorik modeli olarak kabul edilen etkileşimli kabuk modeli çerçevesinde, gerek nükleer ortalama alandan kaynaklı tek-cisim uyarımları, gerekse rezidüel etkileşimlerin sebep olduğu korrelasyon etkileri üniter bir şekilde hesaba katılmakta ve çok büyük model uzaylarında



(gerçekleştirilmiş en kapsamlı hesaplamalarda  $\sim 10^{30}$  boyutlu) dahi seviye yoğunluğu gibi istatistiksel nicelikler hassas bir şekilde hesaplanabilmektedir.

KMMC metoduna giriş yapmadan önce, kısaca da olsa, seviye yoğunluğu konusu üzerine geleneksel yaklaşımları tartışmak uygun olacaktır.

## 2.2 Fenomenolojik Seviye Yoğunluğu Modelleri

Toplam nükleer seviye yoğunluğunu fenomenolojik olarak temsil eden formüller arasında belki de en basit ve en sık kullanılanı Bethe formülü olarak bilinir [Bethe 36]. Bu ifade aslen etkileşimsiz bir Fermi gazının seviye yoğunluğunu veren ve tek bir parametre (tek-cisim seviyelerinin ortalama yoğunluk parametresi,  $a$ ) içeren bir formüldür. (yani Formül 2'deki  $\rho_i(E)$  tipindedir). Etkileşimli bir sistem olan çekirdek ele alındığında, bu parametre fenomenolojik serbest bir parametre olarak ele alınır ve deneysel veriye yapılan fit işlemi sonucunda saptanır. Ancak daha sonradan, komşu çekirdekleri spektroskopik açıdan birbirine göre farklı kılan en bariz özelliklerden biri olan tek-çift etkilerini emüle etmek amacıyla ikinci bir serbest parametre olan geri kaydırma parametresi,  $\Delta$  da bu formüle eklenerek geri-kaydırmalı Bethe formülüne (back-shifted Bethe Formula, BBF) ulaşılmıştır [Gilbert 65, Dilg 73]:

$$\rho_{BBF}(E) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} a^{-1/4} (E - \Delta)^{-5/4} e^{2\sqrt{a(E-\Delta)}} \quad (3)$$

Kabuk etkileri ve çiftlenim korrelasyonları gibi seviye yoğunluğu üzerinde önemli etki yapan fiziksel özellikleri açıkça modellemek amacıyla daha kapsamlı fenomenolojik formüller geliştirilmiş olmasına rağmen [Koning 08, Capote 09], yeterince deneysel veriye sahip bir çekirdek için (düşük enerjilerde seviye sayım verisi ve nötron ayrılma enerjisinde nötron rezonans verisi) BBF parametrizasyonu diğer fenomenolojik modeller kadar kullanışlıdır ve sıkça kullanılmaktadır. Fenomenolojik yaklaşımlar dışında, çeşitli yarı-mikroskopik ve mikroskopik seviye yoğunluk modelleri [Ignatyuk 85, Demetriou 01, Hilaire 06, Capote 09] de bulunmaktadır; ancak, nükleonik korrelasyonların ancak yaklaşık bir şekilde ele alınmasından ötürü bu modellerin fenomenolojik formüllere nazaran sağladığı yegane belirgin avantaj deneysel veri hiç bulunmayan veya yetersiz olan çekirdekler için tahmini bir seviye yoğunluğu verebilmeleridir. Bu proje kapsamında ele alınan çekirdekler kararlılık bölgesi içinde veya yakınında olan çekirdekler olduğundan, KMMC hesaplamaları ile kıyaslanması açısından fenomenolojik bir formül yeterli görülmüş ve bu bağlamda BBF denklemi esas alınmıştır. Çalışmamızda BBF formülünün iki serbest parametresi olan  $a$  ve  $\Delta$  parametreleri, uygun iki farklı bağıntının, eşzamanlı nümerik çözümüyle saptanmıştır [Özen 13b]. Bu bağıntılar sağ tarafları direkt deneysel veri ile saptanan, sol tarafları ise bilinmeyen parametreleri içeren

$$\rho_{BBF}(B_n) = \rho_{\text{exp}}(B_n), \quad (4)$$

ve

$$\int_{E_a}^{E_b} dE' \rho(E') = N(E_b) - N(E_a). \quad (5)$$

ifadeleridir. Bu ifadelerden ilki çekirdeğin nötron rezonans enerjisindeki seviye yoğunluğunu, diğeri ise seviye sayım bölgesinde uygun olarak seçilmiş bir  $[E_a, E_b]$  enerji aralığı içinde kalan toplam seviye sayısını temsil etmektedir. Bu aralık seviye sayısının deneylerce eksiksiz olarak atanabildiği bir aralık olarak seçilmiştir. Deneysel veriler RIPL-3 veri tabanından [Capote 09] sağlanmıştır.

### 3 GEREÇ VE YÖNTEM

#### 3.1 Kabuk Modeli Monte Carlo Yöntemi

##### 3.1.1 Formalizm

Etkileşimli kabuk modelini çözmeye geleneksel yaklaşım Hamiltonyen matrisinin çok-cisim bazında çaprazlanması esasına dayanır [Caurier 05]. Hesaplamalar açısından yapılabilir olduğu sürece bu yaklaşım gerek tek-cisim gerekse kollektif uyarımları aynı formalizm içerisinde tutarlı şekilde hesaba katan gerçekçi çözümler üretir. Ancak, gerek çok sayıda aktif nükleona sahip çekirdeklerde, gerekse çok sayıda tek-cisim seviyesi içeren model uzaylarında, çok-cisim korrelasyonlarının sayısındaki kombinyonel artış sebebiyle çok ciddi kompütasyonel zorluklar ortaya çıkmaktadır. Bu sebeple bu geleneksel yaklaşım sadece yeterince hafif çekirdekler için kullanışlı olup, nükleer tablonun geneli düşünüldüğünde nükleer seviye yoğunlukları konusunda literatüre katkısı ihmal edilebilir durumdadır.

Bu noktada Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) yaklaşımı, güçlü bir alternatif olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu yaklaşım, etkileşimli doğası yüzünden son derece karmaşık çok-cisim problemini efektif olarak etkileşimsiz pek çok problemin simültane çözümüne indirger. KMMC yöntemi, orjinal çok-cisim problemindeki nükleonik korrelasyonları istatistiksel bir yaklaşım dahilinde muhafaza eder; sonuç olarak, istatistikten kaynaklanan hatalar kontrol edilebilir ve prensipte keyfi olarak küçültülebilir. Bu yaklaşımın ana avantajı problemin hesaplama zorluğunun model uzayı oluşturan tek-cisim seviyelerinin sayısı  $N$  cinsinden  $N^4$  ifadesi ile ölçeklenmesindedir [Koonin 97]. Geleneksel kabuk modelinin kombinyonel artışı ile kıyaslandığında, bu mütevazı artış KMMC yöntemine muazzam büyüklükteki model uzaylarında dahi başarıyla hesaplama yapabilme gücü vermektedir. İstatistik mekaniğe dayalı (tercihen kanonik formalizm) formülasyonu sayesinde bu yaklaşım termal nükleer özelliklerin, dolayısıyla da averaj seviye yoğunluğunun hesaplanması açısından doğal bir teorik model teşkil etmektedir. Bu yüzden literatürde bu yöntem kullanılarak yapılmış çeşitli seviye yoğunluk hesaplamaları bulunmaktadır.

Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) metodunun esasında yer alan Hubbard-Stratonovich transformasyonuna [Hubbard 58] göre bir  $\beta$  ters sıcaklığındaki ( $\beta=1/T$ ) imgesel-zaman çok-cisim propagatörü ( $e^{-\beta H}$ ), tek-cisim propagatörleri ( $U_\sigma$ ) cinsinden

$$e^{-\beta H} = \int D[\sigma] G_\sigma U_\sigma, \quad (6)$$

formülüyle ifade edilir. Bu ifadede yer alan integrasyon değişkenleri  $\sigma$ , etkileşim

terimlerinin lineer hale getirilmesinin matematiksel bir sonucu olarak ortaya çıkmış yardımcı alanlardır. Sayıları orjinal Hamiltonyendeki kuadratik etkileşim terimleri kadar (genellikle onbinlerce) olup, reel ekseninde her değeri alabilirler ve genel olarak zamana bağlıdır.  $G_\sigma$  ise yardımcı alanlara bağlı Gausyen bir terimdir. Formül 6'daki  $U_\sigma$  ifadesi, dalgalanan  $\sigma(\tau)$  alanlarında hareket eden efektif olarak etkileşimsiz kılınmış çekirdeği temsil eden bir propagatördür.

KMMC metodunda bir  $O$  gözlemlenebilirinin  $T$  sıcaklığındaki beklenen değeri

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr}[O e^{-\beta H}]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]} = \frac{\int D[\sigma] W_\sigma \Phi_\sigma \langle O \rangle_\sigma}{\int D[\sigma] W_\sigma \Phi_\sigma} , \quad (7)$$

İfadesi ile verilmektedir. Burada  $\text{Tr}$  çok-cisim halleri üzerinden bir trace ifadesini,  $W_\sigma = G_\sigma |\text{Tr} U_\sigma|$  uygun şekilde seçilmiş bir ağırlık fonksiyonunu, ve  $\Phi_\sigma = \text{Tr} U_\sigma / |\text{Tr} U_\sigma|$  Monte Carlo işaret terimi olarak bilinen bir niceliği göstermektedir.  $\langle O \rangle_\sigma \equiv \text{Tr}[O U_\sigma] / \text{Tr}[U_\sigma]$  ifadesi ise,  $O$  gözlemlenebilirin  $T$  sıcaklığında ama dalgalanan  $\sigma(\tau)$  alanlarının belirli bir konfigürasyonuna karşılık gelen etkileşimsiz çok-cisim problemindeki beklenen değerini temsil etmektedir. İntegrandlardaki ifadeler tek-cisim uzayında matris cebiri yoluyla hesaplanabilirler. Öyle ki, kabuk modeli hesabında kullanılan tek-cisim seviyelerinin sayısı  $N_s$  ile gösterilir ise,  $U_\sigma$  boyutları  $N_s \times N_s$  olan bir matris şeklinde yazılabilir. Örneğin, bunun bir sonucu olarak büyük kanonik dağılımda  $\text{Tr}[U_\sigma]$  ifadesi

$$\text{Tr} U_\sigma = \det(\mathbf{1} + U_\sigma) \quad (8)$$

kapalı cebirsel ifadesi ile gösterilebilir. Ancak atom çekirdekleri belli sayıda proton ve nötron içerdiğinden, büyük kanonik dağılım ifadeleri yerine kanonik dağılım ifadeleri kullanılmalıdır. Bu, ayrık Fourier toplamı kullanılarak yazılabilecek sayı-projeksiyon operatörü yoluyla kolaylıkla yapılan bir işlemdir. Örneğin, yukarıdaki  $\text{Tr}[U_\sigma]$  ifadesinin  $A$  parçacığa sahip kanonik topluluktaki değeri,

$$\text{Tr}_A U_\sigma = \frac{e^{\beta \mu A}}{N_s} \sum_{m=1}^{N_s} e^{-i \varphi_m A} \det(\mathbf{1} + e^{i \varphi_m} e^{\beta \mu} U_\sigma) , \quad (9)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. Burada  $\varphi_m = 2\pi m / N_s$  ( $m=1, \dots, N_s$ ) kuadratür noktalarına,  $\mu$  ise nümerik açıdan stabilizasyon sağlaması amacıyla ortaya atılmış kimyasal potansiyel türünden bir niceliğe karşılık gelmektedir.

Formül 7'deki çok-katlı integraller Monte Carlo yöntemleriyle stokastik olarak hesaplanabilir (kontrol edilebilir istatistiksel hatalar dahilinde). İntegrasyondaki  $\sigma$  alanlarından,  $W_\sigma \equiv G_\sigma |\text{Tr}[U_\sigma]|$  dağılım fonksiyonu yoluyla sağlanan  $\sigma_n$  örnekleri cinsinden  $O$  gözlemlenebilirinin beklenen değeri

$$\langle O \rangle \approx \frac{\sum_n \langle O \rangle_{\sigma_n} \Phi_{\sigma_n}}{\sum_n \Phi_{\sigma_n}}, \quad (10)$$

formülü ile hesaplanabilir. Bu ifade paralel hesaplama platformları tarafından hesaplanmaya çok elverişli olduğundan yüksek performanslı bilgisayar sistemleri üzerinde koşturulur .

### 3.1.2 Model Uzayı ve Efektif Hamiltonyen

KMMC hesaplamalarında kullanılan Hamiltonyenler yukarıda belirtildiği gibi Monte Carlo işaret problemine yol açmayan fakat gerçekçi bir Hamiltonyenin dominant terimlerini oluşturan monopol çiftleşim ve multipol-multipol etkileşim bileşenlerine sahiptir:

$$H = \sum_a \epsilon_a \hat{n}_a - \sum_{v=p,n} g_v P_v^+ \cdot P_v - \chi \sum_{\lambda} k_{\lambda} : (O_{\lambda;p} + O_{\lambda;n}) \cdot (O_{\lambda;p} + O_{\lambda;n}) : \quad (11)$$

Buradaki ilk terim, tek-cisim bileşenlerini, ikinci terim çiftleşim etkileşimlerini ve son terim de multipol-multipol etkileşimlerini temsil etmektedir. [Nakada 97] Tek-cisim enerjileri  $\epsilon_a$  , genellikle spin-orbit bileşenli Woods-Saxon tipi bir ortalama alan potansiyelinden elde edilir ve bölgedeki çekirdeklerin düşük-enerjilerdeki özelliklerini sağlayacak değerlere sabitlenir.  $P_v^+ = \sum_{nljm} (-1)^{j+m+l} a_{nljm;v}^+ a_{nlj-m;v}^+$  Çift yaratma

operatörü cinsinden yazılmış olan çiftleşim teriminin şiddeti,  $g_0$  , sayı-projeksiyonlu BCS yöntemi kullanılarak, hesaplama bölgesindeki küresel çekirdeklerin deneysel tek-çift kütle farkını sağlayacak şekilde üretilir. Multipol-multipol etkileşimlerini ifade eden son terimde  $\lambda$  multipol sayacı olup, kuadrupol (2), oktipol (3) ve heksadekapol (4) gibi bileşenleri ifade etmektedir. Burada : normal sıralama operatörü olup,  $\lambda$  -rütbeli multipole karşılık gelen multipol operatörü  $O_{\lambda,v} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda+1}} \sum_{ab} \langle j_a || \frac{dV}{dr} Y_{\lambda} || j_b \rangle [a_{n_a l_a j_a m_a;v}^+ \times \tilde{a}_{n_b l_b j_b m_b;v}]^{(\lambda)}$  ifadesi ile temsil

edilir. Bu ifadede yer alan  $\tilde{a}_{nljm;v} = (-1)^{(j+m)} a_{nlj-m;v}$  operatörü ise  $a_{nljm;v}$  yok-etme operatörünün evrilmiş-zaman karşıtıdır.  $V(r)$  bir merkezi Woods-Saxon potansiyelidir. Multipol terimlerinin genel kuvveti,  $\chi$  , yüzeyde-maksimal ayrıştırılabilir nükleon etkileşiminin (surface-peaked separable interaction), yani  $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -X (dV/dr)(dV/dr') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  ifadesinin, multipolar açılımı yapılarak varyasyonel olarak nükleer ortalama alanla nükleer yoğunluğun,  $\rho$  ilişkilendirilmesi ile edilir. Bu şekilde elde edilen kendinden istikrarlı

$$X^{-1} = \int_0^{\infty} dr r^2 \left( \frac{dV}{dr} \right) \left( \frac{d\rho}{dr} \right), \quad (12)$$

bağıntısı nümerik olarak çözüldüğünde  $X$  değeri hesaplanmış olur. Formül. 11'de multipol terimlerinin bağıl şiddetini veren  $k_{\lambda}$  terimleri ise kor polarizasyonundan kaynaklı renormalizasyon katsayılarıdır [Nakada 97].

### 3.1.3 Monte Carlo İşaret Problemi

Tüm fermiyonik Monte Carlo metodlarında olduğu gibi, KMMC metodunda da kendini gösteren teknik bir sorun Monte Carlo işaret problemidir. Bu problemde, Monte Carlo örneklemede  $W_\sigma \equiv G_\sigma |Tr[U_\sigma]|$  dağılım fonksiyonunun pozitif-definit değerler almadığı konfigürasyonlar olduğu durumlarda, Formül 10'da verilen gözlemlenebilirin değerinde kontrol edilemeyen istatistiksel varyasyonlar ortaya çıkmaktadır [Von den Linden 92, Koonin 97]. Genel bir nükleer Hamiltonyen kullanımının ve/veya tek sayıda nükleon içeren çekirdeklerle ilgili durumlarda söz konusu konfigürasyonların ortaya çıktığı bilinmektedir. Bu projede ele alınan Hamiltonyen'ler işaret problemine yol açmayan, gerçekçi bir nükleer etkileşimin kolektif bileşenlerini temsil eden türden Hamiltonyenlerdir. Proje teklifinde özellikle vurgu yapılmamış olmasına rağmen, projenin ele almayı hedeflediği çekirdekler işaret problemi sınırlamasından dolayı çift sayıda nötron ve proton içeren çift-çift çekirdekler olarak düşünülmüştür. Ancak, proje ana hedeflerine ulaştıktan sonra uygulamalar tek-çift izotoplara da genişletilmiştir. Bu tür çekirdeklere işaret problemi kendini, metodun düşük uyarılma enerjilerine karşı gelen sıcaklıklarda çalıştırılmasında göstermektedir. Toplam ve pariteye-bağlı seviye yoğunluğu hesaplarının yapılmasına engel olmamakla beraber, düşük uyarılma enerjileri ve dolayısıyla temel uyarılma enerjisinin KMMC metodunun erişimi dışında kalmasından ötürü, tek-çift çekirdeklere yönelik sonuçlar temel enerji seviyesinin nümerik değerinde ortaya çıkan belirsizlik ölçüsünde anlamlıdır. Bu sebeple projenin tek-çift çekirdeklere yönelik sonuçları daha ileride yapılacak ve KMMC metodu dışında kalan metodlarla desteklenecek çalışmalarla kesinlik kazanacaktır.

### 3.1.4 Parite Projeksiyonu

Pariteye bağlı seviye yoğunluğu hesaplarında başlangıç noktası, belirli bir pariteye ( $\pi = \pm$ ) sahip seviyelerin, bir  $T = 1/\beta$  sıcaklığındaki ortalama termal enerjisi, yani  $E_\pi(\beta)$  dir. Termodinamiksel olarak bu ifade, KMMC hesaplamaları sonucunda elde edilebilen toplam termal enerji  $E(\beta)$ , pariteye bağlı bölüşüm fonksiyonu  $Z_\pi(\beta)$  ve toplam bölüşüm fonksiyonu  $Z(\beta)$  cinsinden,

$$E_\pi(\beta) = \frac{Tr[HP_\pi e^{-\beta H}]}{Tr[P_\pi e^{-\beta H}]} = \frac{-d \ln[Z_\pi(\beta)/Z(\beta)]}{d\beta} + E(\beta) \quad (13)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. KMMC hesaplamalarında  $Z_\pi(\beta)$  'ın elde edilebilmesi için  $\pi = \pm$  pariteleri üzerine izdüşüm sağlayan

$$P_\pi = \frac{1}{2}(1 + \pi P) \quad (14)$$

operatörünün tek-cisim seviyeleri bazında yazılmış matris representasyonu kullanılır.

### 3.1.5 Toplam ve Parite-izdüşümlü Seviye Yoğunluğu

KMMC hesaplamalarında  $\pi = \pm$  paritesine sahip seviyelerin  $T = 1/\beta$  sıcaklığındaki ortalama enerjisi  $E_\pi(\beta)$

$$E_\pi(\beta) = \frac{\int dE' e^{-\beta H} E' \rho_\pi(E')}{Z_\pi(\beta)} \quad (15)$$

ifadesine göre bu seviyelerin yoğunluğu  $\rho_\pi(E)$  'nun Laplace transformu ile ilişkilidir. Formül 15'te ters Laplace transformu uygulayarak (bu amaç için, eğer noktası yani saddle-point yaklaştırmayı kullandık)  $E$  uyarılma enerjisindeki  $\pi$  pariteli seviyelerin yoğunluğuna varılır:

$$\rho_\pi(E) = \frac{e^{\beta E_\pi + \ln(Z_\pi)}}{\sqrt{-2\pi \frac{dE_\pi(\beta)}{d\beta}}} \quad (16)$$

Toplam seviye yoğunluğu da aynı formül ve yaklaşımda  $E_\pi(\beta)$  yerine  $E(\beta)$  kullanılarak elde edilebilir.

## 3.2 Hesaplama Kaynakları

### 3.2.1 Bilgisayar Kodları

Projede yapılan bütün KMMC hesaplamaları parite ve açılma projeksiyon rutinleri proje yürütücüsü tarafından yazılmış Oak Ridge/Caltech isospin-SMMC kodu kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Projenin son dönemlerinde hesaplama yapılan çekirdeklerin temel enerji seviyelerinin en hassas şekilde saptandığını garanti etmek amacıyla çok düşük sıcaklıklarda hesap yapmaya olanak sağlayan nümerik stabilizasyon rutinleri ile donatılmış Yale SMMC-pn kodu da kullanılmıştır. Her iki KMMC programı da MPI paralel direktifleri içeren FORTRAN 90/95 yazılımıdır. Bu programlar paralel BLAS ve LAPACK kütüphaneleri kullanmaktadırlar.

KMMC ham hesap sonuçlarının analizinde gerekli pek çok ara işlem bulunmaktadır. Toplam ve kısmi seviye yoğunluklarının hesaplanması için gerekli bu nümerik operasyonlar için ~10K satırdan oluşan bash/python skripti, yine yürütücü tarafından yazılmış ve fortran, gnu vs programları koordine edilerek gerekli hesapları hızlı ve verimli şekilde analiz etme imkanı yaratılmıştır.

### 3.2.2 Bilgisayar Platformları

Projede gerçekleştirilen tüm hesaplamalar Kadir Has Üniversitesi bünyesinde yer alan Yüksek Performanslı Hesaplama Birimi bünyesinde gerçekleştirilmiştir. Bu sistemin özellikleri aşağıdaki tabloda özetlenmiştir.

Kadir Has Üniversitesi Yüksek-performanslı Hesaplama Birimi
<b>Sunucu tipi:</b> HP BL2x220c G5 <b>İşlemci tipi/hızı:</b> 2x3.00 GHz Intel Xeon E5450 Quad Core CPU <b>Düğüm sayısı:</b> 17 <b>Toplam çekirdek sayısı:</b> 136 <b>Bellek mimarisi:</b> 16GB PC2-5300 RAM <b>Düğüm başına bellek:</b> 16 GB <b>Performans ağ bağlantısı:</b> Infiniband Mezzanine Card <b>Kalıcı Bellek (HD):</b> 2x120GB 5.4K SATA HDD

**Tablo 1:** Hesaplamalarda kullanılan bilgisayar platformu

## 4 BULGULAR

### 4.1 Temel Enerji Seviyesinin Saptanması

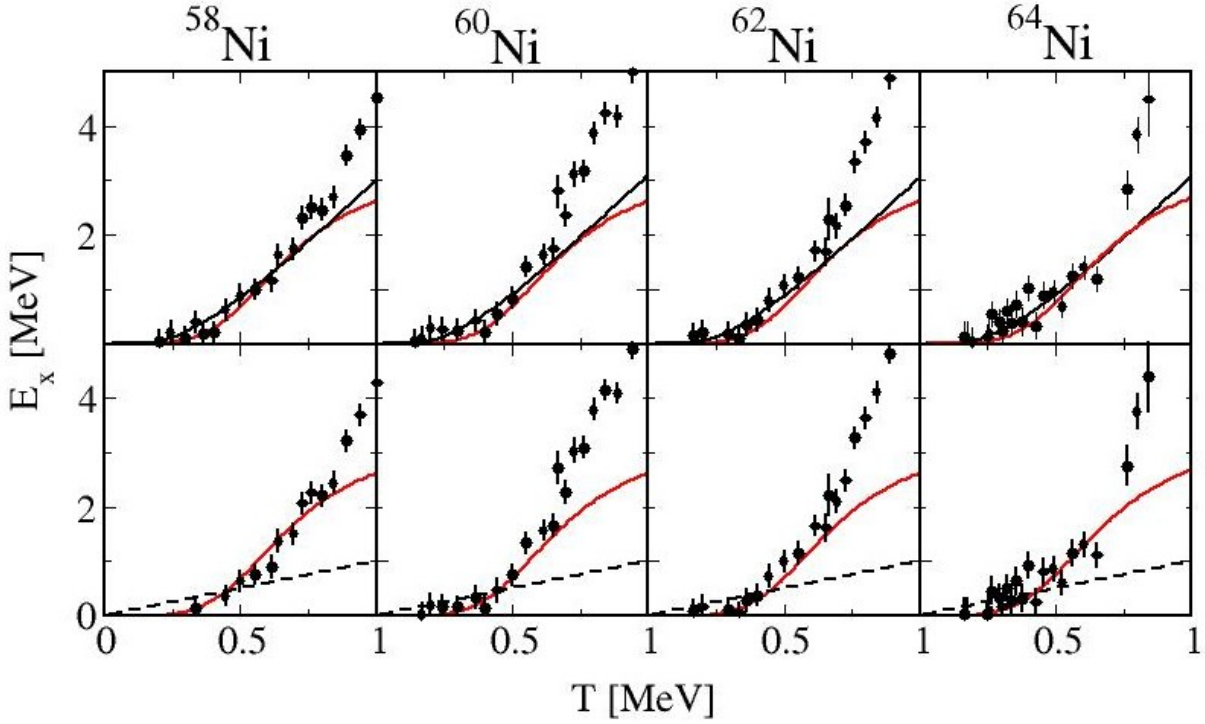
Nükleer seviye yoğunluğu hesaplamalarında çok önemli bir konu, söz konusu çekirdeğin temel enerji seviyesinin doğru bir şekilde saptanmasıdır. Temel enerji seviyesinin doğru saptanmaması durumunda, uyarılma enerjileri de aynı belirsizliğe tabi olacaklarından, belirli bir uyarılma enerjisindeki seviye yoğunluğu tahmini de ciddi oranda hataya maruz kalacaktır.

KMMC metodu termal bir metod olduğu için, temel enerji seviyesine ulaşmak için bu metodu  $\beta = \infty$  limitine ötelemek gerekmektedir. Ancak bu pratikte ancak nümerik stabilite ölçüsünde yaklaşılabilen bir limittir. Projenin son dönemi içerisinde bu konuya özel bir özen gösterilmiş ve hesaplamalarımızda bu açıdan çok düşük sıcaklıklara erişim sağlayabilen Yale SMMC-pn kodu da kullanılmıştır.

Bu çalışmada KMMC yöntemi ile  $\beta = 7 \text{ MeV}^{-1}$  (yani  $T \approx 0.143 \text{ MeV}$ ) değerine kadar soğutma sağlanmıştır. Bu düşük sıcaklıklar, KMMC metodu ile deneysel termal enerji değerlerinin direkt olarak kıyaslanabilmesini sağlamıştır. Deneylerden gelen spektroskopik bilgi ayırık hallerin enerji ve spinleri şeklinde olduğundan,  $T = 1/\beta$  sıcaklığındaki deneysel termal enerji

$$E_{\text{exp}} = \frac{\sum_i e^{-\beta E_i} (2J_i + 1) E_i}{\sum_i e^{-\beta E_i} (2J_i + 1)} \quad (17)$$

formülüyle elde edilmiştir. Burada toplamlar, deneysel olarak bilinen ayırık seviyeler üzerindedir.



**Figür 1: Çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  izotoplarının temel enerji düzeyinin saptanması. Siyah noktalar KMMC termal enerji sonuçlarını, kırmızı eğriler deneysel termal enerji profillerini, siyah düz eğriler (üst pencereler) vibrasyonel band yaklaşımında, siyah kesikli eğriler (alt pencereler) ise rotasyonel band yaklaşımında termal enerji profillerini göstermektedir.**

Bu sonuçlar Figür 1'de kırmızı eğrilerle gösterilmiştir. Yüksek sıcaklıklarda bu eğrinin satüre olmaya başlaması, Formül 17'de dikkate alınan seviyelerin sonlu sayıda olmasındandır. Bu yüzden deneysel termal enerji değerleri belirli bir sıcaklıktan daha yüksek sıcaklıklarda ciddiye alınmamalıdır.

KMMC termal enerjilerinden (siyah noktacıklar),  $T=0$  limitinin ekstre edilmesi (yani temel enerji seviyesinin saptanması) için, [Özen 13] çalışmasında ortaya atılan yaklaşım benimsenmiştir. Düşük uyarılma enerjilerinde Ni çekirdeklerinin ağırlıklı olarak vibrasyonel bir çekirdek gibi davrandığı düşünülmektedir. Bu varsayım Figür 1'de sınanmıştır, öyle ki vibrasyonel modele göre elde edilmiş termal enerji eğrisi (üst panellerde düz siyah eğri) kırmızı eğrilerle gösterilen deneysel termal enerji eğrileri ile büyük ölçüde örtüşmektedir. Kıyaslama yapmak amacıyla her çekirdek için rotasyonel band yaklaşımı esasında hesaplanmış termal enerji eğrileri (kesikli siyah eğriler) de aynı figürde alt panellerde gösterilmiştir. Tablo 2'de görüleceği gibi, her iki yaklaşıma göre ekstre edilen birinci uyarılma ( $2^+$ ) enerjileri, deneysel karşıtıyla kıyaslandığında çekirdeklerin daha çok vibrasyonel davranış sergilediği anlaşılmaktadır. Buradan hareketle KMMC termal enerjilerinin, vibrasyonel model eğrisi üzerine fit edilmesi yoluyla ekstre edilen  $T=0$  limitindeki temel enerji değerleri de Tablo 1'de belirtilmiştir.



Çekirdek	$E_0^{vib}$	$E_0^{rot}$	$E_{2+}^{vib}$	$E_{2+}^{rot}$	$E_{2+}^{exp}$
$^{58}\text{Ni}$	-831.95(7)	-831.83(14)	1.114(9)	0.277(2)	1.454
$^{60}\text{Ni}$	-844.40(6)	-844.32(11)	1.02(1)	0.277(2)	1.332
$^{62}\text{Ni}$	-851.27(9)	-851.23(12)	0.912(7)	0.255(1)	1.172
$^{64}\text{Ni}$	-857.26(4)	-857.17(7)	0.907(6)	0.300(2)	1.345

**Tablo 2:** Çift-çift Ni izotoplarında temel uyarılma ve ilk uyarılma enerjilerinin vibrasyonel ve rotasyonel band yaklaşımında tahmini değerleri. Kıyaslama için her çekirdeğin ilk uyarılma enerjisinin deneysel değeri de gösterilmiştir.

Bölüm 3.1.3'te açıklandığı üzere, tek-çift çekirdeklere yönelik uygulamalarda KMMC yöntemi ile erişim sağlanabilen en düşük sıcaklık, Formül 17'de verilen deneysel termal enerji ifadesinin gerçekçi olduğu sıcaklıklardan daha yüksektir. Bundan ötürü, yukarda izah ettiğimiz ve çift-çift çekirdeklere uyguladığımız fit prosedürü, tek-çift çekirdeklere yeterince gerçekçi değildir; öyle ki, tek-çift çekirdeklerin seviye yoğunluk grafikleri, temel enerji seviyelerindeki belirsizlik ölçüsünde yorumlanmalıdır.

#### 4.2 Parite Projeksiyonu, Toplam ve Pariteye Bağlı Termal Enerji

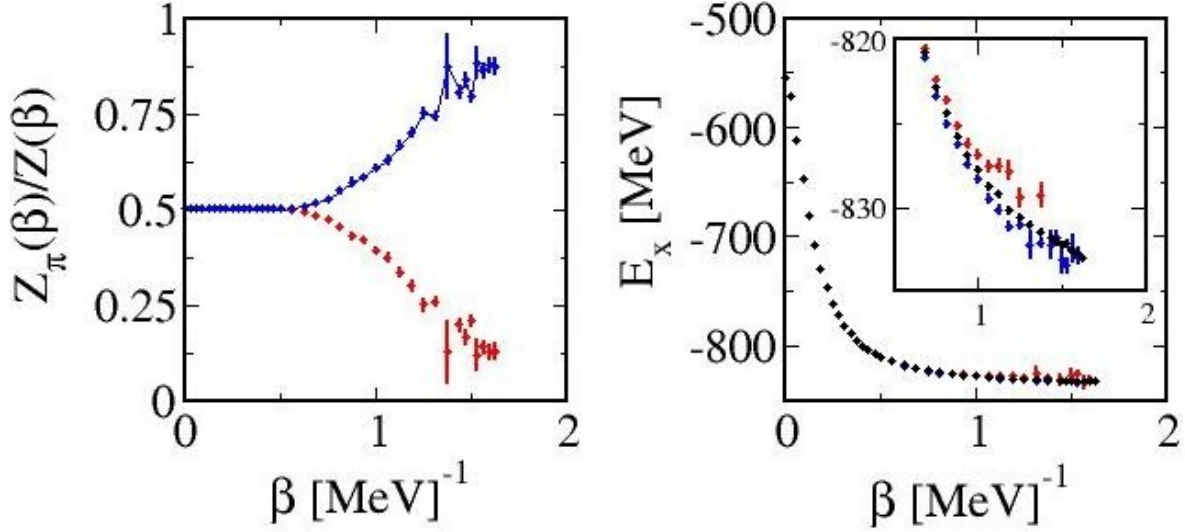
KMMC seviye yoğunluk hesaplarının başlangıç noktası termal enerjiler olduğu için bu kısımda, negatif ve pozitif pariteli seviyelere ait termal enerji profillerinin nasıl elde edildiği örneklenmektedir. 3.1.4 bölümünde izah edildiği üzere  $E_{\pi}(\beta)$  değerleri KMMC kodlarınca direkt olarak hesaplanan  $Z_{\pi}(\beta)/Z(\beta)$  ve  $E(\beta)$  değerlerinden Formül 13'ün sağ tarafındaki ifade kullanılarak hesap edilmektedir.

Bu tür bir hesaplama örneği olarak Figür 2'de  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeği ele alınmıştır. Sol panelde görüleceği üzere  $Z_{\pi}(\beta)/Z(\beta)$  oranı 0 ile 1 değerleri arasında tabii olup, düşük sıcaklıklarda (yani yüksek  $\beta$  değerlerinde)  $\pi=+$  seviyeleri ağırlıklıdır.

Sıcaklığın yükselmesi ile  $Z_{+}(\beta)/Z(\beta)$  ve  $Z_{-}(\beta)/Z(\beta)$  oranları 0.5 limit değerine ulaşarak dengelenirler (parite dengelenmesi). KMMC yönteminin, bölüşüm fonksiyonu bazında ilk planda gösterdiği bu sonuç, fenomenolojik modellerde (özellikle astrofiziksel uygulamalarda) yaygın olarak kullanılan, tüm sıcaklıklarda (diğer bir deyişle tüm uyarılma enerjilerinde) parite dengesinin olduğu varsayımının geçerli olmadığını göstermektedir.

Figür 2' de sol panelde ise Formül 13 kullanılarak elde edilmiş  $E_{+}(\beta)$ ,  $E_{-}(\beta)$  ve bunlara ek olarak  $E(\beta)$  termal enerjileri gösterilmektedir. Bu grafikten de bir kez daha anlaşılacağı gibi düşük sıcaklık limitinde kırmızı noktacıklarla gösterilen negatif parite termal enerjisi, aynı sıcaklıklardaki mavi renkle gösterilen pozitif parite termal enerjisinden daha yüksekde kalmaktadır. (bkz. iç grafik). Bu da düşük sıcaklıklarda çekirdeğin ağırlıklı olarak pozitif pariteye sahip seviyelerle popüle olduğunun diğer bir ifadesidir. Ancak, çekirdeğin sıcaklığının artması ile pozitif ve negatif pariteli çok-cisim halleri arasında kurulması beklenen istatistiksel dengeden

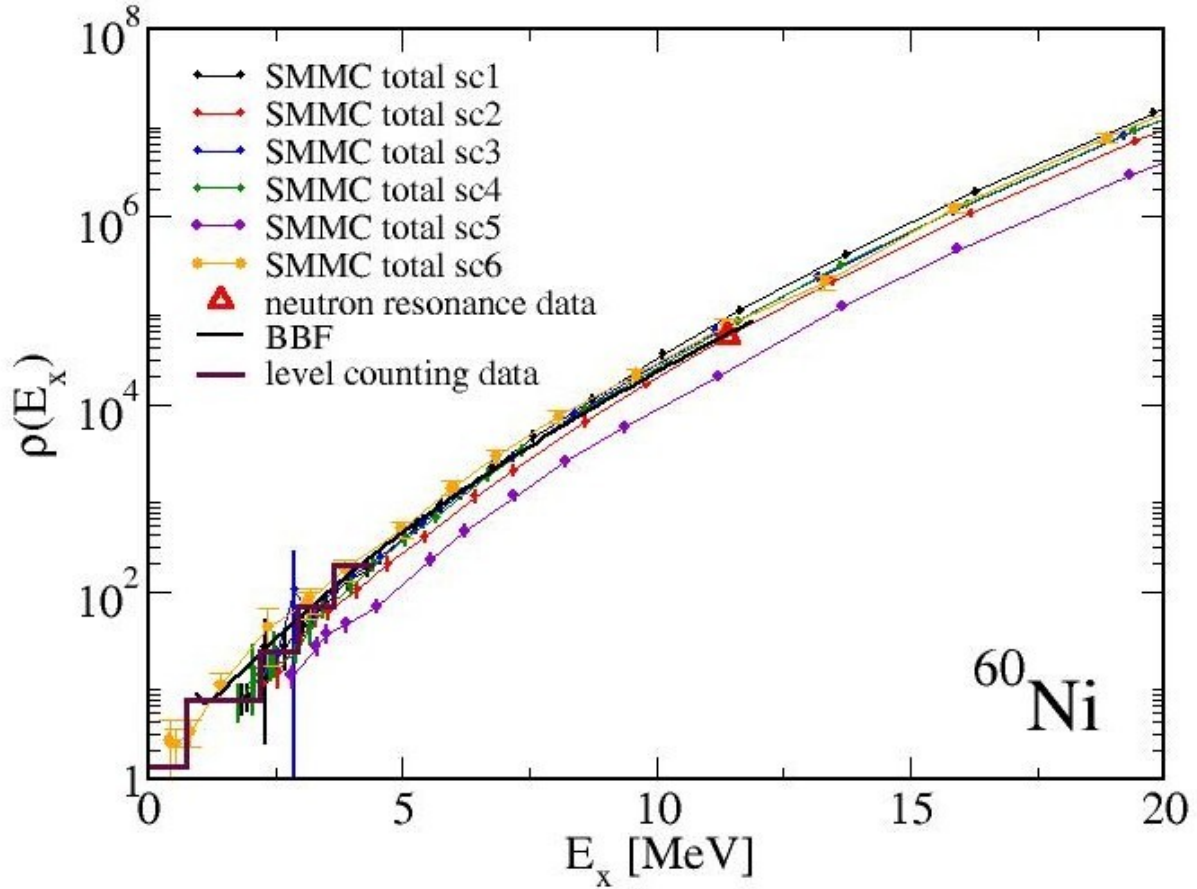
dolayı, pozitif ve negatif pariteli seviyelerin termal enerjisi de dengelenmektedir.



**Figür 2:** <sup>60</sup>Ni çekirdeğinde parite projeksiyonu. Sol pencerede ters sıcaklığın bir fonksiyonu olarak pariteye bağlı bölüşüm fonksiyonunun toplam bölüşüm fonksiyonuna oranı gösterilmektedir. Sağ pencerede ise toplam ve pariteye bağlı termal enerjiler gösterilmiştir. Siyah noktacıklar toplam, kırmızı noktacıklar negatif ve mavi noktacıklar da pozitif pariteye ait nicelikleri belirtmektedir.

### 4.3 Hamiltonyen Parametrizasyonu

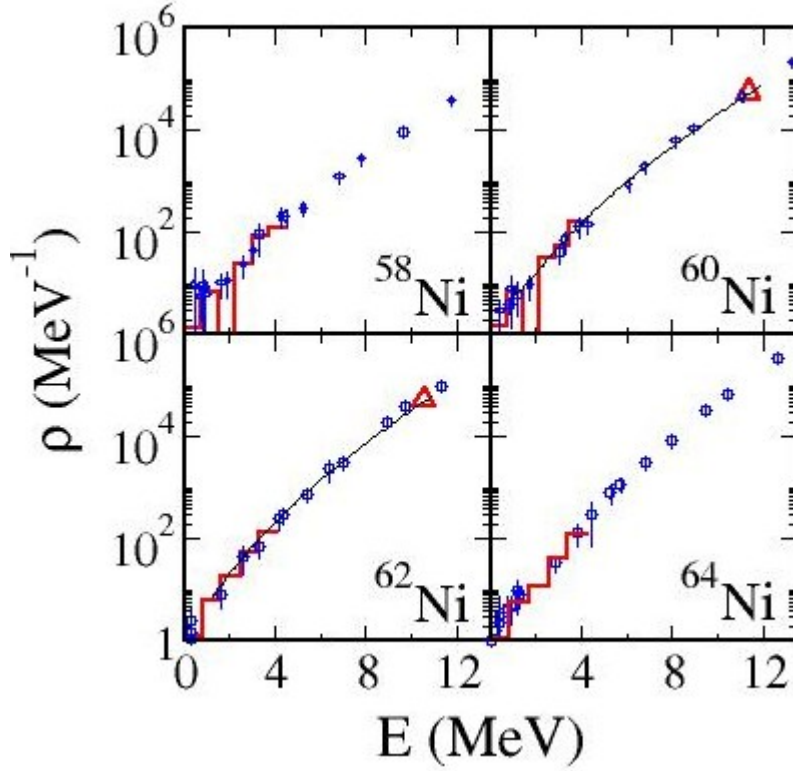
Nikel bölgesinde yaptığımız çalışmalarda, 3.1.2'de açıklanan Hamiltonyen parametreleri, deneysel verileri türetmede en başarılı olan sete göre seçilmiştir. Projenin en uzun zaman alan kısmı bu parametrelerin ince ayarının sağlanmasıdır. Zira, deneysel veriler seviye sayım bölgesi ve mevcutsa nötron rezonans verisi ile sınırlı olmasına rağmen bu iki enerji bölgesinde de başarılı bir şekilde deneyle uyum sağlamak amacıyla bir dizi hesaplama yapmak gerekmektedir. Figür 3, <sup>60</sup>Ni çekirdeği örneğinde Hamiltonyen parametrelerinin saptanma sürecinde yapılmış KMMC hesaplamalarını deneysel seviye sayım ve nötron rezonans verileri ile yine bu verilerden parametrize edilmiş BBF yoğunluğu ile kıyaslamaktadır. Bu çalışma sonunda karar kılınan sc11 etkileşimi sd+fp+gds model uzayında, proton ve nötron çiftlenim terimi şiddeti için  $g_p = g_n = 0.225$  MeV ve multipol etkileşimleri genel şiddeti için  $\chi = 0.21$  MeV ve bağlı terim şiddetleri için  $k_2 = 2.2, k_3 = 1.5, k_4 = 1.0$  değerlerindedir.



**Figür 3:**  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeğinde toplam seviye yoğunluğunun uyarılma enerjisine göre grafiği. Burada  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeği için gerçekleştirilen bir dizi KMMC hesaplaması ile deneysel seviye sayım verisi ve nötron rezonans verisi kıyaslanmaktadır. Her KMMC hesabı ayrı bir Hamiltonyen parametre ailesi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. BBF eğrisi ise, deneysel verilerden parametrize edildiği için, direkt deneysel veri olmayan enerjilerde de KMMC ve deney kıyaslamasına bir ölçüde olanak sağlamaktadır.

#### 4.4 Toplam ve Pariteye-bağlı Seviye Yoğunluğu Hesaplamaları

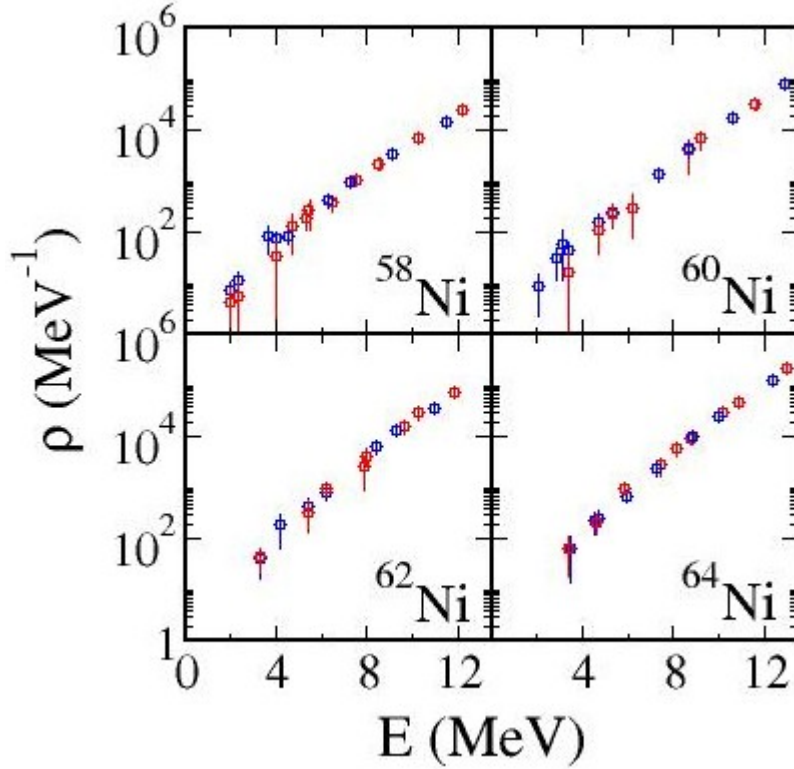
Hamiltonyen parametreleri tek bir aile olarak ele alınan çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  izotop zincirinde toplam seviye yoğunluğunda optimal deney-teori uyumu sağlanacak şekilde ayarlanmıştır. Optimal değerlere sahip sc11 etkileşimine göre elde edilen toplam seviye yoğunluğu sonuçları Figür 4'te gösterilmektedir. Dört çekirdekte de seviye sayım bölgesinde teorik değerlerin deneysel sonuçlarla (basamaklı eğriler) son derece uyumlu olduğu görülmektedir. Burada belirtilen deneysel sonuçlar 0.7 MeV aralıklı bir kutulama ile elde edilmiştir. Diğer bir deneysel veri, nötron ayrılma enerjisindeki seviye yoğunluk verisidir (kırmızı üçgenler). Nötron rezonans verisi bulunmayan  $^{58}\text{Ni}$  ve  $^{64}\text{Ni}$  çekirdeklerini saymazsak,  $^{60}\text{Ni}$  ve  $^{62}\text{Ni}$  izotoplarında KMMC deneysel veriyi başarılı şekilde türetmektedir.



**Figür 4:** Çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  çekirdeklerinde toplam seviye yoğunluğu hesaplamaları ve mevcut deneysel verilerle kıyaslanması. Kırmızı basamaklı eğriler seviye sayım verilerini, kırmızı üçgenler nötron ayrılma enerjisindeki nötron rezonans verilerini, mavi noktacıklar ise toplam KMMC seviye yoğunluklarını göstermektedir.

Figür 5'te ise aynı çekirdekler için hesapladığımız pozitif ve negatif pariteli seviye yoğunlukları gösterilmektedir. Çift-çift çekirdekler söz konusu olduğunda düşük uyarılma enerjilerinin pozitif pariteli seviyelerce domine olması beklenir. Bu durum, çift sayıdaki valans nükleonlarının tüm orbitalleri tek bir parite ile tanımlı olan bir kabukta sadece pozitif pariteli çok-cisim konfigürasyonları üretebilmesinden kaynaklanır. Ancak, uyarılma enerjisinin artırılması ile nükleonlar zıt parite taşıyan üst kabuk orbitallerine tekli sayıda nükleon geçişi yaptıkça negatif pariteli çok-cisim konfigürasyonları da oluşacaktır. Çift-çift çekirdekte bu tür uyarılar, çiftlenim enerjisinin termal enerji dalgalanmalarına nazaran zayıflamaya başlamasıyla artar ve çekirdek hızla zıt pariteli çok-cisim konfigürasyonları üreterek dengeye ulaşır. Figür 5'te  $^{62}\text{Ni}$  ve  $^{64}\text{Ni}$  çekirdeklerinde incelenen tüm uyarılma enerjilerinde parite dengesinin kurulu olduğu,  $^{58}\text{Ni}$  ve  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeklerinde ise KMMC sonuçlarındaki istatistik hata payları göz önüne alındığında  $\sim 4.5$  MeV'den büyük uyarılma enerjilerinde bu dengenin kesin olarak sağlandığı görülmektedir. Bu durum, basite indirgenmiş bir kabuk modeli argümanı ile gerekçelendirilebilir. Tanım gereği proton sektörü ele aldığımız izotoplarda özdeşdir (bu çekirdekte proton  $0f_{7/2}$  alt-kabuğu kapalıdır). Nötron sektöründe ise  $^{58}\text{Ni}$  çekirdeği taban düzeyde iki nötron içeren  $1p_{3/2}$  konfigürasyonundadır. Dört nötron kapasiteli bu orbital  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeğinde

dolacaktır. Nötronca daha zengin  $^{62}\text{Ni}$  ve  $^{64}\text{Ni}$  çekirdeklerinde ise taban düzey konfigürasyonları enerjice  $1p_{3/2}$  orbitalinden daha yukarda olan  $0f_{5/2}$  orbitali olacaktır.  $0f_{5/2}$  orbitali,  $1p_{3/2}$  orbitaline kıyasla, zıt parite taşıyan en yakın uyarılma seviyesi olan  $1d_{5/2}$  orbitaline daha yakın olduğundan  $^{62}\text{Ni}$  ve  $^{64}\text{Ni}$  çekirdeklerinin  $^{58}\text{Ni}$  ve  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeklerine nazaran daha düşük uyarılma enerjilerinde parite dengesine ulaşması beklenir. Figür 5 bu öngörüü doğrulayacak görünümüdür.



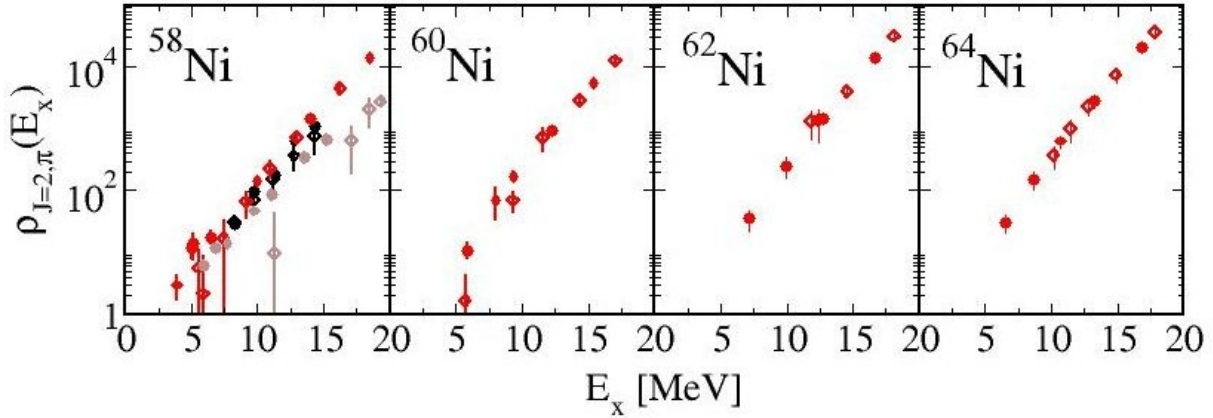
**Figür 5: Çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  çekirdeklerinde pariteye bağlı seviye yoğunluğu hesaplamaları. Koyu mavi noktacıklar pozitif pariteli KMMC seviye yoğunluklarını, kırmızı noktacıklar da negatif pariteli KMMC seviye yoğunluklarını göstermektedir.  $^{58}\text{Ni}$  çekirdeğinde 4-5 MeV'den küçük enerjilerde negatif ve pozitif pariteli seviye yoğunlukları arasında belli bir oranda ayrışma bulunmakla beraber diğer enerjilerde ve diğer çekirdeklerde bu iki yoğunluk tam olarak örtüşmektedir.**

#### 4.5 J=2 Açısal-momentumlu Seviyelerin Pariteye Bağlı Seviye Yoğunlukları

Toplam seviye yoğunluğu yanında, belirli bir açısal momentum ve/veya parite taşıyan seviyelerin yoğunluğu da nükleer yapı fiziği ve uygulamalarında önem taşıyan bir konudur. Bu konuda literatürde sıkça başvurulan zıt pariteli seviyelerin eş-yoğunluklu oluşu varsayımı ile seviyelerin açısal momentum dağılımının spin-kesinti (spin-cutoff) modeline uyduğu varsayımı ancak nükleon korrelasyonlarının ihmal edilebileceği uyarı enerjilerinde güvenle kullanılabilir. Nükleer tablo geneline bakıldığında, seviye yoğunluğu hakkındaki deneysel bilginin neredeyse tamamı seviye sayım verisi ile nötron rezonans verisinden oluşmaktadır. Yakın bir geçmişte ortaya atılan bir deneysel yaklaşım (wavelet analysis), belirli açısal momentum ve parite kanallarındaki seviyelerin yoğunluğunu dev-rezonans bölgesini tanımlayan enerjilerde ekstre etme imkanı yaratmıştır [Kalmykov 07]. Bu çok önemli ilerleme sayesinde deneysel açıdan karanlıkta olan bir enerji aralığı ve spin-parite kanalında teorik nükleer modellerin ilk defa somut bir teste tabii tutulması mümkün olmuştur.  $^{58}\text{Ni}$  ve  $^{90}\text{Zr}$  çekirdeklerini ele alan bahsi geçen çalışmada, ilk kez iki mikroskopik yöntem, Hartree-Fock-Bogoliubov artı kombinatoriyel model ile KMMC modeli, deneyle kıyaslanmıştır. Kabuk etkileri ve ortalama alandan kaynaklı tek-cisim uyarımları yanında karmaşık çok-cisim etkilerini de tutarlı şekilde hesaba katan KMMC metodu, Hartree-Fock-Bogoliubov artı kombinatoriyel modeline göre çok daha gerçekçi bir model kabul edilmektedir. Yarı-dolu kabuk konfigürasyonunda bulunan  $^{90}\text{Zr}$  çekirdeğinde sonuçlar deneyle uyum gösterdiği halde, kapalı-kabuk konfigürasyonuna yakın olan  $^{58}\text{Ni}$  çekirdeğinde her iki teorik yöntem de deneysel  $J^\pi=2^\pm$  seviye yoğunluklarını türetmede başarısız olmuştur. Bu sorunun, KMMC yöntemi açısından bakıldığında o dönemde ele alınan etkileşim ve model uzayının zıt-pariteli çok-cisim konfigürasyonları oluşturmada yetersiz kalmasından kaynaklandığı düşünülmüştür. Projemizin ana amacı bu kütle bölgesinde model uzay ve etkileşim konularını özenle ele almak ve bahsi geçen uyumsuzluğu ortadan kaldıracak şekilde gerçekçi hale getirmektir.

Figür 6'da, çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  çekirdekleri için yaptığımız  $J^\pi=2^\pm$  seviye yoğunluk hesapları gösterilmiştir. Bahsi geçen figürde,  $^{58}\text{Ni}$  çekirdeğine ait deneysel sonuçlar [Kalmykov 07] ile aynı çalışmadan alınan KMMC sonuçları da kıyaslama amacıyla gösterilmektedir.

Görüldüğü üzere,  $^{58}\text{Ni}$ 'de eski KMMC sonuçları, 20 MeV'ye kadar çok ciddi bir parite ayrımı sergilemektedir. Sadece bu çekirdek için mevcut deneysel verilerde ise böyle bir ayrım göze çarpmamakta, ele alınan enerji aralığı içerisinde çekirdeğin her iki pariteye sahip seviyeleri sayıca dengelemiş olduğu anlaşılmaktadır. Bu projede yapılan KMMC hesapları ise  $^{58}\text{Ni}$ 'nin deneysel sonuçlarıyla gerek nitelik gerekse nicelik olarak son derece uyum içindedir. Deneysel veri olmayan ve daha önceden KMMC yöntemi ile incelenmemiş  $^{60}\text{Ni}$ ,  $^{62}\text{Ni}$  ve  $^{64}\text{Ni}$  çekirdeklerinde de yaptığımız çalışmalar parite dengesinin 7-20 MeV aralığında kurulmuş olduğunu ortaya koymaktadır.

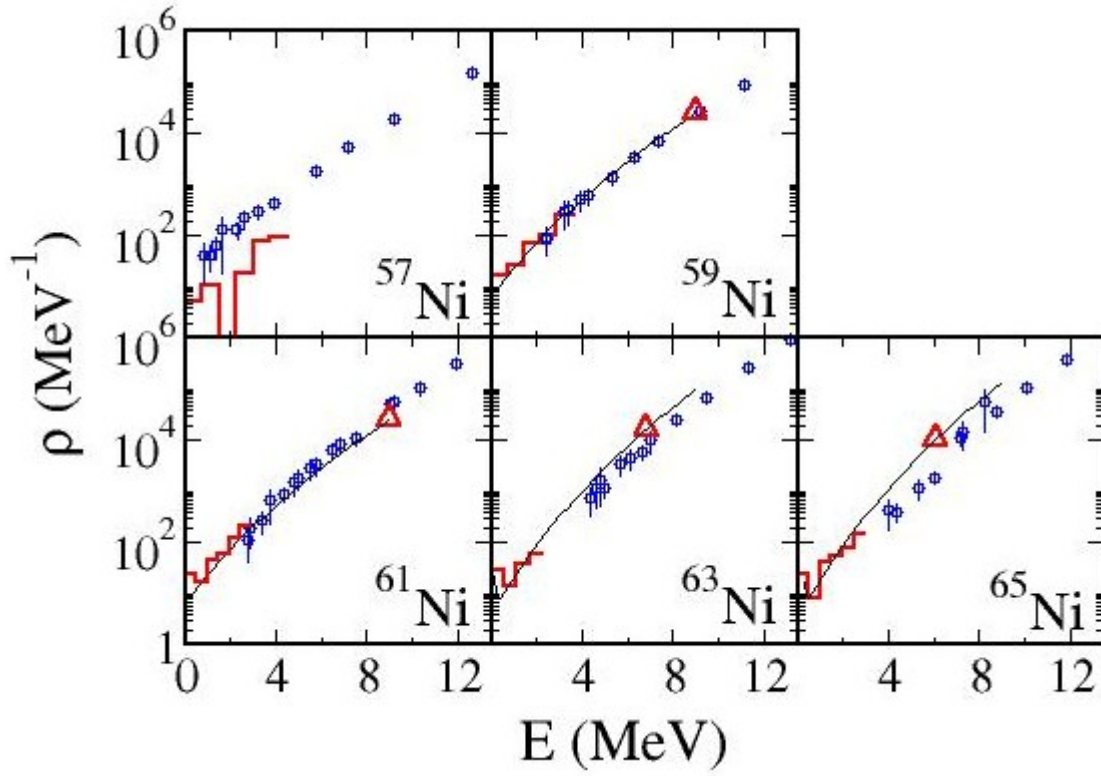


**Figür 6: Çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  çekirdeklerinde  $J^\pi=2^\pm$  seviyelerinin yoğunlukları. Dolu daireler pozitif, boş karolar negatif pariteli KMMC seviye yoğunluklarını temsil etmektedir. Kırmızı ile gösterilen sonuçlar bu projede elde edilen KMMC sonuçlarını, siyahlar deney [Kalmykov 07] sonuçlarını, kahverengiler de Kalmykov yayınında rapor edilen KMMC sonuçlarını göstermektedir.**

#### 4.6 Tek-çift Ni İzotopları

Bu bölümde, projenin ana hedefleri arasında yer almayan ancak proje yürütülürken incelenmesinde fayda görülen tek-çift  $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$  çekirdeklerine dair sonuçlar raporlanmıştır. Raporda daha önceden belirtildiği üzere, tek-çift çekirdeklere KMMC metodunun uygulanmasında karşılaşılan önemli bir sorun, bu çekirdeklere düşük sıcaklıklara erişime engel olan bir işaret probleminin var olmasıdır. Diğer bir deyişle, bu çekirdeklerin temel enerji seviyesi KMMC metodu kullanılarak direkt olarak elde edilememektedir. Bu sebeple bu tür çekirdeklerle ilgili bir araştırma proje taslağında açıkça hedeflenmemiş ancak, proje devam ederken sürdürülen ve proje yürütücüsünün de yer aldığı bağımsız bir çalışmanın [Alhassid 13], temel enerji seviyesinin tahmin edilmesine yönelik bir olanak sağlaması üzerine ele alınması kararlaştırılmıştır. Bahsi geçen çalışma, bir çekirdeğin toplam seviye yoğunluğunun fenomenolojik geri-kaydırmalı Bethe formülü (BBF) ile temsil edilebileceği varsayımına (ansatz) dayanmaktadır. Bu varsayım sayesinde, deneysel veri (seviye sayım ve nötron rezonans verisi) çekirdeğin deneysel termal enerji profilini elde etmemize olanak tanımaktadır. Buradan hareketle, KMMC termal enerji profilinin deneysel termal enerji profiline fit edilmesi yoluyla KMMC yöntemiyle direkt olarak erişilemeyen çekirdeğin temel enerji seviyesi prensip olarak ekstrapole edilebilir. Figür 7 bu metod kullanılarak elde edilen temel enerji seviyeleri ile hesap edilmiş, tek-çift  $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$  çekirdeklerine ait toplam seviye yoğunluğu grafiklerini içermektedir. Görüleceği üzere bu izotop zincirinde yer alan  $^{57}\text{Ni}$  çekirdeği nötron rezonans verisine sahip değildir. Bu sebeple, bahsedilen metod bu çekirdekte uygulanamamış, deneysel termal enerji profili sadece bütünlüğü çok düşük enerjilerle sınırlı seviye sayım verisi kullanılarak elde edilmiştir. Doğal olarak temel enerji seviyesi güvenilir şekilde hesap edilememiş, bu sonuç seviye yoğunluğu eğrisinde de deneysel sonuçtan ciddi oranda sapma olarak kendini göstermiştir.

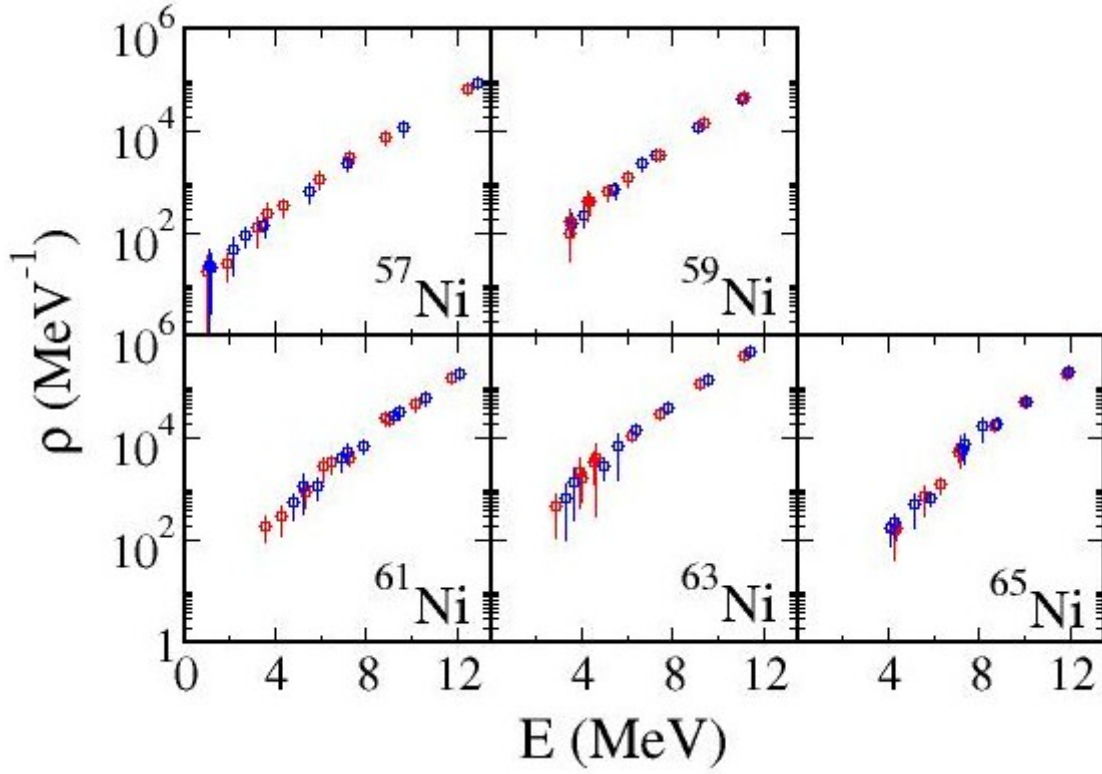




**Figür 7: Tek-çift  $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$  çekirdeklerinde toplam seviye yoğunluğu hesaplamaları. (Grafik notasyonu için bkz. Fig. 4).**

Nötron rezonans verisine sahip diğer izotoplarda ise, yöntem göreceli olarak başarıyla uygulanmış ve  $^{59}\text{Ni}$  ile  $^{61}\text{Ni}$  çekirdeklerinde deneysel seviye yoğunluğunu üretmemize olanak sağlamıştır.  $^{63}\text{Ni}$  ve  $^{65}\text{Ni}$  çekirdeklerinde ise yöntemde varsayılan BFB ansatzının bu çekirdeklerin seviye yoğunluk profillerine uygun olmadığı görülmüştür. Bunun neticesinde temel enerji seviyesi hassas şekilde elde edilememiştir. Deneysel sonuçlarla kıyaslandığında, KMMC seviye yoğunluk eğrilerinde görülen kısmi tutarsızlık buna atfedilebilir. Bu gözlemler, [Alhassid 13] çalışmasında öne sürülen pratik fenomenolojik yöntemin her çekirdeğe uygun olmayabileceğine işaret etmektedir. Öyle gözükmemektedir ki tek-çift çekirdeklere temel enerji seviyesini daha güvenilir elde etmemize olanak tanıyacak yeni bir teorik alt yapı gerekmektedir. Böyle bir çalışma yakın zamanda A. Mukherjee ve ark. tarafından yapılmıştır [Mukherjee 13]. Bahsi geçen yaklaşım, KMMC yöntemi içinde sanal-zamanlı tek-cisim Green fonksiyonunun asimptotik davranışını hesap etmek esasına dayanmaktadır. Mukherjee ve ark. yöntemi demir bölgesinde yer alan bazı çekirdeklere uygulanmış ve bu çekirdeklerin temel enerji seviyelerini başarıyla elde edebilmiştir. Doğal olarak bu yöntemin projemizde ele alınan tek-çift çekirdeklere de uygulanabilirliği sorgulanmalıdır. Kullandığımız model uzayın Mukherjee ve ark. çalışmasındaki model uzaydan ( $fp+g_{9/2}$ ) çok daha büyük olması yöntemin uygulanabilirliği açısından bir çekince içerse de proje yürütücüsü, Dr. Mukherjee ile ikili bir çalışma yürütmek için Eylül 2013 ayı içerisinde İtalya'nın Trento kentindeki ECT\* Enstitüsünü ziyaret edecektir .



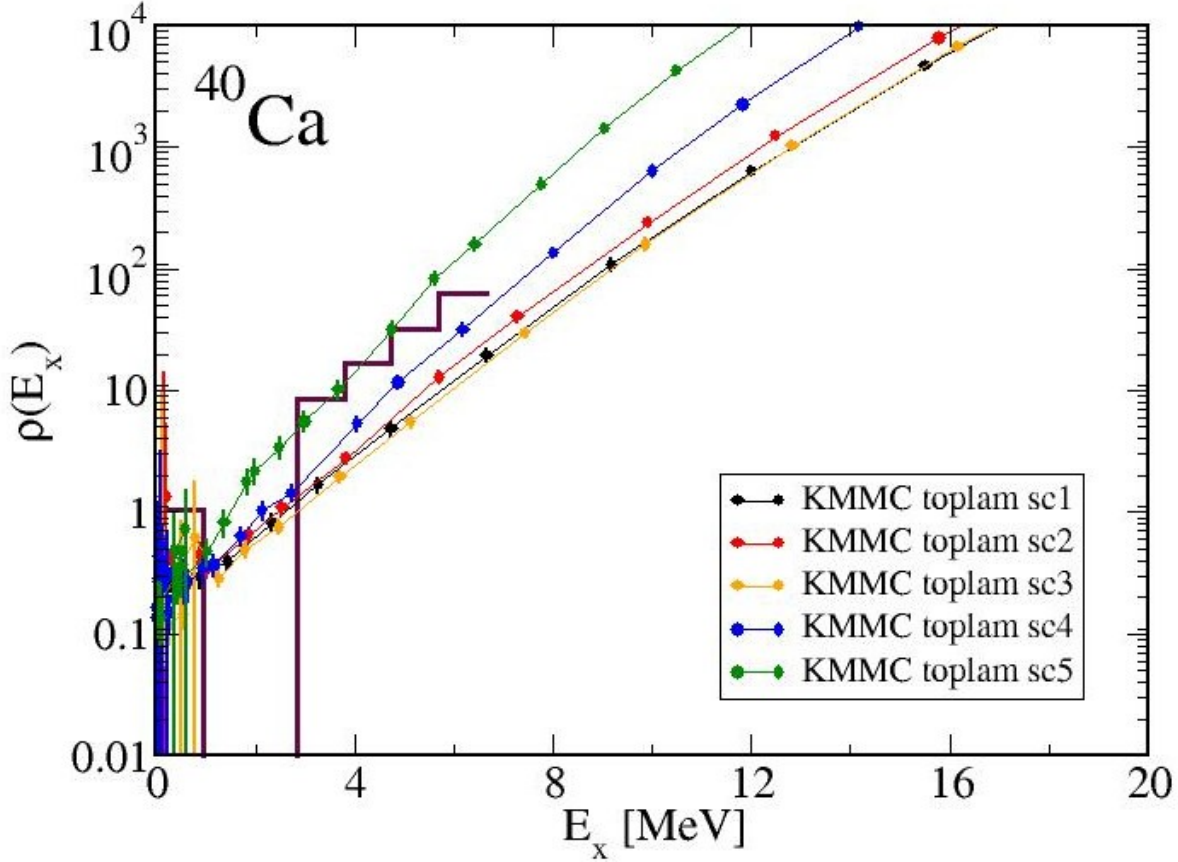


**Figür 8: Tek-çift  $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$  çekirdeklerinde pariteye bağlı seviye yoğunluğu hesaplamaları. (Grafik notasyonu için bkz. Fig. 5).**

Figür 8, incelediğimiz tek-çift nikel izotopları için yapılmış pariteye bağlı seviye yoğunluğu sonuçlarını göstermektedir. Bu çekirdeklerde eşlenmemiş bir nötron her zaman bulunduğu için dolayı zıt-pariteli çok cisim hallerini oluşturmak için gerekli enerji skalası komşu çift-çift çekirdeklerden daha düşüktür. Figür 8'de görüleceği gibi  $\sim 4$  MeV'de dahi bu çekirdeklerde parite eşlenikliği kurulmuştur.

#### 4.7 Kapalı ve yarı-kapalı Kabuk Konfigürasyonuna Sahip Çekirdekler

Tek-çift nikel izotoplarında olduğu gibi, proje teklifinde belirtilen hedefler arasında açıkça yer almayan, ancak proje devam ederken yapılan deneysel bir çalışmaya [Usman 11] atfen proje dahilinde incelenen bir diğer çekirdek grubu da  $^{40}\text{Ca}$  ve  $^{44}\text{Ca}$  olmuştur. Usman ve ark.  $^{40}\text{Ca}$  çekirdeğinde dev rezonans uyarılma enerjilerinde  $2^+$  seviye yoğunluğunu rapor etmişlerdir, aynı deneysel grup  $^{44}\text{Ca}$  çekirdeğine dair bir deney planladıklarını da tarafımıza iletmışlerdir. Bu motivasyonla incelemeye karar verdiğimiz çekirdeklerden  $^{40}\text{Ca}$  taban durumunda kapalı kabuk konfigürasyonunda (proton ve nötron sd kabukları kapalı) yani sihirli,  $^{44}\text{Ca}$  ise yarı-kapalı kabuk konfigürasyonunda (sadece proton sd kabuğu kapalı) yani yarı sihirlidir. Bu tür çekirdekler bilimiz dahilinde KMMC yöntemi ile daha önceden hiç çalışılmamıştır. Prensipinde KMMC metodu ile bu çekirdekleri incelemek açısından bir engel gözükmesine de, kapalı veya yarı-kapalı kabuk konfigürasyonuna sahip çekirdeklerin etkileşimli kabuk modeli açısından bazı sorunlar yarattığı bilinmektedir.



**Figür 9:  $^{40}\text{Ca}$  çekirdeğinde toplam seviye yoğunluğu hesaplamaları. Seviye sayım verisinden ekstre edilmiş deneysel seviye yoğunluğu mor basamaklı eğri ile, çeşitli etkileşimler ile elde edilen KMMC sonuçları da gösterilmiştir (bkz. ana metin).**

Bu bölümde bahsettiğimiz hesaplar Figür 9'da  $^{40}\text{Ca}$  için örneklenmiştir. Sonuçlar  $^{44}\text{Ca}$  için de benzerdir. Figürde bu kütle yöresi için  $sd+fp$  model uzayı kullanılmış, ve çeşitli efektif nükleer etkileşimler kullanılarak deneysel toplam seviye yoğunluğu türetilmeye çalışılmıştır. Bu denemeler (aralarında sadece sc1, sc2 ve sc3 etkileşimi ile elde edilen sonuçlar figürde gösterilmektedir), sistematik olarak deneysel seviye yoğunluğundan daha düşük yoğunluklar üretmiştir. Bu durum, seviye yoğunluğunun Hamiltonyen parametrelerine karşı büyük ölçüde duyarsız olduğu sonucuna işaret etmiştir. Öte yandan seviye yoğunluğu tek-cisim hallerinin enerji skalasına daha spesifik olursak  $sd$  ve  $fp$  kabukları arasındaki enerji açıklığına kuvvetli bir bağlılık göstermektedir. sc3 hesaplamalarında kullanılan kabuklararası enerji aralığı 1 MeV (grafikte sc4) ve 2 MeV (grafikte sc5) düşürüldüğünde KMMC seviye yoğunluğunda ciddi bir artış sağlanabildiği saptanmıştır. Ancak böyle bir modifikasyonu haklı gösterecek fiziksel bir argümana sahip değiliz. Sihirli veya yarı-sihirli çekirdeklerin KMMC kapsamında incelenmesinin bu projeden bağımsız, kapsamlı bir çalışmada ele alınması gerektiği düşünülmektedir.

## 5 TARTIŞMA

Seviye yoğunluğu bir çok-cisim sisteminin en temel istatistiksel fizik niceliklerinden birisidir. Bu nicelik belli bir uyarılma enerjisinde, keyfi düzeyde küçük bir enerji aralığı içinde yer alan çok-cisim hallerinin sayısını karakterize etmektedir. Sistemin içinde bulunabileceği kuantal haller en basit anlamda ortalama alan tarafından saptanan tek-cisim hallerinin tensör çarpımı ile ifade edilebilen hallerdir. Bu tip hallerin istatistiğini ortaya çıkarmak için ortalama alan problemini (ki nükleer yapı fiziğinde Woods-Saxon potansiyeli ile karakterize edilebilir) çözmek yeterlidir. Ancak sistemin içinde bulunacağı haller, daha karmaşık yapıda da olabilir; öyle ki, bu tip haller tek-cisim halleri cinsinden bir tensör çarpımına indirgenemezler. Zira, bu haller kuantum mekanişel olarak dolaşık (entangled) haller olup, kuantum çok-cisim fiziğinde örneğin kollektif uyarımlara karşı gelen hallerdir. Dolayısıyla bir çok-cisim sisteminin seviye yoğunluğunu gerçekçi olarak hesaba katabilmek için gerek tek-cisim, gerekse kollektif uyarımlar tarafından popüle edilen çok-cisim hallerini hesaba katmak gerekmektedir. Nükleer fizik açısından bu tür seviye yoğunluğu hesapları çok yakın zamanlara kadar mümkün olamamıştır. Bunun temel sebebi, çok hafif çekirdekleri saymazsak nükleer sistemler ne az-cisim (few-body) metodları ile ele alınabilecek kadar küçüktür, ne de salt ortalama alan yaklaşımını esas alan çok-cisim metodları ile ele alınacak kadar büyük sistemlerdir. Ortalama alana dayalı (Hartree-Fock, Hartree-Fock+BCS, Hartree-Fock-Bogoliubov vs.) metodlar belli tip fiziksel özelliklerin (örneğin kütle) hesaplanmasında başarılıdır. Öte yandan, nükleer kabuk modeli, kuantal dolaşıklık hallerini sağlayabildiği için nükleer yapı fiziğinin temel teorisi kabul edilmektedir. Ancak kabuk modelinin, seviye yoğunluğu hesaplarına yaygın olarak uygulanabilmesi stokastik bir formülizasyona dayanan Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) yaklaşımının geliştirilmesi ile mümkün olmuştur. KMMC yaklaşımı istatistik fizik ve çok-cisim kuantum mekaniğinin bir sentezi olduğundan, kuantal dalgalanmalar kadar termal dalgalanmalar da dahil olacak şekilde averaj beklenen değerleri istenilen hassasiyette hesaplayabilmektedir. Bu projede bu güçlü teknik, nükleer seviye yoğunluğu üzerine etki eden trivial-olmayan çok-cisim etkilerini hesaba katarak, gerçekçi teorik tahminler üretmekte kullanılmıştır.

Düşük uyarılma enerjilerinde parite dağılımına etki eden en bariz iki unsur, bulunulan kabuğun paritesi ( $fp$ -kabuğu için negatif) ile çekirdeğin nötron ve proton sayılarının tek veya çift olmasıdır. Bu enerjilerde, çift-çift ve tek-tek çekirdekler pozitif pariteli, tek-çift bir çekirdek ise negatif pariteli çok-cisim seviyelerine sahiptir. Projede ele alınan çift-çift nikel çekirdekleri düşük enerjilerde  $fp$ -kabuğuna tabii çekirdekler olup, düşük uyarılma enerjilerinde ağırlıklı olarak pozitif pariteli seviyelerle popüle edilirler. Uyarılma enerjisinin artması, valans nükleonlarının  $fp$ -kabuğuna göre zıt parite taşıyan bir üst kabuğun ( $gd_{5/2}$  orbitalleri) seviyelerine de sıçrama yapılabilmesini sağlar. Bunun bir sonucu olarak bu çekirdeklerde negatif pariteli seviyelerin hızla popüle olması ve termal olarak belirli bir aşamadan sonra pariteler arasında tam bir dengelenme sağlanması beklenmelidir. Bu süreci karakterize eden temel enerji skalası, kabuklar arası enerji aralığı ile çiftlenim etkileşim şiddetidir. Benzer nükleonların çiftler halinde uyarılmasını sağlayan çiftleşim terimi, çift-çift çekirdeklerde seviyelerin işgal edilen kabuk(ların) paritelerinden bağımsız olarak ağırlıklı olarak pozitif parite taşımaya yol açar. Bu yüzden pariteler arasında dengenin kurulması, eğer çiftlenim korrelasyonları güçlü

ise, ancak daha yüksek uyarılma enerjilerinde yani termal etkilerin çiftlenim korrelasyonlarına üstün gelebileceği yüksek enerjilerde mümkün olabilir. Dolayısıyla, parite dağılımlarının eşitlenmesinde kabuklararası enerji aralığı ile çiftlenim korrelasyonlarının gücü birbirlerine zıt olarak işlev görmektedir. Bu problemi çok-cisim fiziği açısından ilginç kılan diğer bir unsur da Hamiltonyendeki çiftlenim terimi ile monopol terimleri arasındaki rekabettir. Monopol terimleri, çiftlenim terimine nazaran çekirdeği deformasyona iten bir etki gösterdiklerinden, burada bahsi geçen oyunda küresel geometriyi tercih eden çiftlenim teriminin mi, yoksa deforme geometrileri tercih eden multipolar terimlerin mi baskın çıkacağı ancak çok-cisim probleminin tam olarak çözülmesi ile saptanabilir.

Bu fiziksel geri plan dahilinde nikel izotopları üzerine yaptığımız çalışmalarımıza erken bir aşamada model uzayı seçimi açısından  $sd+fp+gd_{5/2}$  uzayını alarak başladık. Bu model uzayın, hesaplamalar açısından daha kolay olan  $fp+gds$  uzayına tercih edilmesi, normalde kor kabukları içerisinde atıl olarak ele alınacak bazı nükleonlara da uyarılma şansı vermesi yani daha genel ve gerçekçi bir uzay olmasındandır. Enerji ölçeğinde bakılacak olursa,  $sd$  ve  $fp$  kabukları arasındaki enerji aralığı ile kıyaslanabilecek uyarılma enerjilerine ulaşıldığında  $fp+gds$  uzayı yerine,  $sd+fp+gd_{5/2}$  uzayı ile çalışmanın avantajlı olacağı açıktır. Dolayısıyla da  $fp+gds$  uzayı ile irdelenebilecek uyarılma enerjilerinden daha yüksek uyarılma enerjileri güvenle çalışılmış olmaktadır. Bu aşamadan sonra Hamiltonyen parametrelerinin saptanması aşaması ele alınmıştır. Bu süreç oldukça zahmetli bir çalışma gerektirmiştir. Zira, bölgede bulunan bazı küresel çekirdeklerde tek-çift kütle farkını üretmeye dayalı sayı-projeksiyonlu BCS çalışmaları (danışman Prof. Nakada tarafından yapılmıştır) sayesinde çiftlenim teriminin şiddeti bir ölçüde saptansa da, kuadropol teriminin şiddetini tespit etmek için teorik olarak iyi tanımlı bir prosedür bulunmamaktadır. Bu noktada, daha önceki KMMC çalışmalarından elde edilen bir tecrübe, bu terimin şiddetinin çekirdeklerin HFB metodu ile elde edilen seviye yoğunluklarının eğimine tesir ettiğiidir. HFB seviye yoğunluğu, KMMC seviye yoğunluğundan kolektif etkileri temsil eden bir çarpan dahilinde küçük olduğundan, kuadropol terimi efektif olarak KMMC seviye yoğunluk eğrisinin de eğimine direkt etki yapmaktadır. Ancak bilinmelidir ki, güçlü etkileşimli bir çok-cisim sistemi olan çekirdeklerde hiç bir Hamiltonyen terimi lineer bir sistemde olduğu gibi diğer terimlerden bağımsız olarak irdelenemez. Bu sebeple optimal parametrelerin saptanması meşakkatli bir süreç içinde tüm Hamiltonyen parametrelerinin belirli oranlarda ayara tabi tutulması ile sağlanmaktadır. Her bir parametre seti için üç hafta kadar süren bir hesaplama süreci ve ardından diğer parametre setleri ile kıyaslama süreci geçirilmiştir. Projenin bu kritik aşaması Figür 3'de  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeği için özetlenmiştir. Ancak vurgulanması gereken bir nokta, Hamiltonyen parametrizasyon sürecinin sonunda her çekirdek için aynı anda optimizasyon sağlayan tek bir parametre setine ulaşılmıştır. Dolayısıyla bu çekirdeklerin her biri için ayrı bir Hamiltonyen parametre seti kullanılmamıştır; yani, Hamiltonyenler birbirlerinden sadece çekirdeklerin kütleleriyle ilişkili bir ölçüleme ile farklılık göstermektedirler (bu ölçüleme sonlu model uzayları kullanmanın gerektirdiği matematiksel bir renormalizasyona dayalıdır).

Projede çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  çekirdekleri ile tek-çift  $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$  çekirdeklerini karakterize eden optimal Hamiltonyen parametreleri  $sd+fp+gd_{5/2}$  uzayı için saptanmıştır. KMMC toplam seviye yoğunlukları, seviye sayım verisi ile nötron rezonans verisinden ekstre edilen deneysel toplam seviye yoğunluğu ile

kıyaslanmıştır. Çift-çift çekirdeklerde toplam seviye yoğunlukları deneysel sonuçları başarıyla türetmiş, tek-çift çekirdeklerde ise taban durum enerjisini saptamada karşılaşılan zorluk sebebiyle göreceli bir başarı sağlanmıştır. Pariteye bağlı seviye yoğunluğu hesaplamaları, ele alınan tüm çekirdeklerde parite eşlenikliği varsayımının büyük ölçüde geçerli olduğuna, sadece  $^{58}\text{Ni}$  ve  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeklerinde 4 MeV ve daha düşük enerjilerde dengenin pozitif pariteli seviyeler tarafına kaydığına işaret etmektedir. Parite ve açısal momentum projeksiyonlu hesaplamalar sonucunda elde edilen  $J^\pi=2^\pm$  seviye yoğunluğu,  $^{58}\text{Ni}$  çekirdeğinde 5-20 MeV enerji aralığında deneysel sonuçlarla kıyaslanmış ve gerek nicelik gerekse parite dengesi açısından deneyle başarıyla örtüşmüştür. Son olarak, sihirli  $^{40}\text{Ca}$  ve yarı-sihirli  $^{44}\text{Ca}$  çekirdeklerinde elde ettiğimiz sonuçlardan etkileşim ve model uzay konularının daha detaylı bir çalışmayla ele alınması gerektiği görülmektedir. Bu iki çekirdek muhtemelen sihirli yapılarından dolayı nükleer etkileşimden ziyade tek-cisim enerji sistematiğine daha duyarlı gözükümüştür. Bu çalışmada ve literatürde yer alan diğer KMMC çalışmalarında, işaret problemine yol açmadığı için kollektif uyarımlar yapan çiftlenim artı multipol-multipol etkileşimleri kullanılmaktadır. Bu etkileşim ailesi, gerçekçi bir nükleer etkileşimin önemli bir kısmını oluşturmaktadır ve bu sebeple literatürde güvenle kullanılabilirdiğine dair pek çok çalışma bulunmaktadır. Ancak ele aldığımız kalsiyum çekirdekleri gibi kollektif özellikleri az olan çekirdeklerde burada ihmal edilen kollektif olmayan uyarım unsurlarının seviye yoğunluğuna etkisi şu ana kadar ele alınmamıştır, ancak teorik sonuçlarla deneysel sonuçlar arasındaki uyumsuzluk bu tür uyarımların ihmal edilmesinden kaynaklanıyor olabilir. KMMC açısından bu olasılığın irdelenmesi henüz kesin bir çözümü bilinmeyen Monte Carlo işaret problemine yönelik teknik ilerlemelerin yapılabilmesine bağlıdır. Bu projenin kapsamı ve hedefleri dışında kalmakla beraber böyle bir çalışma bilimsel ilerleme açısından yeni bir fırsat sağlamaktadır.

## 6 SONUÇ

Bu projede demir bölgesinde yer alan ve astrofiziksel açıdan önem taşıyan çift-çift  $^{58-60-62-64}\text{Ni}$  ve tek-çift  $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$  çekirdekleri ile sırasıyla sihirli ve yarı-sihirli  $^{40}\text{Ca}$  ve  $^{44}\text{Ca}$  çekirdekleri ele alınmış, gerekli Hamiltonyen parametrizasyonları sağlandıktan sonra KMMC seviye yoğunlukları hesaplanmıştır.

Projenin ulaştığı ana sonuçlar aşağıda özetlenmiştir:

- Nikel çekirdekleri açısından gerçekçi seviye yoğunluğu sonuçları oluşturabilecek model uzay ve Hamiltonyen parametreleri saptanmıştır.
- Çift-çift nikel izotoplarında KMMC toplam seviye yoğunluğu mevcut deneysel verileri başarıyla türetmiştir. Tek-çift izotoplarda ise temel enerji seviyesinin hassas şekilde elde edilmesini engelleyen işaret probleminden ötürü sonuçlar enerji ekseninde yatay bir belirsizliğe sahiptir. Proje kapsamı dışında kalan ancak yürütücünün dahil olduğu bir ortak çalışma ile tek-çift çekirdeklerdeki işaret problemi aşılmaya çalışılacaktır. Böylece enerji eksenindeki belirsizlik giderilerek sonuçların kabul edilebilir istatistiksel hata payları içerisinde mutlakiyet kazanması hedeflenmektedir.
- $^{58}\text{Ni}$  çekirdeğinde  $J^\pi=2^\pm$  spin kanalında KMMC ve deney sonuçları arasında literatürde yer alan (bkz. [Kalmykov 07]) uyuşmazlığın ortadan kaldırılması sağlanmıştır. İlgili spin-parite kanalında parite bağıllığı olmadığı sonucuna ulaşılmıştır.
- Tüm nikel çekirdeklerinde pariteye bağlı seviye yoğunlukları hesaplanmıştır. Sonuçlar astrofiziksel açıdan önemli enerjilerde parite dengesinin kurulu olduğuna, sadece  $^{58}\text{Ni}$  ve  $^{60}\text{Ni}$  çekirdeklerinde 4-4.5 MeV'den düşük enerjilerde dengenin pozitif parite tarafına kaydığına işaret etmektedir.
- $^{40}\text{Ca}$  ve  $^{44}\text{Ca}$  çekirdeklerinde ise KMMC yöntemi muhtemelen kapalı ve yarı-kapalı kabuk yapılarından kaynaklı sorunlardan dolayı deneysel toplam seviye yoğunluğuna nazaran düşük değerlerdedir. Bu sorunun sebebi tam olarak anlaşılmasa da, KMMC hesaplarında ihmal edilen kollektif dışı Hamiltonyen bileşkelerinin bu tür çekirdeklerde göreceli olarak önemli olabileceği düşünülmektedir. Bu hipotezin sınanması genel bir Hamiltonyen'den kaynaklı Monte Carlo işaret probleminin aşılması ile incelenebilir. Henüz kesin bir çözümü olmayan bu problem gelecekte yapılacak çalışmalarda ele alınacaktır.

Projenin bilimsel bulguları en az iki ayrı çalışma ile muhtemel American Physical Society veya Elsevier dergilerinde yayınlanacaktır. Bu manüskriptlerden birisi büyük ölçüde tamamlanmıştır.

Proje süresince geliştirilen kodlar bundan sonra yapılacak KMMC çalışmalarında da büyük oranda yeniden kullanılabilir olduğundan kalıcı bir akademik yan ürün teşkil etmiştir.

## REFERANSLAR

[Alhassid 13] Alhassid Y. ve Özen C., “A novel approach for circumventing the Monte Carlo sign problem in odd nuclei”, yayına hazırlanıyor.

[Bethe 36] Bethe H.A., “An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus”, Phys. Rev. 50, 332 (1936).

[Bohr 69] Bohr A. ve Mottelson B.R., Nuclear Structure, Vol. 1, Benjamin, New York (1969).

[Capote 09] Capote R. ve ark., “Reference Input Parameter Library for Calculations of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations”, Nuclear Data Sheets 110, 3107 (2009), ve içindeki referanslar

[Caurier 05] Caurier E. ve ark., “The shell model as a unified view of nuclear structure”, Rev. Mod. Phys. 77, 427 (2005).

[Demetrious 01] Demetriou P. ve Goriely S., “Microscopic nuclear level densities for practical applications”, Nucl. Phys. A695, 95-108 (2001).

[Dilg 73] Dilg W. et al., Nucl. Phys. A 217, 269 (1973).

[Gilbert 65] Gilbert A. ve Cameron A.G.W., “A Composite Nuclear Level Density Formula with Shell Corrections”, Can. J. Phys. 43, 1446, (1965).

[Hilaire 06] Hilaire S. ve Goriely S., “Global microscopic nuclear level densities within the HFB plus combinatorial method for practical applications”, Nucl. Phys. A779, 63-81 (2006), and references therein.

[Hubbard 58] Hubbard J., “Calculation of Partition Functions”, Phys. Rev. Lett. 3, 77 (1959); R.L. Stratonovich, Dokl. Akad. Nauk. SSSR 115, 1097 (1957) [Sov. Phys. Dokl. 2, 416 (1958).]

[Ignatyuk 85] Ignatyuk A.V., “Statistical Properties of Excited Atomic Nuclei”, Energoatomizdat, Moscow (1983) (in Russian); Rep. INDC(CCP)- 233, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria, 1985.

[Johnson 92] Johnson C.W., Koonin S.E., Lang G.H., ve Ormand W.E, “Monte Carlo methods for the nuclear shell model, Phys. Rev. Lett.69,3157 (1992).

[Kalmykov 07] Kalmykov Y., Özen C., Langanke K., Martinez-Pinedo G., von Neumann-Cosel P. ve Richter A., “Spin- and Parity-Resolved Level Densities from the Fine Structure of Giant Resonances”, Phys. Rev. Lett. 99, 202502 (2007).

[Koning 08] Koning A.J., Hilaire S. ve Goriely S., “Global and local level density

models”, Nucl. Phys. A810, 13-76 (2008).

[Koonin 97] Koonin S.E., Dean D.J., ve Langanke K., “Shell model Monte Carlo methods”, Phys. Rep. 278, 1 (1997).

[Maino 90] Maino G., Mengoni A., Ventura A., Phys. Rev. C 42 , 988 (1990).

[Mukherjee 12] Mukherjee A. ve Alhassid Y., "Odd-particle systems in the shell model Monte Carlo: circumventing a sign problem", Phys. Rev. Lett. 109, 032503 (2012).

[Nakada 97] Nakada H. ve Alhassid Y., “Total and Parity-Projected Level Densities of Iron-Region Nuclei in the Auxiliary Fields Monte Carlo Shell Model”, Phys. Rev. Lett. 79, 2939 (1997).

[Özen 13] Özen C., Alhassid Y. ve Nakada H., “The crossover from vibrational to rotational collectivity in heavy nuclei in the shell-model Monte Carlo approach”, Phys. Rev. Lett. 110, 042502 (2013).

[Özen 13b] Özen C. ve Alhassid Y., “Simple Parametrizations of Experimental Nuclear State Densities”, yayına hazırlanıyor.

[Ring 80] Ring P. ve Schuck P., The Nuclear Many-body Problem, Springer- Verlag, Berlin Heidelberg (1980).

[Usman 11] Usman I. ve ark. "Level density of 2+ states in 40Ca from high energy-resolution (p,p') experiments", Phys. Rev. C 84, 054322 (2011).

[Von den Linden 92] Von den Linden W., "A Quantum Monte Carlo approach to many-body physics", Phys. Rep. 220, 53 (1992).



**TÜBİTAK**  
**PROJE ÖZET BİLGİ FORMU**

<b>Proje No:</b> 110R004
<b>Proje Başlığı:</b> Kuantum Monte Carlo Yaklaşımında Pariteye Bağlı Nükleer Seviye Yoğunluğu Hesaplamaları
<b>Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar:</b> Yrd. Doç. Dr. Cem ÖZEN
<b>Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:</b> Kadir Has Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Cibali 34083, İstanbul, Türkiye
<b>Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:</b>
<b>Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:</b> 01.10.2010 - 01.10.2012
<b>Öz (en çok 70 kelime)</b> Bu projede astrofiziksel uygulamalar açısından önemli, demir bölgesinde yer alan çift-çift $^{58-60-62-64}\text{Ni}$ çekirdekleri ile tek-çift $^{57-59-61-63-65}\text{Ni}$ ve kapalı/yarı-kapalı kabuk konfigürasyonuna sahip $^{40}\text{Ca}$ ve $^{44}\text{Ca}$ çekirdekleri için toplam ve parite izdüşümlü seviye yoğunlukları Kabuk Modeli Monte Carlo yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Çift-çift çekirdeklere bir dizi deneysel veri başarıyla türetilmiş ve literatürde yer alan önemli bir teori-deney uyumsuzluğu ortadan kaldırılmıştır. KMMC yöntemi açısından sınırlayıcı zorluklara sahip tek-çift nikel izotoplarında seviye yoğunlukları çekirdeklerin temel enerji seviyelerindeki belirsizlik payı dahilinde hesap edilmiştir. Kapalı/yarı-kapalı kabuk konfigürasyonuna sahip $^{40}\text{Ca}$ ve $^{44}\text{Ca}$ çekirdeklerinde ise kullanılan kolektif Hamiltonyenlerin deneysel toplam seviye yoğunluğuna göre daha düşük sonuçlar verdiği saptanmıştır.
<b>Anahtar Kelimeler:</b> nükleer fizik, seviye yoğunluğu, parite, nükleer reaksiyonlar, kabuk modeli, Monte Carlo yöntemleri, nükleer astrofizik, nükleosentez
<b>Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu mu?</b> Evet <input type="checkbox"/> <b>Gerekli Değil</b> <input checked="" type="checkbox"/>
Fikri Ürün Bildirim Formu'nun tesliminden sonra 3 ay içerisinde patent başvurusu yapılmalıdır.
<b>Projeden Yapılan Yayınlar:</b>
<b>Ekte Bulunan "ARDEB Başarı Öyküsü Formu", "Kazanımlar" Bölümünde Belirtilen Kriterlere Göre Proje Çıktılarınızın Başarı Öyküsü Niteliği Taşındığını Düşünüyorsanız "ARDEB Başarı Öyküsü Formu"nu doldurunuz.</b>