

①

Self-Consistent Mean-Field Theories of the Nuclear Mass Table

G.F. Bertsch

Goal: accuracy and reliability for extrapolation
(density-functional theory and extensions?)

- inspiration from condensed matter
- how good is vanilla DFT+BCS?
- correlations
- experience with DFT/GCM(Q₀)

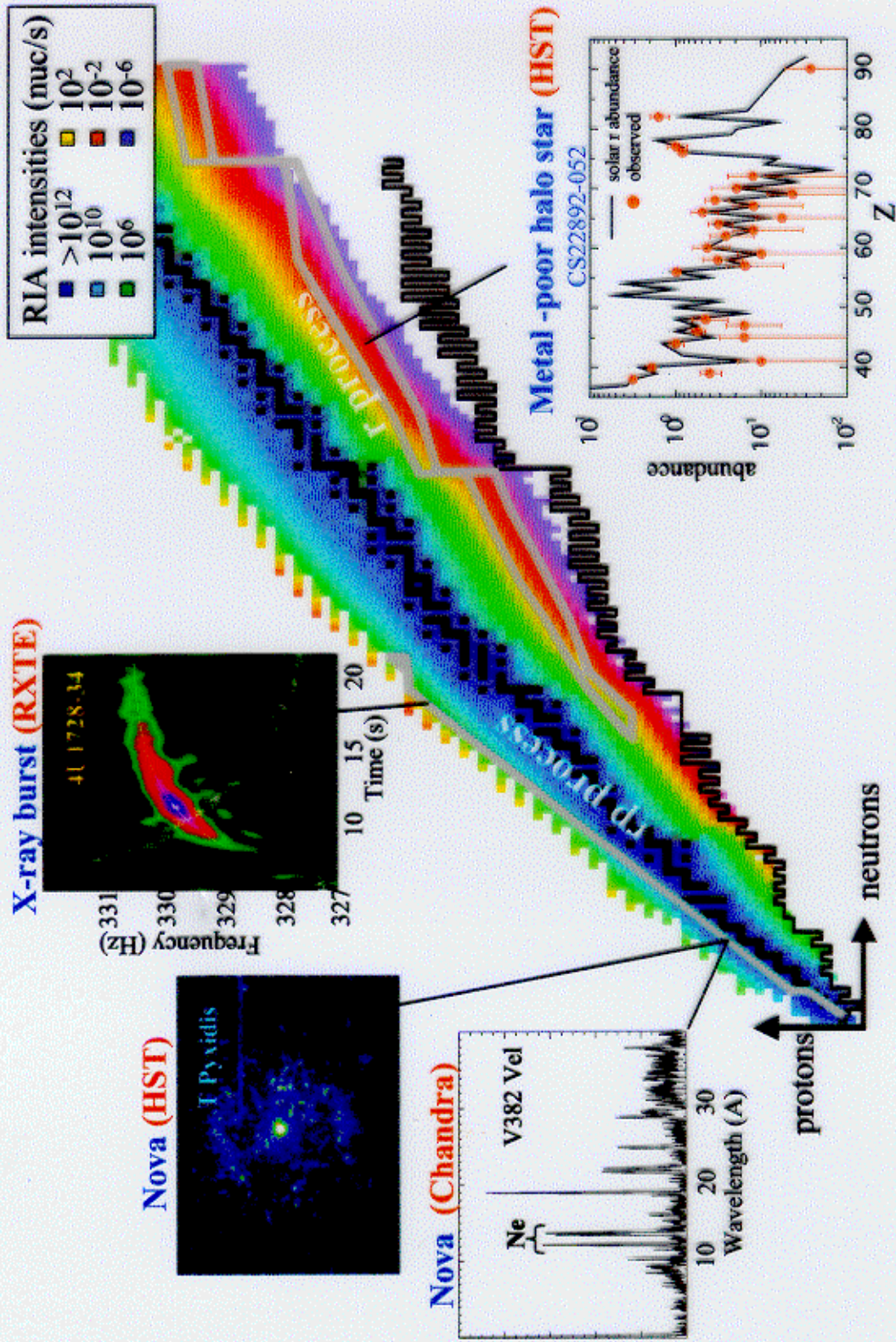
M. Bender, P.-H. Heenen

Some practical considerations in evaluating theories

- Chebyshev norm, an alternative to least squares
- perturbative refits.

Brian Sabbeq
Mika Uusmäkelä

Nuclear Astrophysics with RIA



Density-Functional Theory (Kohn-Sham) or Self-Consistent Mean-Field Theory

basic variables are orbitals $\{\phi\}$
minimize an energy functional of $\{\phi\}$

$$E = \sum_i \int d^3r \frac{\hbar^2 |\vec{\nabla} \phi_i|^2}{2m} + V(\{\phi_i\}) \quad (\text{without BCS})$$

program "ev8.f"

GCM

① minimize $E - \lambda Q$ for selected values of λ

② construct Slater determinants of the orbital sets $\{\phi\}_\lambda$. $|\lambda\rangle = A \prod \phi_i$

③ treat E as a Hamiltonian $H \equiv E$ and minimize

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

where $|\psi\rangle$ is a linear combination of $|\lambda\rangle$

Atomization Energy of selected molecules

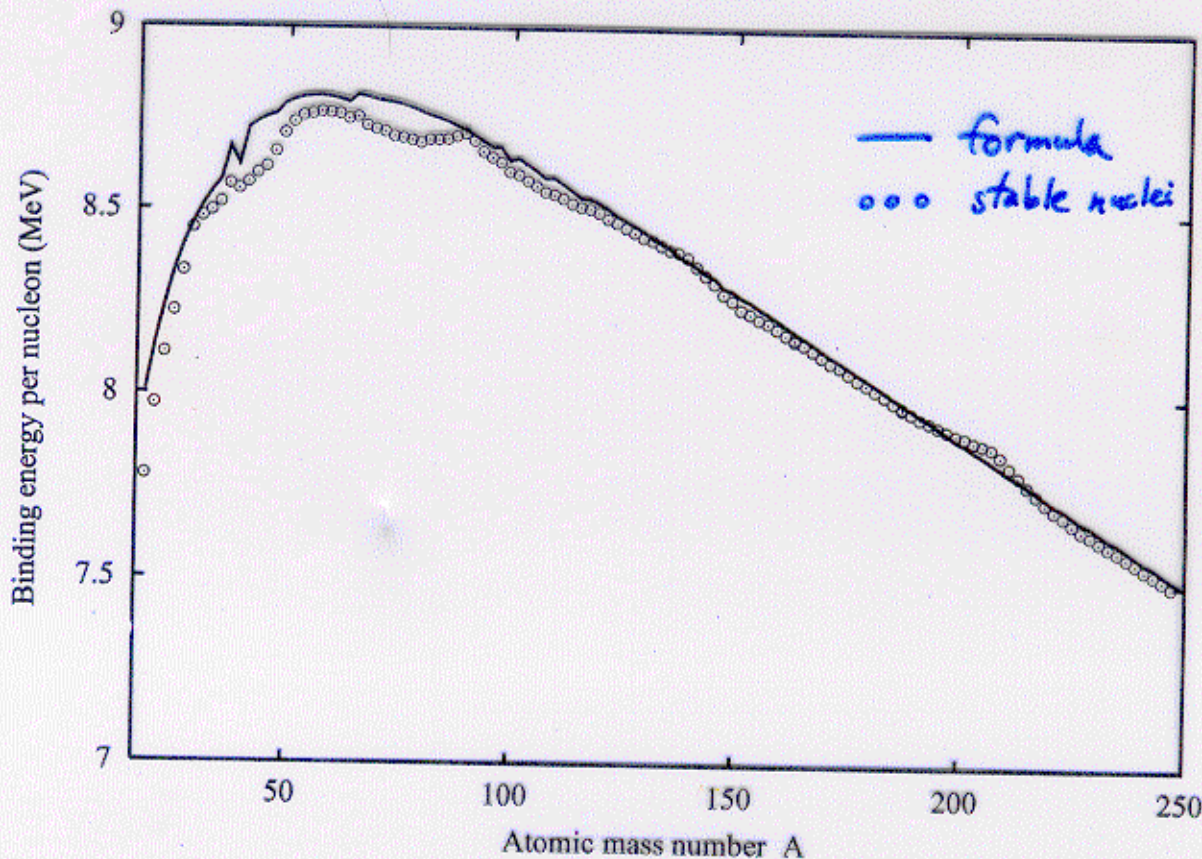
<u>Theory</u>	<u>mean absolute error</u>
Hartree-Fock	3.1 eV
LDA	1.4
GGA	0.35
γ	0.13

J. Perdew, et al. Phys. Rev. Lett. 82 2544 (1999)

Nuclear Binding Energies by the Bethe-Weizsäcker formula

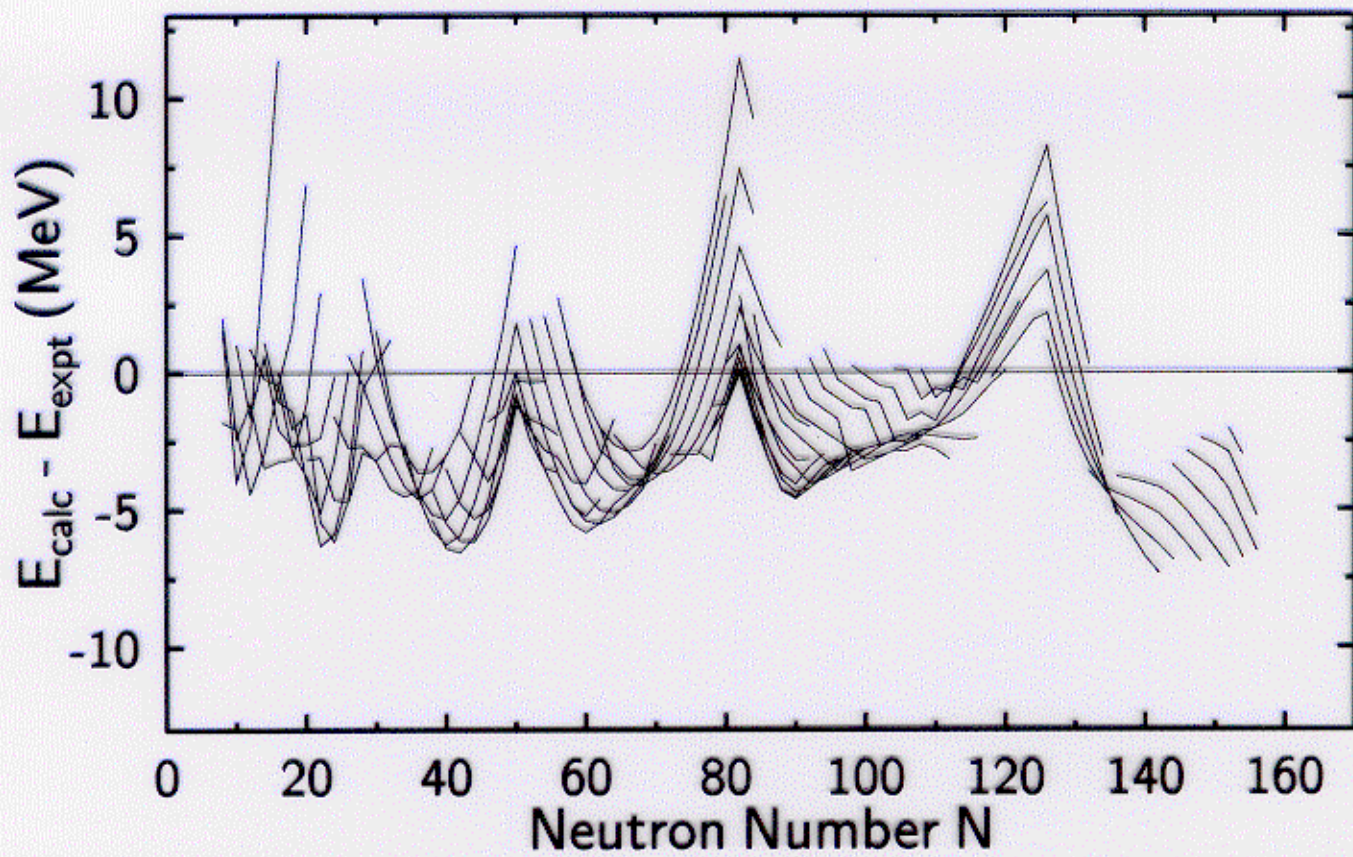
$$B = a_v A + a_s A^{2/3} + a_c \frac{(N-Z)^2}{A} + a_e \frac{Z^2}{A^{1/2}} + \begin{cases} \Delta & e-e \\ 0 & e-o \\ -\Delta & o-o \end{cases}$$

$$\Delta = \frac{a_p}{A^{1/2}}$$



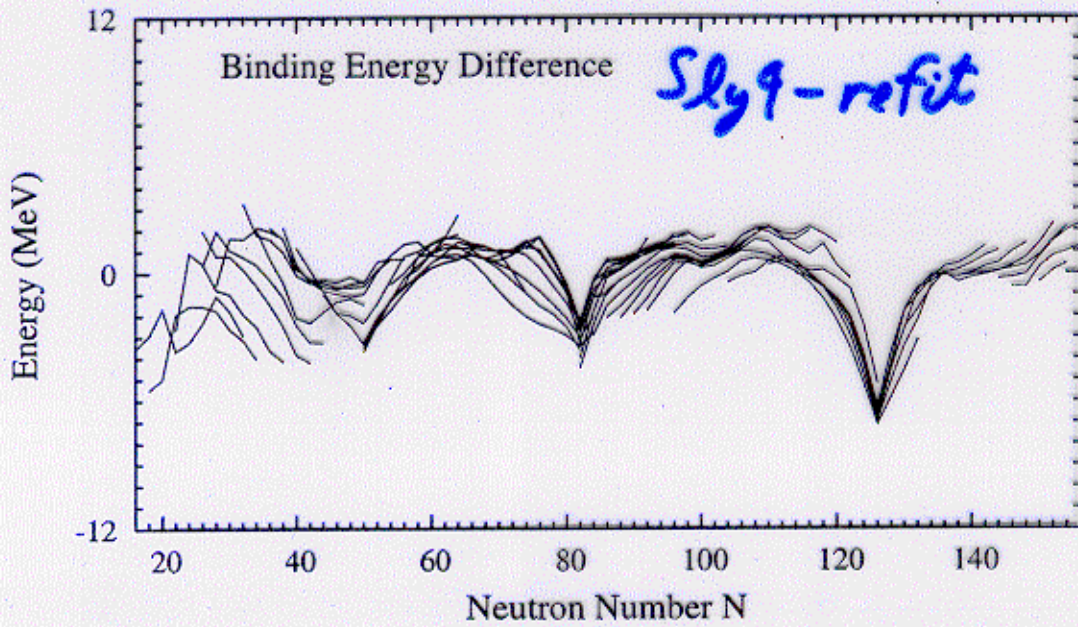
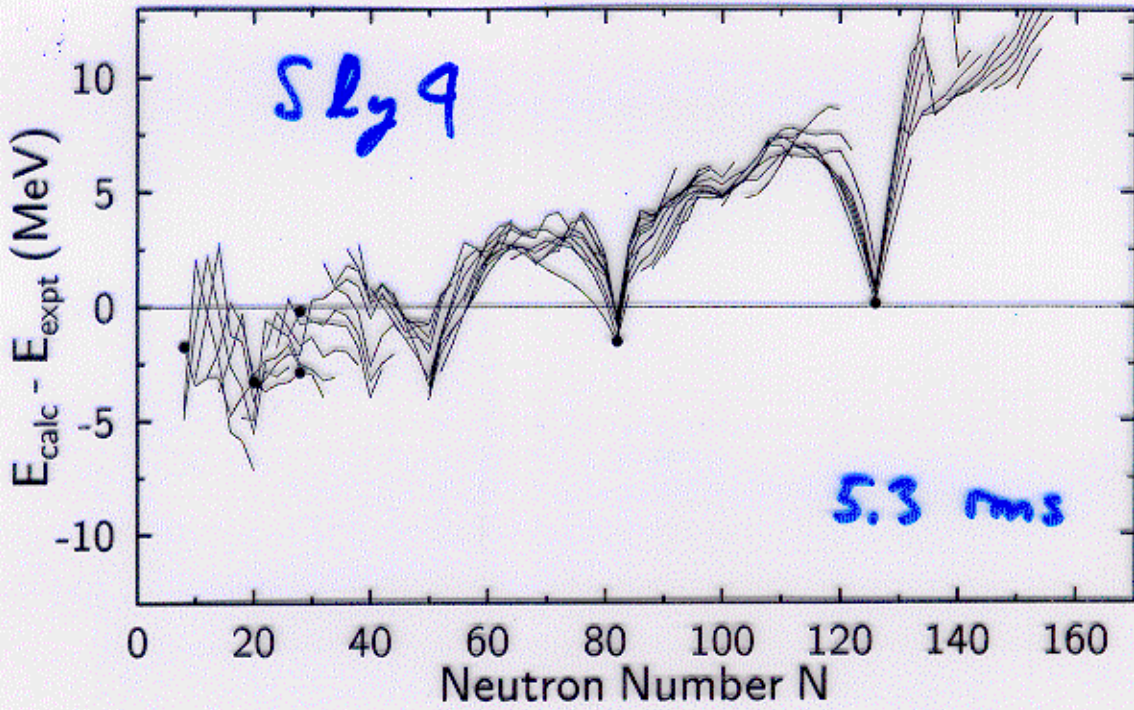
6 parameters

3 MeV r.m.s. error.



Liquid Drop Residuals

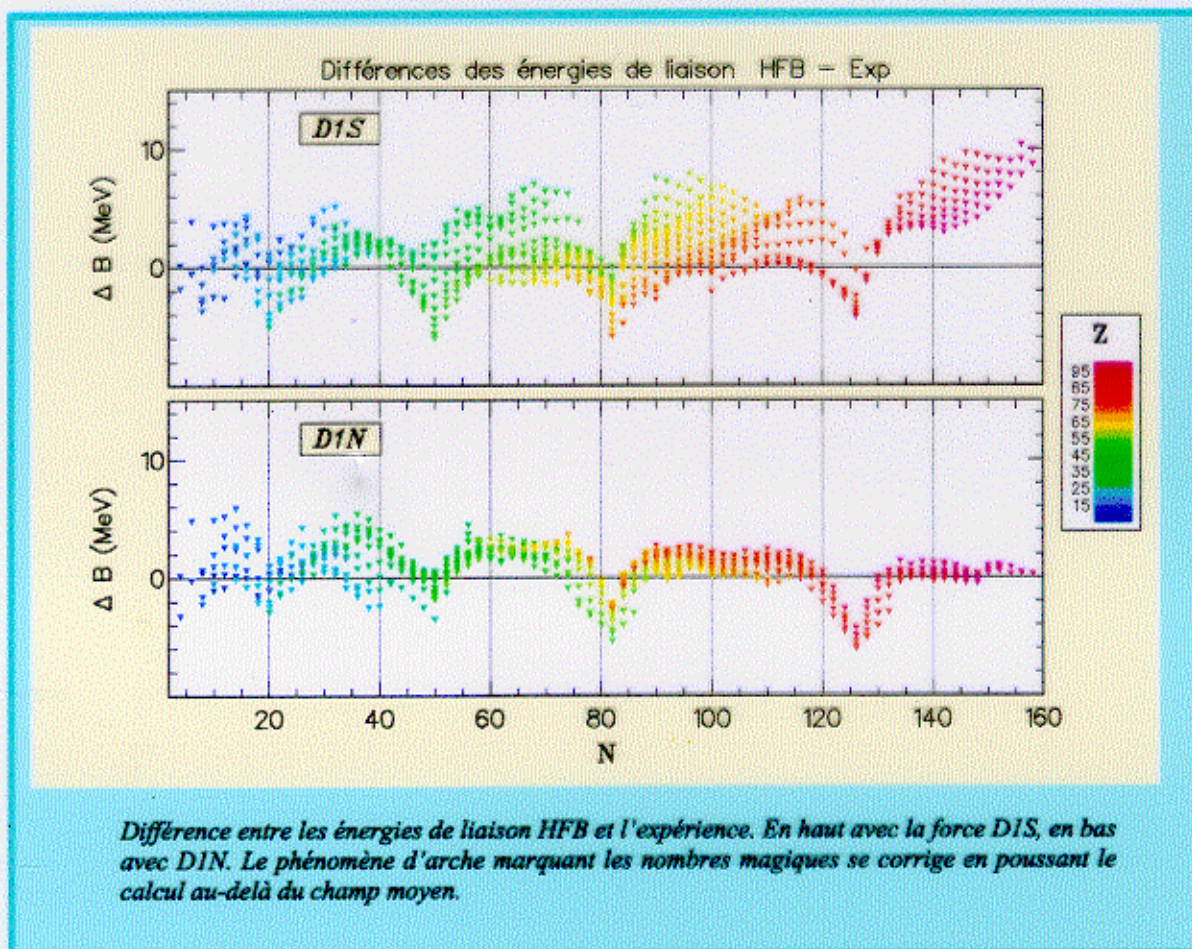
Skyrme residuals



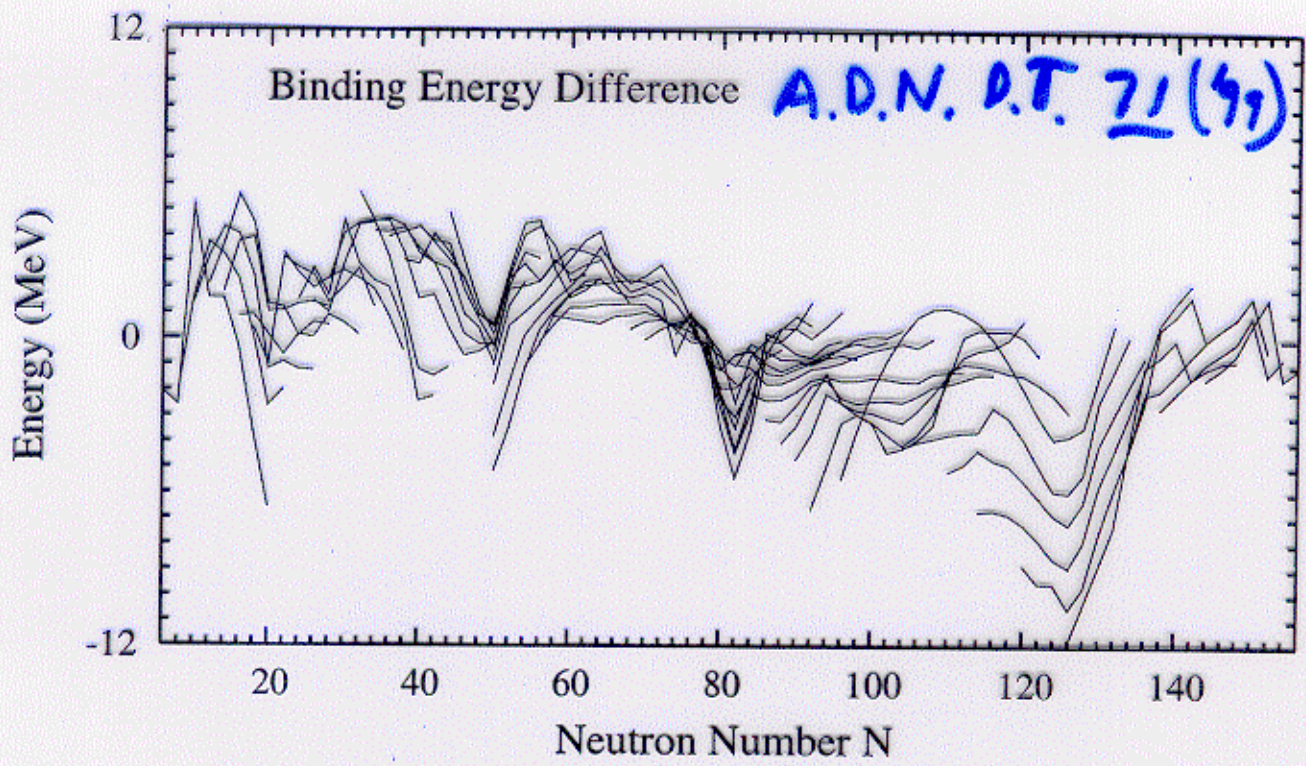
deux défauts et principalement le deuxième qui peut avoir des conséquences importantes dans la description des noyaux : une énergie de 2 MeV par particule peut conduire à des sous estimations de l'énergie de liaison de plus de 10 MeV dans des noyaux lourds.

Nous avons réussi à mettre au point une nouvelle force qui a un bon comportement à haute et basse densité dans la matière neutronique tout en gardant les bonnes caractéristiques de DIS. Les tests sont en cours concernant les rayons des noyaux, leur spectroscopie et même le comportement de cette nouvelle force dans un calcul de super-nova. Les résultats déjà obtenus montrent que cette force est au moins aussi bonne que DIS dans tous les domaines mais surtout spectaculairement meilleure pour les énergies de liaisons des noyaux. Ce résultat était non recherché. Il apparaît clairement aujourd'hui que le défaut d'énergie de liaison constaté surtout dans les noyaux riches en neutrons avec les forces effectives, et en particulier avec la force de Gogny, était essentiellement dû à une surestimation de l'énergie dans la matière neutronique. La figure illustre ce résultat : elle montre les différences d'énergie de liaison, de tous les noyaux pair-pair connus expérimentalement, entre la valeur obtenue par un calcul HFB en symétrie axiale et la valeur expérimentale (en haut avec la force DIS, en bas avec la nouvelle force appelée DIN).

Ce travail va continuer en testant cette nouvelle force et éventuellement en essayant de l'améliorer. Un travail plus fondamental consistera non pas à trouver de nouveaux paramètres mais à étudier une nouvelle paramétrisation (voir page 71).



RMF residuals

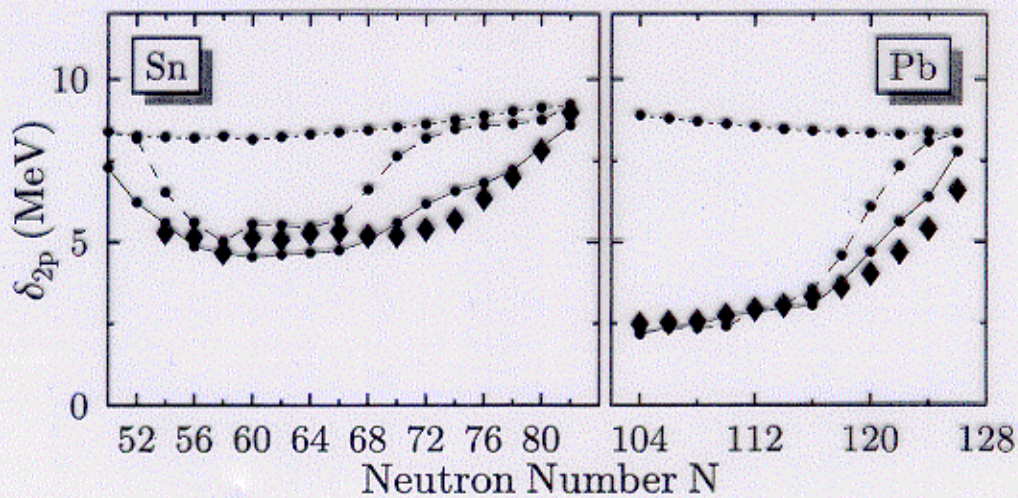


Theory	r.m.s. (MeV)	C-norm (MeV)	overbound critical nuclei underbound critical nuclei
Liquid drop	2.9	8.4	$^{40}\text{Ar}, ^{73}\text{As}, ^{76}\text{Se}, ^{229}\text{Fr}$ $^{102}\text{Sn}, ^{132}\text{Sn}$
Sly4 refit	1.7	4.7	$^{28}\text{Ne}, ^{208}\text{Pb}$ $^{28}\text{Si}, ^{64}\text{Ge}, ^{254}\text{Cf}$
BSk4 refit	1.5	3.8	$^{40}\text{Ti}, ^{98}\text{Cd}, ^{208}\text{Pb}$ $^{76}\text{Sr}, ^{102}\text{Sr}$
SkP refit	1.6	4.7	$^{28}\text{Ne}, ^{104}\text{Sn}, ^{178}\text{Pb}$ $^{24}\text{Mg}, ^{250}\text{Cm}$

} e-e only

- DFT is a factor of two better than the liquid drop model
- DFT overbinds magic nuclei (LD is opposite)
- Problem of mutually enhanced magicity

$$\delta_{2p} = E(N, Z-2) - 2E(N, Z) + E(N, Z+2)$$



Other theory:

S. Baroni, et al. nucl-th/0404019

P. Fleischer, et al., nucl-th/0408032

Correlations

Practical DFT fails for long-range correlations.

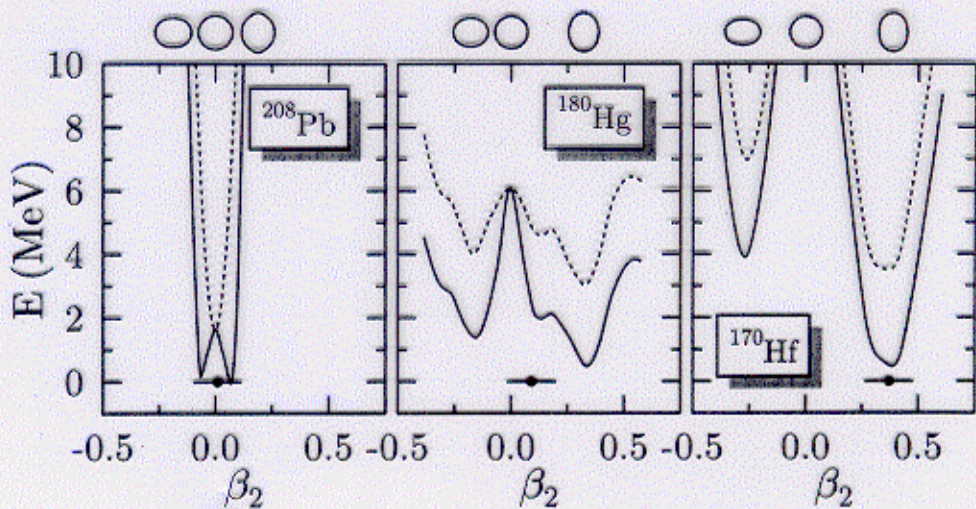
Examples	broken symmetry?
c.m. kinetic	translational
rotational energy	rotational
van der Waals	-

Possible extensions of self-consistent mean-field theory:

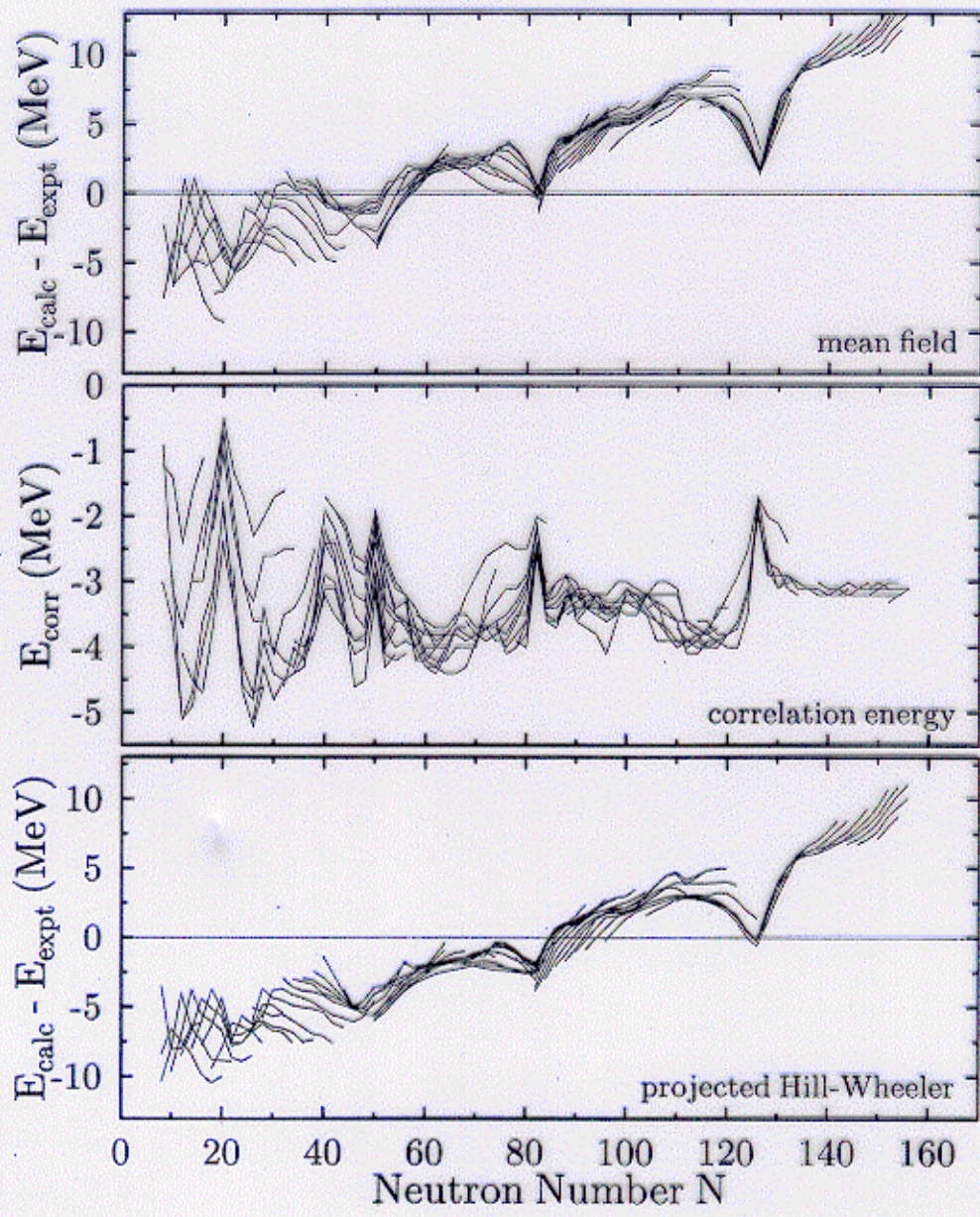
	advantages	disadvantages
RPA	exact for simple models	badly convergent in practice [1]
Projection	relatively easy	dependent on a broken symmetry
GCM*	systematic variational	misses significant degrees of freedom

* Generator coordinate method

[1] I. Stetcu and C. Johnson, Phys. Rev. C66 034301 (2002).



Nucleus	E_{def}	$E_{J=0}$	E_{Hw}	E_{corr}
^{208}Pb	0.0	-1.7	0.0	-1.7
^{180}Hg	-3.0	-2.5	-0.5	-3.1
^{170}Hf	-12.2	-2.9	-0.4	-3.4



Chebyshev norm

C the parameters c_1, c_2, \dots, c_N

$\{A\}$ the nuclei

$$r_A = E_A^{\text{theory}} - E_A^{\text{exp}} \quad \text{the residual}$$

$$\epsilon = \min_C \left(\max_A |r_A| \right)$$

also called minimax fit.

Output of a fit:

C fitted parameters

ϵ the Chebyshev norm

$\{A: |r_A| = \epsilon\}$ set of critical nuclei

For N parameters there are $N+1$ nuclei
in the critical set.

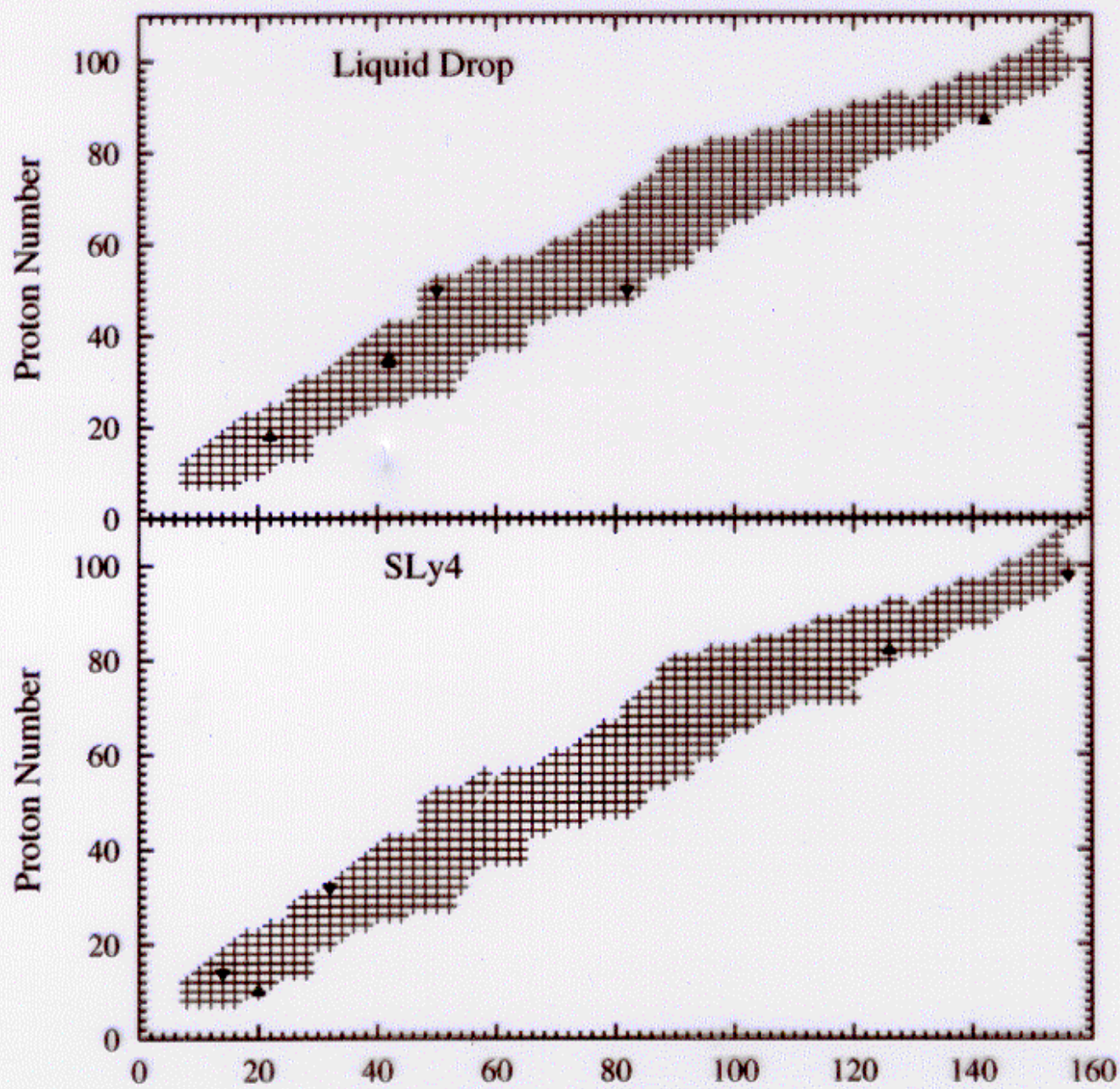


TABLE III: Testing possible improvements of theory, starting from the SCMF with the SLy4 interaction. The putative improvement is calculated on the set of critical nuclei from Table II augmented if needed due to an additional parameter.

Theory	C-norm (MeV)	added nucleus	max. Δc %
Baseline	4.8		
J projection	3.9		9
v_{tensor}	3.6	^{40}Ti	161