

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
**ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ И ДЕЛЕНИЕ ЯДЕР ПРИ
НИЗКИХ И СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ И ПРОБЛЕМА
ПЛОТНОСТИ ЯДЕРНЫХ УРОВНЕЙ**

Студент _____ Л. Е. Трофимов

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

Москва 2022

Содержание

Введение	3
1 Аналитические формулы плотности состояний и уровней с учётом проекции результирующего спина	4
1.1 Прямое преобразование Лапласа	4
1.2 Обобщение на случай системы из двух подсистем	6
1.3 Метод перевала	6
1.4 Обратное преобразование Лапласа	8
1.5 Используемые приближения	10
1.5.1 Замена функции g на среднее значение	10
1.5.2 Низкотемпературное приближение	10
1.5.3 Использование метода перевала	10
1.5.4 Равенство плотностей одночастичных состояний для протонов и нейтронов	11
1.6 Получение формулы количества уровней	11
1.7 Получение формулы количества состояний в зависимости от энергии	11
2 Алгоритм перебора многочастичных состояний	12
2.1 Перебор многочастичных состояний для подсистемы	12
2.2 Получение количества многочастичных состояний <u>системы</u> из количества многочастичных состояний <u>подсистемы</u>	13
3 Модель прямоугольной ямы конечной глубины	13
3.1 Описание модели	13
3.2 Моделирование многочастичных состояний	15
4 Модель одномерного гармонического осциллятора	16
4.1 Моделирование одномерного осциллятора	16
4.2 Ограничения аналитической формулы	18
5 Модель модифицированного осциллятора	19
5.1 Результаты моделирования. Проверка аналитической формулы плотности состояний	20
5.2 Проверка аналитической формулы плотности уровней	23
6 Моделирование ядерных реакций в программном комплексе Talys	24
6.1 Результаты для ^{93}Nb	24
6.2 Результаты для In	26
7 Заключение	27
7.1 Планы на будущее	27
Список литературы	28

Введение

Атомное ядро представляет из себя систему, состоящую из протонов и нейтронов, которые находятся в общей потенциальной яме. Нейтроны и протоны называются общим словом — нуклоны.

В ядерной потенциальной яме есть так называемые одночастичные состояния, которые можно охарактеризовать уникальным набором квантовых чисел. При моделировании полагается, что определённый нуклон может одновременно находиться только в одном конкретном одночастичном состоянии (хотя есть принцип суперпозиции).

Так, например, для 3-мерного осциллятора можно условно выстроить состояния в ряд, упорядочить их по энергии и квантовым числам:

- n — главное квантовое число
- l — орбитальный момент
- l_z — проекция орбитального момента на ось z
- σ — удвоенная проекция спина \vec{s} нуклона на ось z

Также удобно использовать $2 \cdot j_z \in \mathbb{Z}$, где j_z — проекция $\vec{j} \equiv \vec{l} + \vec{s}$ на ось z . Затем вводим понятие многочастичного состояния — набора нуклонов, занимающих определённые одночастичные состояния. Так, если \bullet — занятое, а \circ — незанятое одночастичное состояние, то основным многочастичным состоянием является $\{\bullet \bullet \dots \bullet \bullet \circ \circ \dots\}$.

На программном языке ядерные реакции — это переход ядер из одних многочастичных состояний в другие с образованием продуктов реакции. Чем больше определённых состояний в некотором интервале энергий ΔE , тем более вероятен переход именно в этот интервал. Чем их меньше — тем менее вероятен.

Нас интересует реакция $a + A \rightarrow C \rightarrow b + B$ с образованием компаунд-ядра C (составного ядра C) и последующим распадом.

В статье [1] ядерные реакции поясняются рисунком 1. Здесь изображены переходы из одних многочастичных состояний в другие. Компаунд-ядро находится в правом верхнем углу. При больших энергиях количество многочастичных состояний становится настолько велико, что можно ввести плотность $\frac{dN}{d\varepsilon}$.

В ходе работы проделаны следующие основные моменты:

- Вывод аналитической формулы плотности состояний с учётом проекции результирующего спина.
- Обобщён алгоритм перебора многочастичных состояний, учены проекции спина и чётность.
- Были смоделированы некоторые ядерные реакции в программе Talys.

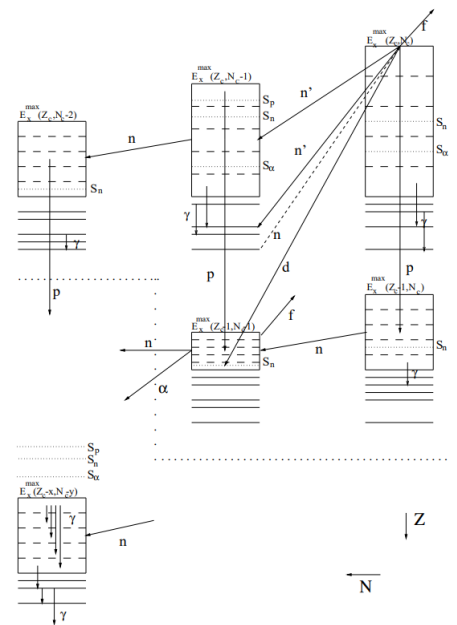


Рисунок 1 — Иллюстрация возможных путей распада из [1]

1 Аналитические формулы плотности состояний и уровней с учётом проекции результирующего спина

Здесь приводятся рассуждения, аналогичные [2, 3]. Целью является получение формулы, показывающей, сколько многочастичных состояний dN находится в интервале энергий возбуждения dU с определённой проекцией полного углового момента M :

$$\omega(U, M) = \frac{\exp \left[2\sqrt{a \left(U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle} \right)} \right]}{12\sqrt{2g\langle m^2 \rangle} \left(U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle} \right)^{3/2}}$$

Здесь $a = \frac{\pi^2}{6}g(\varepsilon_F)$ — параметр плотности, $g \equiv g(\varepsilon_F)$ — плотность состояний вблизи энергии Ферми.

Ход получения такой: сначала получим из преобразования Лапласа статсумму для подсистемы (нейтронной или протонной), а затем просуммируем и получим статсумму системы.

1.1 Прямое преобразование Лапласа

Определим плотность состояний подсистемы как

$$\omega(E, N, M) = \sum_i \delta(E - E_i)\delta(N - N_i)\delta(M - M_i)$$

Здесь буква i соответствует многочастичному состоянию $|i\rangle$ нейтронной подсистемы, E — полная энергия в подсистеме, N — число нейтронов, M — проекция результирующего углового момента на ось z . Для вычисления $\omega(U, M)$ воспользуемся преобразованием Лапласа:

$$F(p) = \int_0^\infty e^{-pt} f(t) dt, \quad f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{Re}(p)-i\infty}^{\text{Re}(p)+i\infty} e^{pt} F(p) dp$$

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

$$Q(\beta, \alpha, k) = \int_0^\infty dE \int_0^\infty dN \int_0^\infty dM e^{-\beta E + N\alpha + kM} \omega(E, N, M) = \sum_i \exp(-\beta E_i + N_i \alpha + k M_i)$$

При этом β, α, k — параметры преобразования. Знаки этих параметров в показателе экспоненты выбираем апостериори, т.к. потом они примут некоторый смысл. Так, например, βE_i должно быть безразмерно. Тогда $1/\beta = T$ имеет смысл температуры. $E_i = \sum_j \varepsilon_j n_j(i)$, $M_i = \sum_j m_j n_j(i)$, $N_i = \sum_j n_j(i)$, где $n_j(i)$ — числа заполнения в данном многочастичном состоянии $|i\rangle$. $n_j(i) = 0$, если частица не занимает состояние с порядковым номером j , и равно 1, если занимает. Перейдём от многочастичных характеристик E_i, N_i, M_i к одночастичным ε_j, n_j, m_j .

$$Q(\beta, \alpha, k) = \sum_i \exp \left(\sum_j [-\beta \varepsilon_j + \alpha + k m_j] n_j(i) \right) = \sum_i e^{(-\beta \varepsilon_1 + \alpha + k m_1) n_1(i)} e^{(-\beta \varepsilon_2 + \alpha + k m_2) n_2(i)} \dots \quad (1)$$

Поскольку $n_j(i)$ принимает значения 0 или 1, а мы хотим рассмотреть всевозможные случаи (даже при разных N_i), то можно сказать следующее: в каждом одночастичном состоянии частица может находиться или не находиться. Если она не находится, то $n_j(i) = 0$, а если находится, то $n_j(i) = 1$. Мы хотим учесть все случаи, и когда она есть, и когда её нет. Тогда ряд (1) можно представить в виде:

$$Q(\beta, \alpha, k) = (1 + e^{-\beta\varepsilon_1 + \alpha + km_1}) (1 + e^{-\beta\varepsilon_2 + \alpha + km_2}) \dots = \prod_j (1 + e^{-\beta\varepsilon_j + \alpha + km_j})$$

Если возьмём логарифм, то получим:

$$\ln Q(\beta, \alpha, k) = \sum_j \ln (1 + e^{-\beta\varepsilon_j + \alpha + km_j})$$

Перейдём от суммирования к интегрированию, введём плотность одночастичных состояний $g(\varepsilon)$, а также выделим явно положительные и отрицательные проекции моментов $m^+ \geq 0$ и $m^- = |m^-| > 0$:

$$\begin{aligned} \sum_j (1 + e^{-\beta\varepsilon_j + \alpha + km_j}) &= \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln (1 + e^{-\beta\varepsilon + \alpha + km}) d\varepsilon = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln (1 + e^{-\beta\varepsilon + \alpha + km^+}) d\varepsilon + \frac{1}{2} \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln (1 + e^{-\beta\varepsilon + \alpha - km^-}) d\varepsilon \end{aligned} \quad (2)$$

$$g(\varepsilon) = \sum_j \delta(\varepsilon - \varepsilon_j)$$

Вычислим первый интеграл. Выделим пределы интегрирования удобным образом, а затем рассмотрим низкотемпературное приближение: $(\alpha + km) \gg 1$. Обозначим для краткости $-\beta\varepsilon + \alpha - km^+ = x(\varepsilon)$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln (1 + e^x) d\varepsilon &= \int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) \ln \underbrace{(1 + e^x)}_{e^x(1 + e^{-x})} d\varepsilon + \int_{\frac{\alpha + km^+}{\beta}}^\infty g(\varepsilon) \ln (1 + e^x) d\varepsilon = \\ &= \underbrace{\int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) x d\varepsilon}_{(1)} + \underbrace{\int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) \ln (1 + e^{-x}) d\varepsilon}_{(2)} + \underbrace{\int_{\frac{\alpha + km^+}{\beta}}^\infty g(\varepsilon) \ln (1 + e^x) d\varepsilon}_{(3)} \end{aligned} \quad (3)$$

$$(1) = \int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) (-\beta\varepsilon + \alpha - km^+) d\varepsilon = \dots = \bar{g} \cdot \frac{(\alpha + km^+)^2}{2\beta}$$

$$(2) \frac{\beta\varepsilon - \alpha + km^+ = -\beta y}{\varepsilon = -y + (\alpha + km^+)/\beta} \int_{\frac{\alpha + km^+}{\beta}}^0 g\left(-y + \frac{\alpha + km^+}{\beta}\right) \ln(1 + e^{-\beta y}) d(-y) = \int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g \ln(1 + e^{-\beta y}) dy$$

$$(3) \xrightarrow[\varepsilon=y+(\alpha+km^+)/\beta]{-\beta\varepsilon+\alpha-km^+=-\beta y} \int_0^\infty g \ln(1 + e^{-\beta y}) dy = \bar{g} \frac{1}{\beta} \int_0^\infty \ln(1 + e^{-\beta y}) d(\beta y) = \bar{g} \cdot \frac{1}{\beta} \cdot \frac{\pi^2}{12}$$

Используя «низкотемпературное приближение» $(\alpha + km^+) \gg 1$ (интегрируем до ∞), а также то, что интеграл $\int_0^\infty \ln(1 + e^{-x}) dx = \frac{\pi^2}{12}$ и вынося g из-под интеграла как среднее, приводим сумму интегралов (3) к виду:

$$\bar{g} \cdot \frac{(\alpha + km^+)^2}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \cdot \bar{g} \cdot \frac{\pi^2}{12} + \frac{1}{2\beta} \cdot \bar{g} \cdot \frac{\pi^2}{12} = \frac{\bar{g}}{2} \left(\frac{(\alpha + km^+)^2}{2\beta} + \frac{\pi^2}{6\beta} \right)$$

Мы получили первый интеграл в выражении (2). Второй будет аналогичный с заменой m^+ на $-m^-$. Тогда преобразовывая (2), получаем:

$$\ln Q(\beta, \alpha, k) \approx \frac{\bar{g}(\alpha + km^+)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}(\alpha - km^-)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}\pi^2}{6\beta} \quad (4)$$

1.2 Обобщение на случай системы из двух подсистем

Полагается, что протонная и нейтронная системы независимы в том смысле, что гамильтониан ядра является суммой гамильтонианов протонной и нейтронной подсистем. Тогда $\Omega = \Omega_1 \cdot \Omega_2$, то есть статсумма является произведением статсумм подсистем. При этом $\ln \Omega = \ln \Omega_N + \ln \Omega_Z$, а $\ln \Omega_N$ известно — это (4). Также введём индексы Z и N , чтобы различать протонную и нейтронную подсистемы.

$$\begin{aligned} \ln Q(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k) &\approx \frac{\bar{g}_Z(\alpha_Z + km_Z^+)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}_Z(\alpha_Z - km_Z^-)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}_Z\pi^2}{6\beta} + \\ &+ \frac{\bar{g}_N(\alpha_N + km_N^+)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}_N(\alpha_N - km_N^-)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}_N\pi^2}{6\beta} = \\ &= \frac{\bar{g}_Z\alpha_Z^2}{2\beta} + \frac{\bar{g}_N\alpha_N^2}{2\beta} + \frac{a}{\beta} + \frac{k^2 \cdot \bar{g} \cdot \bar{m}^2}{2\beta} \end{aligned}$$

Здесь положено $m_Z^+ = m_Z^-$, $m_N^+ = m_N^-$, то есть $\langle m \rangle = 0$. Также введены новые обозначения: $g = \bar{g}_Z + \bar{g}_N$ — полная плотность одночастичных состояний, $a = \frac{\pi^2}{6} g$ — параметр плотности, $\bar{m}^2 = \frac{1}{g}(m_Z^2 \bar{g}_Z + m_N^2 \bar{g}_N)$.

Мы получили выражение для $\ln Q(\beta, \alpha, k)$. Теперь из него надо извлечь E, Z, N, M . Для этого потребуется «метод перевала» и обратное преобразование Лапласа.

1.3 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 $\Phi(\lambda)$:

$$\begin{aligned}\Phi(\lambda) &= \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda h(x)} dx = \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda(h(x)-h(x_0))} e^{\lambda h(x_0)} dx \approx \\ &\approx \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} \varphi(x_0) \exp\left(\lambda h(x_0) + \frac{1}{2} \lambda h''(x_0)(x-x_0)^2 - \lambda h(x_0)\right) e^{\lambda h(x_0)} dx = \\ &= \varphi(x_0) e^{\lambda h(x_0)} \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} \exp\left(\frac{1}{2} \lambda h''(x_0)(x-x_0)^2\right) dx \ominus\end{aligned}$$

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

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

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 наиболее быстрого 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:

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

1.4 Обратное преобразование Лапласа

Сначала стоит пояснить, зачем нам метод перевала и что вообще происходит. Мы хотим найти плотность одночастичных состояний $\omega(E, Z, N, M)$ из обратного преобразования лапласа

$$\omega(E, Z, N, M) = \frac{1}{(2\pi i)^4} \int Q(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k) \exp(\beta E - \alpha_Z Z - \alpha_N N - kM) d\beta d\alpha_Z d\alpha_N dk$$

Явно интеграл вычислить не получится. Зато вся интегральная сумма набирается в окрестности седловой точки, в окрестности пика функции

$$S = \beta E - \alpha_Z Z - \alpha_N N - kM + \ln Q \quad (5)$$

В окрестности седловой точки первые производные по параметрам равны нулю. Тогда S будет примерно равно

$$\begin{aligned} S(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k) &\approx S_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} \Big|_{\beta_0} (\beta - \beta_0)^2 + \dots + \frac{\partial^2 S}{\partial \beta \partial \alpha_Z} \Big|_{\beta_0, \alpha_{Z0}} (\beta - \beta_0)(\alpha_Z - \alpha_{Z0}) + \dots = \\ &= S_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} \Big|_{\beta_0} (\beta - \beta_0)^2 + \dots + \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_Z} \Big|_{\beta_0, \alpha_{Z0}} (\beta - \beta_0)(\alpha_Z - \alpha_{Z0}) + \dots \quad (6) \end{aligned}$$

Поскольку мы интегрируем в обратном преобразовании Лапласа вдоль мнимой оси, логично ввести следующие переменные:

$$\beta = \beta_0 + ix_1, \quad \alpha_Z = \alpha_{Z0} + ix_2, \quad \alpha_N = \alpha_{N0} + ix_3, \quad k = k_0 + ix_4$$

$$\omega = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \exp \left(S_0 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} x_1^2 - \dots - \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_Z} x_1 x_2 - \dots \right) dx_1 dx_2 dx_3 dx_4$$

Известно, что $\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum a_{ij} x_i x_j \right) dx_1 \dots dx_n = (2\pi)^{n/2} D^{-1/2}$, $D = \det(a_{ij})$ (без доказательства). Тогда, по сути дела, осталось только вычислить определитель вторых производных и e^{S_0} :

$$\omega = \frac{1}{(2\pi)^4} e^{S_0} (2\pi)^{4/2} D^{-1/2} \quad (7)$$

Напомним, что $\ln Q = \frac{\bar{g}_Z \alpha_Z^2}{2\beta} + \frac{\bar{g}_N \alpha_N^2}{2\beta} + \frac{a}{\beta} + \frac{k^2 \bar{g} \cdot m^2}{2\beta}$. Опустим знак среднего в плотностях. Вычислим вторые производные для определителя D .

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} &= \frac{g_Z \alpha_Z^2}{\beta^3} + \frac{g_N \alpha_N^2}{\beta^3} + \frac{k^2 \overline{g m^2}}{\beta^3} + \frac{2a}{\beta^3}; \\
\frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_Z^2} &= \frac{g_Z}{\beta}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_N^2} = \frac{g_N}{\beta}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial k^2} = \frac{g \cdot \overline{m^2}}{\beta}; \\
\frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_Z} &= -\frac{g_Z \alpha_Z}{\beta^2}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_N} = -\frac{g_N \alpha_N}{\beta^2}; \\
\frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial k} &= -\frac{k \overline{g m^2}}{\beta^2}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_Z \partial \alpha_N} = \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_Z \partial k} = \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_N \partial k} = 0;
\end{aligned}$$

Определитель равен $D = 2gg_Z g_N \overline{a m^2} / \beta^6$. Теперь осталось заняться e^{S_0} . Для этого надо преобразовать полученные ранее выражения к хорошему виду. Далее нулевой индекс опускается.

Выразим E через S с помощью (5). В окрестности седловой точки $\frac{\partial S}{\partial \beta} = 0$. Тогда $\frac{\partial S}{\partial \beta} = 0 = E + \frac{\partial \ln Q}{\partial \beta}$. Рассуждая аналогично, получаем:

$$\begin{aligned}
E &= -\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} = \frac{g_Z \alpha_Z^2}{2\beta^2} + \frac{g_N \alpha_N^2}{2\beta^2} + \frac{a}{\beta^2} + \frac{k^2 g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} \\
Z &= \frac{\partial \ln Q}{\partial \alpha_Z} = g_Z \frac{\alpha_Z}{\beta} \\
N &= \frac{\partial \ln Q}{\partial \alpha_N} = g_N \frac{\alpha_N}{\beta} \\
M &= \frac{\partial \ln Q}{\partial k} = \frac{k \overline{g m^2}}{\beta} \Rightarrow k = \frac{M\beta}{g \cdot \overline{m^2}}
\end{aligned}$$

Используем соотношения для основного состояния, учтя, что $g(E > E_F) = 0$:
 $Z = \int g_Z dE_Z = g_Z E_{ZF}$, $N = g_N E_{NF}$, $E_0 = \int g_Z E_Z dE_Z + \int g_N E_N dE_N = \frac{g_Z E_{ZF}^2}{2} + \frac{g_N E_{NF}^2}{2}$

$$\alpha_Z = \frac{Z\beta}{g_Z} = \frac{g_Z E_{ZF} \beta}{g_Z} = \beta E_{ZF}, \quad \alpha_N = \beta E_{NF}$$

$$\begin{aligned}
U &= E - E_0 = \frac{g_Z \alpha_Z^2}{2\beta^2} + \frac{g_N \alpha_N^2}{2\beta^2} + \frac{a}{\beta^2} + \frac{k^2 g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} - \frac{g_Z E_{ZF}^2}{2} - \frac{g_N E_{NF}^2}{2} = \\
&= \frac{a}{\beta^2} + k^2 \cdot \frac{g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} = \frac{a}{\beta^2} + \left(\frac{M\beta}{g \cdot \overline{m^2}} \right)^2 \cdot \frac{g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} = \frac{a}{\beta^2} + \frac{M^2}{2g\overline{m^2}}
\end{aligned}$$

$$\frac{a}{\beta^2} = U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}}$$

$$D = 2gg_Z g_N \overline{a m^2} / \beta^6 \xrightarrow{g_Z \approx g_N \approx g/2} \frac{g^3 \overline{a m^2}}{2\beta^6} = \frac{\overline{g m^2} \cdot (6/\pi^2)^2 a^3}{2\beta^6} = \frac{\overline{g m^2}}{2} \left(\frac{6}{\pi^2} \right)^2 \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)^3 \quad (8)$$

$$S = \beta E - \alpha_Z Z - \alpha_N N - kM + \ln Q = \dots = \frac{2a}{\beta} = 2\sqrt{a \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)}$$

Тогда подставляя S и D в (7), получаем:

$$\omega = \frac{1}{(2\pi)^2} D^{-1/2} e^S = \frac{1}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{2}{g\overline{m^2}} \frac{\pi^2}{6}} \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)^{-3/2} \exp \left(2\sqrt{a \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)} \right)$$

Окончательно получаем

$$\omega(U, M) = \frac{1}{12\sqrt{2g\langle m^2 \rangle}} \frac{\exp\left(2\sqrt{a\left(U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle}\right)}\right)}{\left(U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle}\right)^{3/2}} \quad (9)$$

- g — сумма плотностей одночастичных состояний $g_Z + g_N$ вблизи энергии Ферми.
- $\langle m^2 \rangle = \frac{1}{g}(m_Z^2 g_Z + m_N^2 g_N)$ — средний квадрат проекции одночастичного момента.
- $a = \frac{\pi^2}{6}g$ — параметр плотности.

В таком виде трудно что-либо посчитать, поскольку неизвестно $\overline{m^2}$. В сферически симметричном потенциале $\langle l_x^2 \rangle = \langle l_y^2 \rangle = \underbrace{\langle l_z^2 \rangle}_{\langle m^2 \rangle}$, $\langle l_x^2 \rangle + \langle l_y^2 \rangle + \langle l_z^2 \rangle = \langle l^2 \rangle$. Тогда $\langle m^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle l^2 \rangle$.

В первом приближении можно обойтись классическими соображениями и сказать, что ядро — твёрдое тело, момент инерции которого $J = \overline{m^2}\hbar^2 g$. Для сферически симметричного ядра $J = \frac{2}{5}mR^2$. Тогда

$$\frac{1}{2g\langle m^2 \rangle} = \frac{\hbar^2}{2J} = \frac{\hbar^2}{\frac{4}{5}mR^2} = \frac{\hbar^2 c^2}{\frac{4}{5}mc^2 R^2}$$

1.5 Используемые приближения

В ходе получения формулы (9) было сделано довольно много допущений.

1.5.1 Замена функции g на среднее значение

При вычислении интегралов (3) плотность состояний g была вынесена из-под интеграла как среднее \bar{g} — плотность вблизи энергии Ферми. Явный вид g , пригодный для вычислений, неизвестен.

1.5.2 Низкотемпературное приближение

Поскольку в преобразовании Лапласа в показателе экспоненты стоит $-\beta E_i$, то $1/\beta = T$ имеет смысл температуры. Мы использовали приближение $\alpha + km^+ \gg 1$ для вычисления интегралов (3): интегрировали не до $\frac{\alpha + km^+}{\beta}$, а до ∞ , и использовали табличный интеграл.

$$\alpha_Z + km_Z^+ = \beta E_{ZF} + \frac{M\beta}{g \cdot m^2} \gg 1$$

1.5.3 Использование метода перевала

Интегральная сумма набирается в окрестности пика функции S (5), то есть около седловой точки. Там проводится разложение в ряд до слагаемых второго порядка (6). Пренебрегаем слагаемыми более высокого порядка.

1.5.4 Равенство плотностей одночастичных состояний для протонов и нейтронов

При вычислении определителя D в формуле (8) было сделано приближение для плотностей $g_Z = g_N = g/2$.

1.6 Получение формулы количества уровней

Для этого надо узнать, сколько состояний при данной энергии возбуждения имеют полный угловой момент M от I до $I + 1$, то есть продифференцировать (9):

$$\rho(U, I) = \omega(U, M = I) - \omega(U, M = I + 1) \approx - \left. \frac{\partial \omega}{\partial M} \right|_{M=I+1/2}$$

$$\omega(U, M) = \frac{\hbar}{12\sqrt{2J}} \frac{\exp\left(2\sqrt{a\left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)}\right)}{\left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)^{3/2}}, \quad U - \frac{M^2\hbar^2}{2J} = B$$

$$\ominus - \frac{\hbar}{12\sqrt{2J}} \frac{\exp\left(2\sqrt{aB}\right)}{B^3} \left\{ -\sqrt{a} \cdot \frac{\hbar^2}{2J} \cdot 2MB + \frac{3\hbar^2}{2 \cdot 2J} \cdot 2MB^{1/2} \right\}$$

При условии $\sqrt{a\left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)} \gg 1$ можно оставить только первое слагаемое в скобке. Тогда говоря, что $M = I + 1/2$, $M^2 = I(I + 1)$, получаем:

$$\boxed{\rho(U, I) \approx \frac{2I + 1}{12} \sqrt{a} \left(\frac{\hbar^2}{2J}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{\exp\left(2\sqrt{a\left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)}\right)}{\left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)^2}} \quad (10)$$

1.7 Получение формулы количества состояний в зависимости от энергии

Для получения формулы (9), не зависящей от проекции углового момента M надо проинтегрировать по этой переменной. Здесь мы используем приближение малых моментов: $\frac{M^2}{2J} \ll U$. Разложим сначала показатель экспоненты, а затем знаменатель:

$$2\sqrt{a\left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)} = 2\sqrt{aU} \sqrt{1 - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle U}} \approx 2\sqrt{aU} \left(1 - \frac{M^2}{2 \cdot 2g\langle m^2 \rangle U}\right) = 2\sqrt{aU} - \frac{M^2}{2\sigma^2}$$

$$\sigma^2 = \langle m^2 \rangle g \sqrt{\frac{U}{a}} = \langle m^2 \rangle g t \text{ — параметр спиновой зависимости.}$$

$$12\sqrt{2g\langle m^2 \rangle} \left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)^{3/2} \approx 12\sqrt{2\frac{\sigma^2}{\sqrt{U}}} \sqrt{a} \cdot U^{3/2} = 12\sqrt{2}\sigma U^{5/4} a^{1/4}$$

$$\omega(U) = \sum_M \omega(U, M) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(U, M) dM = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\left(2\sqrt{aU}\right)}{12\sqrt{2}\sigma a^{1/4} U^{5/4}} \exp\left(-\frac{M^2}{2\sigma^2}\right) dM$$

$$\boxed{\omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \cdot \frac{\exp\left(2\sqrt{aU}\right)}{a^{1/4} U^{5/4}}} \quad (11)$$

2 Алгоритм перебора многочастичных состояний

Многочастичные состояния атомных ядер складываются из одночастичных состояний, характеризуемых энергией и определёнными квантовыми числами. Нуклоны могут занимать или не занимать эти состояния. Условимся, что наличие частицы обозначается «1», отсутствие — «0». Тогда многочастичное состояние может быть задано как последовательность нулей и единиц. Тогда основное состояние ядра будет выглядеть как $\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, \dots\}$.

Вычисления проводились в предположении, что протоны и нейтроны сидят в одной потенциальной яме. Пренебрегаем кулоновским отталкиванием протонов по сравнению с сильным взаимодействием. Ход работы алгоритма такой:

1. Ввод параметров: количество нейтронов N_n , протонов N_p , а также энергия возбуждения U_{\max} .
2. Построение массива одночастичных состояний.
3. Перебор многочастичных состояний отдельно для нейтронной и протонной подсистем с энергиями возбуждения от 0 до U_{\max} с некоторым шагом ΔU . Здесь также собирается информация о проекциях угловых моментов и чётности. Это учтено в случае модифицированного осциллятора (Nillson Model).
4. Перемножение количеств состояний нейтронной и протонной подсистем с учётом энергии.

2.1 Перебор многочастичных состояний для подсистемы

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 $\{0, \dots, 1, \underbrace{1}_{N+1}, 0, \dots\}$. Затем сдвигаем всю

систему в исходное положение, кроме самой последней частицы — мы перемещаем её из $(N+1)$ в $(N+2)$, а с отстатком 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. Для более подробного объяснения надо смотреть код программы.

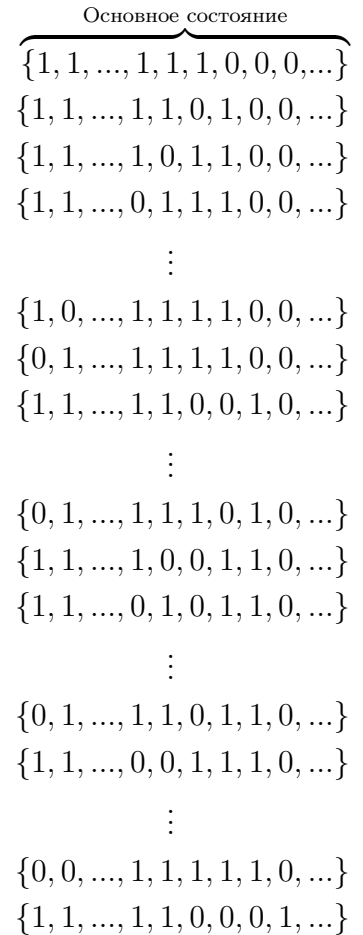


Рисунок 2 — Алгоритм перебора многочастичных состояний

2.2 Получение количества многочастичных состояний системы из количества многочастичных состояний подсистемы

Проще всего это понять на примере эквидистантного спектра (гармонического осциллятора). Обозначим \mathcal{K} — количество многочастичных состояний. Пусть мы нашли $\mathcal{K}_n(u)$. Теперь надо как-то найти $\mathcal{K}(u)$ — количество многочастичных состояний системы при безразмерной энергии возбуждения $u = \frac{U}{\hbar\omega}$.

Таблица 1 — Зависимость $\mathcal{K}_n(u)$

$\mathcal{K}_n(u)$	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	...

- $u = 0$

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

- $u = 1$

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

- $u = 2$

Будут 3 слагаемых:

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

- $u = 3$

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

В общем случае
$$\mathcal{K}(u) = \sum_{i=0}^u \mathcal{K}_n(i)\mathcal{K}_p(u-i) \quad (12)$$

Далее представлены результаты, полученные в течение предыдущих семестров. Новые результаты — в параграфе про модифицированный осциллятор.

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: $\left\{ \underbrace{\bullet, \bullet}_{\varepsilon_1=3}, \underbrace{\bullet, \bullet, \dots}_{\varepsilon_2=6}, \underbrace{\bullet, \dots}_{\varepsilon_3=9}, \underbrace{\bullet, \dots}_{\varepsilon_4=11}, \underbrace{\bullet, \dots}_{\varepsilon_5=12}, \underbrace{\bullet, \bullet, \dots, \bullet, \circ, \dots}_{\varepsilon_6=14}, \underbrace{\circ, \dots}_{\varepsilon_7=17}, \dots \right\}$

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 $Z = N = 22$.

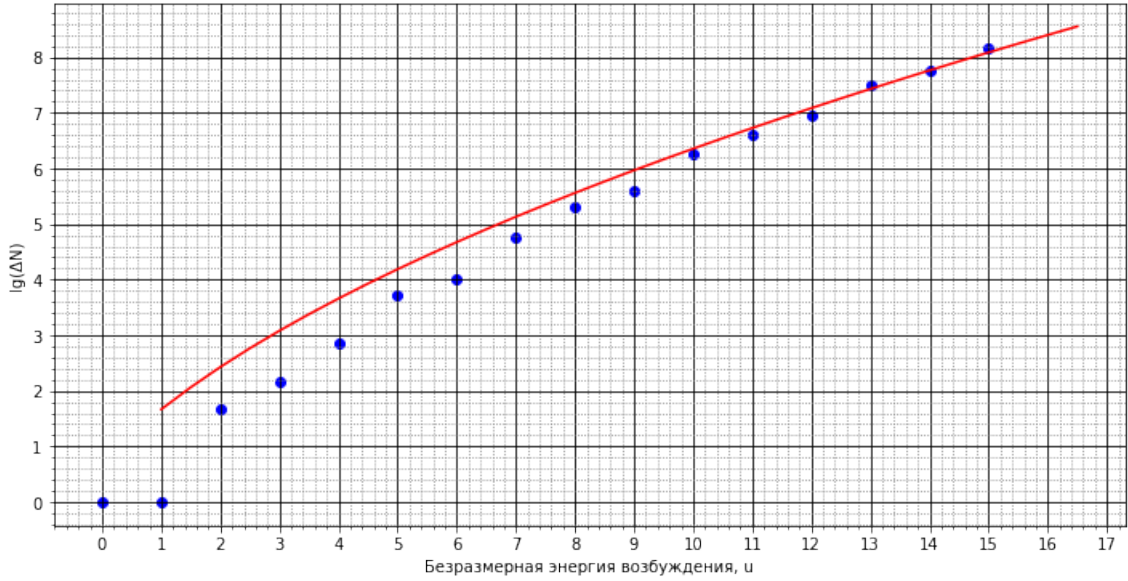


Рисунок 3 — Результаты для $N = Z = 22$. Безразмерный параметр $a = 10.0$

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 [2] в *Приложении табл. П2* есть таблица данных, где указаны значения $a[\text{МэВ}^{-1}]$. Так, для ядра ${}^{44}_{20}\text{Ca}$ параметр $a = 6.34 \text{ МэВ}^{-1}$. 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 $\mathcal{K}_n(u = 2) = \span style="border: 1px solid black; padding: 2px;">9$.

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 (12), 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	...

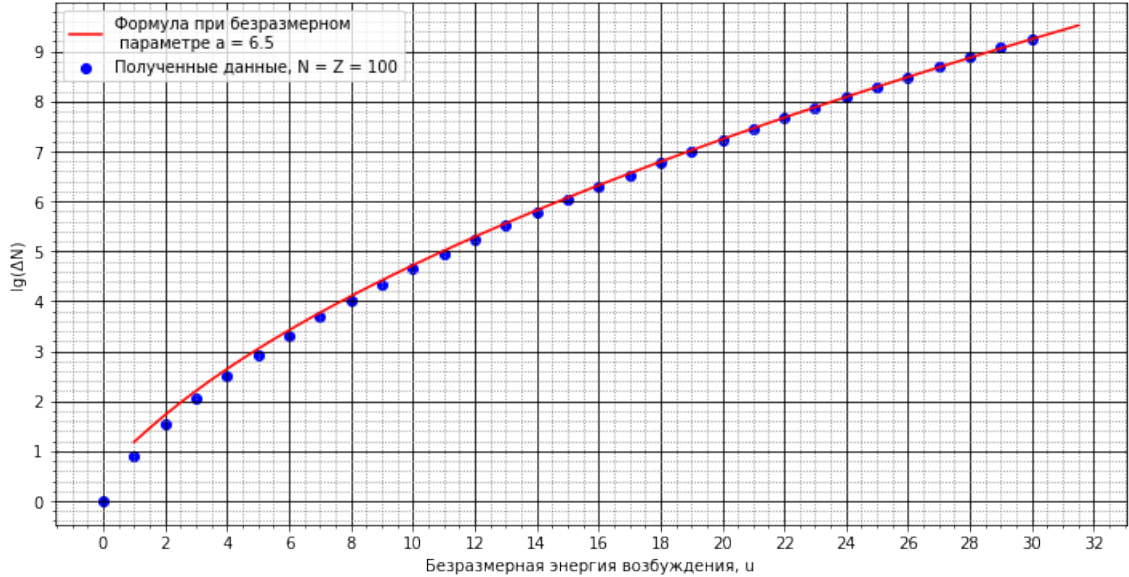


Рисунок 4 — Одномерный осциллятор. Безразмерный параметр $a = 6.5$

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 [3, 2] 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 $u = 1$

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 (11). 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

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

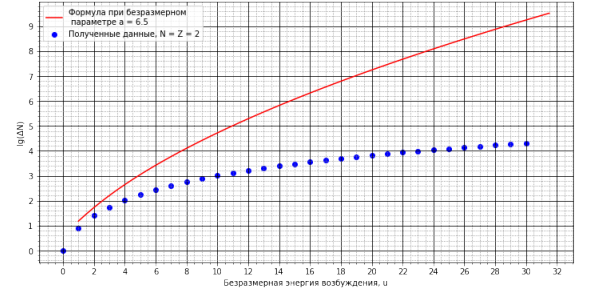
$$\lg(\Delta N_T) - \lg(\Delta N_M) = \lg(2) \approx 0.3$$

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.

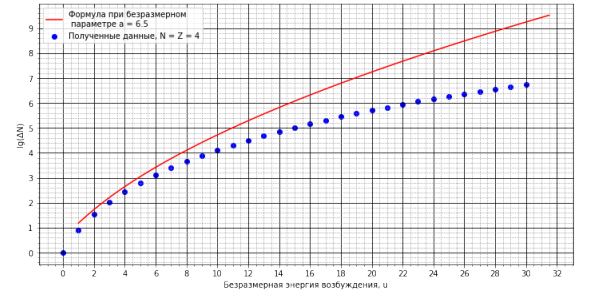
1. $N = Z = 2$. Здесь практически сразу же идёт несоответствие.
2. $N = Z = 4$. Здесь «серьёзное» отклонение наступает при $u = 7$.
3. $N = Z = 6 \implies u = 13$
4. $N = Z = 8 \implies u = 20$
5. $N = Z = 10 \implies u = 30$

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

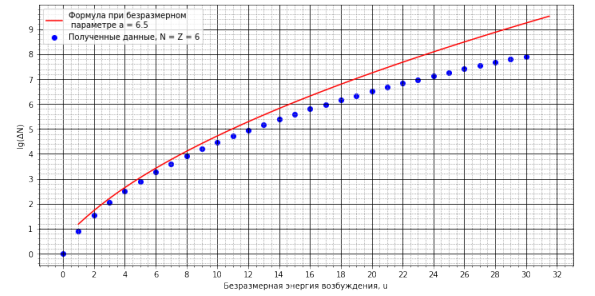
При этом стоит отметить, что полученные значения оказываются всегда под аналитической кривой. Это связано с тем, что при, допустим, энергии возбуждения $u = 20$,



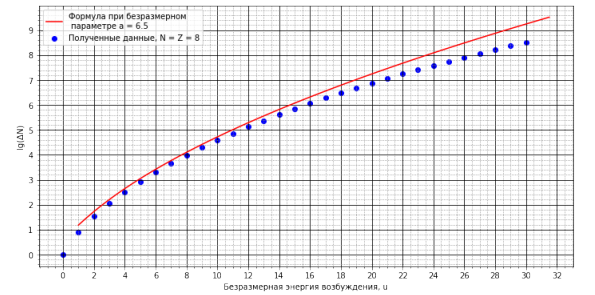
(a)



(b)



(c)



(d)

Рисунок 5 — Результаты для спектра одномерного осциллятора для $N = Z = 2, 4, 6, 8, 10$ соответственно.

$N = Z = 4$ 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.

5 Модель модифицированного осциллятора

Здесь используется модель 3-мерного осциллятора (значения энергий взяты из модели Нильсона). На рисунке 6 представлены одночастичные состояния в зависимости от энергии и некоторого параметра деформации, который у нас полагается равным нулю. Из этой диаграммы взяты энергии и квантовые числа. Так, на уровне $1p_{3/2}$ расположены 4 одночастичных состояния, выстроенных в порядке убывания проекции углового момента.

В процессе перебора многочастичных состояний собирается информация по проекции результирующего момента J .

Допустим, мы получили для обеих подсистем распределения $\frac{\Delta N^+}{\Delta U \Delta J} \equiv \mathcal{K}_J^+(U)$ и $\mathcal{K}_J^-(U)$ — количество многочастичных состояний в диапазоне энергии возбуждения $[U, U + \Delta U]$, положительной (отрицательной) чётностью и проекцией J углового момента, и хотим теперь получить $\mathcal{K}_J^+(U)$ и $\mathcal{K}_J^-(U)$ для системы.

В программе удобно работать с целыми числами, то есть не с J , а с $2J$. Максимальное значение $2J$ было выбрано равным 50. Далее будет видно, что этого вполне хватает.

Для того, чтобы получить $\mathcal{K}_J^+(U)$ и $\mathcal{K}_J^-(U)$ с определённой проекцией момента $2J$, надо сложить \mathcal{K}_n^{+-} и \mathcal{K}_p^{+-} определённым образом, то есть модифицировать выражение (12):

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_J^+(U) &= \sum_{u=0}^U \sum_{i=-2J}^{2J} \mathcal{K}_{-50+2J+i}^{n+}(u) \cdot \mathcal{K}_{50-i}^{p+}(U-u) + \mathcal{K}_{-50+2J+i}^{n-}(u) \cdot \mathcal{K}_{50-i}^{p-}(U-u) \\ \mathcal{K}_J^-(U) &= \sum_{u=0}^U \sum_{i=-2J}^{2J} \mathcal{K}_{-50+2J+i}^{n+}(u) \cdot \mathcal{K}_{50-i}^{p-}(U-u) + \mathcal{K}_{-50+2J+i}^{n-}(u) \cdot \mathcal{K}_{50-i}^{p+}(U-u) \end{aligned} \quad (13)$$

Целью было получить плотность состояний для ядер ${}^{58}_{27}\text{Co}$ и ${}^{58}_{28}\text{Ni}$ для исследования реакции ${}^{58}_{28}\text{Ni}(n,p){}^{58}_{27}\text{mCo}$. Для этого помимо введения в алгоритм угловых моментов и чётности пришлось сделать обобщение для неравного количества нейтронов и протонов. Количество многочастичных состояний системы $\mathcal{K}_J^+(U)$ и $\mathcal{K}_J^-(U)$ будет считаться по формуле (13).

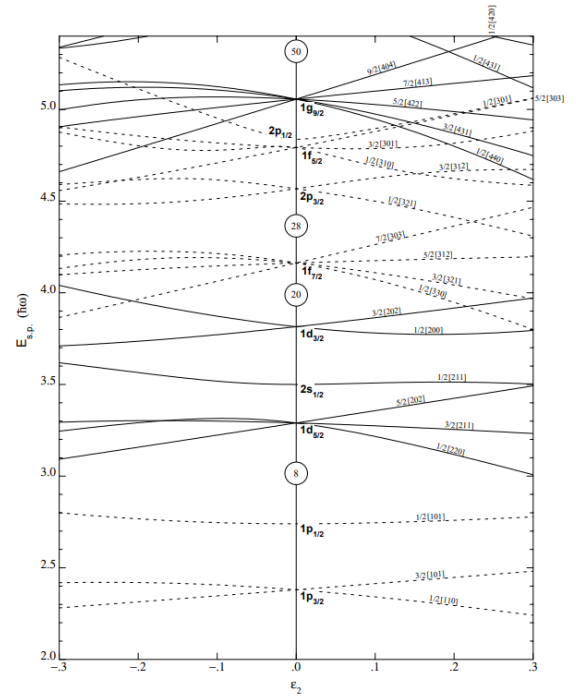


Figure 4. Nilsson diagram for protons or neutrons, $Z, N \leq 50$ ($\epsilon_2 = 0$).

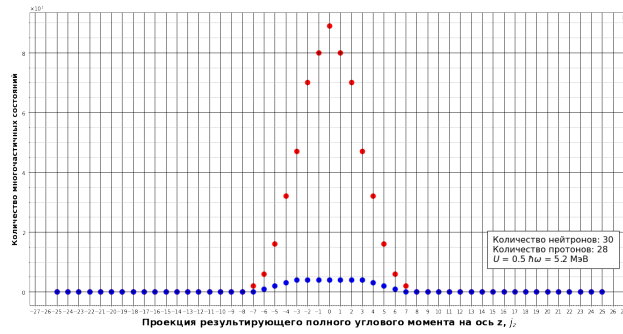
(a)

Рисунок 6 — Диаграмма Нильсона для $N, Z < 50$

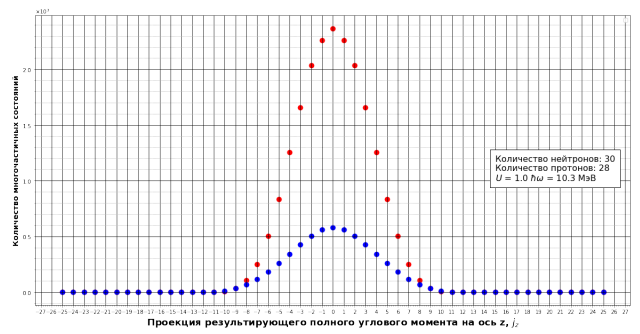
В программе работа ведётся в безразмерных энергиях возбуждения $u = \frac{U}{\hbar\omega}$, где $\hbar\omega \approx 40A^{-1/3}$ МэВ. Это получается в книге Бора и Моттельсона (формула 2.131 [3]).

5.1 Результаты моделирования. Проверка аналитической формулы плотности состояний

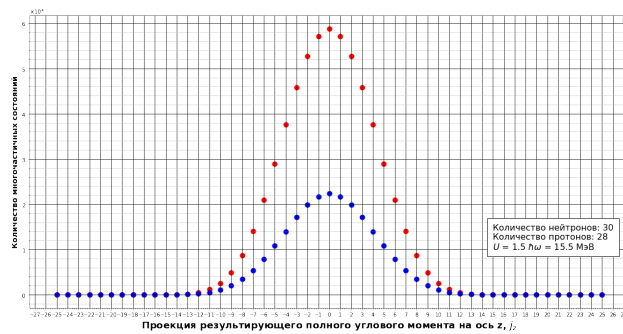
Пусть на графиках красные точки отвечают положительной чётности многочастичных состояний, а синие — отрицательной. Для ядра $^{58}_{28}\text{Ni}$ получаются следующие зависимости:



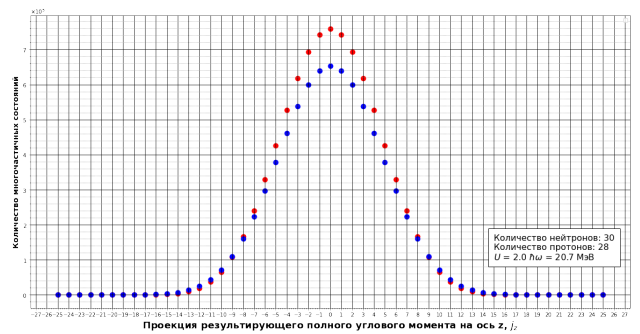
(a) $N = 30, Z = 28, U = 5.2$ МэВ



(b) $N = 30, Z = 28, U = 10.3$ МэВ



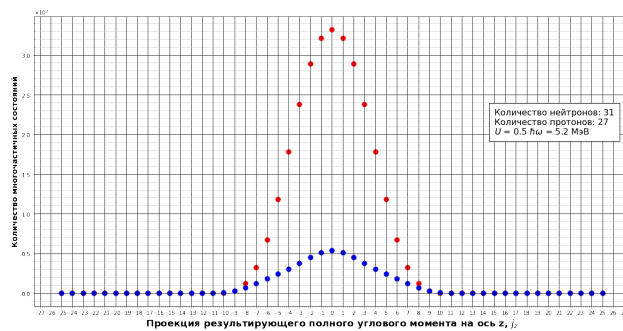
(c) $N = 30, Z = 28, U = 15.5$ МэВ



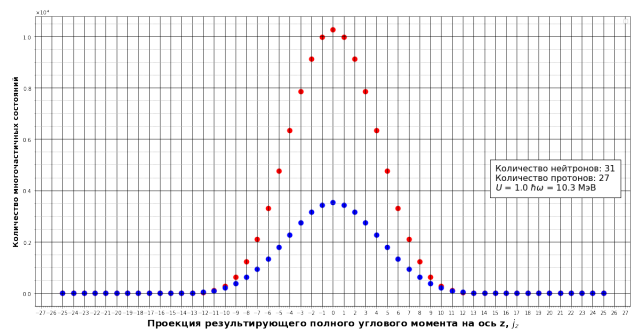
(d) $N = 30, Z = 28, U = 20.7$ МэВ

Видно, что при больших энергиях положительные и отрицательные чётности практически сравниваются, а при малых — преобладает положительная чётность.

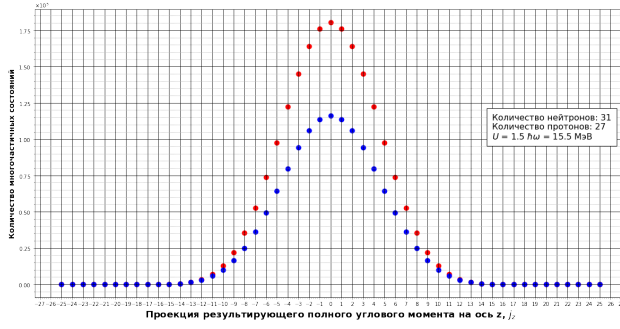
Для ядра кобальта получаем нечто похожее. Сначала преобладает положительная чётность, а потом при больших энергиях чётности сравниваются.



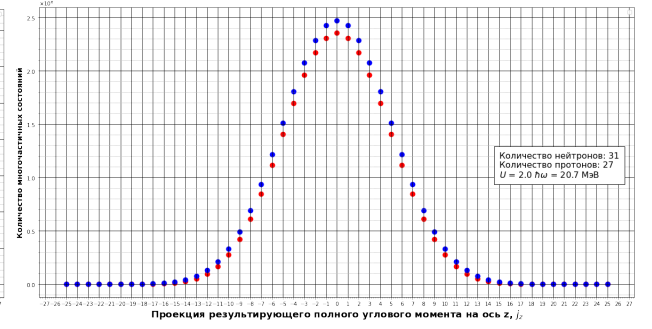
(e) $N = 31, Z = 27, U = 5.2$ МэВ



(f) $N = 31, Z = 27, U = 10.3$ МэВ

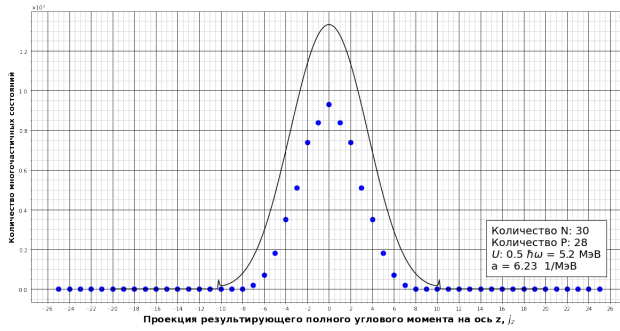


(g) $N = 31, Z = 27, U = 15.5$ МэВ

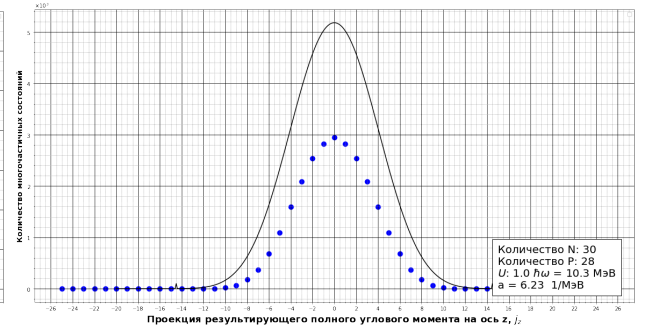


(h) $N = 31, Z = 27, U = 20.7$ МэВ

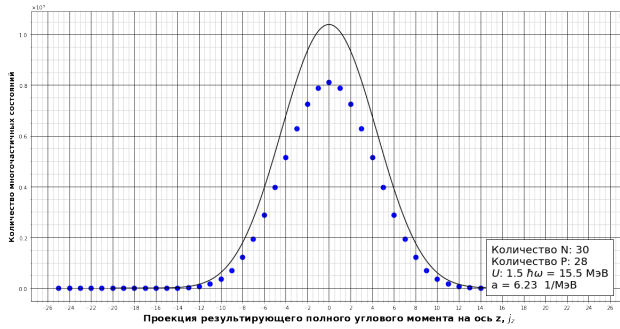
Надо сравнить полученные результаты с теорией. Проблема в том, что в теоретической формуле (9) отражены зависимости только от энергии и проекции полного углового момента. Там нет чётности. Для сравнения с этой формулой надо просуммировать чётные и нечётные вклады.



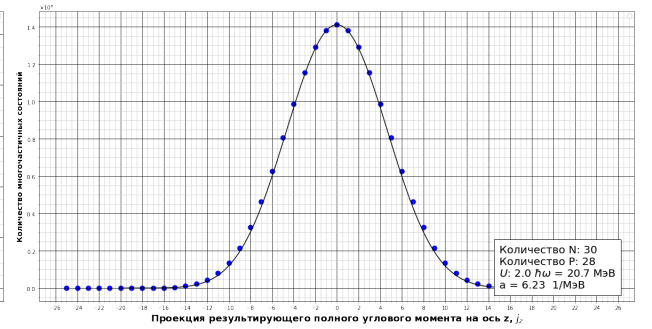
(i) $N = 30, Z = 28, U = 5.2$ МэВ



(j) $N = 30, Z = 28, U = 10.3$ МэВ



(k) $N = 30, Z = 28, U = 15.5$ МэВ



(l) $N = 30, Z = 28, U = 20.7$ МэВ

Параметр плотности $a = \frac{\pi^2}{6}g$ был выбран равным 6.23 МэВ^{-1} так, чтобы кривая совпадала с модельными данными при наивысшей энергии, поскольку чем больше энергии, тем точнее работает формула. Из-за резкой экспоненциальной зависимости возможен точный выбор этого параметра. Параметр r_0 в формуле $R = r_0 A^{1/3}$ был выбран равным 1.1 фм . Тогда

$$\frac{1}{2g\langle m^2 \rangle} \approx \frac{\hbar^2 c^2}{\frac{4}{5} m c^2 R^2} = \frac{197^2 \text{ МэВ}^2 \text{ фм}^2}{0.8 \cdot 939 \text{ МэВ} \cdot 58 \cdot 1.1^2 \text{ фм}^2 \cdot 58^{2/3}} \approx 0.049 \text{ МэВ}$$

Табличный параметр плотности в книге [2] для ^{58}Ni равен 5.44 МэВ^{-1} .

Видно, что при малых энергиях наблюдается отличие между смоделированными данными и теорией. Если посмотреть на распределение $\frac{\Delta N}{\Delta U}$ вне зависимости от проекции

углового момента и чётности, то увидим, что действительно есть некоторое различие. Так, для 10.3 МэВ различие будет равным, судя по графику, $\approx 10^{0.2} \approx 1.6$.

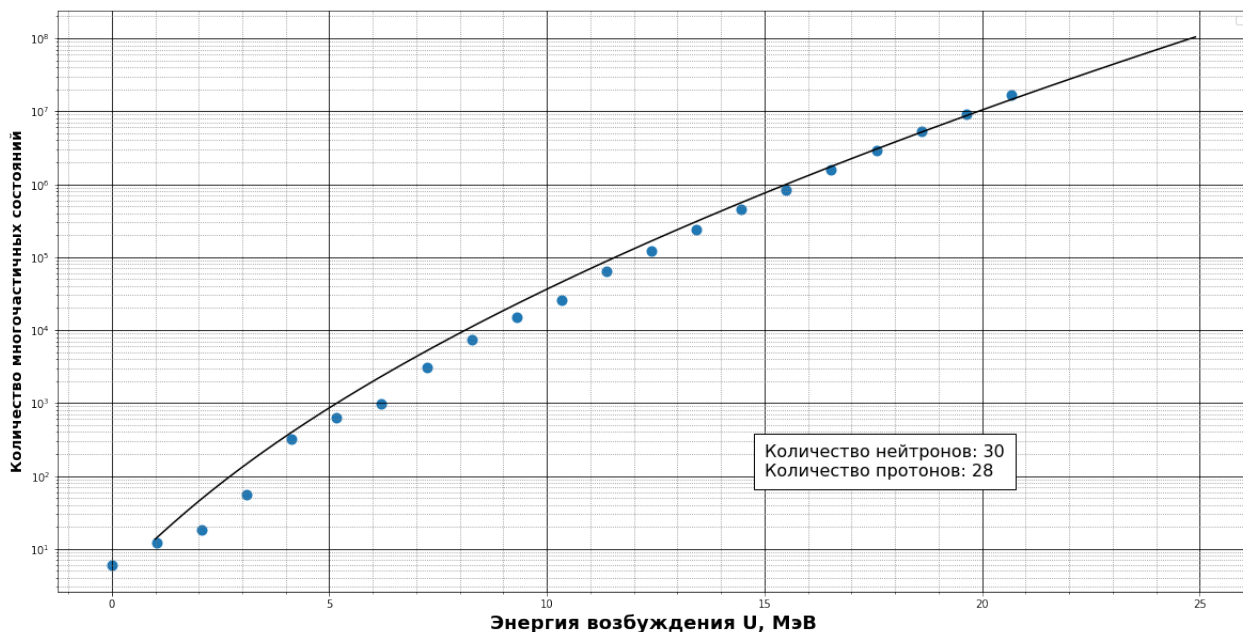
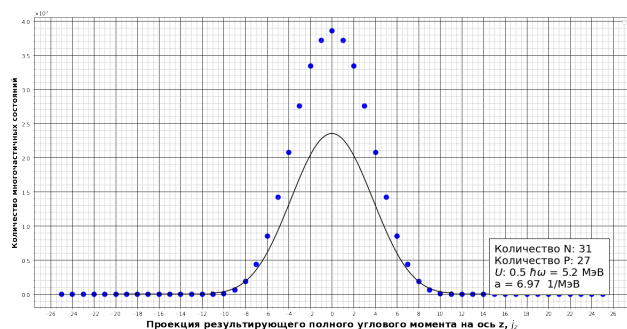
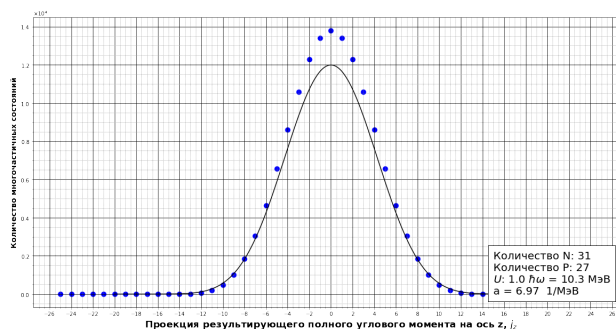


Рисунок 7 — Зависимость $K(U)$ при $N = 30, Z = 28$

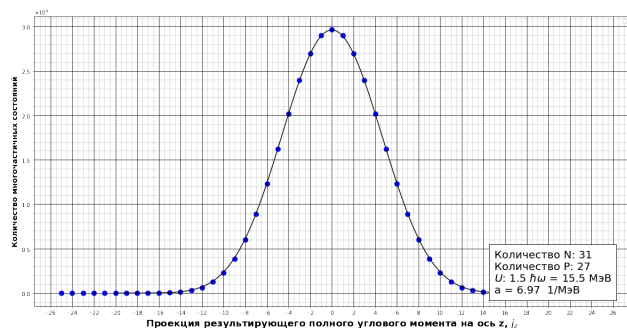
Для ядра ^{58}Co получаем:



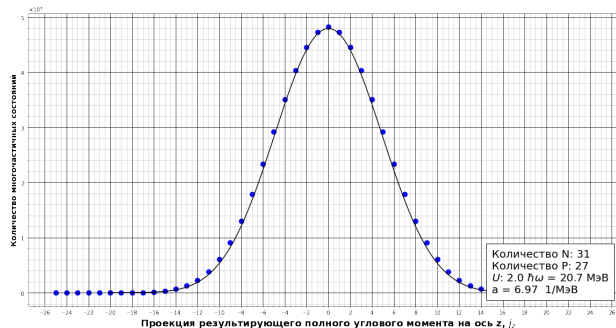
(a) $N = 31, Z = 27, U = 5.2$ МэВ



(b) $N = 31, Z = 27, U = 10.3$ МэВ



(c) $N = 31, Z = 27, U = 15.5$ МэВ

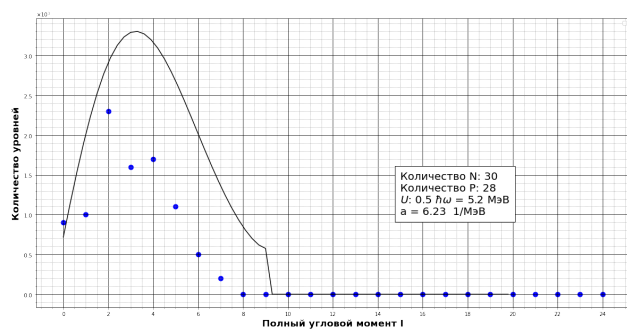


(d) $N = 31, Z = 27, U = 20.7$ МэВ

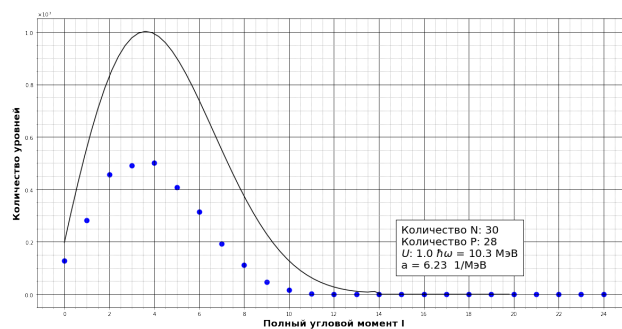
Здесь $r_0 = 1.2$ фм, $a = 6.97$ МэВ $^{-1}$. Примечательно то, что теперь аналитическая кривая при малых энергиях находится под смоделированными данными.

5.2 Проверка аналитической формулы плотности уровней

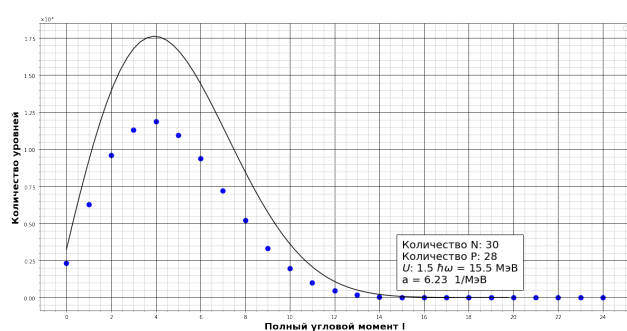
Проверяется формула (10). Используются те же параметры, что и ранее при проверке (9). Для ^{58}Ni получаем



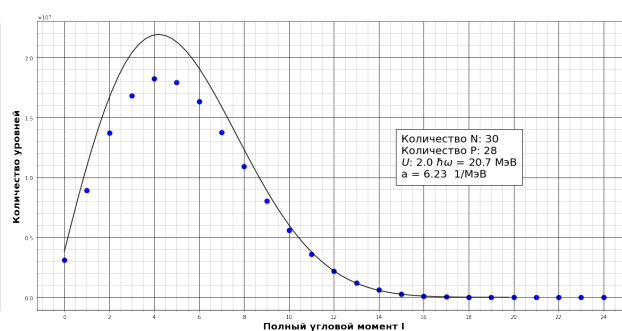
(e) $N = 30, Z = 28, U = 5.2$ МэВ



(f) $N = 30, Z = 28, U = 10.3$ МэВ

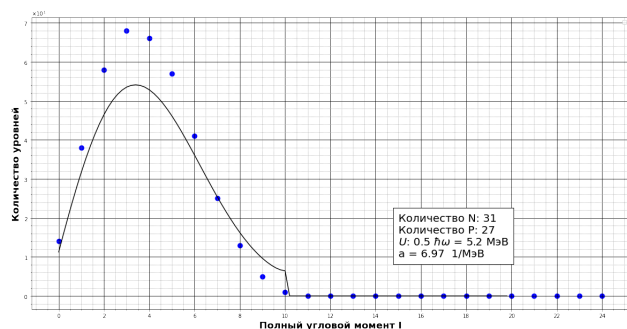


(g) $N = 30, Z = 28, U = 15.5$ МэВ

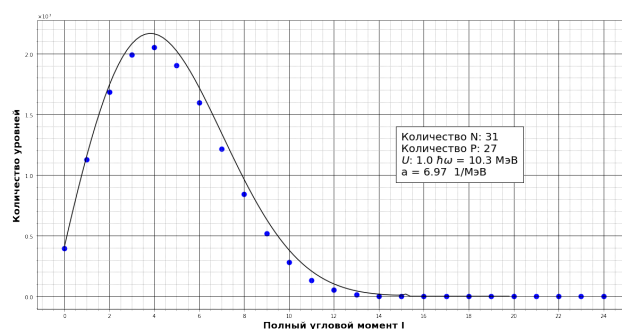


(h) $N = 30, Z = 28, U = 20.7$ МэВ

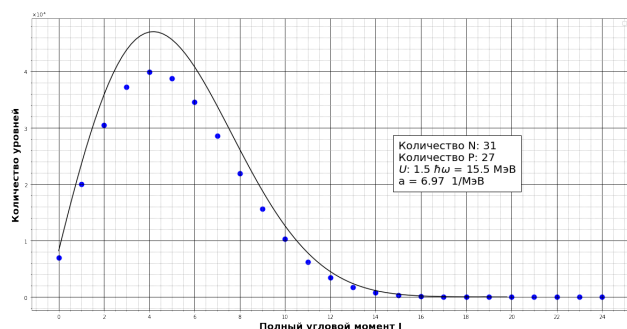
Для ^{58}Co получаем:



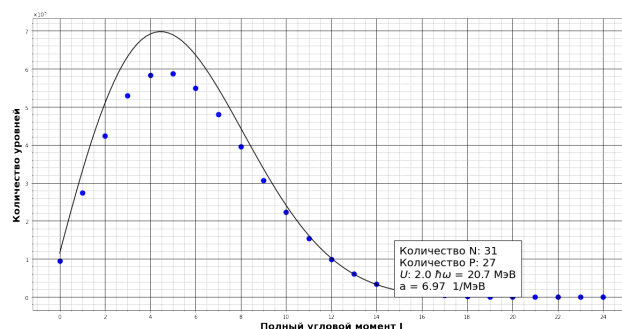
(i) $N = 31, Z = 27, U = 5.2$ МэВ



(j) $N = 31, Z = 27, U = 10.3$ МэВ



(k) $N = 31, Z = 27, U = 15.5$ МэВ



(l) $N = 31, Z = 27, U = 20.7$ МэВ

Можно подытожить, что чем больше энергия возбуждения, тем точнее будут

результаты. Так и должно быть в силу приближений, используемых в выводе аналитических формул. При малых энергиях всё больше начинает сказываться дискретность спектра.

6 Моделирование ядерных реакций в программном комплексе Talys

Существует целый ряд программных комплексов, которые основаны на схожих моделях прямых, предравновесных и компаунд-ядерных процессах, таких как полные и парциальные сечения ядерных реакций, а также спектры испускаемых частиц. В целях унификации ведётся работа по созданию общего набора входных параметров для ядерных моделей — Reference Input Parameter Library (RIPL-3).

К числу программ, использующих по умолчанию параметры из RIPL-3, относится общедоступный программный комплекс TALYS-1.9 [1] с открытым кодом. Этот комплекс позволяет моделировать столкновения ядер с лёгкими частицами, в том числе нейтронами, с энергиями до 200 МэВ. Благодаря тому, что параметры (используемые по умолчанию) ядерных моделей, включённых в TALYS, подобраны по результатам множества тестов, данный программный комплекс обеспечивает реалистичное описание широкого круга наблюдаемых в широком круге ядерных реакций. В качестве первого шага были рассмотрены две реакции:



Были измерены следующие сечения:

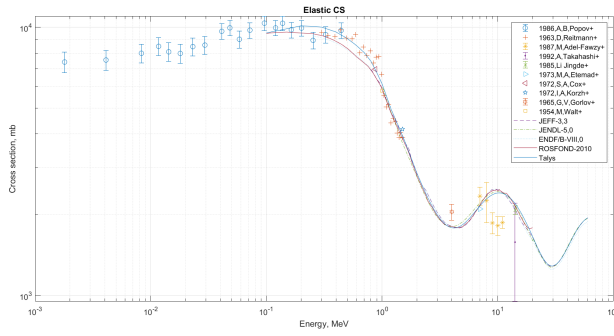
- Сечение упругого рассеяние σ_{el_en} во входном канале
- Полное сечение реакции σ_{tot_en} во входном канале
- Сечение упругого рассеяние σ_{el_ex} в выходном канале
- Полное сечение реакции σ_{tot_ex} в выходном канале
- Сечение образования основного состояния ядра (g, ground-state)
- Сечение образования изомерного состояния ядра (m, isomeric-state)
- Полное сечение образования определённого ядра (g+m)

Для начала были выбраны параметры по умолчанию. Проведено сравнение с библиотеками ядерных данных в базах данных ENDF (Evaluated Nuclear Data File) и EXFOR (Experimental Nuclear Reaction Data).

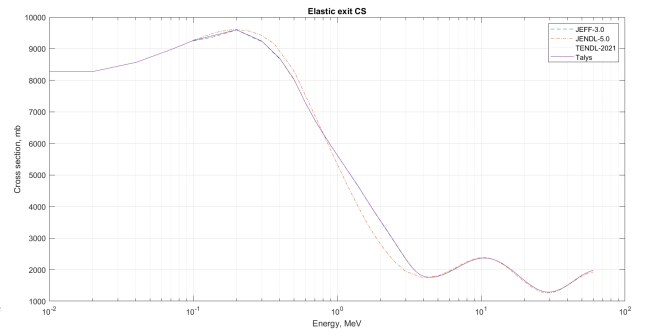
Смоделированные и табличные данные обрабатывались в пакете MATLAB®. Там же были построены графики.

6.1 Результаты для ${}^{93}\text{Nb}$

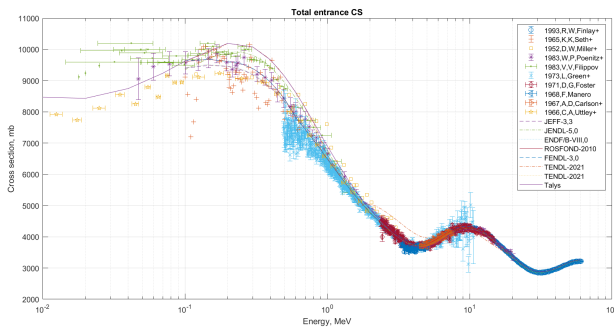
На графиках представлены результаты моделирования (Talys), данные из библиотек JEFF-3.3, JENDL-5.0, ENDF/B-VIII.0, ROSFOND-2010, FENDL-3.0, TENDL-2021, входящих в базу данных ENDF, а также результаты авторов, входящих в базу данных EXFOR.



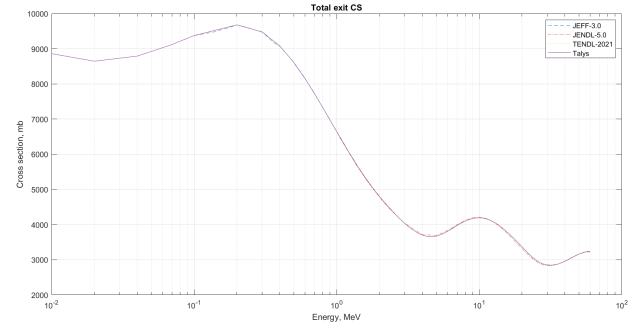
(m) Elastic Entrance



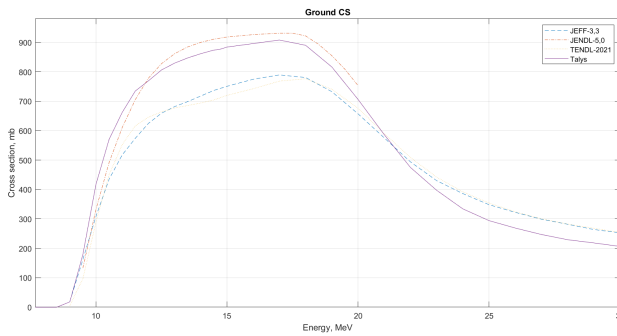
(n) Elastic Exit



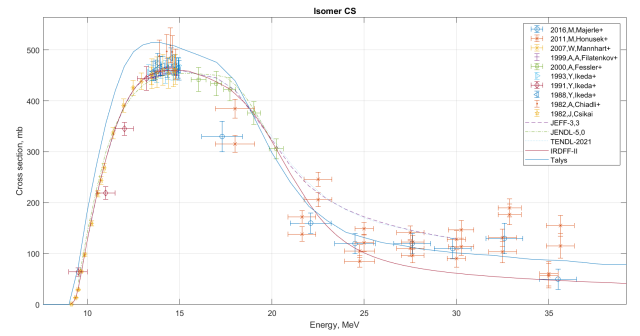
(o) Total Entrance



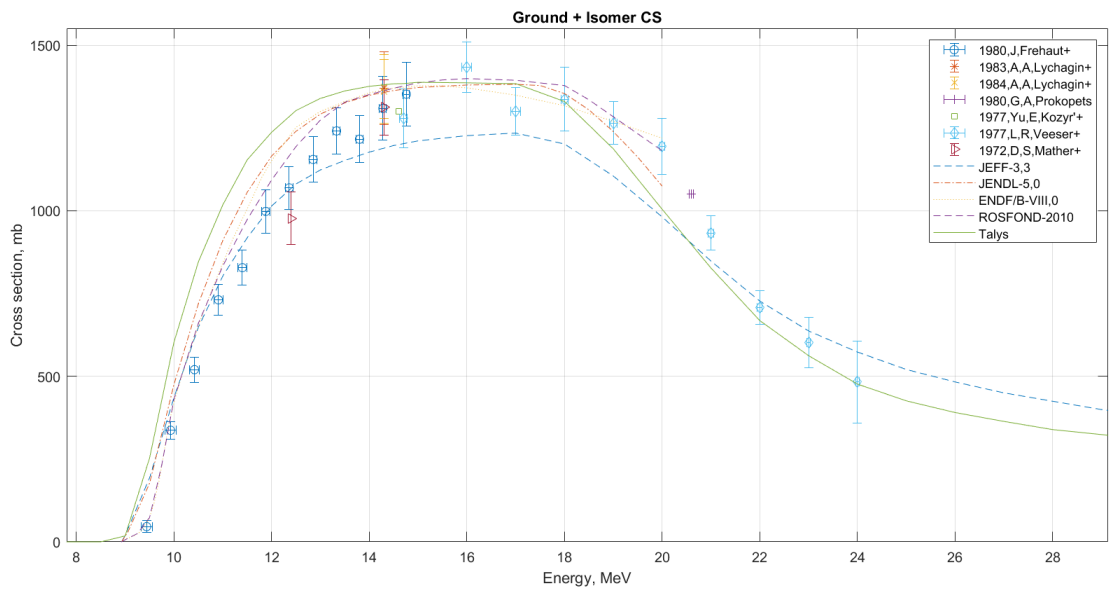
(p) Total Exit



(q) Ground

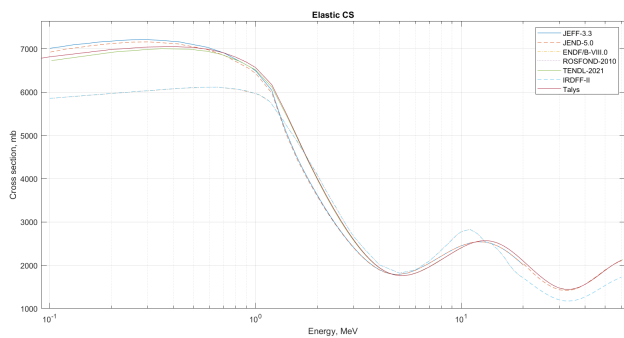


(r) Isomer

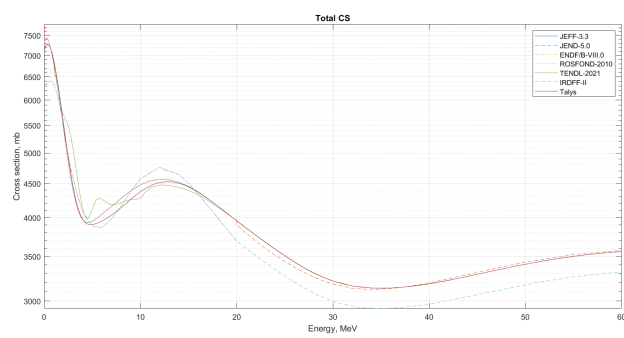


(s) Ground + Isomer

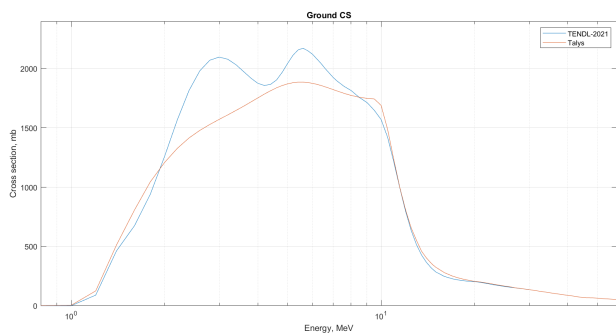
6.2 Результаты для In



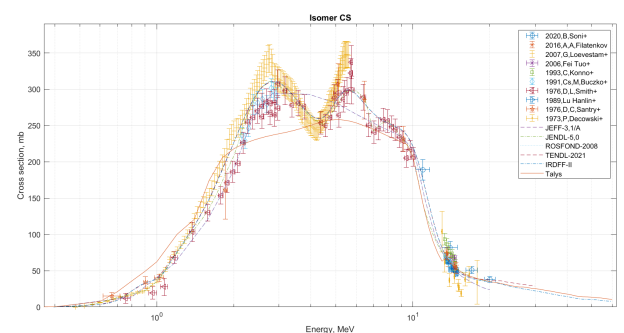
(t) Elastic



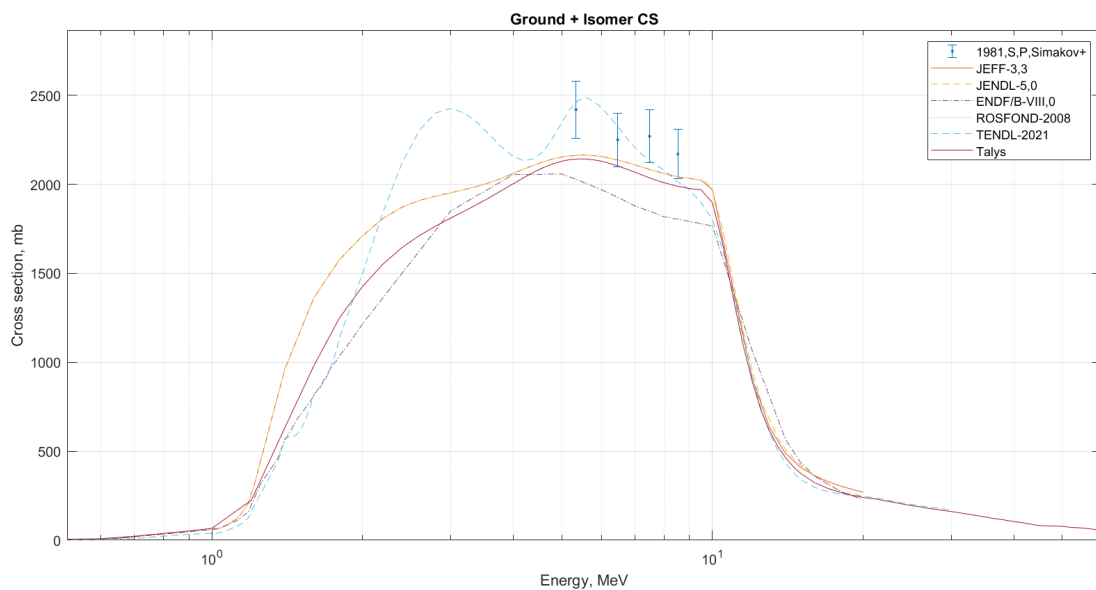
(u) Total



(v) Ground



(w) Isomer



(x) Ground + Isomer

Видно, что в целом наблюдается разумное согласие между смоделированными данными в пакете Talys и табличными данными.

7 Заключение

В работе развивались три направления (которые, конечно, связаны друг с другом):

- Вывод аналитических формул для плотности состояний и уровней атомных ядер.
- Моделирование плотности состояний и уровней с зависимостью от энергии возбуждения, проекции углового момента и чётности в различных моделях ядра.
- Моделирование ядерных реакций в программном комплексе Talys.

Результаты моделирования плотности состояний и уровней были сверены с аналитической формулой. Для больших энергий наблюдается сходство, а для малых — расхождение результатов, поскольку приближения, использованные при выводе, становятся уже слишком грубыми.

Также стоит отметить то, что для ядер ^{58}Co и ^{58}Ni при малых энергиях возбуждения доминирует положительная чётность, а при больших чётности сравниваются.

При моделировании в программном комплексе Talys были исследованы 7 (5) реакций. Наблюдается разумное согласие между полученными и табличными данными.

7.1 Планы на будущее

- Встроить алгоритм перебора многочастичных состояний в Talys и посмотреть на результаты.
- Моделирование с использованием других моделей ядра. Было показано, что в модели прямоугольной ямы параметр плотности получается меньше табличного, а в осцилляторе — больше табличного. Это свидетельствует о том, что ядерный потенциал представляет из себя нечто среднее между этими двумя моделями.

Список литературы

- [1] A.Koning, S.Hilaire, S.Goriely. TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. - 2017.
- [2] Ю.В.Соколов. Плотность уровней атомных ядер. - Москва, Энергоатомиздат, 1990.
- [3] О.Бор, Б.Моттelson. Структура атомного ядра. Том 1. Одночастичное движение. - Москва, Мир, 1971.
- [4] 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.
- [5] 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.