

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»

УДК 539.17

ОТЧЁТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
**ПЛОТНОСТЬ ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ
АТОМНЫХ ЯДЕР**

Студент _____ Л. Е. Трофимов

Научный руководитель
д.ф-м.н., проф. _____ А. Л. Барабанов

Москва 2022

Содержание

Введение	3
1 Аналитическая формула плотности возбуждённых состояний	4
1.1 Прямое преобразования Лапласа	4
1.2 Метод перевала	6
1.3 Обратное преобразование Лапласа	7
1.4 Используемые приближения	8
1.4.1 Замена $g(E)$ гладкой функцией	8
1.4.2 Пренебрежение производными от функции g .	9
1.4.3 Использование метода перевала при вычислении обратного преобразования Лапласа	9
2 Принцип работы алгоритма перебора многочастичных состояний для подсистемы	9
2.1 Алгоритм полного перебора	9
2.2 Алгоритм через числа сочетаний	10
2.3 Преимущества и недостатки двух алгоритмов	12
2.4 Получение количества многочастичных состояний <u>системы</u> из количества многочастичных состояний <u>подсистемы</u>	12
3 Модель прямоугольной ямы конечной глубины	13
3.1 Описание модели	13
3.2 Моделирование многочастичных состояний	14
4 Модель одномерного гармонического осциллятора	15
4.1 Моделирование одномерного осциллятора	15
4.2 Ограничения аналитической формулы	17
5 Модель трёхмерного гармонического осциллятора	18
5.1 Моделирование многочастичных состояний	19
6 Заключение	20
6.1 Планы на будущее	20
Список литературы	21

Введение

Атомное ядро можно рассматривать как систему, состоящую из двух подсистем — нейтронной и протонной, которые находятся в некоторой потенциальной яме. В данной работе эти подсистемы предполагаются невзаимодействующими друг с другом.

Нуклоны в атомных ядрах можно описываются при помощи квантовых чисел. Так, в прямоугольной потенциальной яме энергии одночастичных состояний описываются формулой $E_{ijk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} (i^2 + j^2 + k^2)$, где (i, j, k) , а также проекция спина s_z на ось z являются квантовыми числами, однозначно определяющими эти состояния.

Поясним, что такое «одночастичное состояние» и «многочастичное состояние». Пусть мы упорядочили нуклоны в ядре некоторым образом (например, по энергии). «Изобразим» систему в основном состоянии: $\{\bullet\bullet\bullet\cdots\bullet\circ\circ\circ\dots\circ\dots\}$

Здесь \bullet и \circ означают заполненное (есть частица) и незаполненное (нет частицы) одночастичные состояния соответственно. Многочастичным состоянием $\{\dots\}$ называется комбинация одночастичных состояний. Ядра могут находиться в «возбуждённых многочастичных состояниях»: $\{\bullet\bullet\circ\bullet\bullet\dots\circ\bullet\circ\circ\circ\dots\}$.

В статье [1] ядерные реакции поясняются рисунком 1. Образуются ядра с большими энергиями возбуждения, затем эта энергия высвобождается порциями, при этом ядро оказывается в одном из множества возможных возбуждённых состояний. Чем больше определённых возбуждённых состояний, тем более вероятен переход именно в них, поэтому важно понимать распределение плотности состояний возбуждённых ядер.

В статье [2] приводится аналитическая формула для плотности возбуждённых состояний

$$\omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{\exp[2\sqrt{aU}]}{a^{1/4}U^{5/4}} \quad (1)$$

Здесь U — энергия возбуждения, a — параметр плотности. Получение этой формулы описано далее.

Существуют три способа посчитать плотность многочастичных состояний: аналитическая формула Бете для ферми-газа (1), прямое вычисление многочастичных состояний и комбинаторный метод [3]. Нас будут интересовать 1 и 3 метода.

Целью работы является получение аналитической формулы, построение алгоритмов перебора, моделирование возбуждённых состояний атомных ядер при помощи различных моделей одночастичных спектров:

- Модель прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины.
- Модель линейного гармонического осциллятора.
- Модель изотропного (трёхмерного) гармонического осциллятора.

Проведение сравнения результатов для различных спектров одночастичных состояний с аналитической формулой; сравнение параметра плотности a ; выявление ограничений на аналитическую формулу, где она не применима.

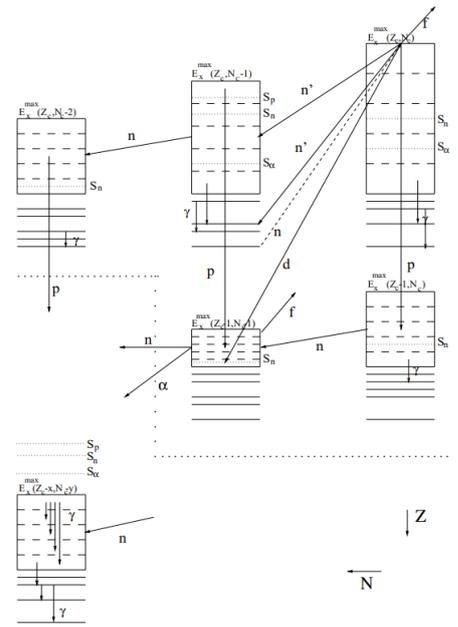


Рисунок 1 — Иллюстрация возможных путей распада из [1]

1 Аналитическая формула плотности возбуждённых состояний

Здесь приводятся рассуждения, аналогичные [4, 5]. Целью является получение некоторой формулы, отражающей зависимость плотности возбуждённых состояний атомных ядер, а именно:

$$\omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{\exp[2\sqrt{aU}]}{a^{1/4}U^{5/4}},$$

где U — энергия возбуждения, a — параметр плотности многочастичных состояний, равный $a = \frac{\pi^2}{6}g(E_F)$, где $g(E_F)$ — плотность состояний вблизи энергии Ферми.

1.1 Прямое преобразования Лапласа

Определим плотность состояний системы как

$$\omega(A, E) = \sum_i \delta(A - n_i)\delta(E - E_i), \quad n_i = \sum_k n_k(i), \quad E_i = \sum_k n_k(i)E(k) \quad (2)$$

Здесь под буквой i подразумевается состояние $|i\rangle$ системы. $n_k(i)$ — числа заполнения; для ферми-частиц эти числа равны 0 или 1 в зависимости от i . Каждому состоянию соответствует своя уникальная комбинация $n_k(i)$. k — счётчик состояний.

Для вычисления $\omega(E)$ используются прямое и обратное преобразования Лапласа:

$$F(p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt, \quad f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{p'-i\infty}^{p'+i\infty} F(p) e^{pt} dp$$

Пусть $Q(\alpha, \beta)$ — результат преобразования Лапласа:

$$Q(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} dE \int_0^{\infty} dA e^{-\beta E + \alpha A} \omega(A, E) \quad (3)$$

Тогда обратное преобразование Лапласа $\omega(A, E)$ будет равно

$$\omega(A, E) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \int_{\alpha'-i\infty}^{\alpha'+i\infty} d\alpha Q e^{\beta E} e^{-\alpha A} = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \int_{\alpha'-i\infty}^{\alpha'+i\infty} d\alpha e^{S(\beta, \alpha)}, \quad (4)$$

где $S(\beta, \alpha) = \beta E - \alpha A + \ln Q(\beta, \alpha)$.

Приведём $Q(\alpha, \beta)$ к более удобному для вычислений виду. Подставляя (2) в (3), $Q(\alpha, \beta)$ получаем выражение для $Q(\alpha, \beta)$:

$$\begin{aligned} Q(\alpha, \beta) &= \int_0^{\infty} dE \int_0^{\infty} dA e^{\alpha A - \beta E} \sum_i \delta(A - n_i)\delta(E - E_i) = \sum_i e^{\alpha n_i - \beta E_i} = \\ &= \sum_i \exp \left[-\beta \sum_k (E_k - \lambda) n_k(i) \right] = \sum_i e^{-\beta(E_1 - \lambda) n_1(i)} \dots e^{-\beta(E_k - \lambda) n_k(i)} \dots \end{aligned}$$

Здесь $\lambda = \frac{\alpha}{\beta}$. В силу принципа Паули для ферми-частиц $n_k(i)$ может быть либо 0, либо 1. Сумма производится по всем возможным состояниям. Тогда $Q(\alpha, \beta)$ равно

$$Q(\alpha, \beta) = \sum_i \exp \left[-\beta \sum_k (E(k) - \lambda) n_k(i) \right] = \left(1 + \exp[-\beta(E_1 - \lambda)] \right) \cdot \left(1 + \exp[-\beta(E_2 - \lambda)] \right) \cdot \dots \\ \dots \cdot \left(1 + \exp[-\beta(E_k - \lambda)] \right) = \prod_k \left(1 + \exp[-\beta(E(k) - \lambda)] \right)$$

В каждой скобке есть два слагаемых: 1 отвечает за отсутствие частицы ($n_k(i) = 0$), а $\exp[-\beta(E_k - \lambda)]$ соответствует наличию частицы в данном состоянии. Частица либо есть, либо её нет. Затем логарифмируем полученное выражение, вводим плотность одночастичных состояний $g(E)$:

$$\ln(Q(\alpha, \beta)) = \sum_k \ln(1 + \exp[\alpha - \beta E_i]) \approx \int_0^{\infty} g(E) \ln(1 + \exp[\alpha - E]) dE = \\ = \int_0^{\alpha/\beta} g(E) \ln(1 + \exp[\alpha - \beta E]) dE + \int_{\alpha/\beta}^{\infty} g(E) \ln(1 + \exp[\alpha - \beta E]) dE = \\ = \int_0^{\alpha/\beta} g(E) \ln \left(e^{\alpha - \beta E} \cdot (1 + e^{-\alpha + \beta E}) \right) dE + \int_{\alpha/\beta}^{\infty} g(E) \ln(1 + e^{\alpha - \beta E}) dE = \\ = \underbrace{\int_0^{\alpha/\beta} g(E) (\alpha - \beta E) dE}_{(1)} + \underbrace{\int_0^{\alpha/\beta} g(E) \ln(1 + e^{-\alpha + \beta E}) dE}_{(2)} + \underbrace{\int_{\alpha/\beta}^{\infty} g(E) \ln(1 + e^{\alpha - \beta E}) dE}_{(3)}$$

Производим замену переменных в (2): $-\alpha + \beta E = -\beta x$, $E = \frac{\alpha}{\beta} - x$. Делаем похожую замену в (3): $\alpha - \beta E = -\beta x$, $E = \frac{\alpha}{\beta} + x$. Полагая $g(E) = 0$ при $E < 0$, можно представить интегралы (2) и (3) в виде

$$(2) + (3) = \int_{\alpha/\beta}^0 g \left(\frac{\alpha}{\beta} - x \right) \cdot \ln(1 + e^{-\beta x}) d(-x) + \int_0^{\infty} g \left(\frac{\alpha}{\beta} + x \right) \cdot \ln(1 + e^{-\beta x}) dx = \\ = \int_0^{\infty} \left[g \left(\frac{\alpha}{\beta} + x \right) + g \left(\frac{\alpha}{\beta} - x \right) \right] \ln(1 + e^{-\beta x}) dx \quad (5)$$

Величина логарифма практически равна нулю вне интервала $\sim 1/\beta$ в окрестности $x = 0$. Если $1/\beta \gg E_k - E_{k-1}$, то функция плотности g является довольно гладкой для интегрирования. К тому же, если интервал $1/\beta \ll$ характерного расстояния, на котором меняется g , то можно разложить g в ряд по x и почленно проинтегрировать: $g \left(\frac{\alpha}{\beta} + x \right) \approx g \left(\frac{\alpha}{\beta} \right) + g' \left(\frac{\alpha}{\beta} \right) \cdot x + \frac{1}{2} g'' \left(\frac{\alpha}{\beta} \right) \cdot x^2$, $g \left(\frac{\alpha}{\beta} - x \right) \approx g \left(\frac{\alpha}{\beta} \right) - g' \left(\frac{\alpha}{\beta} \right) \cdot x + \frac{1}{2} g'' \left(\frac{\alpha}{\beta} \right) \cdot x^2$

$$\ln(Q(\alpha, \beta)) \approx \int_0^{\alpha/\beta} g(E)(\alpha - \beta E) dE + 2g\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \int_0^{\infty} \ln(1 + e^{-\beta x}) dx + \\ + g''\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \int_0^{\infty} x^2 \ln(1 + e^{-\beta x}) dx \quad (6)$$

Интеграл $\int_0^{\infty} \ln(1 + e^{-\beta x}) dx = \frac{\pi^2}{12}$. В дальнейшем мы будем пренебрегать членами, содержащими производные от g .

Теперь, когда получено приближённое значения для $Q(\alpha, \beta)$, можно выполнить обратное преобразование Лапласа (4):

$$\omega(A, E) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \int_{\alpha'-i\infty}^{\alpha'+i\infty} d\alpha Q(\alpha, \beta) e^{\beta E} e^{-\alpha A} = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\beta'-i\infty}^{\beta'+i\infty} d\beta \int_{\alpha'-i\infty}^{\alpha'+i\infty} d\alpha e^{S(\beta, \alpha)} \quad (7)$$

Далее следует произвести разложение функции $S(\alpha, \beta)$ в окрестности некоторой точки, чтобы найти приближённое значение для $\omega(A, E)$. Обоснование такого разложения описывается «методом перевала».

1.2 Метод перевала

Пусть имеется некоторая функция вида $F(\lambda) = \int_C f(z) e^{\lambda S(z)} dz$.

$S(z) \in C(a, b) : \exists! z_0 : S'(z_0) = 0, S''(z_0) \neq 0$.

Тогда $F(\lambda) \xrightarrow[\lambda \in \mathbb{R}]{\lambda \rightarrow +\infty} f(z_0) \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda |S''(z_0)|}} \cdot e^{\lambda S(z_0)} e^{i\varphi_m}$, где $\varphi_m = \frac{\pi - \theta}{2} + m\pi$, $\theta = \arg(S''(z_0))$

Для доказательства рассмотрим сначала действительную функцию

$\Phi(\lambda) = \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda h(x)} dx$, $h(x) \in C^1(a, b) : \exists! x_0 : h'(x_0) = 0, h''(x_0) < 0$. Вблизи точки x_0

можно разложить функцию $h(x)$ как $h(x_0) + \frac{1}{2} h''(x_0)(x - x_0)^2$ и положить $\varphi(x) \approx \varphi(x_0)$. Здесь нет слагаемого с $h'(x_0)$, поскольку в x_0 оно равно нулю по условию.

Введём функцию $H(\lambda, x) \stackrel{def}{=} \exp[\lambda(h(x) - h(x_0))]$. При $\lambda \gg 1$ эта функция будет выглядеть как очень резкий пик с центром в точке x_0 , значение $H(\lambda, x_0) = 1$. Значение интеграла набирается именно около этой точки. Вне окрестности $(x_0 - \delta, x_0 + \delta)$ $H(\lambda, x)$ будет мало. Тогда можно преобразовать $\Phi(\lambda)$:

$$\Phi(\lambda) = \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda h(x)} dx = \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda(h(x) - h(x_0))} e^{\lambda h(x_0)} dx \approx \\ \approx \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} \varphi(x_0) \exp\left(\lambda h(x_0) + \frac{1}{2} \lambda h''(x_0)(x - x_0)^2 - \lambda h(x_0)\right) e^{\lambda h(x_0)} dx = \\ = \varphi(x_0) e^{\lambda h(x_0)} \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} \underbrace{\exp\left(\frac{1}{2} \lambda h''(x_0)(x - x_0)^2\right)}_{-\frac{t^2}{2}} dx \ominus$$

$$t = \sqrt{-\lambda h''(x_0)(x-x_0)^2} = \sqrt{-\lambda h''(x_0)} \cdot (x-x_0), \quad dx = \frac{dt}{\sqrt{-\lambda h''(x_0)}}$$

$$\ominus \frac{\varphi(x_0)e^{\lambda h(x_0)}}{\sqrt{-\lambda h''(x_0)}} \underbrace{\int_{-\delta\sqrt{-\lambda h''(x_0)}}^{+\delta\sqrt{-\lambda h''(x_0)}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt}_{\xrightarrow{\lambda \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{t^2}{2}} dt = \sqrt{2\pi}} \rightarrow \varphi(x_0)e^{\lambda h(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{-\lambda h''(x_0)}}$$

Теперь рассмотрим наш случай: $z = x + iy$, $S(z) = u(x,y) + iv(x,y)$. Здесь S полагается аналитической функцией. Тогда можно записать условие Коши-Римана:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} \quad \text{или} \quad \begin{cases} \partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2 = 0 \\ \partial^2 v / \partial x^2 + \partial^2 v / \partial y^2 = 0 \end{cases}$$

Поскольку $S''(z_0)$ по условию $\neq 0$, то если $\partial^2 u / \partial x^2 > 0$, будет $\partial^2 u / \partial y^2 < 0$. То же самое для функции v . Получается, в окрестности z_0 нет ни максимума, ни экстремума; есть только точка перегиба. Поэтому эта точка называется «седловой точкой». Функции u и v имеют вид гиперболического параболоида.

Для доказательства сперва надо отметить, что по теореме Коши интеграл от аналитической функции не зависит от пути интегрирования, а определяется только начальной z_1 и конечной z_2 точками кривой C , которую выбираем удобным образом: пусть $\text{Re}(S)$ убывает наиболее быстро, а $\text{Im}(S) = \text{const}$.

$$\text{В окрестности } z_0 \text{ будет } S(z) \approx S(z_0) + \underbrace{\frac{1}{2} S''(z_0)}_{r e^{i\theta}} \underbrace{(z - z_0)^2}_{\rho e^{i\varphi}} = S(z_0) + r \rho^2 e^{i(\theta+2\varphi)}.$$

$$\text{Получаем } \begin{cases} u(x,y) = u(x_0,y_0) + r \rho^2 \cos(\theta + 2\varphi) \\ v(x,y) = v(x_0,y_0) + r \rho^2 \sin(\theta + 2\varphi) \end{cases}$$

Отсюда видно, что линия наибыстрейшего спада $\text{Re}(S)$ определяется $\cos(\theta + 2\varphi) = -1$, $\varphi_1 = \frac{\pi - \theta}{2}$. Этому условию удовлетворяют также углы $\varphi_m = \varphi_1 + \pi m$, $m \in \mathbb{Z}$. Заодно получается, что $\sin(\theta + \varphi_m) = 0 \implies v(x,y) = v(x_0, y_0) = \text{const}$, что гарантирует отсутствие осцилляций.

Продельвая рассуждения для $F(\lambda)$, аналогичные описанным ранее для $\Phi(\lambda)$, получаем:

$$F(\lambda) \xrightarrow[\lambda \in \mathbb{R}]{\lambda \rightarrow +\infty} f(z_0) \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda |S''(z_0)|}} \cdot e^{\lambda S(z_0)} e^{i\varphi_m}, \quad \varphi_m = \frac{\pi - \theta}{2} + \pi m, \quad \theta = \arg(S''(z_0))$$

1.3 Обратное преобразование Лапласа

Вернёмся к соотношениям (6) и (7). Подынтегральное выражение является некоторой функцией переменных α и β . Сумма интеграла набирается в основном в окрестности седловой точки (α_0, β_0) по аналогии с методом перевала. Применим этот метод. Напомним, что $S(\beta, \alpha) = \beta E - \alpha A + \ln Q(\beta, \alpha)$.

$$\alpha_0, \beta_0 : \quad \frac{\partial S}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial \beta} = 0, \quad E = -\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta}, \quad A = \frac{\partial \ln Q}{\partial \alpha}$$

$$S(\alpha, \beta) \approx S(\alpha_0, \beta_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha^2} (\alpha - \alpha_0)^2 + \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha \partial \beta} (\alpha - \alpha_0)(\beta - \beta_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} (\beta - \beta_0)^2 \quad (8)$$

$$\alpha = \alpha_0 + ix, \quad \beta = \beta_0 + iy$$

$$\omega(A, E) = e^{S(\alpha_0, \beta_0)} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp \left[- \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} x^2 + \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha \partial \beta} xy + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha^2} y^2 \right) \right] \quad (9)$$

В общем виде интеграл (9) можно записать как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{ij} x_i x_j \right] dx_1 \dots dx_n = (2\pi)^{n/2} |D|^{-1/2}, \quad |D| = \det(a_{ij})$$

$$\text{Тогда } \omega(A, E) = \frac{e^{S(\alpha_0, \beta_0)}}{2\pi |D|^{1/2}}, \quad D = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha^2} & \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha \partial \beta} \\ \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha} & \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} \end{vmatrix}_{\substack{\alpha=\alpha_0 \\ \beta=\beta_0}} \quad (10)$$

Затем из (6) находим параметры A и E , пренебрегаем производными по g :

$$A = \frac{\partial \ln Q}{\partial \alpha} = \int_0^{\alpha_0/\beta_0} g(\varepsilon) d\varepsilon, \quad E = -\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} = \int_0^{\alpha_0/\beta_0} \varepsilon g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6\beta_0^2} \cdot g\left(\frac{\alpha_0}{\beta_0}\right) \quad (11)$$

С другой стороны, для основного состояния $\int_0^{E_F} g(\varepsilon) d\varepsilon = A$, $\int_0^{E_F} g(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon = E_0$. Здесь E_F — энергия Ферми. Тогда, согласно (11), $\alpha_0 = \beta_0 E_F$. Обозначим энергию возбуждения как $U = E - E_0 = \frac{\pi^2}{6\beta_0^2} g(E_F)$. Вычисляя вторые производные по α и по β из соотношения (6) для определителя в (10), подставляя туда найденные выражения для $\alpha_0 = \beta_0 E_F$ и $\beta_0 = \pi \sqrt{\frac{g(E_F)}{6U}}$, находим $\omega(A, U)$:

$$\boxed{\omega(A, U) = \frac{\sqrt{\pi} \exp \left[2 \sqrt{\frac{\pi^2}{6}} g(E_F) U \right]}{12 \cdot a^{1/4} U^{5/4}}} \quad (12)$$

1.4 Используемые приближения

1.4.1 Замена $g(E)$ гладкой функцией

При вычислении интеграла (5) были сделаны следующие преобразования:

$$g\left(\frac{\alpha}{\beta} + x\right) \approx g\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) + g'\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \cdot x + \frac{1}{2} g''\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \cdot x^2$$

$$g\left(\frac{\alpha}{\beta} + x\right) \approx g\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) - g'\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \cdot x + \frac{1}{2} g''\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) \cdot x^2$$

Это справедливо при условии

$$\beta_0^{-1}g(E_F) \gg 1 \quad (13)$$

При $U = E - E_0 = \frac{\pi^2}{6\beta_0^2}g(E_F)$ это условие эквивалентно $g(E_F)U \gg 1$ или $U \gg g(E_F)^{-1}$. Это означает, что «среднюю плотность уровней» можно ввести только тогда, когда энергия возбуждения велика по сравнению с энергией первого возбуждённого состояния g^{-1} .

1.4.2 Пренебрежение производными от функции g .

Последнее слагаемое в (6) при вычислениях не рассматривалось. Условием такого приближения является

$$\frac{(g''(E_F))^2 U^3}{(g(E_F))^3} \ll 1$$

Поскольку для ферми-газа $g \sim A \cdot E^{1/2} \cdot E_F^{-3/2}$, то это условие можно записать как $U \ll E_F A^{1/3}$. Казалось бы, условия $U \ll E_F A$ должно быть вполне достаточно для того, чтобы записать показатель экспоненты в (12) с точностью до множителя 2. Но для того, чтобы записать выражение для ω с такой точностью, необходимо оценить показатель экспоненты с точностью до 1, а в этом случае справедливость формулы (12) определяется более жёстким условием $\frac{(g''(E_F))^2 U^3}{(g(E_F))^3} \ll 1$.

1.4.3 Использование метода перевала при вычислении обратного преобразования Лапласа

В 1.1 был выписан интеграл (4). Далее было рассказано про «метод перевала», и в 1.3 применён этот метод: исходный интеграл был представлен в виде (9). Можно установить точность такого приближения, оценивая отброшенные слагаемые в (8). В целом, это приближение работает при выполнении ранее описанного условия (13).

2 Принцип работы алгоритма перебора многочастичных состояний для подсистемы

2.1 Алгоритм полного перебора

Как говорилось ранее, ядро представляет из себя протонную и нейтронную подсистемы. В пятом семестре был разработан алгоритм, перебирающий всевозможные многочастичные состояния с учётом ограничений на энергии для определённой подсистемы. Напомним, как он работает.

При моделировании работа велась в безразмерных переменных: вместо U [МэВ] использовалась безразмерная энергия возбуждения, обозначенная маленькой буквой u . Вместо размерного параметра плотности состояний a [МэВ] $^{-1}$ вводился безразмерный параметр плотности, обозначенный также маленькой буквой a .

Пусть имеется произвольный спектр одночастичных состояний. Здесь энергия возбуждения $u = 0$:

$$\left\{ \underbrace{\bullet \bullet \dots}_{E_1}, \underbrace{\bullet \bullet \dots}_{E_2}, \dots, \underbrace{\bullet \bullet \dots}_{E_{i-1}}, \underbrace{\bullet \bullet \dots \circ \circ \dots}_{E_i}, \underbrace{\circ \circ \dots}_{E_{i+1}}, \dots \right\}$$

В программе «1» означает наличие частицы в данном одночастичном состоянии, а «0» — отсутствие.

Пусть имеется N частиц. Алгоритм работы следующий: сначала мы перемещаем частицу из N -го одночастичного состояния в $(N+1)$. Затем $(N-1) \rightarrow N$, на следующем шаге $(N-2) \rightarrow (N-1)$ и т.д. до тех пор, пока не дойдём до конца и частицы не кончатся. Тут получаем многочастичное состояние $\{0, \dots, \underbrace{1}_{N+1}, 0, \dots\}$. Затем сдвигаем всю систему в исходное положение, кроме самой последней частицы — мы перемещаем её из $(N+1)$ в $(N+2)$, а с отставком проводим ту же самую операцию до тех пор, пока не окажемся в состоянии $\{0, 1, \dots, \underbrace{1}_N, 0, 1, 0, \dots\}$. Потом сдвигаем остаток системы влево кроме N -й частицы, которая идёт в $(N+1)$ состояние, и получается $\{1, 1, \dots, 0, \underbrace{0}_N, 1, 1, 0, \dots\}$.

Продолжая действовать подобным образом, можно построить итерационный алгоритм, который перебирает абсолютно все многочастичные состояния, которых оказывается ровно C_n^k , n — общее количество свободных и занятых ячеек, k — количество занятых частицами ячеек.

Остаётся учесть ограничения на энергии. Поскольку одночастичные состояния выстроены в порядке возрастания энергии, то чем правее находится частица, тем большее её энергия. На основании этого можно на много порядков сократить время расчёта для определённой энергии. Лучше всего работать с максимально узкими диапазонами энергий шириной $\Delta u = 1$. Где конкретно реализовать это ограничение на энергии и перейти к следующей итерации?

Вполне очевидно, что в общем случае энергия состояния $\{\dots, 0, 1, \dots\} \equiv \{a\}$ больше, чем состояния $\{\dots, 1, 0, \dots\} \equiv \{b\}$. Если $u_{\{b\}} > u + \Delta u$, то заведомо $u_{\{a\}} > u + \Delta u$, и эту итерацию с «прогоном» нуля до самого левого края можно опустить. Проблема в том, как аккуратно перейти к следующей итерации, передвинуть единицы влево, нули вправо для произвольного случая. Эта проблема тоже была решена; для более подробного объяснения надо смотреть код программы.

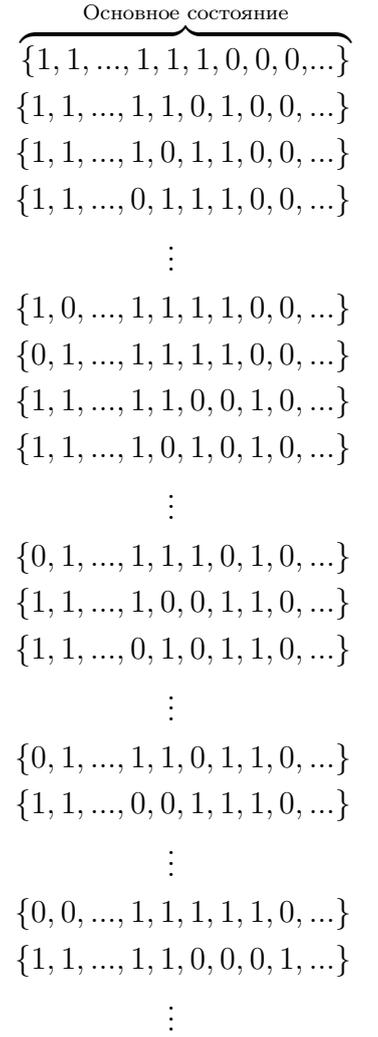


Рисунок 2 — Алгоритм перебора многочастичных состояний при $u = 2$

2.2 Алгоритм через числа сочетаний

Число сочетаний $C_n^k \equiv \frac{n!}{k!(n-k)!}$. Имеем произвольный спектр:

$$\left\{ \underbrace{\bullet \bullet \dots}_{E_1, N_1}, \underbrace{\bullet \bullet \dots}_{E_2, N_2}, \dots, \underbrace{\bullet \bullet \dots}_{E_{i-1}, N_{i-1}}, \underbrace{\bullet \bullet \dots \circ \circ \dots}_{E_i, N_i}, \underbrace{\circ \circ \dots}_{E_{i+1}, N_{i+1}}, \dots \right\} \quad (14)$$

- E_k — энергия одночастичных состояний на k -м уровне
- N_k — количество одночастичных состояний, обладающих энергией E_k

- \mathcal{N} — количество занятых одночастичных состояний (количество частиц) на i -м уровне в основном состоянии

Важно отметить, что здесь i является не каким-то пересчётным коэффициентом, а указателем на порядковый номер уровня, где в основном состоянии заполнены не все одночастичные состояния¹.

$$N = N_1 + N_2 + \dots + N_{i-1} + \mathcal{N} \implies \mathcal{N} = N - N_1 - N_2 - \dots - N_{i-1}$$

Обозначим **количество многочастичных состояний подсистемы нейтронов (протонов) при энергии возбуждения** $[u - \frac{1}{2}, u + \frac{1}{2}]$ как $\mathcal{K}_n(u)$.

u = 0

Здесь просто всевозможные комбинации из \mathcal{N} частиц внутри ячейки N_i .
 $\mathcal{K}_n(u = 0) = C_{N_i}^{\mathcal{N}}$

u = 1

Возможны переходы $(\varepsilon = i) \xrightarrow{1n^0} (\varepsilon = i + 1)$ и $(\varepsilon = i - 1) \xrightarrow{1n^0} (\varepsilon = i)$.

В первом случае получаем $C_{N_{i+1}}^1 C_{N_i}^{\mathcal{N}-1} = N_{i+1} \cdot C_{N_i}^{\mathcal{N}-1}$.

Во втором — $C_{N_i}^{\mathcal{N}+1} C_{N_{i-1}}^{N_{i-1}-1} = C_{N_i}^{\mathcal{N}+1} \cdot N_{i-1}$.

Получаем $\mathcal{K}_n(u = 1) = N_{i+1} \cdot C_{N_i}^{\mathcal{N}-1} + N_{i-1} \cdot C_{N_i}^{\mathcal{N}+1}$

u = 2

- $(\varepsilon = i) \xrightarrow{1n^0} (\varepsilon = i + 2) \implies C_{N_{i+2}}^1 C_{N_i}^{\mathcal{N}-1}$
- $(\varepsilon = i) \xrightarrow{2n^0} (\varepsilon = i + 1) \implies C_{N_{i+1}}^2 C_{N_i}^{\mathcal{N}-2}$
- $(\varepsilon = i - 1) \xrightarrow{1n^0} (\varepsilon = i + 1) \implies C_{N_{i+1}}^1 C_{N_i}^{\mathcal{N}} C_{N_{i-1}}^{M_{i-1}-1} = N_{i+1} \cdot C_{N_i}^{\mathcal{N}} \cdot N_{i-1}$
- $(\varepsilon = i - 1) \xrightarrow{2n^0} (\varepsilon = i) \implies C_{N_i}^{\mathcal{N}+2} C_{N_{i-1}}^{N_{i-1}-2}$
- $(\varepsilon = i - 2) \xrightarrow{1n^0} (\varepsilon = i) \implies C_{N_i}^{\mathcal{N}+1} C_{N_{i-2}}^{N_{i-2}-1}$

$\mathcal{K}_n(u = 2) = \sum$ всего этого.

Можно продолжать выписывать всевозможные перестановки для более высоких энергий возбуждения. Главное — случайно не упустить важные комбинации, что при энергиях побольше сделать довольно просто.

¹Произвольность выбора остаётся в случае полностью заполненной оболочки. Если оказывается, что в основном состоянии k -я оболочка полностью заполнена, а $(k + 1)$ -я вообще не заполнена, то полагается $i = k$.

2.3 Преимущества и недостатки двух алгоритмов

Сначала стоит отметить, что имеется общего у обоих алгоритмов: они могут работать со спектрами произвольных типов (например, одномерный, трёхмерный осцилляторы, прямоугольная яма).

Преимуществом второго алгоритма является его **быстрота**: не надо перебирать абсолютно каждое многочастичное состояние. Просто посчитать факториалы. Наиболее явно видна разница в случае трёхмерного осциллятора. Например, распола-

гаем спектром $\{\dots, \underbrace{\bullet \bullet}_{3, 20}, \dots, \underbrace{\bullet \bullet \bullet \bullet}_{4, 30}, \dots, \underbrace{\circ \circ}_{5, 42}, \dots\}$. Обозначения такие же, как и в произ-

вольном спектре (14). Если захотим рассчитать $K_n(u = 0)$, то алгоритм «через числа сочетаний» посчитает $\frac{30!}{15! \cdot 15!}$. Алгоритм «полного перебора» будет работать до тех пор, пока не переберёт абсолютно каждое из 155 117 520 многочастичных состояний (ограничение на энергии не будет работать, т.к. все состояния обладают одинаковой энергией). Это займёт много времени. То есть проблемы с первым алгоритмом могут начаться уже с самого начала, если есть большое вырождение по энергиям.

Недостаток второго алгоритма — пока не понятно, как получить формулы для $K_n(u)$ в общем случае для произвольного u . Однако оказывается, что первые три значения K_n , соответствующие энергиям $u = 0, 1, 2$ позволяют определить порядок величины a в аналитической формуле(1). В то же время, если вырождение не слишком велико, то алгоритм полного перебора позволяет находить K_n , соответствующие довольно большим энергиям возбуждения u .

2.4 Получение количества многочастичных состояний системы из количества многочастичных состояний подсистемы

Поясним на следующем примере. Пусть мы нашли $K_n(u)$. Теперь надо как-то найти $\mathcal{K}(u)$ — количество многочастичных состояний системы при энергии возбуждения u .

Таблица 1 — Зависимость $K_n(u)$

$K_n(u)$	1	4	9	20	42	80	147	260	445	744	1215	1940	3047	4704	7155	...
u	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	...

Если $K_n(u) = K_p(u)$, то можно вычислить общее количество возбуждённых состояний следующим образом:

- $u = 0$

В этом случае $K_n = 1$, $K_p = 1$, $\mathcal{K} = K_n \cdot K_p = 1$. Система находится в основном состоянии.

- $u = 1$

Эта энергия пойдёт либо в нейтронную, либо в протонную подсистему. Тогда либо $K_n(u = 1) = 4$, $K_p(u = 0) = 1$, либо наоборот $K_n(u = 0) = 1$, $K_p(u = 1) = 4$. Сумма будет равна $\mathcal{K}(1) = K_n(0)K_p(1) + K_n(1)K_p(0) = 8$.

- $u = 2$

Будут 3 слагаемых:

$$\mathcal{K}(2) = K_n(0)K_p(2) + K_n(1)K_p(1) + K_n(2)K_p(0) = 1 \cdot 9 + 4 \cdot 4 + 9 \cdot 1 = 34$$

- $u = 3$

$$\mathcal{K}(3) = \mathcal{K}_n(0)\mathcal{K}_p(3) + \mathcal{K}_n(1)\mathcal{K}_p(2) + \mathcal{K}_n(2)\mathcal{K}_p(1) + \mathcal{K}_n(3)\mathcal{K}_p(0) = \dots = 112$$

В общем случае
$$\mathcal{K}(u) = \sum_{i=0}^u \mathcal{K}_n(i)\mathcal{K}_p(u-i) \quad (15)$$

3 Модель прямоугольной ямы конечной глубины

3.1 Описание модели

Моделирование проводилось при помощи алгоритма «полного перебора».

$$U(x, y, z) = \begin{cases} -U_0, & \text{если } 0 < x < b, 0 < y < b, 0 < z < b, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases}$$

Если глубина потенциальной ямы велика, то энергии низших состояний приблизительно равны энергиям состояний в потенциале с бесконечно высокими стенками. Тогда энергии таких состояний относительно дна потенциальной ямы определяются формулой

$$E_{ijk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} (i^2 + j^2 + k^2)$$

Можно составить таблицу 2, в которой отражена вся нужная информация по одночастичным состояниям в данной модели.

Таблица 2 — Энергетическое распределение основных состояний

Номер уровня n	ijk	Энергия уровня $\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_n$	Кратность вырождения уровня d_n	Суммарная энергия $\sum \varepsilon_n$	$\sum d_n = M$
1	111	3	2	6	2
2	112, 121, 211	6	6	42	8
3	122, 212, 221	9	6	96	14
4	113, 131, 311	11	6	162	20
5	222	12	2	186	22
6	123, 132, 213, 231, 312, 321	14	12	354	34
7	223, 232, 322	17	6	456	40
8	114, 141, 411	18	6	564	46
9	133, 313, 331	19	6	678	52
10	124, 142, 214, 241, 412, 421	21	12	930	64
11	223, 232, 322	22	6	1062	70
12	224, 242, 422	24	6	1206	76
13	134, 143, 314, 341, 413, 431	26	12	1518	88
14	115, 151, 511, 333	27	8	1734	96
15	234, 243, 324, 342, 423, 432	29	12	2082	108
16	125, 152, 215, 251, 512, 521	30	12	2442	120
17	225, 252, 522, 144, 414, 441	33	12	2838	132
18	334, 343, 433	34	6	3042	138
19	135, 153, 315, 351, 513, 531	35	12	3462	150
20	244, 424, 442	36	6	3678	156
21	235, 253, 325, 352, 523, 532, 116, 161, 661	38	18	4362	174

Здесь мы ограничили максимальную энергию: $\varepsilon_{\text{ceiling}} = 38$. Квантовыми числами, характеризующими одночастичные состояния, являются (i, j, k, σ) , где $\sigma = 2s_z = \pm 1$, s_z — проекция спина на ось z . Одночастичные состояния нумеруются в следующем порядке:

1. По энергии.
2. При определённой энергии первым идёт такое состояние (ijk) , у которого «сумма» чисел (конкатенация) \overline{ijk} наименьшая.
3. Учёт спина. Сначала идёт «+», затем «-».

Для моделирования используется безразмерная энергия $\varepsilon = i^2 + j^2 + k^2$.

Тогда энергетический спектр: $\left\{ \underbrace{\bullet, \bullet}_{\varepsilon_1=3}, \underbrace{\bullet, \bullet, \dots}_{N_2=6, \varepsilon_2=6}, \underbrace{\bullet, \dots}_{N_3=6, \varepsilon_3=9}, \underbrace{\bullet, \dots}_{N_4=6, \varepsilon_4=11}, \underbrace{\bullet, \bullet}_{\varepsilon_5=12}, \underbrace{\bullet, \dots, \bullet, \circ, \dots}_{N_6=12, \varepsilon_6=14}, \underbrace{\circ, \dots}_{N_7=6, \varepsilon_7=17}, \dots \right\}$

Используем приближение: $A \approx N_n + N_p$.

Ширина потенциальной ямы: $R \approx r_0 \cdot A^{1/3}$, $\frac{4}{3}\pi R^3 = b^3$, $b = r_0 \sqrt[3]{\frac{4}{3}\pi A}$, $r_0 \approx 1.6$ фм.

Размерный множитель: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2 c^2}{2(mc^2)} \cdot \frac{1}{b^2}$

3.2 Моделирование многочастичных состояний

Рассмотрим данную модель применительно к, например, ядру $Z = N = 22$.

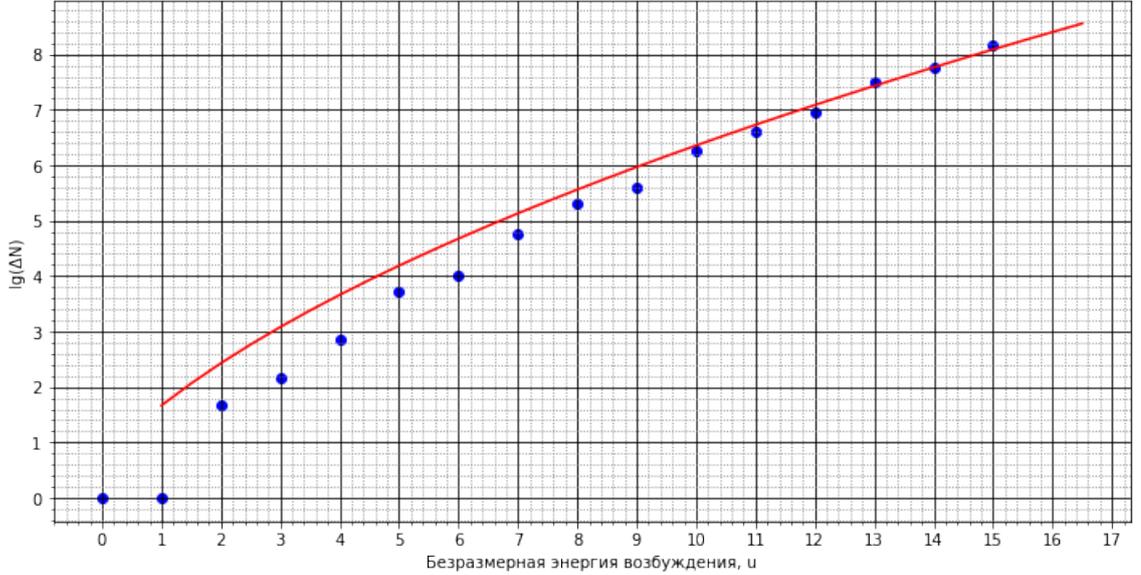


Рисунок 3 — Результаты для $N = Z = 22$. Безразмерный параметр $a = 10.0$

Здесь на рисунке 3 по оси абсцисс отложена безразмерная энергия возбуждения u , по оси ординат — десятичный логарифм от количества многочастичных состояний $\lg(\Delta N)$ ($\Delta N(u) \equiv \mathcal{K}(u)$) с энергией возбуждения u . Синим — полученные моделированием данные, красным — $\lg \left[\frac{\sqrt{\pi} \exp \left[2 \sqrt{\frac{\pi^2}{6} g(E_F) U} \right]}{12 \cdot a^{1/4} U^{5/4}} \right]$. Здесь $A = 44 \implies \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} \approx 4.475$ МэВ.

Подбором параметра плотности a подгоняем вид аналитической кривой под полученные данные, отсюда находим безразмерный параметр плотности $a = 10.0$. Тогда размерный параметр $a = \frac{10.0}{4.475 \text{ МэВ}} = 4.04 \text{ МэВ}^{-1}$.

В книге [5] в *Приложении табл. П2* есть таблица данных, где указаны значения a [МэВ⁻¹]. Так, для ядра $^{44}_{20}\text{Ca}$ параметр $a = 6.34$ МэВ⁻¹. Получается разница примерно в ~ 1.5 раза.

То же самое можно проделать для других N и Z :

- для 20+20 частиц:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.637 \text{ МэВ} \implies a = \frac{10.5}{2.637} = 3.982 \text{ МэВ}^{-1}. \text{ Табличное: } a(^{41}\text{Ca}) = 5.44 \text{ МэВ}^{-1}.$$

- 22+22 частиц:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.475 \text{ МэВ} \implies a = \frac{10}{2.475} = 4.041 \text{ МэВ}^{-1}. \text{ Табличное: } a(^{45}\text{Ti}) = 6.84 \text{ МэВ}^{-1}.$$

- 24+24 частиц:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.335 \text{ МэВ} \implies a = \frac{15}{2.335} = 6.423 \text{ МэВ}^{-1}. \text{ Табличное: } a(^{50}\text{Cr}) = 6.54 \text{ МэВ}^{-1}.$$

- 26+26 частиц:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.214 \text{ МэВ} \implies a = \frac{19}{2.214} = 8.582 \text{ МэВ}^{-1}. \text{ Табличное: } a(^{54}\text{Fe}) = 6.13 \text{ МэВ}^{-1}.$$

При этом стоит принять во внимание то, что моделирование проводилось для $N = Z = \frac{A}{2}$; в таблице даны значения для $N \neq Z$. К тому же, значение размерного параметра a сильно зависит от $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$, от выбора r_0 , которое было принято равным 1.6 фм вместо привычных 1.2 фм, чтобы увеличить значения параметра a .

4 Модель одномерного гармонического осциллятора

Особенностями этого спектра являются:

- $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots$
- Энергетический спектр $\{\varepsilon_1, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n, \dots\} = \{0^+, 0^-, 1^+, 1^-, 2^+, 2^-, 3^+, 3^-, \dots\}$
Здесь «+» или «-» соответствуют квантовому числу $\sigma = \pm 1$.
- Эквидистантность \implies Плотность состояний $\frac{\Delta N}{\Delta E} = \frac{1}{\hbar\omega} = g_0 = \text{const}$

4.1 Моделирование одномерного осциллятора

Работаем в безразмерных единицах энергии. Пусть $\varepsilon \equiv n = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$
В безразмерных переменных $g_0 \equiv 1$. Поясним, что происходит, на следующем примере: пусть количество нейтронов N_n и количество протонов N_p будет по 20. Вводим в подсистему безразмерную энергию возбуждения u :

u = 0

Поскольку все состояния с энергией $\varepsilon = 19$ заняты, то есть только один способ разместить частицы (основное состояние).

u = 1

Рассмотрим, что происходит около энергии Ферми.

Исходный спектр: $\{\dots, 18^+, 18^-, 19^+, 19^-, 20^+, 20^-, \dots\}$.

Всего есть 4 возможных многочастичных состояния, которые соответствуют энергии возбуждения: $19^+ \rightarrow 20^+, 19^+ \rightarrow 20^-, 19^- \rightarrow 20^+, 19^- \rightarrow 20^-$.

u = 2

Исходный спектр: $\{\dots, 18^+, 18^-, 19^+, 19^-, 20^+, 20^-, 21^+, 21^-, \dots\}$.

Алгоритм говорит, что количество многочастичных состояний $\mathcal{K}_n(u = 2) = \boxed{9}$.

1. $18^+ \rightarrow 20^+$
2. $18^+ \rightarrow 20^-$
3. $18^- \rightarrow 20^+$
4. $18^- \rightarrow 20^-$
5. $19^+ \rightarrow 20^+$ и $19^- \rightarrow 20^-$
6. $19^+ \rightarrow 21^+$
7. $19^+ \rightarrow 21^-$
8. $19^- \rightarrow 21^+$
9. $19^- \rightarrow 21^-$

При этом перестановки ($19^+ \rightarrow 20^+$ и $19^- \rightarrow 20^-$) и ($19^+ \rightarrow 20^-$ и $19^- \rightarrow 20^+$) считаются эквивалентными, поскольку в конечном счёте обе тождественные частицы (нейтроны или протоны) занимают одни и те же одночастичные состояния.

Таким образом можно получить зависимость количества возбуждённых многочастичных состояний подсистемы нейтронов $\mathcal{K}_n(u)$ (таблица 3).

Таблица 3 — Зависимость $\mathcal{K}_n(u)$ для подсистемы из 20 частиц

$\mathcal{K}_n(u)$	1	4	9	20	42	80	147	260	445	744	1215	1940	3047	4704	...
u	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	...

В согласии с формулой (15), вычисляем $\mathcal{K}(u)$. Получаем следующие результаты:

Таблица 4 — Зависимость $\mathcal{K}(u)$ для системы из 20+20 частиц

$\mathcal{K}_n(u)$	1	8	34	112	325	856	2090	4816	10580	22328	45540	90160	...
u	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	...

Напомним, что в аналитической формуле $a = \frac{\pi^2}{6} \cdot g(E_F)$. В безразмерных величинах $g = 1 \implies a = \frac{\pi^2}{6}$. Учитывая, что в системе есть частицы двух сортов (p^+ и n^0), параметр a просто удваивается.

Стоит отметить, что в [4, 5] при выводе формулы не учитывалось, что у протонов и нейтронов есть спин $\frac{1}{2}$. Мы же его учитываем. Тогда на каждое одночастичное состояние приходится не энергия $\hbar\omega$, а $\frac{\hbar\omega}{2}$. То есть g надо ещё раз умножить на 2, и мы получим $a_{\text{теор}} = \frac{2\pi^2}{3} \approx 6.58$, что довольно близко к полученному результату $a_{\text{модел}} = 6.5$.

Оказывается, что в силу эквидистантности спектра полученные результаты будут точно такими же для различных атомных ядер. В данной модели плотность возбуждённых многочастичных состояний атомных ядер не зависит от количества нуклонов, а определяется только энергией возбуждения.

Почему так получается? Поскольку спектр эквидистантный, то, например, для малой энергии возбуждения (скажем, $u = 1$) совершенно без разницы, сколько в основном состоянии частиц (10, 20 или даже больше частиц). В любом случае при $u = 1$

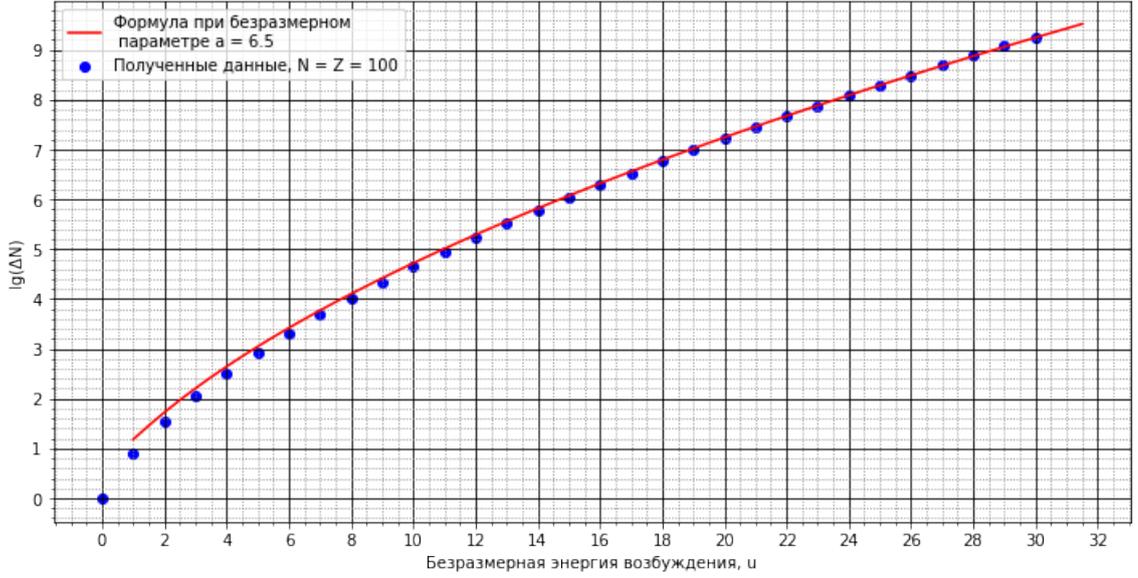


Рисунок 4 — Одномерный осциллятор. Безразмерный параметр $a = 6.5$

будут перестановки $i^+ \rightarrow (i+1)^+$, $i^+ \rightarrow (i+1)^-$, $i^- \rightarrow (i+1)^+$, $i^- \rightarrow (i+1)^-$. Точно так же с $u = 2, 3$, и т.д. до тех пор, пока u не станет равным $\frac{N}{2} + 1$.

Энергия $u = \frac{1}{2}N$ может возбудить частицу в низшем энергетическом состоянии (0^+ или 0^-), а энергия $\frac{N}{2} + 1$ уже не может возбудить частицы в состоянии $(-1)^+$ и $(-1)^-$, поскольку этих состояний нет. Но если увеличить количество частиц $N_{new} = N + 2$, то $u = \frac{N_{new}}{2} + 1$ уже возбуждает частицу в состоянии 0^+ или 0^- . Поэтому в данном случае количество многочастичных состояний будет различным.

4.2 Ограничения аналитической формулы

Ожидается, что при $u > \frac{N}{2}$ начнутся отклонения от аналитической формулы (12). Посмотрим, что происходит при малых количествах частиц: $N = Z = 2, 4, 6, 8, 10$. При относительно больших энергиях наблюдается отклонение от красной (аналитической) линии.

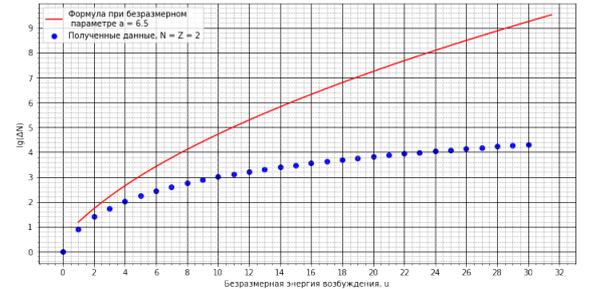
Пусть серьёзным отклонением будет

$$2 = \frac{\Delta N_{\text{теор}}}{\Delta N_{\text{модел}}} = \frac{10^{\lg(\Delta N_T)}}{10^{\lg(\Delta N_M)}} = 10^{\lg(\Delta N_T) - \lg(\Delta N_M)}$$

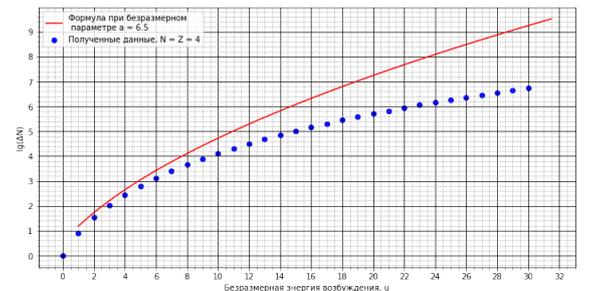
$$\lg(\Delta N_T) - \lg(\Delta N_M) = \lg(2) \approx 0.3$$

Для оценки пусть будет не 0.3, а 0.4, поскольку насечки на оси ординат сделаны с шагом 0.2. То есть две маленьких клетки по вертикали — уже «серьёзное» отклонение.

1. $N = Z = 2$. Здесь практически сразу же идёт несоответствие.



(a)



(b)

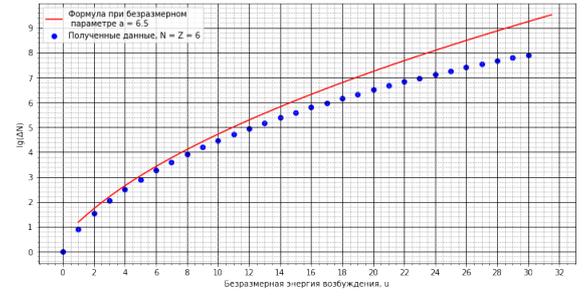
Рисунок 5 — Результаты для спектра одномерного осциллятора для $N = Z = 2, 4, 6$ соответственно.

2. $N = Z = 4$. Здесь «серьёзное» отклонение наступает при $u = 7$.
3. $N = Z = 6 \implies u = 13$
4. $N = Z = 8 \implies u = 20$
5. $N = Z = 10 \implies u = 30$

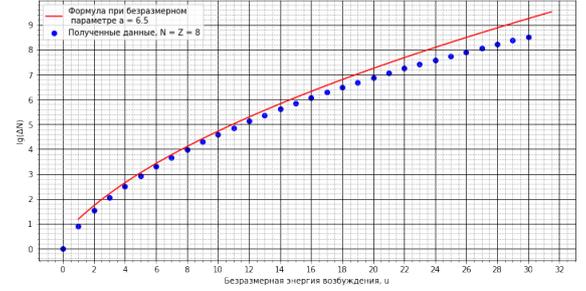
Видно, что «серьёзное» отклонение наступает чуть позже значения $\frac{A}{2}$. Это может быть связано с тем, как мы определяем предельно допустимое $\frac{\Delta N_{\text{теор}}}{\Delta N_{\text{модель}}}$: если бы оно было меньше, чем 2, то соответствующая энергия возбуждения u была бы меньше.

При этом стоит отметить, что полученные значения оказываются всегда под аналитической кривой. Это связано с тем, что при, допустим, энергии возбуждения $u = 20$, $N = Z = 4$ невозможно переложить частицы из состояний $(-3)^+$ или $(-3)^-$ в другие незанятые одночастичные состояния. Таких отрицательных состояний не существует, поэтому происходит ограничение количества возможных многочастичных состояний.

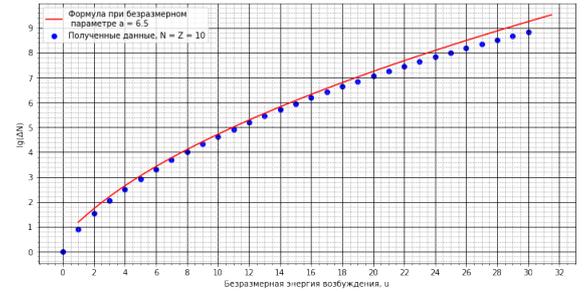
Таким образом, в спектре одномерного осциллятора был получен безразмерный параметр плотности $a = 6.5$, которой с учётом двух подсистем (p^+ и n^0) и спина оказался довольно близко к теоретическому: $a = 6.58$. Также были показаны случаи, когда аналитическая формула не работает: количество частиц мало, а энергии велики.



(a)



(b)



(c)

Рисунок 6 — Результаты для спектра одномерного осциллятора для $N = Z = 6, 8, 10$ соответственно.

5 Модель трёхмерного гармонического осциллятора

Энергия одночастичного состояния: $E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega (n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2})$.

Вводим безразмерную энергию $\varepsilon_{n_1, n_2, n_3} = \frac{1}{\hbar\omega} E_{n_1, n_2, n_3} - \frac{3}{2} = n_1 + n_2 + n_3$.

Одночастичные состояния нумеруются в следующем порядке:

1. По энергии.
2. При определённой энергии первым идёт такое состояние $(n_1 n_2 n_3)$, у которого «сумма» чисел (конкатенация) $\overline{n_1 n_2 n_3}$ наименьшая.
3. Учёт спина. Сначала идёт «+», затем «-».

Перебирая различные комбинации (n_1, n_2, n_3, σ) , получаем, например, такой энергетический спектр:

$$\left\{ \underbrace{\bullet, \bullet}_{0,2}, \underbrace{\bullet, \bullet, \dots}_{1,6}, \underbrace{\bullet, \dots}_{2,12}, \underbrace{\bullet, \dots}_{3,20}, \underbrace{\overbrace{\bullet, \dots, \bullet}^{\mathcal{N}}, \dots}_{\varepsilon_4=4}, \underbrace{\bullet, \dots}_{N_4=30}, \underbrace{\bullet, \dots}_{5,42}, \underbrace{\bullet, \dots}_{6,56}, \underbrace{\bullet, \dots}_{7,72}, \underbrace{\bullet, \dots}_{8,90}, \dots \right\}$$

В случае этого спектра алгоритм «полного перебора» оказывается слабоприменимым. Дело в том, что вырождение по энергиям довольно велико. Чтобы найти количество многочастичных состояний без энергии возбуждения $u = 0$, как обсуждалось в 2.3, для случая $\mathcal{N} = 15$, $N = 53$ надо будет потратить крайне много времени; это количество равно 155 117 52. Поэтому в силу вступает алгоритм «через числа сочетаний». Можно будет лишь оценить порядок параметра плотности a , поскольку общий алгоритм для произвольной энергии возбуждения не разработан.

5.1 Моделирование многочастичных состояний

Рассмотрим, например, случай $N = Z = 20$.

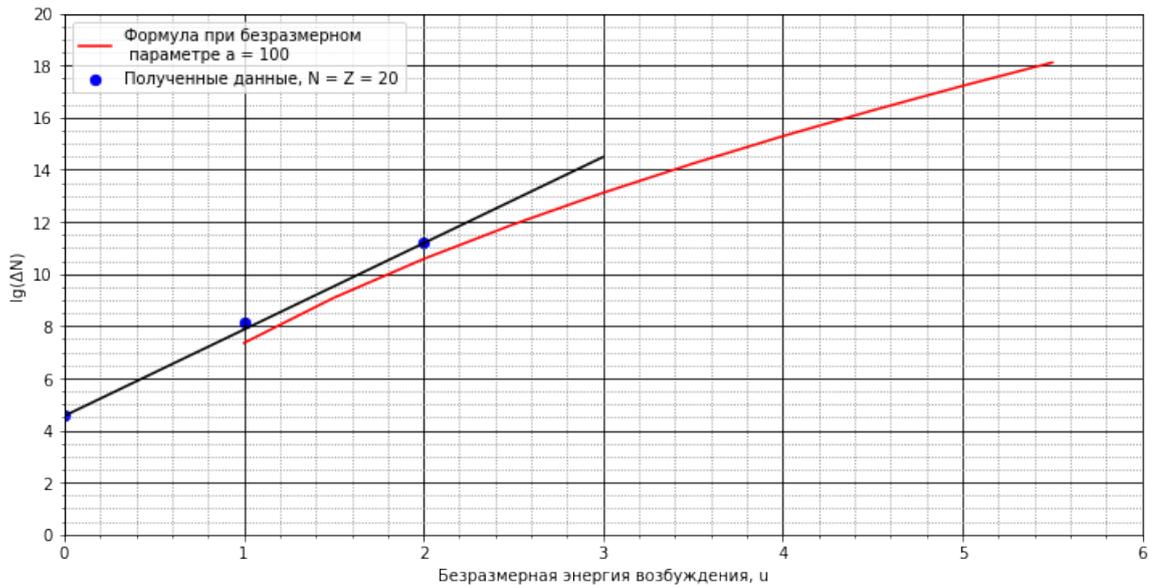


Рисунок 7 — Случай $N = Z = 20$ для трёхмерного осциллятора.

Здесь безразмерный параметр плотности a оказывается равным ~ 100 . Сравним значения в размерных переменных.

Синим — смоделированные данные. Красным — аналитическая формула. Чёрным — «продолжение» смоделированных данных. Прямая проведена через первую и последнюю точки.

В книге [4] (стр. 206, формула 2.131) описывается, каким образом можно выбрать размерный множитель $\hbar\omega$ для изотропного осциллятора:

$$\hbar\omega \approx \frac{5}{4} \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{Mr_0^2} Z^{-1/3} \xrightarrow{r_0=1.2 \text{ фм}} 40Z^{-1/3} \text{ МэВ}$$

Посчитаем для ^{40}Ca : получается $N = Z = 20 \implies \hbar\omega \approx 14.74 \text{ МэВ}$. Теперь, чтобы получить размерный параметр плотности a , считаем $\frac{a_{\text{безразм}}}{40A^{-1/3}} = \frac{100.0}{14.74} \approx \boxed{6.8 \text{ МэВ}^{-1}}$. Табличные данные в [5] (стр. 144) для различных атомных ядер в МэВ^{-1} :

$$a(^{40}\text{Ar}) = 6.70, \quad a(^{40}\text{K}) = 5.34, \quad a(^{41}\text{Ca}) = 5.44, \quad a(^{42}\text{Ca}) = 6.58$$

Полученное значение 6.8 МэВ^{-1} находится в разумном согласии с табличными данными. Продолжаем аналогичные действия с другими ядрами:

$$\begin{aligned} ^{30}_{15}\text{P} : & \quad a_{\text{безр}} = 70, \quad \hbar\omega = 16.22 \text{ МэВ}, \quad a = 4.3 \text{ МэВ}^{-1}, \quad a_{\text{таб}}(^{30}_{15}\text{P}) = 3.47 \text{ МэВ}^{-1} \\ ^{50}_{25}\text{Mn} : & \quad a_{\text{безр}} = 105, \quad \hbar\omega = 13.68 \text{ МэВ}, \quad a = 7.7 \text{ МэВ}^{-1}, \quad a_{\text{таб}}(^{50}_{25}\text{Mn}) = 6.29 \text{ МэВ}^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{60}_{30}\text{Zn} : a_{\text{безр}} = 110, \quad \hbar\omega = 12.87 \text{ МэВ}, \quad a = 8.5 \text{ МэВ}^{-1}, \quad a_{\text{таб}} ({}^{63}_{30}\text{Zn}) = 7.45 \text{ МэВ}^{-1} \\
{}^{80}_{40}\text{Zr} : a_{\text{безр}} = 140, \quad \hbar\omega = 11.70 \text{ МэВ}, \quad a = 12.0 \text{ МэВ}^{-1}, \quad a_{\text{таб}} ({}^{92}_{40}\text{Zn}) = 11.17 \text{ МэВ}^{-1}
\end{aligned}$$

Видно, что смоделированные данные всегда получаются больше табличных. При этом стоит обратить внимание на то, что полученные данные были получены не с такой точностью, как для спектра «прямоугольной ямы» или «одномерного гармонического осциллятора»: проводилась оценка значения всего по трём точкам. К тому же, предполагалось $N = Z$; это не так в общем случае.

В заключение отметим, что в книге [5] имеется сводка 8 зависимости a от массового числа A (стр. 49). Поэтому для быстрой оценки значения a можно использовать эмпирическое соотношение $a \approx \frac{A}{8}$.

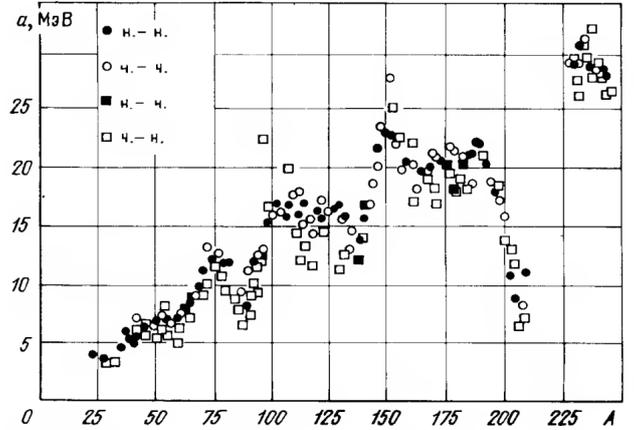


Рисунок 8 — Зависимость параметра плотности уровней a от массового числа A

6 Заключение

1. В представленной работе был проделан вывод аналитической формулы Бете (1).
2. Были построены алгоритмы «полного перебора» и «через числа сочетаний».
3. В случае одномерного осциллятора предсказанное аналитической формулой значение параметра a с учётом поправок на протон-нейтронную систему и спин довольно точно сходится с полученными данными. Также были показаны ограничения на аналитическую формулу: количество частиц мало, а энергии велики.
4. С помощью моделирования многочастичных возбуждённых состояний в моделях «прямоугольной потенциальной ямы» и «трёхмерного осциллятора» получены значения параметра плотности a , которые сравнивались с табличным [5].

Получается так, что в «прямоугольной яме» смоделированные значения получаются меньше теоретических, а в «трёхмерном осцилляторе» — чуть больше теоретических. Таким образом, ядерный потенциал представляет собой нечно среднее между «колодцем» и «изотропным осциллятором».

6.1 Планы на будущее

- Моделирование с использованием других моделей ядра. На примере «прямоугольной потенциальной ямы» и «трёхмерного осциллятора» было показано, что получаемые значения могут довольно сильно различаться в зависимости от модели. Поэтому выбор хорошей модели важен.
- Учёт результирующих спинов многочастичных состояний. То есть если имеем некоторое многочастичное состояние $\{j_1, j_2, j_3, \dots\}$, то $\vec{J} = \sum \vec{j}_i$, и проекция \vec{J} на ось z будет пробегать дискретный конечный набор значений. Будет снятие вырождения по энергиям.

Список литературы

- [1] A.Koning, S.Hilaire, S.Goriely. TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. - 2017.
- [2] R.Capote, M.Herman, P.Oblozinsky, P.G.Young, S.Goriely et al. RIPL - Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations. - Nuclear Data Sheets, v. 110, iss. 12, p. 3107-3214, 2009.
- [3] M.Bender, R.Bernard, G.Bertsch, S.Chiba, J.Dobaczewski et al. Future of nuclear fission theory. - J. Phys. G: Nucl. Part. Phys., v. 47, iss. 11, 113002, 2020.
- [4] О.Бор, Б.Мотгельсон. Структура атомного ядра. Том 1. Одночастичное движение. - Москва, Мир, 1971.
- [5] Ю.В.Соколов. Плотность уровней атомных ядер. - Москва, Энергоатомиздат, 1990.