

**Nükleer Spin Dağılım Fonksiyonunun Mikroskopik Bir
Yöntemle Hesaplanması**

Program Kodu: 1001

Proje No: 112T973

Proje Yürütücüsü:

Doç. Dr. Cem ÖZEN

Bursiyerler:

Nihal GÖZLÜKLÜOĞLU KARAKUŞ

Özge MERCAN

OCAK 2016

İSTANBUL

ÖNSÖZ

Bu proje, TÜBİTAK (MFAG –112T973) desteği ile, 15.05.2013-15.11.2015 tarihleri arasında Kadir Has Üniversitesi'nden Doç. Dr. Cem Özen tarafından yürütülmüş ve nükleer tablonun çeşitli kütle bölgelerinde yer alan çekirdeklerin spin dağılım fonksiyonunun mikroskopik bir yöntem olan Kabuk Modeli Kuantum Monte Carlo metodu kullanılarak hesaplanmasını konu edinmiştir. Bu çalışmalarla spin-kesinti parametresinin enerji bağılılığı incelenmiş ve literatürde kullanılan fenomenolojik formüllerin test edilmesi sağlanmıştır.

Projede İstanbul Üniversitesi Fizik Bölümü yüksek lisans öğrencisi Enes Akyüz (15/05/2013-31/10/2013), İstanbul Üniversitesi Fizik Bölümü yüksek lisans öğrencisi Yaşar Karabul (01/11/2013-01/03/2014), İstanbul Teknik Üniversitesi Fizik Müh. Bölümü yüksek lisans öğrencileri Nihal Gözlüklüoğlu Karakuş ve Özge Mercan (16/02/2015-15/11/2015) bursiyer olarak yer almıştır. Projede ele alınan hesaplamalar Doç Dr. Cem Özen tarafından modife edilmiş Caltech/Oak Ridge Shell Model Monte Carlo programının Kadir Has Üniversitesi Yüksek Performanslı Bilgisayar Sisteminde koşturulması ile gerçekleştirilmiştir. Analizlerin yapılması ve sonuçların elde edilmesinde proje sürecinde yazılan bir dizi yazılım kullanılmıştır.

Proje ekibi olarak, gerçekleştirilen ortak çalışma ziyaretleri yoluyla faydalı görüş alışverişinde bulunduğumuz Prof. Dr. Hitoshi Nakada'ya (Chiba Üniversitesi, Japonya), Prof. Dr. Yoram Alhassid'e (Yale Üniversitesi, A.B.D.) ve Dr. Abhishek Mukherjee'ye (ECT*, İtalya) teşekkür ederiz. Son olarak, bu raporun görsellerinin hazırlanmasında önemli emeği geçen Dr. Ayşe İdil Çakıroğlu Özen'e de teşekkür borçluyuz.

İÇİNDEKİLER

TABLO LİSTESİ.....	iv
ŞEKİL LİSTESİ	v
ÖZET	vi
ABSTRACT.....	vii
1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR ÖZETİ	2
2.1 Fenomenolojik Seviye Yoğunluğu Modelleri.....	2
2.2 Nükleer Seviye Yoğunluğunun Parametrizasyonu	3
2.3 Spin Dağılım Fonksiyonu.....	5
3. GEREÇ VE YÖNTEM	8
3.1 Kabuk Modeli Monte Carlo Yaklaşımı	8
4. BULGULAR.....	10
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	24
6. KAYNAKÇA	25

TABLO LİSTESİ

Tablo 1. Toplam hal yoğunluğunun BBF parametrizasyonuna dair nicelikler.....	10
Tablo 2. Nikel ve zirkonyum izotoplarının toplam hal yoğunluğunun CF parametrizasyonuna dair nicelikler.	11
Tablo 3. Spin-kesinti parametresinin fenomenolojik ifadelerinde kullanılan NL , NU ve Pa' değerleri.....	11

ŞEKİL LİSTESİ

- Şekil 1.** Lokal BBF hal yoğunluğu parametrizasyonunda a ve Δ 'nın kütleye göre dağılımı. 12
- Şekil 2.** Lokal CF hal yoğunluğu parametrizasyonunda $E1$ ve $T1$ 'nın kütleye göre dağılımı.
..... 13
- Şekil 3.** Lokal CF hal yoğunluğu parametrizasyonunda a , Δ ve Em 'nin kütleye göre dağılımı.
..... 13
- Şekil 4.** Nikel bölgesinde spin-kesinti parametresi 16
- Şekil 5.** Ni58 çekirdeğinde spin dağılım fonksiyonu 16
- Şekil 6.** Ni60 çekirdeğinde spin dağılım fonksiyonu 17
- Şekil 7.** Zirkonyum bölgesinde spin-kesinti parametresi..... 18
- Şekil 8.** Zirkonyum bölgesinde toplam hal yoğunluğu 18
- Şekil 9.** Neodimyum bölgesinde spin-kesinti parametresi 19
- Şekil 10.** Samaryum bölgesinde spin-kesinti parametresi20
- Şekil 11.** Tek-çift neodimyum ve samaryum çekirdeklerinde toplam hal yoğunluğu21
- Şekil 12.** Kollektif Artırım Fonksiyonunda parçacık-sayısı simetrisinin etkisi.....23

ÖZET

Nükleer seviyelerin spin dağılımının mikroskopik yöntemlerle hesaplanması korrelasyon etkileri göz önüne alındığında güç bir problem teşkil eder. Günümüzde bu dağılımların hesaplanması için geliştirilmiş yöntemler arasında en güçlü olanı Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) yöntemidir. Ancak çok yüksek bir hesaplama gücüne gereksinim olması yüzünden bu yöntem büyük sayılarda çekirdek için bu tip tabloların oluşturulmasına elverişli değildir. Bu yüzden basitleştirilmiş modeller çoğu nükleer uygulama için hayati önem taşımaktadır.

Nükleer seviye yoğunluğunun global parametrizasyonlarında sıkça kabul gören bir varsayım spin dağılımının spin-kesinti modeline uyduğudur. Bu modele göre çekirdeklerin spinleri, nükleon spinlerinin keyfi ve ilintisiz eşleşmesi ile vücutte gelmektedir. Spin-kesinti modeli, burdan hareketle, spin-kesinti parametresi olarak adlandırılan tek bir parametre ile karakterize edilir. Literatürde spin-kesinti parametresi için ortaya atılmış birkaç model bulunmaktadır. Bu projenin ana amacı bahsi geçen modellerin geçerliliğini test etmek üzere nükleer tablonun çeşitli kütle bölgelerinde KMMC hesaplamaları yapmak ve spin-kesinti parametresinin enerji bağıllığının sistematüğünü analiz etmektir. Proje aynı zamanda çok düşük uyarılma enerjilerinde büyük önem taşıyan korrelasyon ve kabuk etkilerinin spin-kesinti modelinin temel varsayımlarını ne derecede etkilediğini ve geçersiz kılıp kılmadığını irdeleyecektir.

Anahtar Kelimeler: nükleer yapı fiziği, spin (açısal momentum) dağılımı, spin-kesinti modeli, seviye yoğunluğu, kabuk modeli, Monte Carlo yöntemleri, nükleer reaksiyonlar

ABSTRACT

The microscopic calculation of the spin distribution of nuclear levels in the presence of correlations constitutes a difficult problem. To date, the shell model Monte Carlo (SMMC) method is the most powerful microscopic approach for the calculation of these distributions. However, due to the associated computational power this method is not suitable for constructing tables for large numbers of nuclei. Because of this, simplified models are invaluable to most nuclear applications.

A common assumption in global parametrizations of nuclear level densities is that the spin distribution follows the spin-cutoff model. According to this model, nuclear spins emerge as nucleons' spins couple in a random and uncorrelated fashion. Spin-cutoff model is then characterized by a single parameter called the spin-cutoff parameter. In the literature there are a number of simple models for the spin-cutoff parameter. The primary goal of this project is to test the validity of these models by performing SMMC calculations in various mass regions across the chart of nuclei and study the systematics in the energy dependence of the spin-cutoff parameter. The project also aims to question the validity of the spin-cutoff model at very low excitation energies at which the assumptions behind the model are expected to be overruled by important correlation and shell effects.

Key Words: nuclear structure physics, spin (angular momentum) distribution, spin-cutoff model, level density, shell model, Monte Carlo methods, nuclear reactions

1. GİRİŞ

Atom çekirdekleri açısal momentum ve parite kuantum sayıları taşıyan uyarılmış hallere sahip çok-cisim sistemleridir (Bohr ve Mottelson 1998). Uyarılmış seviyelerin en temel istatistiksel özelliklerinden birisi seviye yoğunluğudur. İstatistiksel reaksiyon modellerinin ana girdilerinden biri olan bu nicelik çoğu zaman Fermi gaz modeli ya da sabit sıcaklık modeli gibi parametreleri deneysel verilere uydurma yoluyla saptanan fenomenolojik modellerle temsil edilir. Ancak seviye dağılımının mikroskopik kökeni nükleon-nükleon etkileşimine dayandığından, bu etkileşimlerden yola çıkarak seviye yoğunluğunu gerçekçi şekilde modellemek nükleer yapı modelleri için önemli bir hedef olmuştur. Mikroskopik nükleer modellemeye duyulan diğer bir ihtiyaç ise, deneysel verinin kararlılık vadisi komşuluğunda yer alan çekirdeklerle sınırlı olması yanında, düşük uyarılma enerjili seviye sayım verileri ile nötron rezonans sayım verileri ile sınırlı olmasıdır (Capote vd., 2009). Bu sınırlamalar fenomenolojik model parametrelerinin bilinen çekirdeklerin küçük bir kısmı için hassas şekilde saptanmasına olanak tanımaktadır. Bunların yanı sıra, özellikle düşük ve orta-düzy uyarılma enerjilerinde önem taşıyan kabuk, çiftlenim etkileri, kolektif uyarım modları gibi yapısal özelliklerin seviye yoğunluğuna etkisinin irdelenmesinde de güvenilir mikroskopik modellere ihtiyaç duyulmaktadır. Seviye yoğunluğunun parite ve spin gibi kuantum sayılarına göre dağılımı da nükleer uygulamalar için önem taşıyan bir unsur olmuştur (Capote vd., 2009). Bu dağılımların genellikle çekirdeğin nispeten yüksek enerjilerde ulaştığı istatistiksel davranışları esas alacak şekilde cereyan ettiği varsayılmaktadır. Ancak, spin ve parite dağılımlarının düşük uyarım enerjilerinde etkisi güçlü olan çiftlenim ve kolektif uyarım etkileri altında varsayılan dağılımlardan sapma gösterdiği bilinmektedir. Bu projede bir dizi nikel, zirkonyum, samaryum ve neodimyum izotoplarında nükleer seviye yoğunluğunun spin dağılımı başarılı bir mikroskopik yöntem olarak bilinen Kabuk Modeli Monte Carlo yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Daha spesifik olarak,

- 1) Spin-kesinti parametresinin enerji bağıllığı nükleer tablonun bahsi geçen çekirdekleri içeren üç farklı kütle bölgesinde etkileşimli nükleer kabuk teorisinden elde edilmiştir.
- 2) Bu sonuçlarla literatürde yer alan çeşitli formüller (Koning vd., 2008; von Egidy ve Bucurescu, 2009) kıyaslanarak bu formüllerin geçerli oldukları kütle bölgeleri ve enerji aralıkları hakkında bazı saptamalar yapılmıştır.

2. LİTERATÜR ÖZETİ

2.1 Fenomenolojik Seviye Yoğunluğu Modelleri

Geri-kaydırmalı Bethe formülü (*back-shifted Bethe Formula*) (BBF) ve sabit sıcaklık modeli (*constant temperature model*) (CT) en iyi bilinen iki fenomenolojik seviye yoğunluk modelidir. Bu modellerden BBF ilk olarak Hans Bethe tarafından Fermi gazı modeli için türetilmiştir (Bethe, 1936). BBF’de, Bethe’nin orjinal çalışmasında dikkate alınmayan çiftlenim korrelasyonlarının etkisi sonradan modele eklenen geri-kaydırma parametresi ile açık olarak temsil edilir (Dilg, 1973).

$$\rho_{BBF}(E) = \frac{\sqrt{12}}{12} \frac{e^{2\sqrt{aU}}}{a^{1/4}U^{5/4}} \quad (1)$$

Çekirdeklerin toplam *hal yoğunluğunu* (yani her seviyenin $(2J + 1)$ dejenerasyon faktörü kadar ağırlık sağladığı seviye yoğunluğu) ifade eden bu formülde a seviye yoğunluk parametresi olarak bilinir ve Fermi gazı modelinde proton ve nötronların Fermi enerjisi komşuluğunda tek-cisim enerjisi hallerinin yoğunluğunu temsil eder. Bu modelde yer alan $U = E - \Delta$ ise çekirdeğin *efektif* uyarılma enerjisidir. Bu değişkenin görevi, komşu çekirdeklere belirgin etkisi olan tek-çift nükleon etkisini uyarılma enerjisi E 'yi yaklaşık olarak çiftlenim enerjisini temsil eden Δ kadar kaydırarak simüle etmektir. Δ parametresi pozitiften negatife, büyüklük olarak çoğunlukla 1 MeV’yi geçmeyen değerler almaktadır (bkz. Şekil 1). Δ parametresinin pozitif değerler aldığı durumlarda (genellikle çift-çift çekirdekler), $E \leq \Delta$ olan uyarılma enerjilerinde BBF formülü singüler yapısından dolayı kullanılamaz, bunun yerine aşağıda belirtilen sabit sıcaklık modeli veya kompozit formül tercih edilir.

Çekirdeklerin seviye yoğunluğunun temsil edilmesinde yaygın olarak kullanılan bir diğer model ise sabit sıcaklık (*constant temperature*) (CT) Modelidir (Ericson, 1960). Bu modelde çekirdeklerin hal yoğunluğu

$$\rho_{CT}(E) = \frac{1}{T} e^{(E - E_1)/T_1} \quad (2)$$

ifadesiyle gösterilir. E_1 ve T_1 bu modelin serbest parametreleri olup modelin deneysel verilere uydurulması suretiyle saptanırlar. T_1 Parametresi modele adını veren ve sıcaklık cinsinden bir niceliktir. Bu parametre modelin geçerli olduğu uyarılma enerji aralığında sabit olarak kaldığından model Sabit Sıcaklık modeli olarak adlandırılmıştır. Ancak çekirdeklerde yüksek uyarılma enerjilerinde BBF daha başarılı olduğundan dolayı, literatürde ilk kez Gilbert ve Cameron tarafından CT ve BBF modellerinin uygun görülen bir eşleştirme enerjisinde (E_m) süreklilik sağlama koşuluyla oluşturulan ve

$$\rho_{CF}(E) = \begin{cases} \rho_{CT}(E) & \text{for } (E < E_m) \\ \rho_{BBF}(E) & \text{for } (E \geq E_m) \end{cases} \quad (3)$$

ifadesiyle gösterilen bir de kompozit formül (*composite formula*) (CF) modeli bulunmaktadır (Gilbert ve Cameron, 1965). Projemizde deneysel hal yoğunlukları için hem BBF hem de CF modelleri kullanılmış, spin-kesinti parametresi ile ilgili sonuçlarda ise deneysel verilerin yüksek uyarılma enerjilerinde BBF modeli kullanılmıştır.

2.2 Nükleer Seviye Yoğunluğunun Parametrizasyonu

Projede ele aldığımız tüm çekirdekler için mikroskopik KMMC hesaplarının yapılabilmesi için güvenilir bir temsili nükleon-nükleon etkileşiminin elde edilmesi gerek şarttır. Burada güvenilirden kasıt, çiftlenim ve multipol terimlerinden oluşan Hamiltonyen'i KMMC metodunun deneysel bazı gözlenebilirleri belli bir kütle yörnesinde türetecek şekilde parametrize etmektir. Ancak, burada KMMC yönteminin spektroskopik yani spesifik bir uyarılmış hale dair bilgi vermeyen, ancak çekirdeğin averaj termal özelliklerini hesaplayabilen bir metod olduğu hatırlatılmalıdır. Bu sebeple deneyden gelen verilerle kıyaslamaya en uygun nicelik ele alınan çekirdeğin toplam hal yoğunluğudur. Bu sebeple projenin iş yükünün ciddi bir kısmı çekirdeklerin deneysel toplam hal yoğunluğunu nitelemek ve ardından KMMC yönteminin kullanağı Hamiltonyen'in parametrizasyonunu bu deneysel hal yoğunluğunu türetecek şekilde gerçekleştirmektir. Çekirdeklerin deneysel hal yoğunluğu hakkında iki türlü deneysel veri bulunmaktadır. Bunlardan biri düşük enerjili uyarım rejiminde (yani seviyelerin ayrık olduğu bölgede) saptanmış seviye sayım verisi, diğeri ise nötron ayrılma enerjisinde sayılan rezonans verisidir. Bu iki veri olduğunda, sırasıyla yukarıda Formül 1 ve Formül 3' te verilen BBF ve CF modelleri parametrize edilebilir. Bu çalışmada literatürde bulunan parametrizasyonları kullanmak yerine, bu modellerin kendi tarafımızca ve local olarak parametrize edilmesi yoluna gidilmiştir. Bunun iki sebebi vardır. Birincil olarak, KMMC

yöntemi genelde hal yoğunluğunun elde edilmesinde kullanılır. Deneysel gruplar ise sonuçlarını çoğu zaman seviyelerin açılal momentumdan kaynaklı dejenerasyon faktörünü hesaba katmayan seviye yoğunluğu cinsinden ifade ederler. Teori ve deney arasındaki bu fark, bu iki niceliğin birbiri cinsinden ilişkilendirilmesi mümkün olduğundan önemsiz görülebilir. Ancak bu ilişki, projenin konusu olan spin-kesinti parametresini içerdiğinden (bkz. 2.1.3 Spin Dağılım Fonksiyonu), objektif olmak amacıyla deneysel verilerin doğrudan hal yoğunluğu cinsinden parametrize edilmesi yoluna gidilmiştir. Diğer sebep ise, hassaslık için lokal parametrisasyonun global parametrisasyonlara tercih edilmesidir.

Buna göre, ele alınan bir çekirdek için iki parametrelil BBF formülü

$$\begin{aligned} \rho(S_n) &= \rho_{exp}(S_n) \\ \int dE' \rho(E') &= N(E_U) - N(E_L) \end{aligned} \quad (4)$$

denklem sisteminin eş-zamanlı çözümü ile parametrize edilmiştir. Yukarda eşitliğin sağ tarafındaki ifadeler deneyden gelip, sırasıyla nötron ayrılma enerjisindeki deneysel hal yoğunluğunu (üst denklem) ve uygun seçilmiş bir enerji aralığında yer alan seviye sayım verisini (alt denklem) içermektedir. Veriler RIPL 3 veri tabanından sağlanmıştır (Capote vd, 2009). Nötron rezonans verisine sahip tüm çekirdeklere BBF parametrelerinin kütle sayısına göre dağılımını gösteren sonuçlar Şekil 1'de gösterilmiştir (Δ parametresinin dağılımında kullanılan renkler çekirdekleri nükleon sayılarının tek veya çift oluşuna göre nitelemek için kullanılmıştır, ancak bu nitelemenin bu çalışma için çarpıcı bir sonucu yoktur). Bulgular kısmında ele alınan çekirdekler için BBF parametrisasyonunda kullanılan değerler ve elde edilen a ve Δ değerleri Tablo 1'de sunulmuştur.

CF modelinin parametrisasyonunda ise E_1 ve T_1 parametreleri doğrudan deneysel sayım dadasına uydurularak saptanmış, sonrasında da serbest durumdaki a ve Δ parametreleri ile eşleştirme enerjisi E_m ,

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{a}{E_M - \Delta}} - \frac{5}{4} \frac{1}{E_M - \Delta} &= \frac{1}{T_1} \\ \frac{\sqrt{\pi}}{12} a^{-1/4} (E_M - \Delta)^{-5/4} e^{s\sqrt{a(E_M - \Delta)}} &= e^{(E_M - E_1)/T_1} \end{aligned} \quad (5)$$

denklem sisteminin

$$X^2(E_M) = \left(\frac{\rho(S_n; E_M) - \rho_{exp}(S_n)}{\delta \rho_{exp}(S_n)} \right)^2 \quad \text{for } (E_M \leq S_n). \quad (6)$$

niceliğini minimize etme koşulu ile saptanmıştır. Bu nicelik nötron ayrılma enerjisinde modelin gözlemlenen yoğunluğu en iyi şekilde temsil etmesini talep etmektedir. Ancak bu ifadenin her

çekirdek için iyi tanımlı bir lokal minimumu olmadığından dolayı bazı çekirdeklere CF parametreleri belirlenememektedir. Nötron rezonans verisine sahip olup, yukardaki koşulları sağlayan tüm çekirdekler için CF parametrelerinin kütle sayısına göre dağılımını gösteren sonuçlar Şekil 2 ve Şekil 3'de gösterilmiştir.

2.3 Spin Dağılım Fonksiyonu

Seviye yoğunluğunun açısal momentum dağılımı¹. $f_J(E)$.

$$f_J(E) = \frac{\rho_J(E)}{\rho(E)} \quad (7)$$

faktörüyle ifade edilir. Spin dağılım fonksiyonu, bazı varsayımlar altında analitik bir formüle indirgenebilmektedir. Uyarılmış seviyelerin açısal momentum dağılımının nükleonların açısal momentumlarının keyfi ve ilintisiz eşleşmesi ile olduğu varsayımı altında varılan spin-kesinti (spin-cutoff) modeline (Ericson, 1960) göre. $f_J(E)$

$$f_J(E) \approx \frac{2J+1}{2\sigma^2} e^{-J(J+1)/2\sigma^2} \quad (8)$$

formülü ile verilir. Bu ifadede σ^2 . spin-kesinti (*spin-cutoff*) parametresi olarak bilinir ve çekirdeklerin seviye ($\rho(E) = \sum \rho_J(E)$) ve hal yoğunluklarını $\rho(E) = \sum (2J + 1)\rho_J(E)$ birbiriyle ilişkilendirir:

$$\rho(E) = \sqrt{2\pi\sigma}\rho(E). \quad (9)$$

σ^2 çekirdeğin eylemsizlik momenti (I) ile ilişkilidir. Bu eylemsizlik momenti, verilen bir uyarılma enerjisinin bir kısmının nükleonları bireysel olarak uyarmak yerine kollektif olarak uyurarak, rotasyon oluşturmasından kaynaklanmaktadır. Spin-kesinti parametresi Fermi gazı modelinden yola çıkarak termodinamik açıdan eylemsizlik momenti ve sıcaklık ile $\sigma^2 \propto IT$ şeklinde fonksiyonel olarak ilişkilendirilebilir. Ancak belli bir enerji değerinde σ^2 çekirdekten çekirdeğe de farklılık göstermektedir. Fermi gazı (ve dolayısıyla BBF

1 Genellikle spin dağılım fonksiyonu olarak adlandırılır.

formülündeki) a parametresinde de görülen bu etki çekirdeklerin kabuk yapısına sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Bu etki göz önüne alınacak olursa σ^2 'nin bir T sıcaklığındaki değeri

$$\sigma_F^2(E) = I \frac{a}{a'} T(E) . \quad (10)$$

bağıntısı ile verilir. Burada uyarılma enerjisi ile sıcaklık arasında Fermi gazı modelinden gelen

$$T = \sqrt{\frac{U}{a}} . \quad (11)$$

ilişkisi esas alınmıştır. a' ise seviye yoğunluk parametresinin kabuk etkilerinden arındırılmış asimptotik değerini göstermektedir ve

$$a' = \alpha a + \beta A^{2/3} . \quad (12)$$

parametrizasyonu yoluyla sıvı damlası modeline paralel olarak global sistematikten belirlenen hacim (α) ve yüzey terimleri (β) cinsinden bu niceliği ifade eder. Formül 7'de çekirdeğin eylemsizlik momentinin enerji bağıllığının çok zayıf olduğu varsayılmıştır. Değeri katı-cisim (*rigid-body*) değerine (yani $I(E) \approx I_0$) sabitlendiğinde σ^2

$$\sigma_F^2(E) = 0.01389 A^{5/3} \frac{a}{a'} T . \quad (13)$$

formülüyle verilir. Ancak, burada önemli bir husus σ_F^2 , σ^2 'nin seviye yoğunluğunun süreklilik rejiminde kullanmaya uygun halidir. Dolayısıyla Formül 10. uyarılmış seviyelerin ayrık olduğu çok düşük enerjilerde kullanılmaya uygun değildir. Bu ifadenin RIPL-3 (Capote, 2009) veri tabanında tatbik edilmiş bir de ayrık seviyeler için geçerli olan

$$\sigma_d^2 = \frac{1}{3 \sum 2J_i + 1} \sum J_i (J_i + 1) (2J_i + 1) . \quad (14)$$

hali bulunmaktadır. Burada spin-kesinti parametresinin düşük enerjilerdeki (yani ayrık bölgedeki) değerini gösteren σ_d^2 spinleri bilinen ve $[E_L, E_U]$ gibi bir enerji aralığı içerisinde eksiksiz olarak saptanmış nükleer seviyelerden hareket edilerek ifade edilmiştir. N_L ve N_U bu

aralıkta yer alan seviyelerin artan enerjiye göre sıralandırılmış numaralarını belirtmektedir. İlgili çekirdek için seviye sayım verisi bulunduğu zaman kullanılabilen bu formülün bu veri bulunmadığında başvurulacak global sistematikten elde edilmiş

$$\sigma_{d, glob}^2 = (0.83A^{0.26})^2 . \quad (15)$$

versiyonu da bulunmaktadır. Bununla birlikte, spin-kesinti parametresi ayrık (σ_d^2) ve süreklilik (σ_F^2) rejimlerindeki ifadelerinin doğrusal interpolasyonu ile

$$\sigma(E) = \begin{cases} \sigma_d^2 & \text{for } 0 \leq E < E_d \\ \sigma_d^2 + \frac{E-E_d}{S_n-E_d} [\sigma_F^2(S_n) - \sigma_d^2] & \text{for } E_d \leq E < S_n \\ \sigma_F^2 & \text{for } E \geq S_n \end{cases} \quad (16)$$

formülüyle temsil edilebilir. Burada $E_d = \frac{1}{2}(E_L + E_U)$ olup ayrık seviye sayım aralığının enerji olarak orta değerine karşı gelmektedir. S_n ise ele alınan çekirdeğin nötron ayrılma enerjisi olup ayrık ve süreklilik rejimlerinin birbiriyle eşleştirildiği enerji olarak seçilmiştir.

Spin-kesinti parametresini yukarda belirtilen sistematikten farklı olarak ifade eden daha yeni çalışmalar da bulunmaktadır. von Egidy ve Bucurescu, 2009 yayınında ortaya atılan

$$\sigma^2(E) = 0.391A^{0.675}(E - 0.5Pa')^{0.312} \quad (17)$$

formülü spin-kesinti parametresinin kütle ve enerji bağıllığını içeren alternatif bir fenomenolojiye dayanmaktadır. Bu ifadede Pa' terimi döteron çiftlenim enerjisini göstermektedir.

Tüm bu formülasyonların, mikroskopik teorice yani nükleon-nükleon etkileşimlerinden yola çıkarak elde edilen değerlerle kıyaslanması projenin ana motivasyonu olmuştur. Bu kıyaslamalar Şekil 4'te nikel çekirdekleri, Şekil 7'de zirkonyum çekirdekleri, Şekil 9'da neodimyum çekirdekleri ve Şekil 10'da samaryum çekirdekleri için yapılmıştır.

3. GEREÇ VE YÖNTEM

3.1 Kabuk Modeli Monte Carlo Yaklaşımı

Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC), (*shell model Monte Carlo, SMMC*) nükleer yapı fiziği hesaplamalarında kullanılan güçlü bir stokastik kuantum çok-cisim tekniğidir (Johnson, 1992; Koonin, 1997). KMMC yönteminde nükleer yapı fiziğinin birleşik teorik modeli olarak kabul edilen etkileşimli kabuk modeli (Caurier, 2005) 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.

Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) metodu bir $\beta = 1/T$ ters sıcaklığındaki imgesel-zaman çok-cisim propagatörünü ($e^{-\beta H}$) tek-cisim propagatörlerinin (U_σ) bir süperpozisyonu olarak ifade eden Hubbard-Stratonovich transformasyonunu esas alır. Bu representasyon $e^{-\beta H} = \int D[\sigma] G_\sigma U_\sigma$ formülüyle gösterilebilir. Bu ifadede σ zamana bağlı ve harici yardımcı alanları temsil eder. G_σ belli bir σ yardımcı alana bağlı tek-cisim propagatörü U_σ için ağırlık fonksiyonu rolünde Gausyen bir terimdir. KMMC metodunda bir O operatörünün T sıcaklığındaki beklenen değeri

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr}[O e^{-\beta H}]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]} = \frac{\int D[\sigma] W_\sigma \Phi_\sigma \langle O \rangle_\sigma}{\int D[\sigma] W_\sigma \Phi_\sigma} \quad (18)$$

formülüyle verilir. Yukarda $W_\sigma \equiv G_\sigma |\text{Tr}[U_\sigma]|$ pozitif tanımlı bir fonksiyonu $\Phi_\sigma \equiv \text{Tr}[U_\sigma] / |\text{Tr}[U_\sigma]|$ da Monte Carlo işareti olarak bilinen bir terimi göstermektedir. $\langle O \rangle_\sigma \equiv \text{Tr}[O U_\sigma] / \text{Tr}[U_\sigma]$ ifadesi ise yardımcı alanlara bağlı tek-cisim propagatörünce dikte edilen bir beklenen-değerdir. Tüm bu formüllerdeki matris izleri kanonik kümede yani çekirdeğin nötron ve proton sayılarını koruyan çok-cisim halleri üzerinden değerlendirilir. KMMC metodunda W_σ fonksiyonu σ yardımcı alanlarını sonlu bir sette örneklemede kullanılır. Bu örnekleme Monte Carlo yöntemleriyle yapılır ve bunun sonucunda aranan beklenen değer $\langle O \rangle \approx \sum_\sigma \langle O \rangle_\sigma \Phi_\sigma / \sum_\sigma \Phi_\sigma$ formülüyle yaklaşık olarak hesaplanır. Buradaki hata payları istatistiksel olup kontrol edilebilir.

Nükleer hal yoğunluğu bölüşüm fonksiyonunun $Z(\beta) = Tr[e^{-\beta H}]$ ters Laplace transformuna karşılık gelir. Bu niceliğin elde edilmesinde başlangıç noktası ters-sıcaklığın bir fonksiyonu olarak termal enerjinin $E(\beta)$ hesaplanmasıdır. Termal enerji, KMMC yöntemi kullanılarak bir dizi sıcaklık değerinde hesaplanır. Daha sonra

$$E(\beta) = \frac{Tr[He^{-\beta H}]}{Tr[e^{-\beta H}]} = \frac{\int dE \rho(E) e^{-\beta E}}{Z(\beta)} \quad (19)$$

ifadesinin eğer-noktası (saddle-point) yaklaşımında ters Laplace transformuna tabi tutulmasıyla

$$\rho(E) = \frac{e^{\beta E + \ln(Z)}}{\sqrt{-2\pi \frac{dE(\beta)}{d\beta}}} \quad (20)$$

hal yoğunluğu elde edilir.

KMMC metodunda spin dağılım fonksiyonu

$$E_J(\beta) = \frac{-d \ln[Z_J(\beta)/Z(\beta)]}{d\beta} + E(\beta) \quad (21)$$

İle ifade edilen niceliklerden türetilir. Burada Z_J , J açılmalı momentumlu çok-cisim hallerinin bölüşüm fonksiyonu olup uygun projeksiyon operatörü kullanılarak KMMC yöntemi tarafından hesaplanmaktadır. $E_J(\beta)$ 'ın elde edilmesinden de sonra bir dizi β değerine karşı gelen $E(\beta)$ ve $E_J(\beta)$ değerleri ile projede gerekli niceliklerin büyük kısmı elde edilebilir. Örneğin, $E(\beta) \rightarrow \rho(E)$ ve $E_J(\beta) \rightarrow \rho_J(E)$ yoluyla $\rho(E)$ ve $\rho_J(E)$ hesaplanmaktadır. Spesifik olarak $E_J(\beta) \rightarrow \rho_J(E)$ dönüşümü, saddle-point yaklaşımında

$$\rho_J(E) = \frac{e^{\beta E_J + \ln(Z_J)}}{\sqrt{-2\pi \frac{dE_J(\beta)}{d\beta}}} \quad (22)$$

formülüyle gerçekleştirilir.

Spin kesinti parametresi ise $\langle J^2 \rangle / 3$ yarı-klasik ifadesi ile hesaplanır.

4. BULGULAR

Projede öncelikli olarak ele alınan tüm çekirdeklerin deneysel seviye sayım ve nötron rezonans verileri kullanılarak, deneysel toplam hal yoğunlukları saptanmıştır. BBF formülü (Formül 1) esas alındığında, Formül 4'te ihtiyaç duyulan nicelikler, ve çözümden elde edilen BBF parametreleri Tablo 1'de gösterilmektedir.

Tablo 1. Toplam hal yoğunluğunun BBF parametrizasyonuna dair nicelikler

Çekirdek	$S_n(\text{MeV})$	N_L	N_U	$a(\text{MeV})^{-1}$	$\Delta(\text{MeV})$
⁵⁹ Ni	8.999	4	8	6.222	-0.457
⁶⁰ Ni	11.388	4	10	6.241	0.858
⁶¹ Ni	7.820	5	12	6.852	-0.488
⁶² Ni	10.596	7	9	6.577	0.763
⁶³ Ni	6.838	2	8	7.817	0.066
⁶⁵ Ni	6.098	3	5	8.269	0.234
⁹¹ Zr	7.195	4	7	10.316	0.862
⁹² Zr	8.635	3	6	9.844	0.975
⁹³ Zr	6.735	3	5	11.346	0.636
⁹⁴ Zr	8.221	3	7	11.230	1.164
⁹⁵ Zr	6.462	3	7	11.787	0.754
⁹⁷ Zr	5.575	2	7	11.961	0.969
¹⁴³ Nd	6.123	8	23	15.951	0.759
¹⁴⁴ Nd	7.817	8	29	15.719	1.225
¹⁴⁵ Nd	5.755	8	21	16.792	0.135
¹⁴⁶ Nd	7.565	6	15	16.724	0.843
¹⁴⁷ Nd	5.292	4	20	18.276	0.058
¹⁴⁸ Nd	7.333	5	17	19.293	0.581
¹⁴⁹ Nd	5.039	2	15	18.552	-0.644
¹⁵¹ Nd	5.335	8	28	17.159	-0.932
¹⁴⁸ Sm	8.142	8	29	17.120	0.751
¹⁴⁹ Sm	5.871	7	19	19.086	-0.196
¹⁵⁰ Sm	7.987	3	21	18.547	0.638
¹⁵¹ Sm	5.597	5	16	18.999	-0.771
¹⁵² Sm	8.258	5	17	18.554	0.322
¹⁵³ Sm	5.868	4	17	17.849	-1.053
¹⁵⁵ Sm	5.807	7	15	17.067	-0.834

Tablo 2.'de de CF modeli (Formül 3 ve parametrizasyonu, Formül 5-6) ile ilgili değerler ve elde edilen parametreleri, nükleer etkileşim için model uzayda çalışmalar yaptığımız Ni ve Zr

bölgesi için gösterilmektedir. Neodimyum ve samarium hesaplamaları daha önceki çalışmalarda (Özen vd., 2013) tesis edilmiş Hamiltonyenleri kullandığından, o bölgedeki çekirdekler için CF parametreleri bu tabloda belirtilmemiştir. Buna karşın genel anlamda hal yoğunluğu parametrizasyonu konusunda yaptığımız çalışmalar hakkında fikir vermesi açısından BBF (Şekil 1) ve CF (Şekil 3 ve Şekil 4) parametrelerinin değerlerinin nükleer tablo genelinde veriye sahip tüm çekirdekler için kütleyle göre dağılımları gösterilmiştir.

Tablo 2. Nikel ve zirkonyum izotoplarının toplam hal yoğunluğunun CF parametrizasyonuna dair nicelikler.

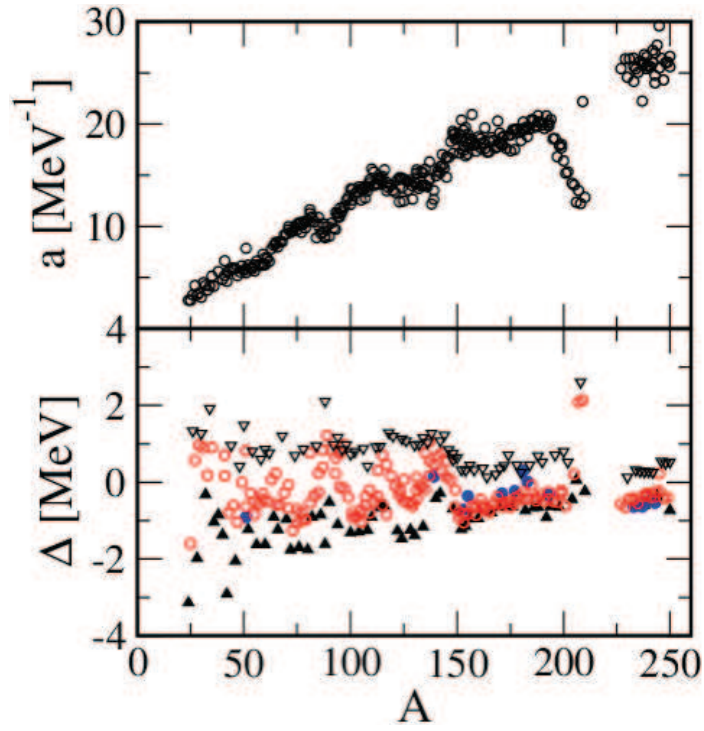
Çekirdek	N_L	N_U	E_1 (MeV)	T_1 (MeV)	E_M (MeV)	α (MeV) ⁻¹	Δ (MeV)
59 Ni	10	57	-2.518	1.081	4.455	6.455	0.029
61 Ni	2	36	-1.860	0.837	1.928	6.929	-0.354
91 Zr	11	55	-1.456	0.780	7.200	11.968	2.061
92 Zr	4	57	-0.301	0.639	3.610	10.195	1.327
94 Zr	2	28	-0.194	0.582	3.670	11.571	1.439
95 Zr	3	20	-0.905	0.635	5.246	13.297	1.642

Spin-kesinti parametresinin (σ^2) deneysel veya fenomenolojik ifadelerinin elde edilmesine yönelik olarak da, süreklilik rejimi ifadesinde (Formül 13) esas alınan α parametreleri için Tablo 1'deki BBF değerleri kullanılmıştır. Spin-kesinti parametresinin ayrık seviyeler rejimindeki ifadesinin (Formül 14) elde edilmesinde ise Tablo 3'de ifade edilen ve Koning, 2008 çalışmasından alınan N_L ve N_U değerleri kullanılmıştır. Formül 17 ile gösterilen parametrizasyonda ise yine Tablo 3'de belirtilen ve von Egidy ve Bucurescu, 2009 çalışmasından alınan parametreler kullanılmıştır

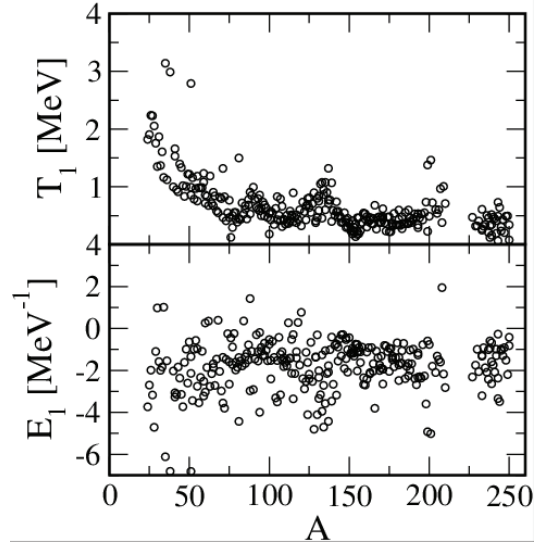
Tablo 3. Spin-kesinti parametresinin fenomenolojik ifadelerinde kullanılan N_L , N_U ve Pa' değerleri

Çekirdek	N_L	N_U	Pa' (MeV)
59 Ni	2	23	0.49
60 Ni	7	32	3.15
61 Ni	0	15	0.32
62 Ni	6	18	3.21
63 Ni	8	18	0.43
65 Ni	7	17	0.55
94 Zr	4	16	2.06
143 Nd	8	23	0.36
144 Nd	8	29	2.13
145 Nd	8	21	0.38

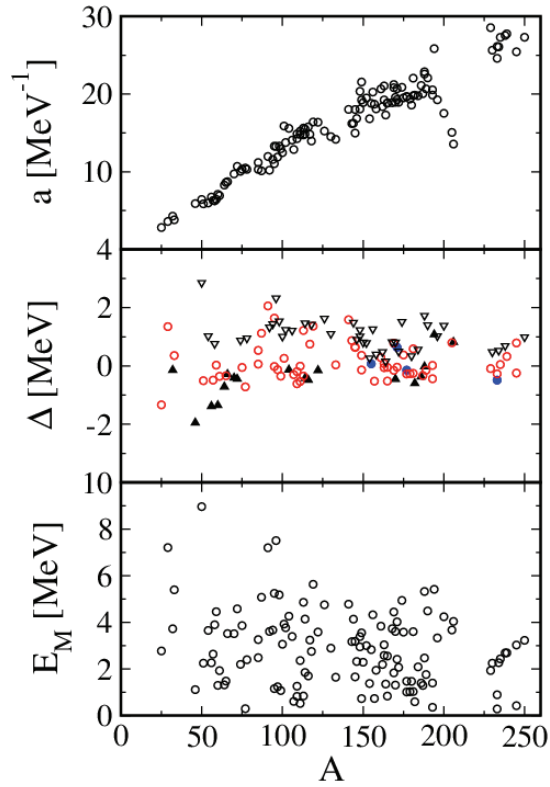
^{146}Nd	6	15	2.12
^{147}Nd	4	20	0.30
^{148}Nd	5	17	2.25
^{149}Nd	2	15	-0.04
^{151}Nd	8	28	0.08
^{148}Sm	8	29	2.21
^{149}Sm	7	19	0.29
^{150}Sm	3	21	2.17
^{151}Sm	5	16	-0.14
^{152}Sm	5	17	2.09
^{153}Sm	4	17	-0.04
^{155}Sm	7	15	0.12



Şekil 1. Lokal BBF hal yoğunluğu parametrizasyonunda a ve Δ 'nın kütleye göre dağılımı.



Şekil 2. Lokal CF hal yoğunluğu parametrizasyonunda E_1 ve T_1 'nin kütleyle göre dağılımı.



Şekil 3. Lokal CF hal yoğunluğu parametrizasyonunda a , Δ ve E_m 'nin kütleyle göre dağılımı.

Projede ele alınan KMMC hesapları nikel bölgesindeki çekirdekler için:

1s1/2 0d3/2 0d5/2 0f5/2 0f7/2 1p3/2 1p1/2 0g9/2 (protonlar ve nötronlar) model uzayında,

zirkonyum çekirdekleri için:

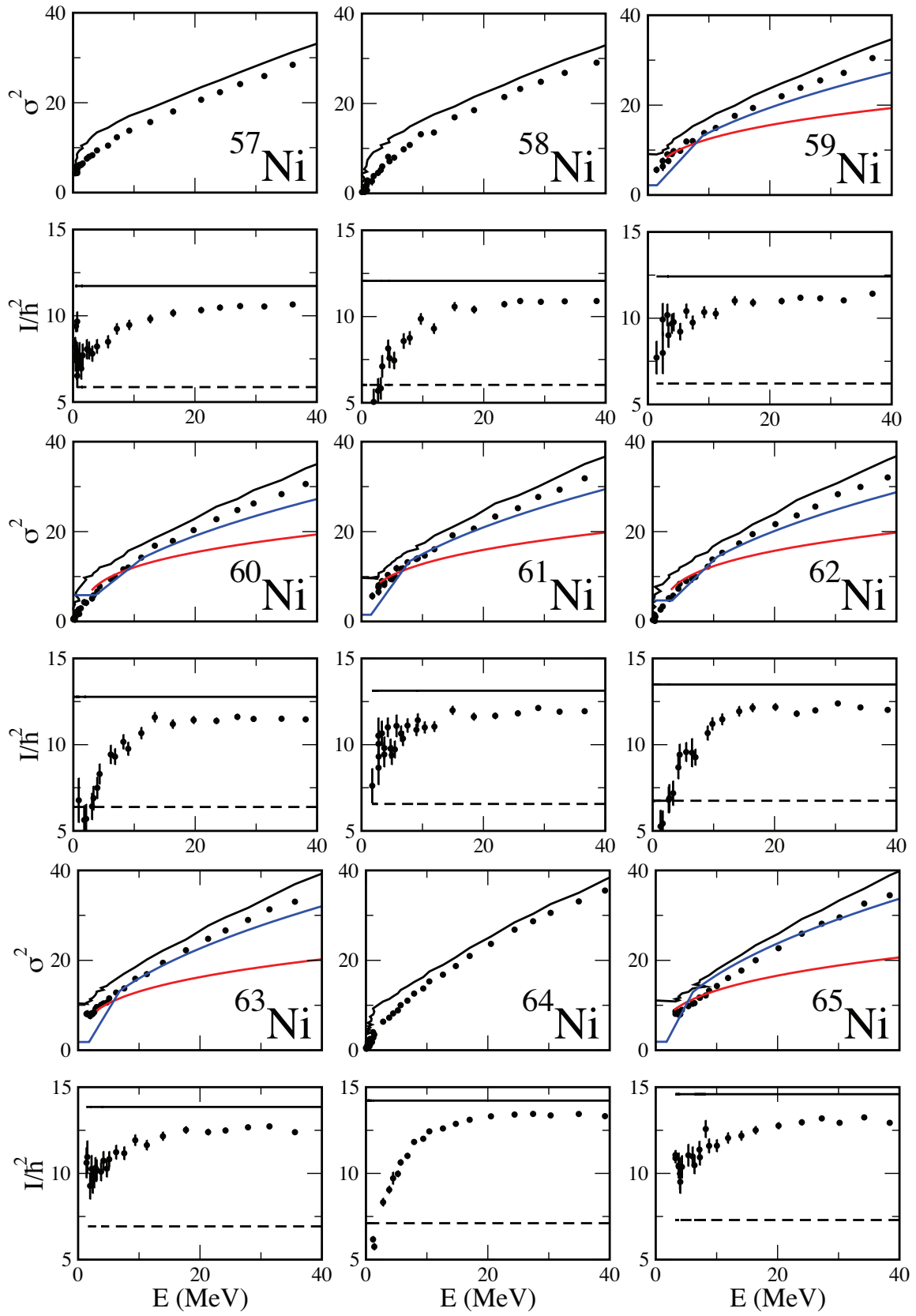
0f5/2, 1p3/2, 1p1/2, 0g9/2, 0g7/2, 1d5/2 (protonlar) ve

0f5/2, 1p3/2, 1p1/2, 0g9/2, 0g7/2, 1d5/2, 1d3/2, 2s1/2, 0h11/2 (nötronlar) model uzaylarında ve samaryum-neodimyum çekirdekleri için:

0g7/2 1d5/2 , 1d3/2 , 2s1/2 , 0h11/2 , 1f7/2 (protonlar)

0h11/2 ,0h9/2 , 1f7/2 , 1f5/2 , 2p3/2 , 2p1/2 , 0i13/2, 1g9/2 (nötronlar) model uzaylarında gerçekleştirilmiştir.

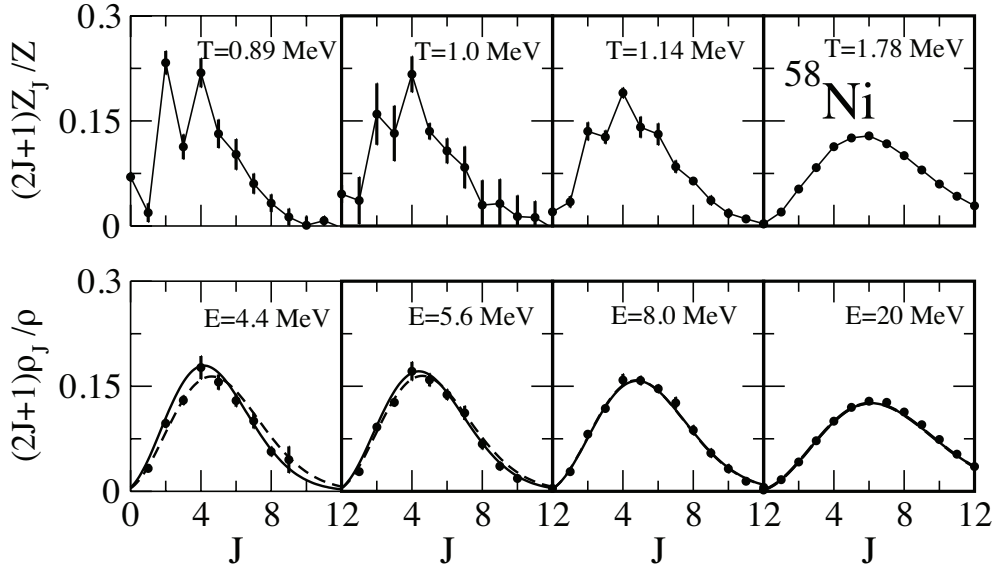
Bu kütle yörelerinde yapılan spin kesinti parametresi hesaplamaları, deneysel ifadeler ve fenomenolojiye dayalı çeşitli yaklaşımlarla kıyaslanmıştır. Sonuçlar Şekil 4'te nikel çekirdekleri, Şekil 7'de zirkonyum çekirdekleri, Şekil 9'da neodimyum çekirdekleri ve Şekil 10'da samaryum çekirdekleri için gösterilmektedir. Bu şekillerde içi dolu yuvarlaklar KMMC hesaplarıyla elde edilen sonuçları göstermektedir. Koyu siyahla gösterilen eğriler Formül 13 ile gösterilen spin-kesinti parametresinin süreklilik halini (Fermi gazı limiti) göstermektedir. Ancak bu eğrilerde, kabuk etkileri göz ardı edilerek ($\alpha' = 1$) alınarak elde edilmiştir. Spin-kesinti parametresi ayrık (σ_d^2) ve süreklilik (σ_F^2) rejimlerini doğrusal interpolasyonla birbirine bağlayan Koning vd. 2008 (Formül 16) sonuçları mavi eğrilerle gösterilmektedir. Bu eğrilerde ise süreklilik rejiminde kabuk etkileri de hesaba katılmıştır. Bu amaç için Koning vd. 2008'de BBF yaklaşımı esas alan (BFM effective) parametre değerleri $\alpha = 0.0722396$ ve $\beta = 0.195267$ kullanılmıştır (bkz. Formül 10 ve Formül 12). Şekiller 4,7,9 ve 10'da her çekirdek için üst paneled spin-kesinti parametresi, alt panelde ise eylemsizlik momenti gösterilmektedir. Eylemsizlik momenti, uyarılma enerjisi ile artan ancak belli bir enerjide satüre olan bir niceliktir. Bu değer çekirdeğin katı-cisim gibi davrandığı limit olup, çekirdeğin aldığı uyarım enerjisinin artık rotasyon için daha fazla kullanılamayacağı durumu gösterir. Bu değer bu şekillerde kesintisiz yatay çizgiyle verilmiştir. Kesintili yatay çizgi ise katı cisim eylemsizlik momentinin yarısına denk olup referans amacıyla belirtilmiştir. Tüm şekillerde görüleceği üzere eylemsizlik momenti katı-cisim limitine yaklaşırken, spin-kesinti parametresi de siyah sürekli çizgi ile gösterilen Fermi gazı limitine yakınsamaktadır. Spin kesinti şekillerinde kırmızı rankle temsil edilen eğri ise von Egidy ve Bucurescu, 2009 yöntemiyle elde edilmiş sonuçlardır.



Şekil 4. Nikel bölgesinde spin-kesinti parametresi

Nikel bölgesinde ≈ 10 MeV'ye kadar olan enerjilerde von Egidy ve Bucurescu, 2009 yönteminin (kırmızı eğriler) Koning vd. 2008 yönteminden (mavi eğriler) daha başarılı olduğu görülmektedir. Ancak 10-20 MeV aralığında Koning vd. 2008 yönteminin daha başarılıdır.

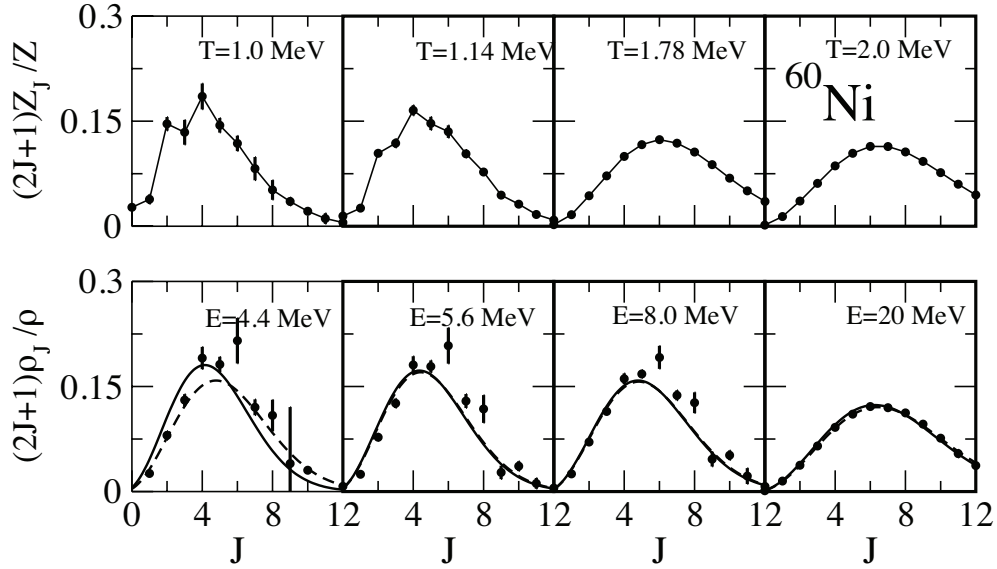
Bu kütle yöresi ele aldığımız üç kütle bölgesi içinde doğrudan spin projeksiyon tekniklerini kullanabildiğimiz bölgedir. Bunun sebebi spin projeksiyon metodunun normalde yüksek performanslı hesaplama kaynakları gerektiren KMMC yöntemi üzerinde ekstra hesaplama gücü ihtiyacı getirmesidir. Zr, Sm-Nd kütle bölgelerinde bu mümkün olmamıştır. Ancak nikel bölgesinde iki çekirdek için yaptığımız hesapların sonuçları Şekil 5 ve Şekil 6'da verilmiştir.



Şekil 5. Ni58 çekirdeğinde spin dağılım fonksiyonu

Bu şekillerde üst panelde 12'ye kadar olan açısal momentum değerine sahip uyarılmış seviyelerin, belli sıcaklıklarda bölüşüm fonksiyonunun, toplam bölüşüm fonksiyonuna oranı gösterilmektedir. Alt panellerde ise kanonik kümede bu yaklaşık olarak bu sıcaklıklara karşı gelen uyarı enerjilerinde, belli bir açısal momentum sahip hal yoğunluğunun toplam hal yoğunluğuna oranı gösterilmektedir. Bir ayağı orjinde sabitlenmiş, Gaussyen formundaki bu eğriler, spin-kesinti modelindeki forma denk gelmektedir. Ancak bu davranış (yuvarlaklarla gösterilen KMMC sonuçlarına uydurulan siyah düz eğri) 8 MeV ve altında averaj olarak sağlandığı halde, çift sayılı açısal momentum değerleri için KMMC sonuçlarından az, tek sayılı açısal momentum değerleri için ise KMMC değerlerinden fazla sonuç vermektedir. Bunun sebebi KMMC metodunun nükleonik korrelasyonları hesaba katması ve bu enerjilerde Hamiltonyen'in çiftlenim teriminin çift-çift çekirdeklere daha önemli olmasıdır. Sonuçta

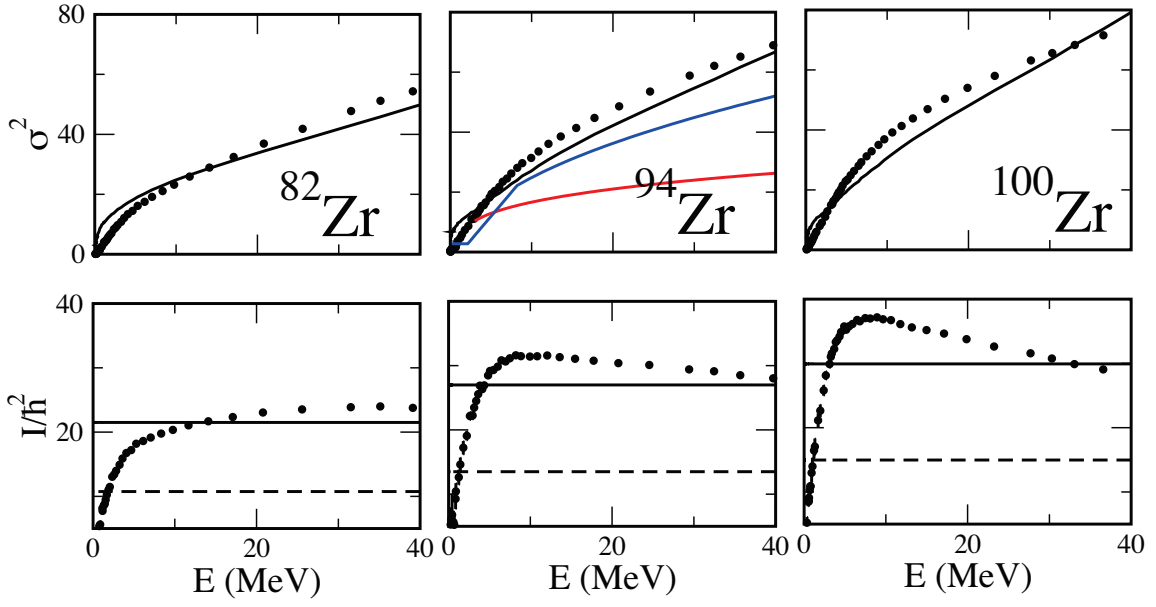
çiftlenim terimi küresel simetriyi tercih eden bir etkileşim olduğundan çift-çift çekirdeklere eylemsizlik momenti de tek-çift veya tek-tek çekirdeklere göre baskınır.



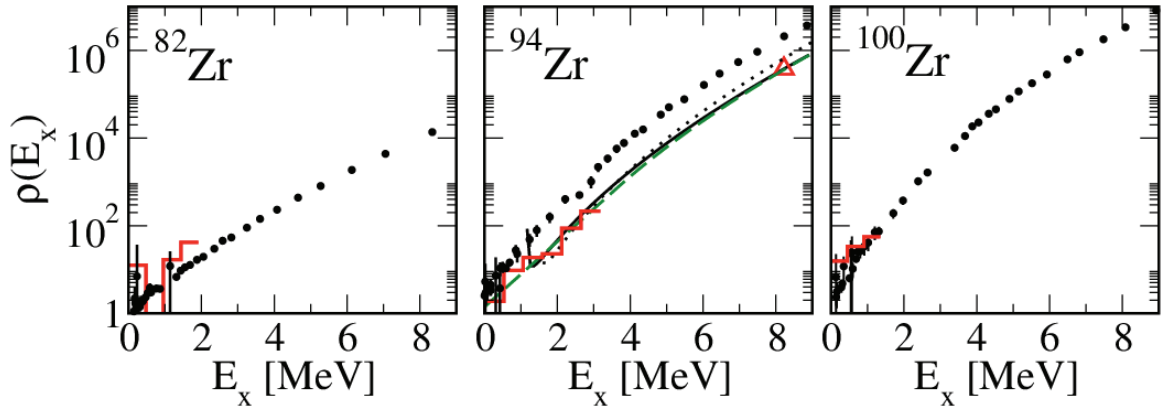
Şekil 6. Ni60 çekirdeğinde spin dağılım fonksiyonu

Şekil 7'de ise Zr bölgesinde yaptığımız spin-kesinti hesaplamaları gösterilmektedir. Ancak bu çekirdeklerin yer aldığı kütle yöresinde Hamiltonyen parametrizasyonu henüz son halini almamıştır. Şekil 8.'de Hamiltonyen parametrizasyonunun şu andaki durumu anlaşılabilir. Nötron rezonans verisi bulunmayan Zr82 çekirdeğinde KMMC yöntemi kırmızı ile gösterilen seviye sayım verisini henüz tam türetememektedir. Bunun yanı sıra nötron rezonans verisine (kırmızı üçgen) KMMC sonuçlarının BBF (siyah eğri) ve CF (yeşil eğri)'den ciddi oranda sapma gösterdiği açıktır. Dolayısıyla bu kütle yöresinde Hamiltonyen'de belirgin bir iyileştirme yapılması gerekmektedir.

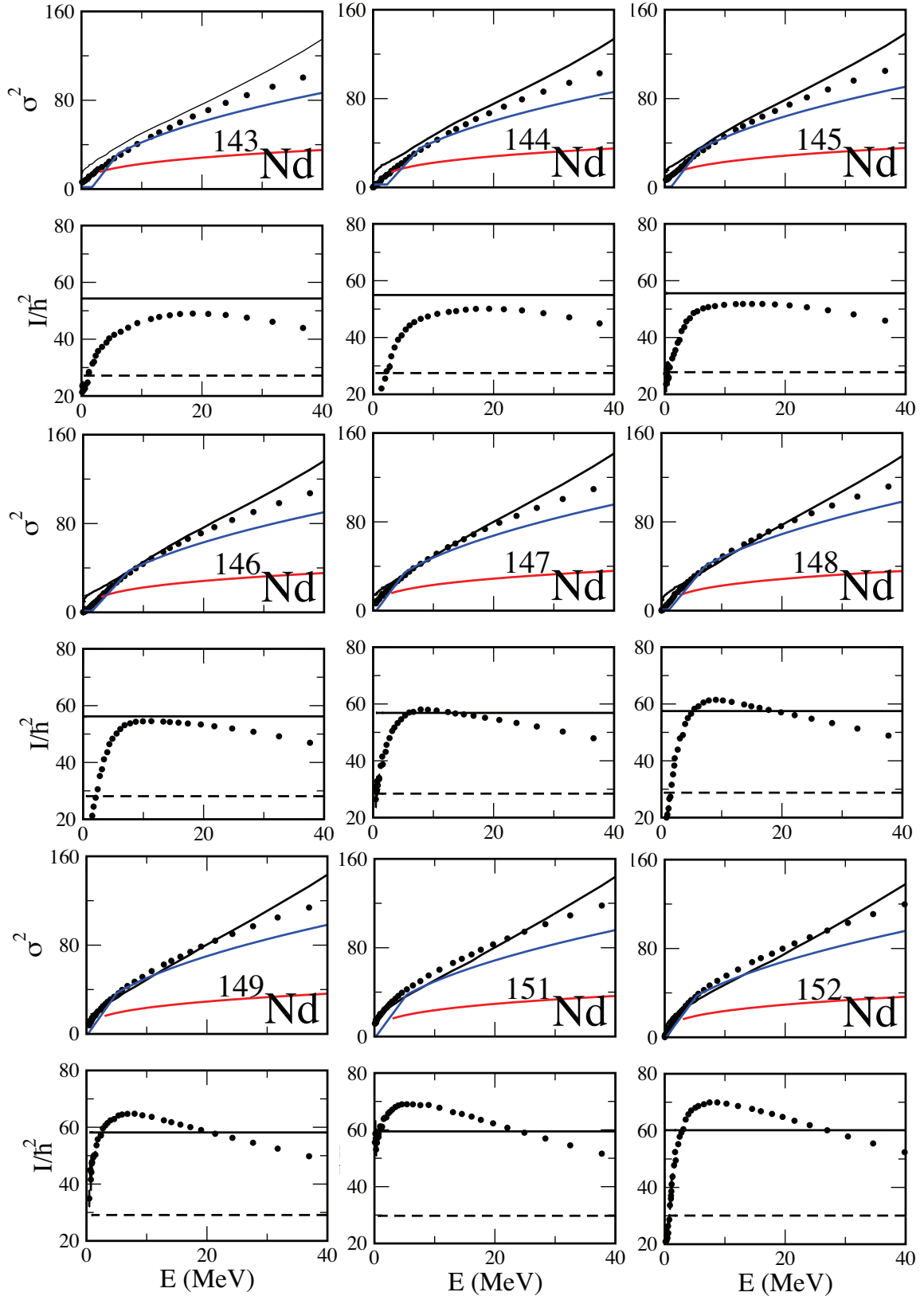
Ancak burada gösterilen öncül sonuçlardan yine de bazı davranışlar ortaya çıkmaktadır. von Egidy ve Bucurescu, 2009 yönteminin bu kütle bölgesinde çok daha kısıtlı bir aralıkta başarılı olduğu ve Koning vd. 2008 yönteminin daha uygun olabileceğine dair bir kanı uyanmaktadır. Bu kanı bu yöreden de ağır bir yöre olan Nd-Sm bölgesindeki sonuçlarla da desteklenmektedir.



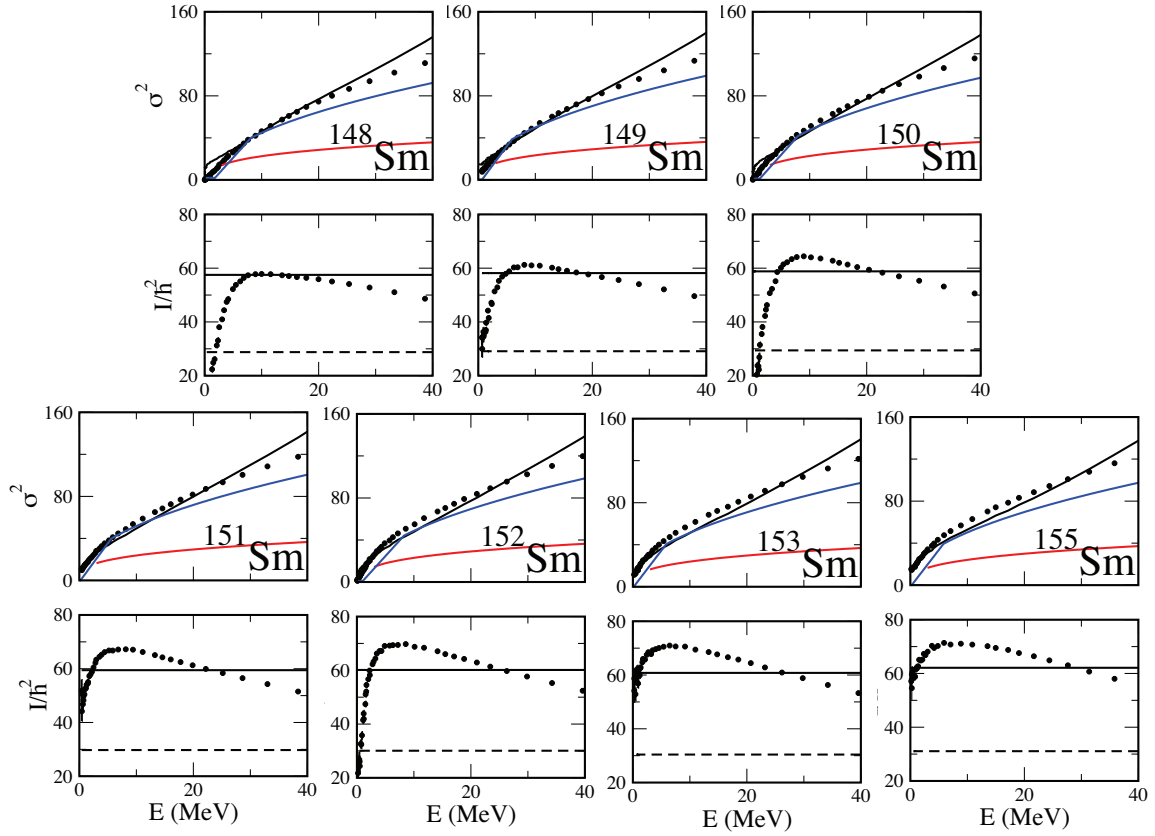
Şekil 7. Zirkonyum bölgesinde spin-kesinti parametresi



Şekil 8. Zirkonyum bölgesinde toplam hal yoğunluğu



Şekil 9. Neodimyum bölgesinde spin-kesinti parametresi



Şekil 10. Samaryum bölgesinde spin-kesinti parametresi

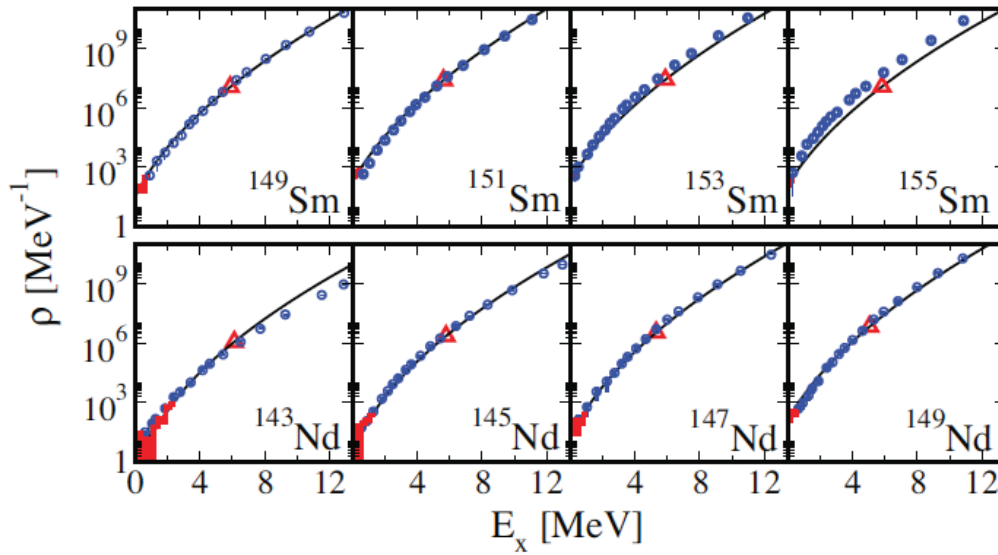
Şekil 9 ve 10'da Nd ve Sm izotopları için yapılan çalışmalardan elde edilen sonuçlar incelendiğinde 10-15 MeV'ye kadar olan enerjilerde Koning vd. 2008 yönteminin oldukça güvenilir olduğu söylenebilir. Buna karşın von Egidy ve Bucurescu, 2009 yönteminin 5 MeV ve daha düşük enerjiler hariç ciddi sapma gösterdiği görülmektedir.

Yukarda bahsi geçen spin-kesinti sonuçlarına eşlik eden eylemsizlik momenti grafikleri, KMMC modeline güvenilebilecek üst enerji değerleri hakkında da bilgi vermektedir. Eylemsizlik değerinin belli bir enerjiden sonra azalmaya başlaması kabuki modeli hesaplamalarında sınırlı olan model uzayın uyarım kapasitesi açısından aşıldığını göstermektedir. Bu grafiklerden de görüleceği üzere daha bir kütle yöresinde daha ağır izotoplarda daha belirgin olan bir durumdur. Valans nükleon sayıları daha fazla olduğu için daha ağır çekirdeklerin model uzayda daha sınırlı bir üst uyarı enerjisine kadar başarıyla modellenebileceği açıktır.

Şekil 11'de ise projede elde edilen bir başka ilerlemeye dair sonuçlar verilmektedir. Projenin ana metodu olan KMMC metodu, tek-çift çekirdekler için yapılan hesaplamalarda, diğer

fermionik Monte Carlo yöntemlerinde olduğu gibi işaret problemi olarak bilinen ve düşük sıcaklıklarda yöntemin işleyişini engelleyen bir problemle karşılaşmaktadır.

Bu problem yüzünden doğru olarak elde edilemeyen temel enerji değeri, hal yoğunluğu ve spin dağılım fonksiyonlarının hesaplanmasına engel olmaktadır. Proje sürecinde bu problemi elimine etmek amacıyla efektif bir yöntem geliştirilmiş ve sonuçları yayınlanmıştır. Bu yöntemin başarısı deneysel hal yoğunluğunun başarıyla türetilmesi ile gösterilmiş ve bu sayede projede ele alınan tek-çift samaryum ve neodimyum çekirdeklerinin de spin-kesinti parametrelerinin hesaplanması mümkün olmuştur.



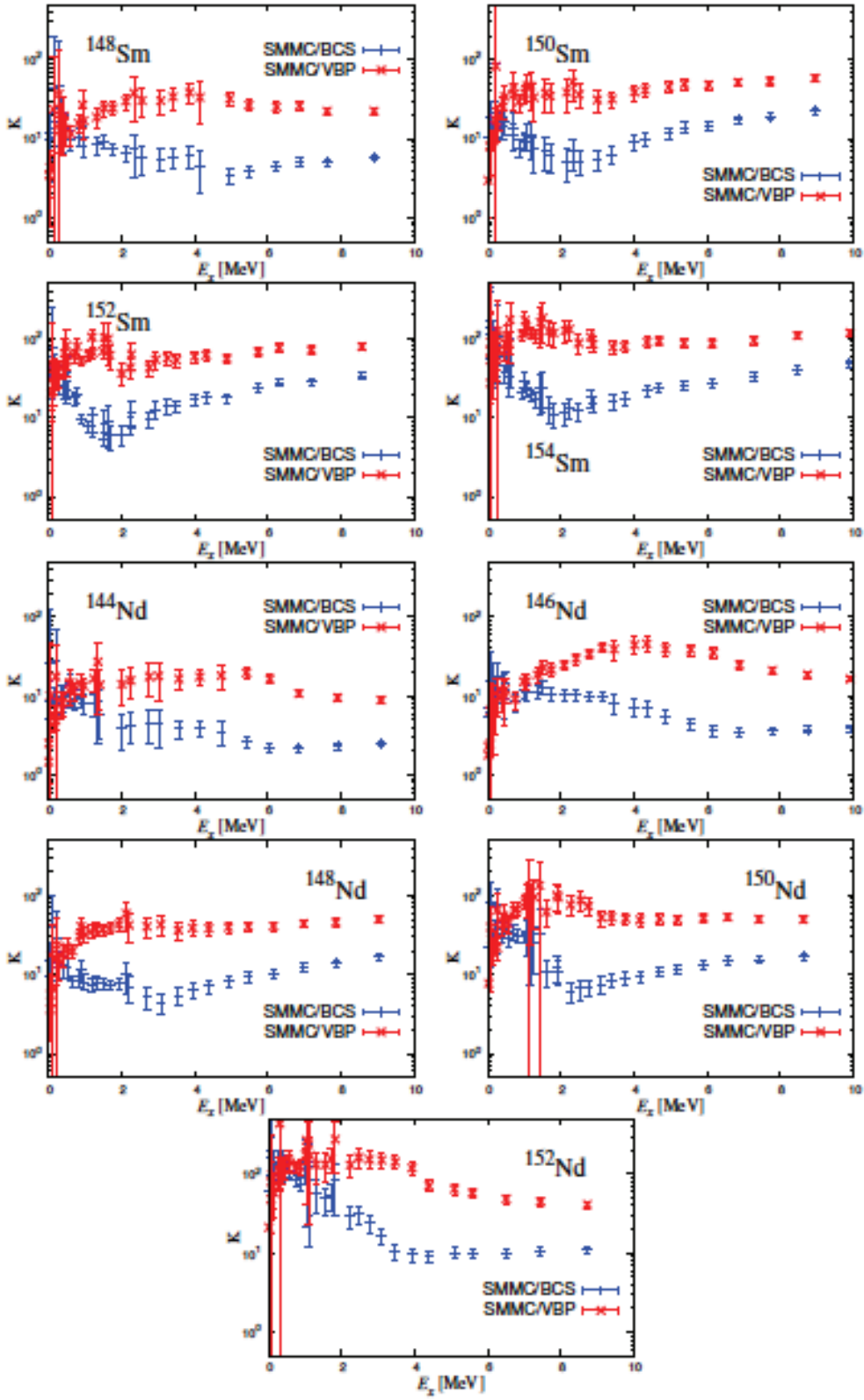
Şekil 11. Tek-çift neodimyum ve samaryum çekirdeklerinde toplam hal yoğunluğu

Uyarılmış nükleer seviyelerin dağılımında kabuk etkileri ve çiftlenim etkileşiminden kaynaklı etkiler yanında kolektif uyarım modları (vibrasyon ve rotasyon) da önemli bir yer tutmaktadır. Seviye (veya hal) yoğunluğu söz konusu olduğunda, tek-cisim türü uyarımları açıklayan ortalama-alan metodları (HFB gibi) olduğu halde kolektif uyarımlar hemen hemen her zaman fenomenolojik olarak ele alınmaktadır (Capote 09). Bunun temel sebebi, kolektif uyarımları mikroskopik prensiplerden yola çıkarak hesaba katmanın korrelasyon içinde olan çok-cisim hallerinin kombinatoryel sayılarından kaynaklı zorluktur (Ring ve Schuck, 1980). KMMC yönteminde kullanılan stokastik yaklaşım bu zorluğu aşmayı sağladığından, bu tür etkileri ele almak için KMMC yöntemi ideal bir yöntem sağlamaktadır.

Bu anlamda, yakın bir tarihte yapılan çalışmalarda (Özen vd. 2013; Alhassid vd. 2014) *kollektif artırım fonksiyonu* (KAF)

$$K(E) = \rho(E)/\rho_{HFB}(E) \quad (23)$$

Formülüyle tanımlanmıştır. Bu ifade, kollektif korelasyonları içermeyen ortalama-alan metodlarıyla (bu örnekte HFB) hesaplanmış seviye yoğunluğunun ($\rho_{HFB}(E)$) gerçel hal yoğunluğundan ($\rho(E)$) ne oranda eksik olduğunu gösterir. Ancak bu tanımlamada kullanılan HFB metodu, diğer ortalama-alan metodlarında olduğu gibi, belli bir simetrinin kırılmasına yol açar. Burada söz konusu olan simetri, parçacık sayısı korunumu olup, gerçekte çekirdeklerde korunan bir simetridir. Bu sebeple Formül 21'in bu simetrinin yeniden tesis edilerek ele alınması önem taşımaktadır. Bu bağlamda ortalama-alan seviye yoğunluğu, HFB yerine Prof. Nakada ekibinin geliştirdiği Parçacık-sayı projeksiyonlu BCS yöntemi ile hesaplanarak, proje yürütücüsü tarafından hesaplanan KMMC seviye yoğunluğu ile kıyaslanarak KAF yeniden elde edilmiştir (Nakada, H. vd., 2016). Bunun sonucunda KAF'ın vibrasyonel bileşenlerinin önceki sonuçlardan (Özen vd. 2013; Alhassid vd. 2014) daha yüksek enerjilere kadar varlığını koruyabildiği sonucu çıkarılmıştır. Şekil 12'de mavi sonuçlar parçacık-sayısını korumayan ortalama-alanca (BCS) tanımlanan KAF fonksiyonunu, kırmızı sonuçlar ise bu simetrinin tesisinden sonraki durumu göstermektedir.



Şekil 12. Kollektif Artırım Fonksiyonunda parçacık-sayısı simetrisinin etkisi.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Projede nikel, zirkonyum ve neodimyum-samaryum kütle bölgelerinde yer alan bir dizi çekirdek için etkileşimli nükleer kabuk modeli kullanılarak spin kesinti fonksiyonları hesaplanmıştır. Bu hesaplamalar bu model uzayları için özel olarak parametrize edilmiş efektif Hamiltonyenler kullanılarak, Kabuk Modeli Monte Carlo formalizminde gerçekleştirilmiştir.

Projede;

- 1) Spin-kesinti parametresinin enerji bağıllığının nükleer tablonun değişik kütle bölgelerinde yer alan çekirdekleri için hesaplanmıştır. Böylesine geniş kapsamlı bir mikroskopik çalışma bilgimiz dahilinde ilktir.
- 2) Literatürde yer alan ve pratik uygulamalarda sıkça kullanılan çeşitli formüller (Koning vd., 2008; von Egidy ve Bucurescu, 2009) elde ettiğimiz mikroskopik sonuçlarla kıyaslanarak geçerli oldukları kütle bölgeleri ve enerji aralıkları hakkında saptamalar yapılmıştır. Bu saptamalar da ilk kez bu formüllerin geçerliliği açısından geniş kapsamlı bir sınama imkanı sağlamıştır

Bu çalışmalar sonucunda Koning vd., 2008 yaklaşımının daha geniş bir enerji aralığında geçerli olduğu görülmektedir ve nükleer tablonun daha geniş kütle bölgelerine uygun olduğu görülmektedir.

Proje bu sonuçlar yanında tek sayıda nötron veya protona sahip çekirdeklerde temel enerji halinin ve spin kesinti parametresinin hesaplanmasını mümkün kılan bir de metod geliştirilmesini sağlamıştır. Bunun yanı sıra projede çekirdeklerin hal yoğunluğuna etkisi olan kolektif bileşenlerden vibrasyon modunun daha önceki çalışmalarda elde edilen bulgulardan farklı olarak yüksek enerjilere kadar bulunabildiğini göstermiştir.

Bu çalışmadan yola çıkarak daha ileriki yıllarda kapalı kabuk konfigürasyonuna sahip çekirdeklerle, yüksek deformasyona çekirdekler arasında spin kesinti parametresine etki eden sistematik farklılıkların ele alınmasının faydalı olacağı düşünülmektedir.

6. KAYNAKÇA

Alhassid, Y., vd. 2015a. "Recent Advances in the Application of the Shell Model Monte Carlo Approach to Nuclei", Journal of Physics: Conference Series 580, 012009

Alhassid, Y., vd. 2015b. "Microscopic nuclear level densities by the shell model Monte Carlo method", CERN-Proceedings-2015-001.

Alhassid, Y., vd. 2014. "Calculating Level Densities of Heavy Nuclei by the Shell Model Monte Carlo Method", Nucl. Data Sheets 118, 233.

Bethe, H.A., 1936. "An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus", Phys. Rev. 50, 332.

Bohr, A. ve Mottelson, R. 1998. Nuclear Structure, 1. Cilt. World Scientific.

Caurier E. vd., 2005. "The shell model as a unified view of nuclear structure", Rev. Mod. Phys. 77, 427.

Capote, R. vd., 2009. "RIPL, Reference Input Parameter Library for calculation of nuclear reactions and nuclear data evaluations", Nuclear Data Sheets, 110, 3107.

Dilg, W. vd., 1973. "Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range $40 < A < 250$ ", Nucl. Phys. A, 217, 269.

Ericson, T., 1960. "The statistical model and nuclear level densities", Adv. Phys. 9, 425.

Gilbert, A. ve Cameron, A.G.W., 1965. "A Composite Nuclear Level Density Formula with Shell Corrections", Can. J. Phys. 43, 1446.

Johnson, C.W., vd. 1992. "Monte Carlo methods for the nuclear shell model", Phys. Rev. Lett. 69, 3157.

Koning, A.J. vd., 2008. "Global and local level density models", Nucl. Phys. A 810, 13.

Koonin S.E. vd., 1997. "Shell model Monte Carlo methods", Phys. Rep. 278, 1.

Nakada, H., vd. 2016. "Persistence of Vibrational Collectivity in Nuclear Level Densities", EPJ Web of Conferences, dergiye gönderildi.

Özen, C., vd. 2013. "The crossover from vibrational to rotational collectivity in heavy nuclei in the shell-model Monte Carlo approach", Phys. Rev. Lett. 110, 042502.

Özen, C., vd. 2015. "Nuclear state densities of odd-mass nuclei in the shell model Monte Carlo approach", Phys. Rev. C 91, 034329.

Ring, S. ve Schuck 1980. S. The nuclear many-body problem. Springer-Verlag.

von Egidy, T. ve Bucurescu, D. 2009, "Experimental energy-dependent nuclear spin distributions", Phys. Rev. C 80, 054310.

**TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU**

Proje Yürütücüsü:	Doç. Dr. CEM ÖZEN
Proje No:	112T973
Proje Başlığı:	Nükleer Spin Dağılım Fonksiyonunun Mikroskopik Bir Yöntemle Hesaplanması
Proje Türü:	1001 - Araştırma
Proje Süresi:	30
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	KADİR HAS Ü. MÜHENDİSLİK VE DOĞA BİLİMLERİ F.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	15/05/2013 - 15/11/2015
Onaylanan Bütçe:	111915.0
Harcanan Bütçe:	76374.99
Öz:	<p>Nükleer seviyelerin spin dağılımının mikroskopik yöntemlerle hesaplanması korrelasyon etkileri göz önüne alındığında güç bir problem teşkil eder. Günümüzde bu dağılımların hesaplanması için geliştirilmiş yöntemler arasında en güçlü olanı Kabuk Modeli Monte Carlo (KMMC) yöntemidir. Ancak çok yüksek bir hesaplama gücüne gereksinim olması yüzünden bu yöntem büyük sayılarda çekirdek için bu tip tabloların oluşturulmasına elverişli değildir. Bu yüzden basitleştirilmiş modeller çoğu nükleer uygulama için hayati önem taşımaktadır.</p> <p>Nükleer seviye yoğunluğunun global parametrizasyonlarında sıkça kabul gören bir varsayım spin dağılımının spin-kesinti modeline uyduğudur. Bu modele göre çekirdeklerin spinleri. nükleon spinlerinin keyfi ve ilintisiz eşleşmesi ile vücutte gelmektedir. Spin-kesinti modeli. burdan hareketle. spin-kesinti parametresi olarak adlandırılan tek bir parametre ile karakterize edilir. Literatürde spin-kesinti parametresi için ortaya atılmış birkaç model bulunmaktadır. Bu projenin ana amacı bahsi geçen modellerin geçerliliğini test etmek üzere nükleer tablonun çeşitli kütle bölgelerinde KMMC hesaplamaları yapmak ve spin-kesinti parametresinin enerji bağılılığının sistematikini analiz etmektir. Proje aynı zamanda çok düşük uyarılma enerjilerinde büyük önem taşıyan korrelasyon ve kabuk etkilerinin spin-kesinti modelinin temel varsayımlarını ne derecede etkilediğini ve geçersiz kılıp kılmadığını irdeleyecektir.</p>
Anahtar Kelimeler:	nükleer yapı fiziği, spin dağılımı, seviye yoğunluğu, kabuk modeli, Monte Carlo
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Evet
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- Recent Advances in the Application of the Shell Model Monte Carlo Approach to Nuclei (Makale - Diğer Hakemli Makale), 2- Nuclear state densities of odd-mass heavy nuclei in the shell model Monte Carlo approach (Makale - Diğer Hakemli Makale),