Министерство науки и высшего образования

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
«МОСКОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ»
(НИЯУ «МИФИ»)

УДК 539.17

ОТЧЁТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ И ДЕЛЕНИЕ ЯДЕР ПРИ НИЗКИХ И СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ И ПРОБЛЕМА МИКРОСТРУКТУРЫ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДЕР

Исполнитель темы студент группы Б19-102	______________________ подпись, дата	Д. А. Ситьков
Научный руководитель д-р физ.-мат. наук, проф.	______________________ подпись, дата	А. Л. Барабанов

Москва 2023

Оглавление

Введение

В процессе деления ядро проходит процесс, который заканчивается появлением двух возбужденных ядерных осколков. Они, в свою очередь, претерпевают череду распадов, снимающих возбуждение, и оказываются в своих основных состояниях (либо же в изомерных возбуждённых состояниях).

По мере протекания процесса форма ядра меняется, поддерживая и удлиняя образующуюся шейку между двумя будущими осколками. В итоге система переходит потенциальный барьер и стремится к неадиабатичному процессу разрыва данного региона — образуются два разлетающихся ядерных осколка.

В данной работе продолжается решение задачи в потенциале двухцентрового симметричного осциллятора, описанного в работе [1], что является хорошим приближением реального потенциала деформирующегося в ходе деления ядра — исследуются энергетические уровни модели с учётом ядерного спин-орбитального взаимодействия. В главе 1 представлены результаты, которые были получены в прошлом семестре, в главах 2–10 — результаты рассмотренного в этом семестре спин-орбитального взаимодействия.

Кроме процесса деления ядер в главе 11 данной работы рассматривается важный вопрос ядерного синтеза. А именно, при проектирования установок, в которых предполагается осуществление управляемой реакции термоядерного синтеза $\mathrm{d} + \mathrm{t} \to {}^4\mathrm{He} + \mathrm{n}$ с образованием нейтронов с энергией 14,1 МэВ (в системе центра масс), представляет интерес исследование реакций, в которых образуются ядра (посредством взаимодействия нейтронов с ядрами атомов конструкционных материалов и других элементов, использующихся в данных установках) в относительно долгоживущих изомерных состояниях, распадающихся посредством испускания довольно жёстких гамма-квантов: учёт этих гамма-квантов важен для оценки радиационной стойкости материалов, используемых в проектируемых установках.

В последней версии библиотеки IRDFF-II (International Reactor Dosimetry and Fusion File) [2] (базы данных EXFOR) всего 4 реакции представляют собой образования ядер-изомеров под действием нейтронов:

1. ${}^{93}\mathrm{Nb}(\mathrm{n}, 2\mathrm{n})^{92\mathrm{m}}\mathrm{Nb}$,
2. ${}^{113}\mathrm{In}(\mathrm{n}, \mathrm{n}')^{113\mathrm{m}}\mathrm{In}$,
3. ${}^{115}\mathrm{In}(\mathrm{n}, \mathrm{n}')^{115\mathrm{m}}\mathrm{In}$,
4. ${}^{115}\mathrm{In}(\mathrm{n}, 2\mathrm{n})^{114\mathrm{m}}\mathrm{In}$.

В настоящее время достигнут значительный прогресс в области численного моделирования ядерных реакций. Подходящим примером может служить программный комплекс

TALYS-1.9 [3] с открытым кодом. Этот комплекс позволяет моделировать столкновения ядер с лёгкими частицами, в том числе нейтронами, с энергиями до 200 МэВ.

Выполненный ранее анализ показал, что с разумной точностью как экспериментальные данные (из библиотеки EXFOR), так и оценки из IRDFF-II по этим сечениям воспроизводятся расчётами по TALYS со следующими (из числа необязательных) ключевыми словами, которые соответствуют тому или иному набору входных параметров из библиотеки RIPL-3 (Reference Input Parameter Library) [4]:

- `ldmodel 1` (`2` или `3`);
- **`fullhf`** `y`;
- `optmodall y`.

В данной работе изучалась возможность использования комплекса TALYS-1.9 как предсказательного инструмента при оценке сечений реакций. Для этого рассматривались реакции

1. $^{91}\mathrm{Zr(n,p)}^{91\mathrm{m/g}}\mathrm{Y}$;
2. $^{91}\mathrm{Zr}(\mathrm{n},\mathrm{n}+\alpha)^{87\mathrm{m/g}}\mathrm{Sr}$;
3. $^{115}\mathrm{In(n,2n)}^{114\mathrm{m/g}}\mathrm{In}$;
4. $^{115}\mathrm{In(n,n')}^{115\mathrm{m/g}}\mathrm{In}$.

Мы рассматриваем данный программный комплекс, поскольку изучаемая модель двухцентрового осциллятора служит хорошим приближением реальной модели ядра при его делении, и в программный комплекс TALYS имеется возможность внедрять собственные модели для расчёта сечений. Таким образом, подробно изучив двухцентровой осциллятор, можно будет проверить полученную модель на практике, внедрив её в комплекс TALYS.

1 Модель двухцентрового осциллятора

Потенциал двухцентрового симметричного осциллятора дан в работе [1]. Рассмотрим решение задачи без учёта спин-орбитального взаимодействия.

Нуклон массой m находится в поле

$$V(\rho, z) = \frac{m\omega^2\rho^2}{2} + \frac{m\omega^2\left(|z| - z_0\right)^2}{2}, \tag{1.1}$$

где частота $\omega = \omega_0{}^R\!/_r$, а величина $r = r(z_0)$ может быть аналитически определена из уравнения

$$2r^3 + 3r^2 z_0 - z_0^3 - 2R^3 = 0, \tag{1.2}$$

а, согласно [5, §4, п. 1], величина $\hbar\omega_0 = 40A^{-1/3}$ (MeV) и $R = r_0 A^{1/3}$, где $r_0 = 1{,}2$ (Fm).

Уравнение Шрёдингера $\hat{\mathcal{H}}_0\phi = E\phi$ в этом потенциале записывается в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\rho^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\left(|z| - z_0\right)^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\phi = 0. \tag{1.3}$$

Решения (1.3) представляются в виде $\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) = \upsilon_{n_\varphi}(\varphi)\chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho)\zeta_{n_z}(z)$, где

$$\upsilon_{n_\varphi}(\varphi) = \frac{e^{in_\varphi\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad n_\varphi \in \mathbb{Z}, \tag{1.4a}$$

$$\chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) = \frac{\exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right)\rho^{|n_\varphi|}}{|n_\varphi|!}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{|n_\varphi|+1}{2}}\sqrt{\frac{2\left(|n_\varphi| + n_\rho\right)!}{n_\rho!}}M\left(-n_\rho, |n_\varphi| + 1; \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right), \quad n_\rho \in \mathbb{N}_0, \tag{1.4b}$$

$$\begin{aligned}\zeta_{n_z=1,3,5,\dots}\left(z \gtrless 0\right) = C^{(-)}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(z \mp z_0)^2\right)\times \\ \times\left[(z \mp z_0)\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right) \mp \right. \\ \left. \mp \frac{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)}M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right)\right],\end{aligned} \tag{1.4c}$$

$$\zeta_{n_z=0,2,4,\dots}(z) = C^{(+)} \exp\Bigl(-\frac{m\omega}{2\hbar}\bigl(|z|-z_0\bigr)^2\Bigr) \times$$
$$\times \Biggl[M\biggl(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega\bigl(|z|-z_0\bigr)^2}{\hbar}\biggr) - \frac{2\Gamma\bigl(\frac{1-n_z}{2}\bigr)}{\Gamma\bigl(-\frac{n_z}{2}\bigr)}\bigl(|z|-z_0\bigr)\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times$$
$$\times M\biggl(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega\bigl(|z|-z_0\bigr)^2}{\hbar}\biggr)\Biggr], \quad (1.4d)$$

где $C^{(-)}$ и $C^{(+)}$ — нормировочные постоянные, которые находятся численным интегрированием.

Квантовое число $n_z = n_z(z_0)$ — функция параметра[1)] растяжения z_0, которая принимает непрерывный спектр значений $\mathbb{R}$.

Соответствующие энергетические уровни даются зависимостью

$$E^0_{n_\varphi n_\rho n_z} = \hbar\omega(z_0)\bigl(|n_\varphi| + 2n_\rho + n_z(z_0) + {}^3\!/\!_2\bigr). \quad (1.5)$$

Для приближения полученных уровней к реальным, необходимо ввести в гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_0$ спин-орбитальное слагаемое $V_1(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s})$.

[1)] В индексах волновых функций указывается значение $n_z(z_0 = 0)$.

2 Введение спин-орбитального слагаемого

Согласно [6, (3)] спин-орбитальное слагаемое описывается потенциалом

$$V_1(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}) = -\varkappa\hbar\omega(z_0) \cdot 2\boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s}, \tag{2.1}$$

где оператор $\boldsymbol{\ell}$ описывает орбитальный момент по отношению к соответствующему центру осциллятора $z = -z_0$ или $z = +z_0$, и $\varkappa = \mathrm{const}$.

Необходимо выразить оператор $\boldsymbol{\ell}$ через операторы повышения/понижения (ℓ_+, ℓ_-, ℓ_z) в цилиндрических координатах.

Согласно [7, (4)] оператор орбитального момента для нуклона, помещённого в поле $V(\rho, \varphi, z)$, имеет вид

$$\mathbf{L} = \boldsymbol{\nabla} V \times \mathbf{p}, \quad \mathbf{L} \equiv \hbar m\omega^2(z_0)\boldsymbol{\ell}. \tag{2.2}$$

Найдём его компоненты в декартовой системе координат

$$\mathbf{L} = -i\hbar \cdot \boldsymbol{\nabla} V \times \boldsymbol{\nabla} = -i\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \frac{\partial V}{\partial x} & \frac{\partial V}{\partial y} & \frac{\partial V}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} = -i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial V}{\partial y}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{bmatrix}. \tag{2.3}$$

Действуя на функцию, заданную в цилиндрических координатах, производные в декартовых координатах должны преобразовываться по законам

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \rho}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{2.4}$$

Цилиндрические координаты задаются тождествами

$$\rho\cos\varphi = x, \quad \rho\sin\varphi = y \implies \rho^2 = x^2 + y^2. \tag{2.5}$$

Отсюда,

$$\frac{\partial}{\partial x}\big(\rho^2 = x^2 + y^2\big), \quad \frac{\partial}{\partial y}\big(\rho^2 = x^2 + y^2\big) \tag{2.6}$$

$$\rho\frac{\partial \rho}{\partial x} = x, \quad \rho\frac{\partial \rho}{\partial y} = y \tag{2.7}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = \cos\varphi, \quad \frac{\partial \rho}{\partial y} = \sin\varphi. \tag{2.8}$$

Аналогично, рассматривая первые два тождества из (2.5), получим

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho\cos\varphi = x), \quad \frac{\partial}{\partial y}(\rho\sin\varphi = y), \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial x}\cos\varphi - \rho\sin\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial x} = 1, \quad \frac{\partial\rho}{\partial y}\sin\varphi + \rho\cos\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial y} = 1. \tag{2.10}$$

Используем (2.8):

$$\cos^2\varphi - \rho\sin\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial x} = 1, \quad \sin^2\varphi + \rho\cos\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial y} = 1, \tag{2.11}$$

$$-\rho\sin\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial x} = \sin^2\varphi, \quad \rho\cos\varphi\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \cos^2\varphi, \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{1}{\rho}\sin\varphi, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{\rho}\cos\varphi. \tag{2.13}$$

Таким образом,

$$\frac{\partial\rho}{\partial x} = \cos\varphi, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{1}{\rho}\sin\varphi, \tag{2.14}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial y} = \sin\varphi, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{\rho}\cos\varphi. \tag{2.15}$$

Отсюда, из (2.4) получим

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{2.16}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{2.17}$$

Преобразуем компоненты $\mathbf{L}$ при потенциале $V = V(\rho, z)$, *не зависящим от угла* φ.

$$\begin{gathered}\frac{L_z}{-i\hbar} = \frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} = \left(\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial\varphi}\right)\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \\ - \left(\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial\varphi}\right)\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}\cos^2\varphi\frac{\partial V}{\partial\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \\ - \sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}\sin^2\varphi\frac{\partial V}{\partial\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial V}{\partial\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}.\end{gathered} \tag{2.18}$$

То есть,

$$L_z = -i\hbar\frac{1}{\rho}\frac{\partial V}{\partial\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{2.19}$$

Далее,

$$\frac{L_x}{-i\hbar} = \frac{\partial V}{\partial y}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial y} = \left(\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial \varphi}\right)\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}\right) =$$
$$= \sin\varphi\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \sin\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\varphi\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) - \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{2.20}$$

То есть,

$$L_x = -i\hbar\left[\sin\varphi\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) - \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right]. \tag{2.21}$$

Последняя компонента

$$\frac{L_y}{-i\hbar} = \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial V}{\partial z}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial \varphi}\right) - \left(\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial \varphi}\right)\frac{\partial}{\partial z} =$$
$$= \cos\varphi\left(\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z}\right) - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{2.22}$$

То есть,

$$L_y = -i\hbar\left[\cos\varphi\left(\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z}\right) - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right]. \tag{2.23}$$

В [8, (4.69)] и [9, Математическое дополнение Б] операторы повышения/понижения вводятся как

$$L_+ \equiv L_x + iL_y, \tag{2.24}$$

$$L_- \equiv L_x - iL_y. \tag{2.25}$$

Так,

$$\frac{L_+}{-i\hbar} = \frac{L_x}{-i\hbar} + i\frac{L_y}{-i\hbar} = \sin\varphi\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) - \frac{1}{\rho}\cos\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} +$$
$$+ i\left[-\cos\varphi\left(-\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z}\right) - \frac{1}{\rho}\sin\varphi\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right] = -i(\cos\varphi + i\sin\varphi)\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) -$$
$$- \frac{1}{\rho}(\cos\varphi + i\sin\varphi)\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} = -ie^{i\varphi}\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) - \frac{1}{\rho}e^{i\varphi}\frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} =$$
$$= -ie^{i\varphi}\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} - i\frac{\partial V}{\partial z}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right). \tag{2.26}$$

То есть,

$$L_+ = -\hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} - i\frac{\partial V}{\partial z}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right). \tag{2.27}$$

Из (2.21) и (2.23) видно, что $L_x^* = -L_x$ и $L_y^* = -L_y$. Тогда, $L_- = L_x - iL_y = -L_x^* - (iL_y)^* = -(L_x + iL_y)^* = -L_+^*$. Так,

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} + i\frac{\partial V}{\partial z}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right). \tag{2.28}$$

Объединяя (2.27) и (2.28), получим, что

$$L_\pm = \mp\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \rho} \mp i\frac{\partial V}{\partial z}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right). \tag{2.29}$$

Из (2.24) и (2.25) следует, что

$$L_x = \frac{L_+ + L_-}{2}, \tag{2.30}$$

$$L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i}. \tag{2.31}$$

Тогда

$$\begin{aligned}\mathbf{L}\cdot\mathbf{s} = L_x s_x + L_y s_y + L_z s_z = \frac{(L_+ + L_-)(s_+ + s_-) - (L_+ - L_-)(s_+ - s_-)}{4} + L_z s_z = \\ = \frac{L_+s_+ + L_+s_- + L_-s_+ + L_-s_- - L_+s_+ + L_+s_- + L_-s_+ - L_-s_-}{4} + L_z s_z = \\ = \frac{1}{2}\left(L_+s_- + L_-s_+\right) + L_z s_z.\end{aligned} \tag{2.32}$$

3 Матричный элемент $\boldsymbol{\ell_z s_z}$

Для рассматриваемого потенциала двухцентрового осциллятора (1.1), оператор L_z принимает вид

$$L_z = -i\hbar \frac{1}{\rho}\frac{\partial V}{\partial \rho}\frac{\partial}{\partial \varphi} = -i\hbar m\omega^2 \frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{3.1}$$

Ранее были получены волновые функции

$$\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) = v_{n_\varphi}(\varphi)\chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho)\zeta_{n_z}(z) \equiv \langle \mathbf{r}| n_\varphi\, n_\rho\, n_z \rangle\,. \tag{3.2}$$

Так,

$$\begin{aligned}\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z \middle| L_z \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z \right\rangle &= -i\hbar m\omega^2 \int\limits_{\mathbb{R}^3} v^*_{n'_\varphi}\chi^*_{n'_\varphi n'_\rho}\zeta^*_{n'_z}\frac{\partial}{\partial\varphi}\bigl(v_{n_\varphi}\chi_{n_\varphi n_\rho}\zeta_{n_z}\bigr)\,\mathrm{d}^3 r = \\ &= -i\hbar m\omega^2 \left[\int\limits_0^{+\infty}\chi_{n'_\varphi n'_\rho}\chi_{n_\varphi n_\rho}\cdot\rho\,\mathrm{d}\rho\right]\left[\int\limits_0^{2\pi} v^*_{n'_\varphi}\frac{\partial v_{n_\varphi}}{\partial\varphi}\,\mathrm{d}\varphi\right]\left[\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\zeta_{n'_z}\zeta_{n_z}\,\mathrm{d}z\right].\end{aligned} \tag{3.3}$$

Рассмотрим второй интеграл (по φ).

$$\int\limits_0^{2\pi} v^*_{n'_\varphi}\frac{\partial v_{n_\varphi}}{\partial\varphi}\,\mathrm{d}\varphi = \frac{in_\varphi}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi}\exp\bigl(-i(n'_\varphi - n_\varphi)\varphi\bigr)\,\mathrm{d}\varphi = \frac{in_\varphi}{2\pi}\cdot 2\pi\delta_{n'_\varphi, n_\varphi} = in_\varphi\delta_{n'_\varphi, n_\varphi}. \tag{3.4}$$

Первый интеграл (по ρ) вместе с $\delta_{n'_\varphi, n_\varphi}$:

$$\begin{aligned}\delta_{n'_\varphi, n_\varphi}\int\limits_0^{+\infty}\chi_{n'_\varphi n'_\rho}\chi_{n_\varphi n_\rho}\cdot\rho\,\mathrm{d}\rho = C'_1 C_1 \delta_{n'_\varphi, n_\varphi}\int\limits_0^{+\infty}\exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right)\rho^{|n'_\varphi|+|n_\varphi|+1} M\left(-n'_\rho,\, \left|n'_\varphi\right|+1,\, \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right)\times \\ \times M\left(-n_\rho,\, |n_\varphi|+1,\, \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right)\mathrm{d}\rho\,,\end{aligned} \tag{3.5}$$

где C'_1 и C_1 — нормировочные константы функций $\chi_{n'_\varphi n'_\rho}$ и $\chi_{n_\varphi n_\rho}$ соответственно. Положим $n'_\varphi = n_\varphi$, уберём дельту Крёнекера, опустим третий аргумент функции Куммера и аргумент экспоненты:

$$\int\limits_0^{+\infty} \chi_{n_\varphi n'_\rho} \chi_{n_\varphi n_\rho} \cdot \rho \, \mathrm{d}\rho = C'_1 C_1 \int\limits_0^{+\infty} \exp(\cdots) \rho^{2|n_\varphi|+1} M\left(-n'_\rho, |n_\varphi|+1, \dots\right) M\left(-n_\rho, |n_\varphi|+1, \dots\right) =$$

$$= C'_1 C_1 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\Gamma(n_\rho+1)}{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{|n_\varphi|+1}} \cdot \frac{\Gamma^2(|n_\varphi|+1)}{\Gamma(|n_\varphi|+n_\rho+1)} \delta_{n'_\rho, n_\rho} =$$

$$= |C_1|^2 \delta_{n'_\rho, n_\rho} \cdot \frac{1}{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{|n_\varphi|+1}} \cdot \Gamma^2(|n_\varphi|+1) \cdot \frac{\Gamma(n_\rho+1)}{2\Gamma(|n_\varphi|+n_\rho+1)}. \quad (3.6)$$

Итого, подставляя нормировочную константу, получим

$$\int\limits_0^{+\infty} \chi_{n_\varphi n'_\rho} \chi_{n_\varphi n_\rho} \cdot \rho \, \mathrm{d}\rho = \delta_{n'_\rho, n_\rho}. \quad (3.7)$$

При вычислении (3.6) было использовано соотношение [10, (4.4)].

Так,

$$\left\langle n'_\varphi \, n'_\rho \, n'_z \middle| L_z \middle| n_\varphi \, n_\rho \, n_z \right\rangle = \hbar m \omega^2 n_\varphi \delta_{n'_\varphi, n_\varphi} \delta_{n'_\rho, n_\rho} \cdot \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \zeta_{n'_z} \zeta_{n_z} \, \mathrm{d}z \, . \quad (3.8)$$

Последний интеграл по z при любом виде функции $\zeta(z)$ получить аналитически не удалось.

Однако, поскольку

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \zeta_{n'_z}(z) \zeta_{n_z}(z) \, \mathrm{d}z \equiv \langle n'_z | n_z \rangle \, , \quad (3.9)$$

а кривые $n_z(z_0)$ не пересекаются, то можно сказать, что

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \zeta_{n'_z}(z) \zeta_{n_z}(z) \, \mathrm{d}z = \delta_{n'_z, n_z}. \quad (3.10)$$

«Утверждение» (3.10) было проверено численно: при разных зависимостях n'_z и n_z для начальных уровней ($n_z(z_0 = 0) = 0, 1$) вычисление интеграла давало величину порядка $\sim 10^{-6}$, для более высоких уровней (зависимости $\zeta(z)$ более сложные) — величину порядка $\sim 10^{-3}$. При одинаковых зависимостях n'_z и n_z вычисление стабильно выдаёт единицу с очень хорошей точностью.

Полная волновая функция со спиновой частью

$$\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\rho, z, \varphi, s) = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) \sigma(s). \quad (3.11)$$

Так,

$$\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\, s' \middle| \ell_z s_z \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z\, s \right\rangle = s n_\varphi \cdot \delta_{n'_\varphi, n_\varphi} \delta_{n'_\rho, n_\rho} \delta_{n'_z, n_z} \delta_{s', s}. \tag{3.12}$$

4 Матричный элемент $\boldsymbol{\ell}_+ \boldsymbol{s}_-$

Для рассматриваемого потенциала оператор L_+ имеет вид

$$L_+ = -\hbar m\omega^2 (z_0) \left(\underbrace{\exp(i\varphi)\rho\frac{\partial}{\partial z}}_{\ell_+^{(1)}} - \underbrace{\exp(i\varphi)\big(|z| - z_0\big)\operatorname{sgn}(z)\frac{\partial}{\partial \rho}}_{\ell_+^{(2)}} - \underbrace{i\exp(i\varphi)\big(|z| - z_0\big)\operatorname{sgn}(z)\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \varphi}}_{\ell_+^{(3)}} \right). \tag{4.1}$$

Будем рассматривать действие оператора L_+ на векторах $\langle \mathbf{r} | n_\varphi \, n_\rho \, n_z \rangle = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z)$:

$$\phi_{000}(\varphi, \rho, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \cdot \zeta_0(z), \tag{4.2}$$

$$\phi_{001}(\varphi, \rho, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \cdot \zeta_1(z), \tag{4.3}$$

$$\phi_{100}(\varphi, \rho, z) = \frac{\exp(i\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho \cdot \frac{m\omega\sqrt{2}}{\hbar} \cdot \zeta_0(z), \tag{4.4}$$

$$\phi_{101}(\varphi, \rho, z) = \frac{\exp(i\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho \cdot \frac{m\omega\sqrt{2}}{\hbar} \cdot \zeta_1(z). \tag{4.5}$$

4.1 Состояние $|0\,0\,0\rangle$

4.1.1 Диагональный элемент

Поскольку ϕ_{000} не зависит от угла φ, то

$$\langle 0\,0\,0 | L_+ | 0\,0\,0 \rangle = 0. \tag{4.6}$$

4.1.2 Недиагональные элементы

Элемент $\langle \mathbf{0\,0\,1} | \boldsymbol{L}_+ | \mathbf{0\,0\,0} \rangle$

Поскольку ϕ_{001} и ϕ_{000} не зависят от φ, то аналогично (4.6) получим

$$\langle 0\,0\,1 | L_+ | 0\,0\,0 \rangle = 0. \tag{4.7}$$

Элемент $\langle 1\,0\,0|\boldsymbol{L}_+|0\,0\,0\rangle$

$$\langle 1\,0\,0|\ell_+^{(1)}|0\,0\,0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-1/2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \zeta_0(z)\frac{\mathrm{d}\zeta_0(z)}{\mathrm{d}z}\,\mathrm{d}z = 0, \tag{4.8}$$

в силу нечётности подынтегральной функции. Аналогично

$$\langle 1\,0\,0|\ell_+^{(2)}|0\,0\,0\rangle = -\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \zeta_0(z)\zeta_0(z)\big(|z|-z_0\big)\,\mathrm{sgn}(z)\,\mathrm{d}z = 0. \tag{4.9}$$

Слагаемое

$$\langle 1\,0\,0|\ell_+^{(3)}|0\,0\,0\rangle = 0, \tag{4.10}$$

поскольку ϕ_{000} не зависит от φ.

Итого,

$$\langle 1\,0\,0|L_+|0\,0\,0\rangle = 0. \tag{4.11}$$

Элемент $\langle 1\,0\,1|\boldsymbol{L}_+|0\,0\,0\rangle$

$$\langle 1\,0\,1|\ell_+^{(1)}|0\,0\,0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-1/2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \zeta_1(z)\frac{\mathrm{d}\zeta_0(z)}{\mathrm{d}z}\,\mathrm{d}z\,, \tag{4.12a}$$

где $\zeta_1(z)$ — нечётная функция, $\mathrm{d}\zeta_0(z)/\mathrm{d}z$ — тоже нечётная функция. Поэтому

$$\langle 1\,0\,1|\ell_+^{(1)}|0\,0\,0\rangle = 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-1/2} \int\limits_{0}^{+\infty} \zeta_1(z)\frac{\mathrm{d}\zeta_0(z)}{\mathrm{d}z}\,\mathrm{d}z \tag{4.12b}$$

$$\langle 1\,0\,1|\ell_+^{(2)}|0\,0\,0\rangle = -2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \int\limits_{0}^{+\infty} \zeta_1(z)\zeta_0(z)\cdot z\,\mathrm{d}z\ ^{1)}. \tag{4.13}$$

$$\langle 1\,0\,1|\ell_+^{(3)}|0\,0\,0\rangle = 0, \tag{4.14}$$

Итого,

$$\langle 1\,0\,1|L_+|0\,0\,0\rangle = -2\sqrt{\hbar^3 m\omega^3(z_0)} \int\limits_{0}^{+\infty} \zeta_1(z)\left(\frac{m\omega(z_0)}{\hbar}z + \frac{\partial}{\partial z}\right)\zeta_0(z)\,\mathrm{d}z\,. \tag{4.15}$$

[1)] В силу разных n_z и n_z' интеграл, содержащий $z_0 = \mathrm{const}$, равен нулю.

4.2 Состояние $|0\,0\,1\rangle$

4.2.1 Диагональный элемент

$$\langle 0\,0\,1|L_+|0\,0\,1\rangle = 0. \tag{4.16}$$

4.2.2 Недиагональные элементы

Элемент $\langle \mathbf{0\,0\,0}|\boldsymbol{L_+}|\mathbf{0\,0\,1}\rangle$

$$\langle 0\,0\,0|L_+|0\,0\,1\rangle = 0. \tag{4.17}$$

Элемент $\langle \mathbf{1\,0\,0}|\boldsymbol{L_+}|\mathbf{0\,0\,1}\rangle$

$$\langle 1\,0\,0|\ell_+^{(1)}|0\,0\,1\rangle = 2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-1/2}\int\limits_0^{+\infty}\zeta_0(z)\frac{\mathrm{d}\zeta_1(z)}{\mathrm{d}z}\,\mathrm{d}z\,, \tag{4.18}$$

в силу чётности подынтегральной функции. Аналогично,

$$\langle 1\,0\,0|\ell_+^{(2)}|0\,0\,1\rangle = -2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\int\limits_0^{+\infty}\zeta_0(z)\zeta_1(z)\cdot z\,\mathrm{d}z\,. \tag{4.19}$$

$$\langle 1\,0\,0|\ell_+^{(3)}|0\,0\,1\rangle = 0. \tag{4.20}$$

Итого,

$$\langle 1\,0\,0|\ell_+|0\,0\,1\rangle = -2\sqrt{\hbar^3 m\omega^3(z_0)}\int\limits_0^{+\infty}\zeta_0(z)\left(\frac{m\omega(z_0)}{\hbar}z + \frac{\partial}{\partial z}\right)\zeta_1(z)\,\mathrm{d}z\,. \tag{4.21}$$

Элемент $\langle \mathbf{1\,0\,1}|\boldsymbol{L_+}|\mathbf{0\,0\,1}\rangle$

$$\langle 1\,0\,1|\ell_+^{(1)}|0\,0\,1\rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-1/2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\zeta_1(z)\frac{\mathrm{d}\zeta_1(z)}{\mathrm{d}z}\,\mathrm{d}z = 0, \tag{4.22}$$

в силу нечётности подынтегральной функции. Аналогично,

$$\langle 1\,0\,1|\ell_+^{(2)}|0\,0\,1\rangle = -\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\zeta_1(z)\zeta_1(z)\big(|z|-z_0\big)\,\mathrm{sgn}(z)\,\mathrm{d}z = 0. \tag{4.23}$$

Также

$$\langle 1\,0\,1|\ell_+^{(3)}|0\,0\,1\rangle = 0. \tag{4.24}$$

Итого,

$$\langle 1\,0\,1|L_+|0\,0\,1\rangle = 0. \tag{4.25}$$

4.3 Состояние $|1\,0\,0\rangle$

4.3.1 Диагональный элемент

$$\langle 1\,0\,0|L_+|1\,0\,0\rangle = 0, \tag{4.26}$$

в силу одинаковости числа $n_\varphi = 1$.

4.3.2 Недиагональные элементы

Элемент $\langle 0\,0\,0|L_+|1\,0\,0\rangle$

$$\langle 0\,0\,0|L_+|1\,0\,0\rangle = 0, \tag{4.27}$$

в силу $\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} 1\cdot e^{i\varphi}e^{i\varphi}\,\mathrm{d}\varphi = 0$.

Элемент $\langle 0\,0\,1|L_+|1\,0\,0\rangle$

Аналогично элементу выше,

$$\langle 0\,0\,1|L_+|1\,0\,0\rangle = 0. \tag{4.28}$$

Элемент $\langle 1\,0\,1|L_+|1\,0\,0\rangle$

Аналогично диагональному элементу,

$$\langle 1\,0\,1|L_+|1\,0\,0\rangle = 0. \tag{4.29}$$

4.4 Состояние $|1\,0\,1\rangle$

Аналогично состоянию $|1\,0\,0\rangle$ все матричные элементы состояния $|1\,0\,1\rangle$ равны нулю.

4.5 Матрица элементов

$\frac{L_+}{-\sqrt{\hbar^3 m\omega^3(z_0)}}$	$\|0\,0\,0\rangle$	$\|0\,0\,1\rangle$	$\|1\,0\,0\rangle$	$\|1\,0\,1\rangle$	$\cdots$
$\langle 0\,0\,0\|$	0	0	0	0	
$\langle 0\,0\,1\|$	0	0	0	0	
$\langle 1\,0\,0\|$	0	$\langle\zeta_0\|\frac{m\omega(z_0)}{\hbar}z+\frac{\partial}{\partial z}\|\zeta_1\rangle$	0	0	
$\langle 1\,0\,1\|$	$\langle\zeta_1\|\frac{m\omega(z_0)}{\hbar}z+\frac{\partial}{\partial z}\|\zeta_0\rangle$	0	0	0	
$\vdots$					

Таблица 4.1 — Условное изображение матричных элементов $\langle L_+\rangle$.

5 Матричный элемент $\boldsymbol{\ell_- s_+}$

По построению

$$\ell_- = -\ell_+^*, \tag{5.1}$$

поэтому

$$\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z \middle| \ell_- \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z \right\rangle = -\left[\left\langle n_\varphi\, n_\rho\, n_z \middle| \ell_+ \middle| n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z \right\rangle\right]^*, \tag{5.2}$$

что в матричном виде условно можно записать как

$$\langle \ell_- \rangle = -\langle \ell_+ \rangle^\dagger . \tag{5.3}$$

Сохраняя соответствие между строками и столбцами из таблицы 4.1, получим матрицу элементов для оператора L_-:

$$\frac{\langle L_- \rangle}{-\sqrt{\hbar^3 m \omega^3 (z_0)}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -\langle \zeta_0 | \mathfrak{z}_0 | \zeta_1 \rangle \\ 0 & 0 & -\langle \zeta_1 | \mathfrak{z}_0 | \zeta_0 \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{5.4}$$

где $\mathfrak{z}_0 = \frac{m\omega(z_0)}{\hbar} z + \frac{\partial}{\partial z}$.

6 Элементы $\boldsymbol{\ell_- s_+}$ и $\boldsymbol{\ell_+ s_-}$ для полной волновой функции

Для полной волновой функции $\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s) = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z)\sigma(s)$ матричные элементы равны

$$\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\, s' \middle| \ell_+ s_- \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z\, s \right\rangle = \langle \ell_+ \rangle\, \delta_{s', s-1}, \tag{6.1a}$$

$$\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\, s' \middle| \ell_- s_+ \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z\, s \right\rangle = \langle \ell_- \rangle\, \delta_{s', s+1}. \tag{6.1b}$$

7 Матричные элементы спин-орбитального оператора

Имеем матричные элементы для полной волновой функции $\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s)$.

$$\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\, s' \middle| \ell_z s_z \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z\, s \right\rangle = s n_\varphi \cdot \delta_{n'_\varphi, n_\varphi} \delta_{n'_\rho, n_\rho} \delta_{n'_z, n_z} \delta_{s', s}. \tag{7.1a}$$

Запишем матричные элементы в виде матрицы, соответствующей расположению строк и столбцов таблицы 4.1, включая проекцию спина. Первый столбец будет соответствовать вектору состояния $|0\,0\,0\,{-}^1\!/_2\rangle$, второй столбец — $|0\,0\,0\,{+}^1\!/_2\rangle$, третий — $|0\,0\,1\,{-}^1\!/_2\rangle$ и так далее.

$$\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\, s' \middle| \ell_+ s_- \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z\, s \right\rangle =$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\langle \zeta_0 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_1 \rangle & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\langle \zeta_1 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_0 \rangle & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{7.1b}$$

где $\mathfrak{z}_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\hbar} z + \frac{\partial}{\partial z}\right)$.

Из (5.3) получим

$$\left\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\, s' \middle| \ell_- s_+ \middle| n_\varphi\, n_\rho\, n_z\, s \right\rangle =$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \langle \zeta_1 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_0 \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle \zeta_0 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_1 \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{7.1c}$$

8 Гамильтониан системы со спин-орбитальным взаимодействием

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V_1(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}), \tag{8.1}$$

где $\hat{\mathcal{H}}_0$ — гамильтониан чистого двухцентрового осциллятора.

Так, его матричный элемент имеет вид

$$\begin{aligned}\big\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\, s' \big|\hat{\mathcal{H}}\big| n_\varphi\, n_\rho\, n_z\, s\big\rangle = E^0_{n_\varphi n_\rho n_z}(z_0)\cdot \delta_{n'_\varphi,n_\varphi}\delta_{n'_\rho,n_\rho}\delta_{n'_z,n_z}\delta_{s',s} - \varkappa\hbar\omega(z_0)\times \\ \times\Big(\big\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\big|\ell_+\big|n_\varphi\, n_\rho\, n_z\big\rangle\,\delta_{s',s-1} + \big\langle n'_\varphi\, n'_\rho\, n'_z\big|\ell_-\big|n_\varphi\, n_\rho\, n_z\big\rangle\,\delta_{s',s+1} + 2sn_\varphi\cdot\delta_{n'_\varphi,n_\varphi}\delta_{n'_\rho,n_\rho}\delta_{n'_z,n_z}\delta_{s',s}\Big),\end{aligned} \tag{8.2}$$

где $E^0_{n_\varphi n_\rho n_z}(z_0) = \hbar\omega(z_0)\big(n_z(z_0) + 2n_\rho + |n_\varphi| + {}^3\!/_2\big)$ — энергетические уровни чистого двухцентрового осциллятора.

Выпишем *ненулевые* матричные элементы.

$$\langle 0\,0\,0\,{-}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|0\,0\,0\,{-}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{000}, \tag{8.3a}$$

$$\langle 0\,0\,0\,{+}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|0\,0\,0\,{+}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{000}, \quad \langle 1\,0\,1\,{-}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|0\,0\,0\,{+}{}^1\!/_2\rangle = +\varkappa\hbar\omega\,\langle\zeta_1|\mathfrak{z}_1|\zeta_0\rangle\,, \tag{8.3b}$$

$$\langle 0\,0\,1\,{-}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|0\,0\,1\,{-}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{001}, \tag{8.3c}$$

$$\langle 0\,0\,1\,{+}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|0\,0\,1\,{+}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{001}, \quad \langle 1\,0\,0\,{-}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|0\,0\,1\,{+}{}^1\!/_2\rangle = +\varkappa\hbar\omega\,\langle\zeta_0|\mathfrak{z}_1|\zeta_1\rangle\,, \tag{8.3d}$$

$$\langle 1\,0\,0\,{-}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|1\,0\,0\,{-}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{100} + \varkappa\hbar\omega, \quad \langle 0\,0\,1\,{+}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|1\,0\,0\,{-}{}^1\!/_2\rangle = -\varkappa\hbar\omega\,\langle\zeta_0|\mathfrak{z}_1|\zeta_1\rangle\,, \tag{8.3e}$$

$$\langle 1\,0\,0\,{+}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|1\,0\,0\,{+}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{100} - \varkappa\hbar\omega, \tag{8.3f}$$

$$\langle 1\,0\,1\,{-}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|1\,0\,1\,{-}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{101} + \varkappa\hbar\omega, \quad \langle 0\,0\,0\,{+}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|1\,0\,1\,{-}{}^1\!/_2\rangle = -\varkappa\hbar\omega\,\langle\zeta_1|\mathfrak{z}_1|\zeta_0\rangle\,, \tag{8.3g}$$

$$\langle 1\,0\,1\,{+}{}^1\!/_2|\hat{\mathcal{H}}|1\,0\,1\,{+}{}^1\!/_2\rangle = E^0_{101} - \varkappa\hbar\omega, \tag{8.3h}$$

где константа $\varkappa = 0{,}05$ взята из оригинальной работы Nilsson [11].

9 Энергетические уровни в первом порядке

9.1 Уровень $\boldsymbol{E^0_{000}}$

Состояние с квантовыми числами $n_\varphi = n_\rho = n_z(z_0 = 0) = 0$ является вырожденным только по проекции спина $s = \pm{}^1\!/\!_2$.

Тогда, новая волновая функция в первом приближении имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_{k=\pm 1/2} a_k \, |0\,0\,0\,k\rangle \, . \tag{9.1}$$

Подставляя данное разложение в уравнение $\hat{\mathcal{H}}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$, получим уравнение на новые энергетические уровни в первом приближении:

$$\begin{vmatrix} E^0_{000} - E & 0 \\ 0 & E^0_{000} - E \end{vmatrix} = 0. \tag{9.2}$$

Таким образом, вырождение уровней в первом приближении не снялось — имеем два уровня[1)]

$$E^{(2)}_{1,2} = E^0_{000}. \tag{9.3}$$

9.2 Уровень $\boldsymbol{E^0_{001}}$

Состояние $n_\varphi = n_\rho = 0$, $n_z(z_0 = 0) = 1$ вырождено по проекции спина s и по квантовым числам n_φ, n_z. Волновая функция в первом приближении имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{q=(001),\,(100)\\ p=\pm 1/2}} a_{qp} \, |q\,p\rangle \, . \tag{9.4}$$

Уравнение $\hat{\mathcal{H}}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$ приводит к уравнению на энергетические уровни вида

$$\begin{vmatrix} E^0_{001} - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E^0_{001} - E & -\varkappa\varepsilon & 0 \\ 0 & \varkappa\varepsilon & E^0_{100} - E + \varkappa\hbar\omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E^0_{100} - E - \varkappa\hbar\omega \end{vmatrix} = 0, \tag{9.5}$$

1) Будем обозначать j–ый полученный уровень как $E^{(r)}_j$, где r — кратность вырождения уровня невозмущённого гамильтониана, из волновых функций которого было получено соответствующее секулярное уравнение.

где $\varepsilon = \hbar\omega \langle \zeta_0 | \mathfrak{z}_1 | \zeta_1 \rangle$. Получим четыре уровня

$$E_1^{(4)} = E_{001}^0, \tag{9.6a}$$

$$E_2^{(4)} = E_{100}^0 - \varkappa\hbar\omega, \tag{9.6b}$$

$$E_{3,4}^{(4)} = \frac{E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa\hbar\omega \pm \sqrt{\left(E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa\hbar\omega\right)^2 - 4\left(\varkappa^2\varepsilon^2 + E_{001}^0(E_{100}^0 + \varkappa\hbar\omega)\right)}}{2}. \tag{9.6c}$$

Приближая (9.6c) до слагаемых первого порядка по $\varkappa$, получим

$$E_1^{(4)} = E_{001}^0, \tag{9.7a}$$

$$E_2^{(4)} = E_{100}^0 - \varkappa\hbar\omega, \tag{9.7b}$$

$$E_{3,4}^{(4)} \approx \frac{E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa\hbar\omega \pm \sqrt{\left(E_{100}^0 - E_{001}^0\right)^2 + 2\varkappa\hbar\omega \cdot \left(E_{100}^0 - E_{001}^0\right)}}{2}. \tag{9.7c}$$

9.3 Уровень $\boldsymbol{E_{101}^0}$

Состояние $n_\varphi = 1$, $n_\rho = 0$, $n_z(z_0 = 0) = 1$ вырождено по всем квантовыми числам (включая проекцию спина). При рассмотрении ограниченного количества волновых функций получим оценочные энергетические уровни, поскольку в новую волновую функцию не будут включены *все* волновые функции, соответствующие вырожденным уровням:

$$|\psi\rangle \sim \sum_{k=\pm 1/2} |1\,0\,1\,k\rangle\,. \tag{9.8}$$

Соответствующее секулярное уравнение приведёт к уровням

$$E_1^{(8)} \sim E_{101}^0 + \varkappa\hbar\omega, \tag{9.9a}$$

$$E_2^{(8)} \sim E_{101}^0 - \varkappa\hbar\omega. \tag{9.9b}$$

9.4 Уровни в зависимости от параметра растяжения

Изобразим полученные уровни.

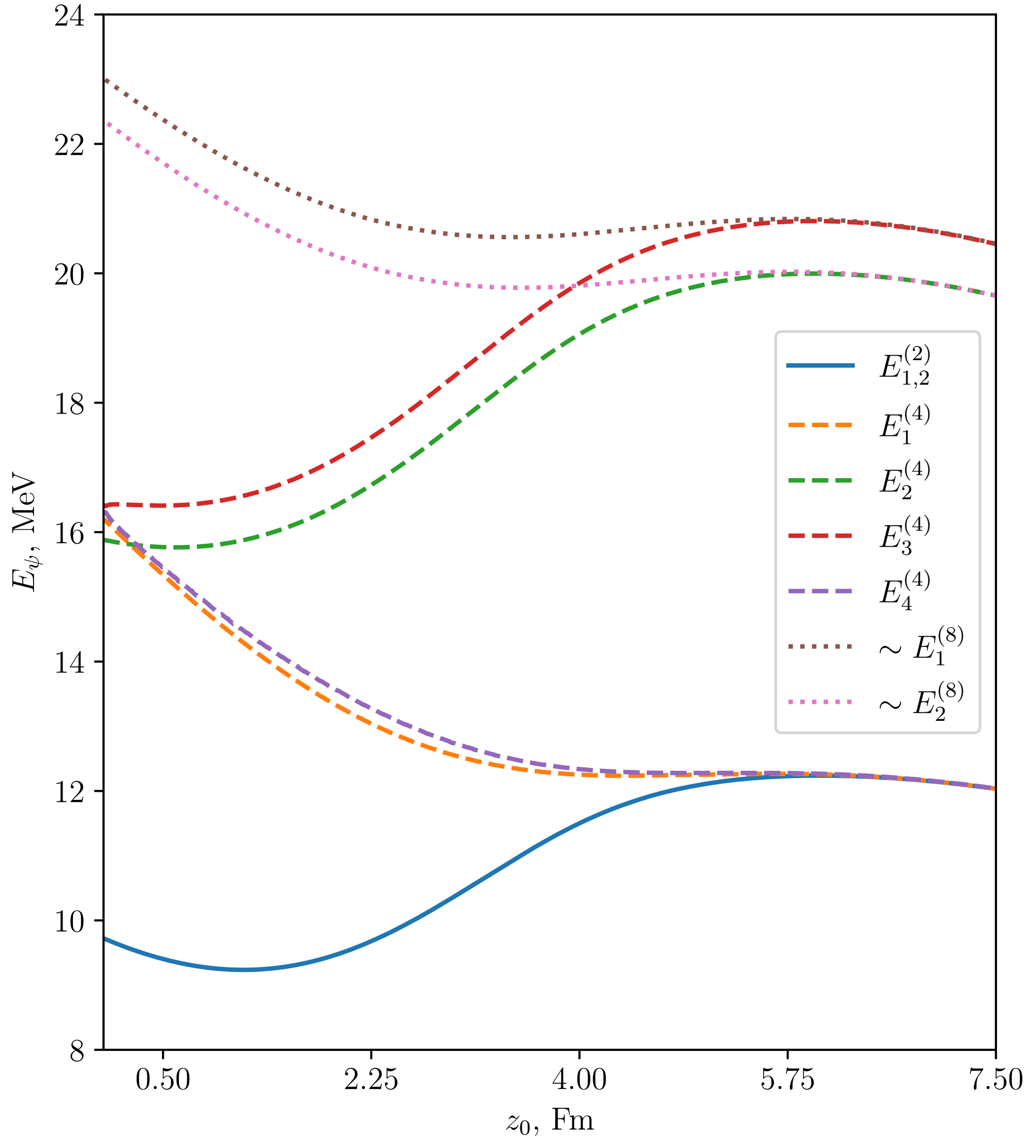

Рисунок 9.1 — Энергетические уровни двухцентрового осциллятора со спин-орбитальным взаимодействием в первом приближении.

Видно, что двукратно вырожденный уровень E_{000}^0 остался вырожденным, а с четырёхкратно вырожденного уровня E_{100}^0 полностью снялось вырождение, причём появился уровень $E_2^{(4)}(z_0 = 0) < E_{100}^0(z_0 = 0)$. С восьмикратно вырожденного E_{101}^0 в рассматриваемом оценочном приближении вырождение снимается частично.

10 Энергетические уровни во втором порядке

Для состояния из раздела 9.1 новые состояния $|\psi_{000\,k}\rangle = a_k\,|0\,0\,0\,k\rangle$ в сумме $\sum_{k=\pm 1/2} |\psi_{000\,k}\rangle = |\psi\rangle$ останутся вырожденными по энергии $E^{(2)}_{1,2} \equiv E^{(2)}_{-1/2,+1/2}$.

Соответственно, коэффициенты a_k останутся неопределёнными. Их всегда можно выбрать такими, чтобы $\langle\psi_{000\,m}|\psi_{000\,k}\rangle = \delta_{mk}$. Тогда, поправки к энергии второго порядка по общей формуле будут иметь вид

$$\left[E^{(2)}_k\right]^{(2)} = \sum_{\langle\omega|\neq\langle\psi_{000\,k}|} \frac{\left|\langle\omega|V_{ls}|\psi_{000\,k}\rangle\right|^2}{E^{(2)}_k - E_\omega}, \tag{10.1}$$

где сумма производится по состояниям $\langle\omega| = \left\langle\psi_{000\,-1/2}\right|, \left\langle\psi_{000\,+1/2}\right|, \langle 0\,0\,1\,-1/2|, \ldots$, а энергии E_ω — энергии соответствующих состояний $|\omega\rangle$.

Вычисляя их и не пренебрегая слагаемыми порядка $\sim \varkappa^2$ в (9.6c), получим уровни

$$E^{(2)}_1 = E^0_{000}, \tag{10.2a}$$

$$E^{(2)}_2 = E^0_{000} + \frac{\varkappa^2\tilde{\varepsilon}^2}{E^0_{000} - E^0_{101}}, \tag{10.2b}$$

$$E^{(4)}_1 = E^0_{001}, \tag{10.3a}$$

$$E^{(4)}_2 = E^0_{100} - \varkappa\hbar\omega, \tag{10.3b}$$

$$E^{(4)}_{3,4} = \frac{E^0_{100} + E^0_{001} + \varkappa\hbar\omega \pm \sqrt{\left(E^0_{100} + E^0_{001} + \varkappa\hbar\omega\right)^2 - 4\left(\varkappa^2\varepsilon^2 + E^0_{001}(E^0_{100} + \varkappa\hbar\omega)\right)}}{2}, \tag{10.3c}$$

$$E^{(8)}_1 \sim E^0_{101} + \varkappa\hbar\omega, \tag{10.4a}$$

$$E^{(8)}_2 \sim E^0_{101} - \varkappa\hbar\omega, \tag{10.4b}$$

где $\tilde{\varepsilon} = \hbar\omega\,\langle\zeta_1|\mathfrak{z}_1|\zeta_0\rangle$.

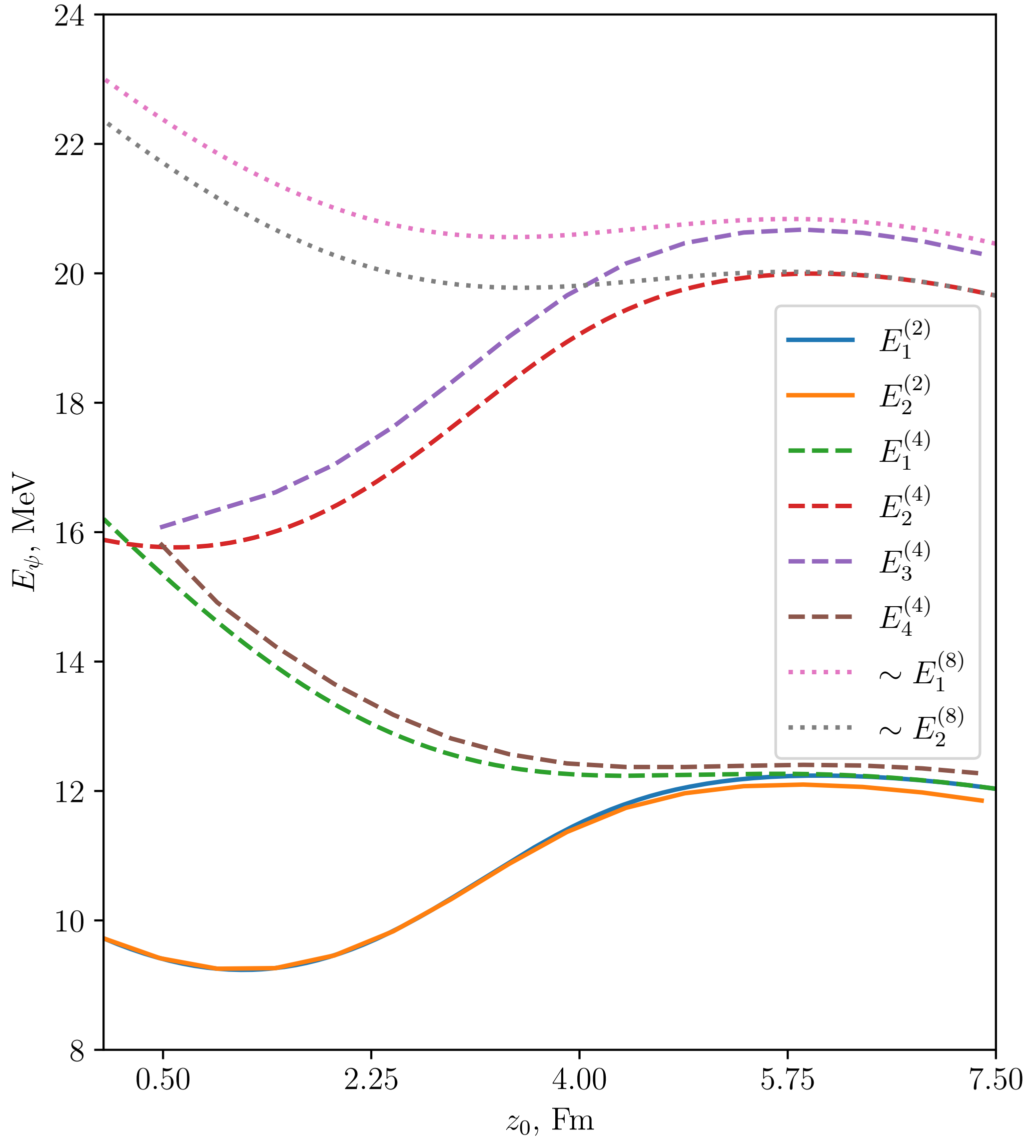

Рисунок 10.1 — Энергетические уровни двухцентрового осциллятора со спин-орбитальным взаимодействием во втором приближении.

Рисунки 9.1 и 10.1 в основном отличаются тем, что во втором приближении полностью снимается вырождение с уровней $E_{1,2}^{(2)}$.

Различие в изображении уровней $E_{3,4}^{(4)}$ (в частности тот факт, что кривые начинаются не из $z_0 = 0$) главным образом заключается в накопленных ошибках при численном вычислении слагаемых, содержащих матричные элементы ε и $\tilde{\varepsilon}$.

11 Изучение комплекса TALYS-1.9

К анализу реакций

a) $^{91}\mathrm{Zr(n,p)}^{91m/g}\mathrm{Y}$;

b) $^{91}\mathrm{Zr}(\mathrm{n,n}+\alpha)^{87m/g}\mathrm{Sr}$;

c) $^{115}\mathrm{In(n,2n)}^{114m/g}\mathrm{In}$;

d) $^{115}\mathrm{In(n,n')}^{115m/g}\mathrm{In}$.

были привлечены следующие данные:

1. результаты расчёта сечений реакции с выходом как основного (g), так и изомерного (m) состояний, выполненные программой TALYS-1.9 с параметрами `ldmodel 1/2/3`, `fullhf`, `optmodall` в зависимости от энергии падающего нейтрона от порога реакции до 20 МэВ;

2. оценённые зависимости сечений от энергии нейтронов (до 20 МэВ) из базы данных ENDF из библиотек TENDL-2021, IRDFF-II;

3. все экспериментальные данные, относящиеся к энергии нейтронов до 20 МэВ, из базы данных EXFOR.

11.1 Образование ^{91}Y

На рисунках 11.1 и 11.2 представлены сечения выхода основного (g) и изомерного (m) состояний соответственно ядра ^{91}Y в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR. В наиболее интересующей нас области 10–15 МэВ имеет место хорошее согласие рассчитанного по TALYS-1.9 сечения выхода изомерного (m) состояния с оцененными сечениями экспериментальными данными из EXFOR.

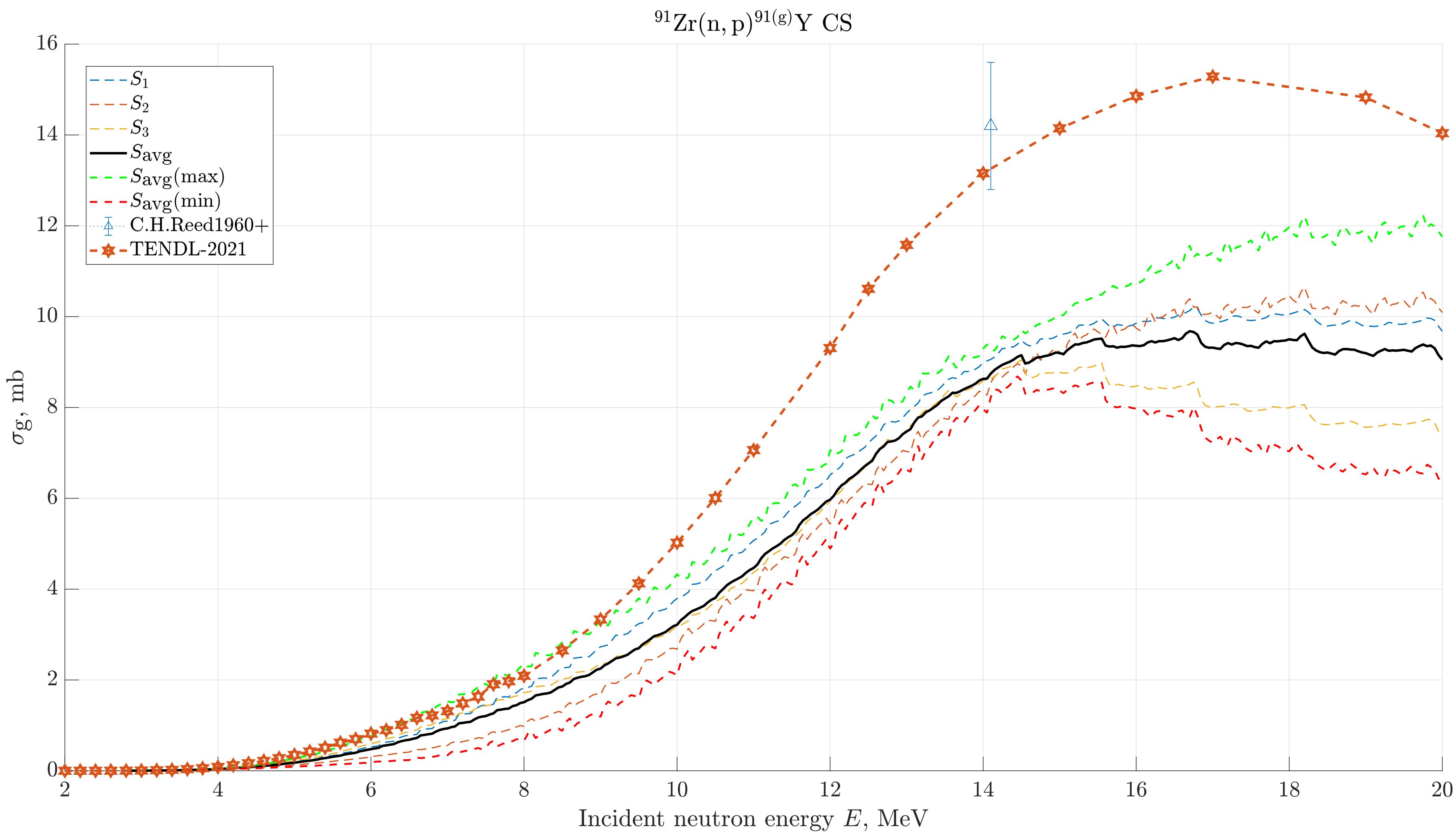

Рисунок 11.1 — Сечение выхода основного (g) состояния ядра ^{91}Y в реакции ^{91}Zr(n, p)^{91}Y в зависимости от энергии нейтрона.

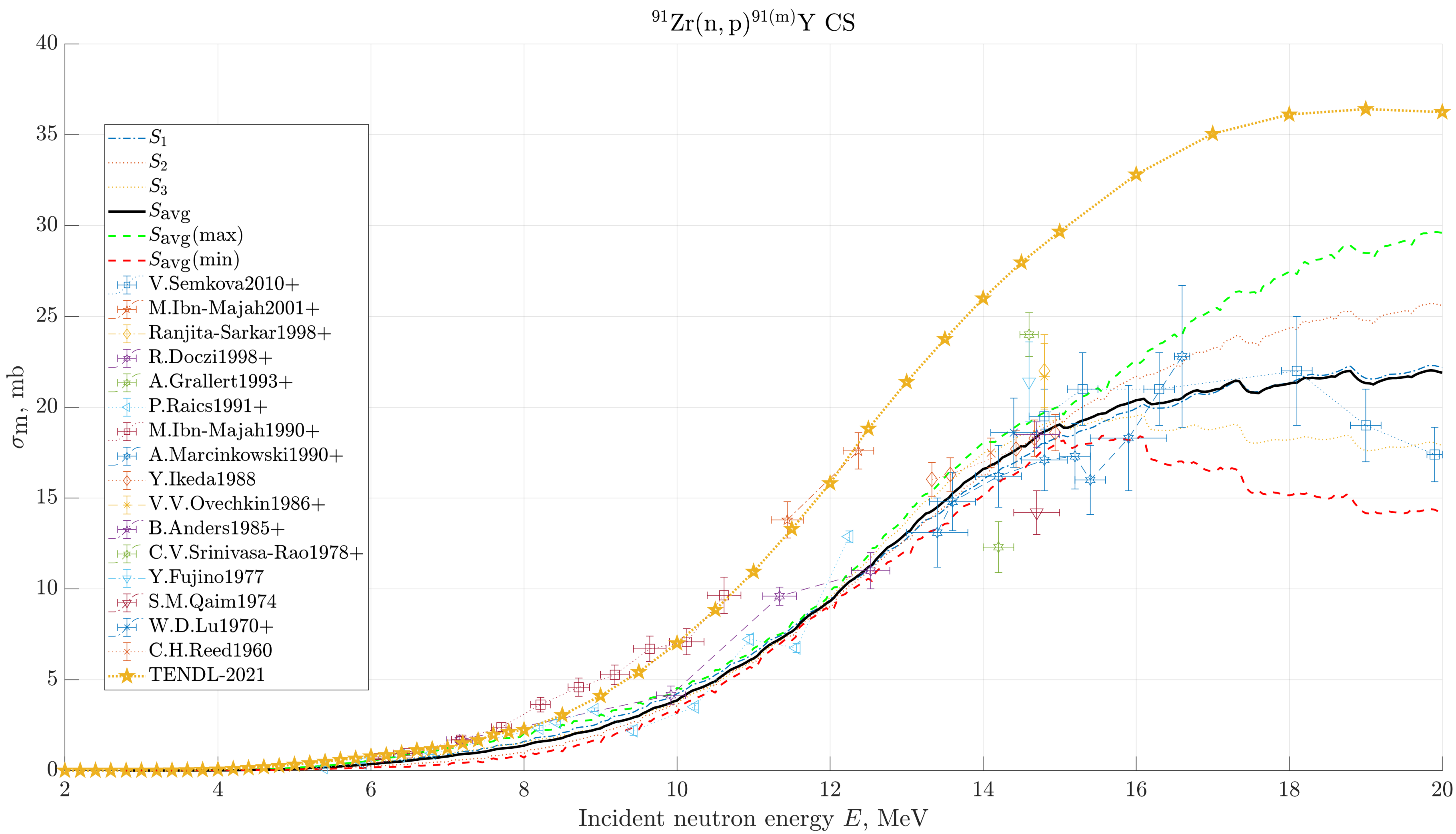

Рисунок 11.2 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{91}Y в реакции ^{91}Zr(n, p)^{91}Y в зависимости от энергии нейтрона.

11.2 Образование ^{87}Sr

На рисунках 11.3 и 11.4 представлены сечения выхода основного (g) и изомерного (m) состояний соответственно ядра ^{87}Sr в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR. На обоих рисунках видно, что, используя заложенные модели в комплекс TALYS-1.9, можно получать хорошие оценки сечений рассматриваемых реакций, укладывающиеся в разброс экспериментальных данных.

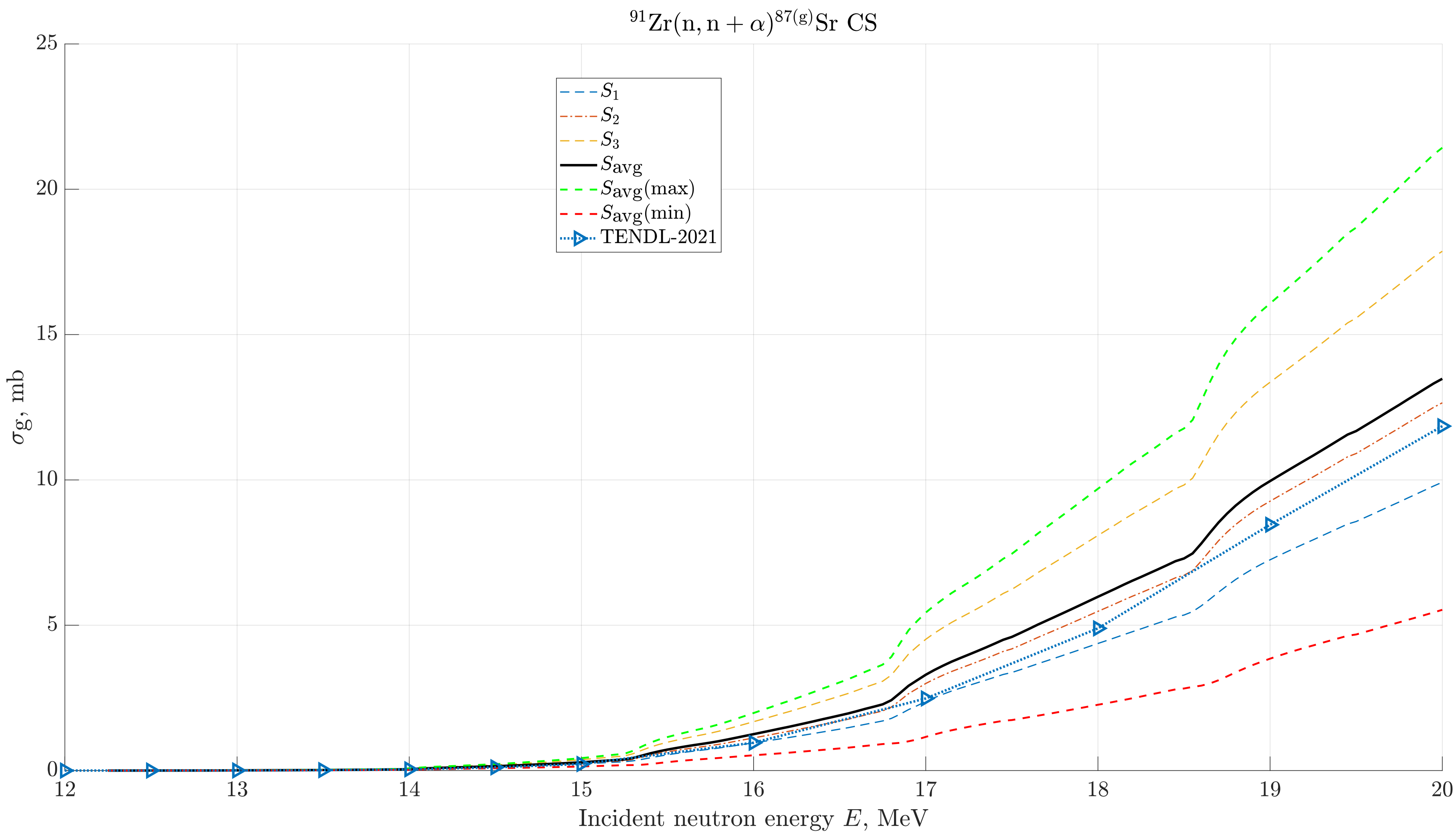

Рисунок 11.3 — Сечение выхода основного (g) состояния ядра ^{87}Sr в реакции ^{91}Zr(n, n + α)^{87}Sr в зависимости от энергии нейтрона.

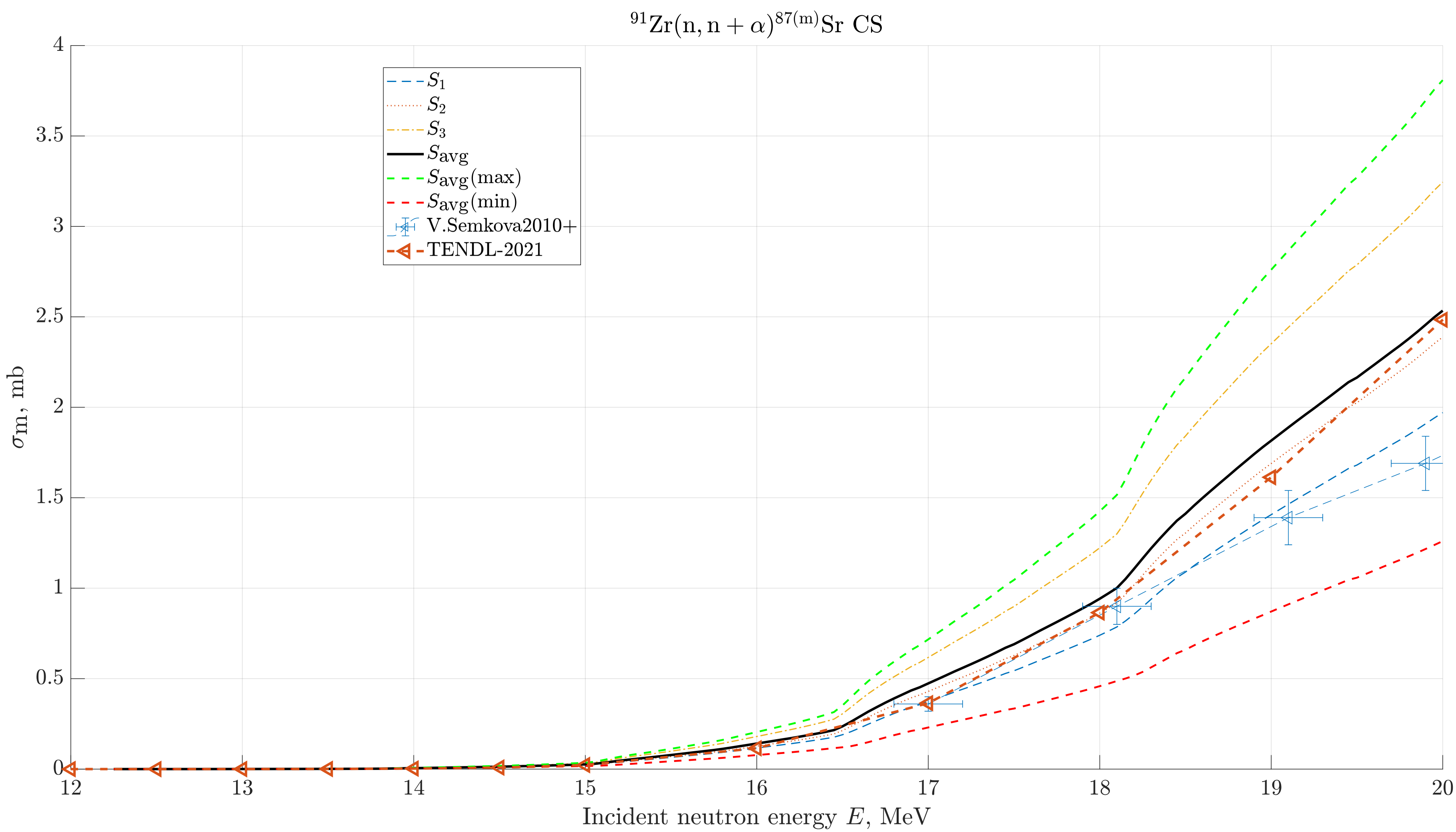

Рисунок 11.4 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{87}Sr в реакции ^{91}Zr(n, n + α)^{87}Sr в зависимости от энергии нейтрона.

11.3 Образование ^{114}In

На рисунках 11.5 и 11.6 представлены сечения выхода основного (g) и изомерного (m) состояний соответственно ядра ^{114}In в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR. На всех этих рисунках видно схожее поведение кривых, соответствующих сечению, рассчитанному по TALYS-1.9, и оцененным сечениям. Основной массив экспериментальных данных подтверждает правильность расчёта и оценок.

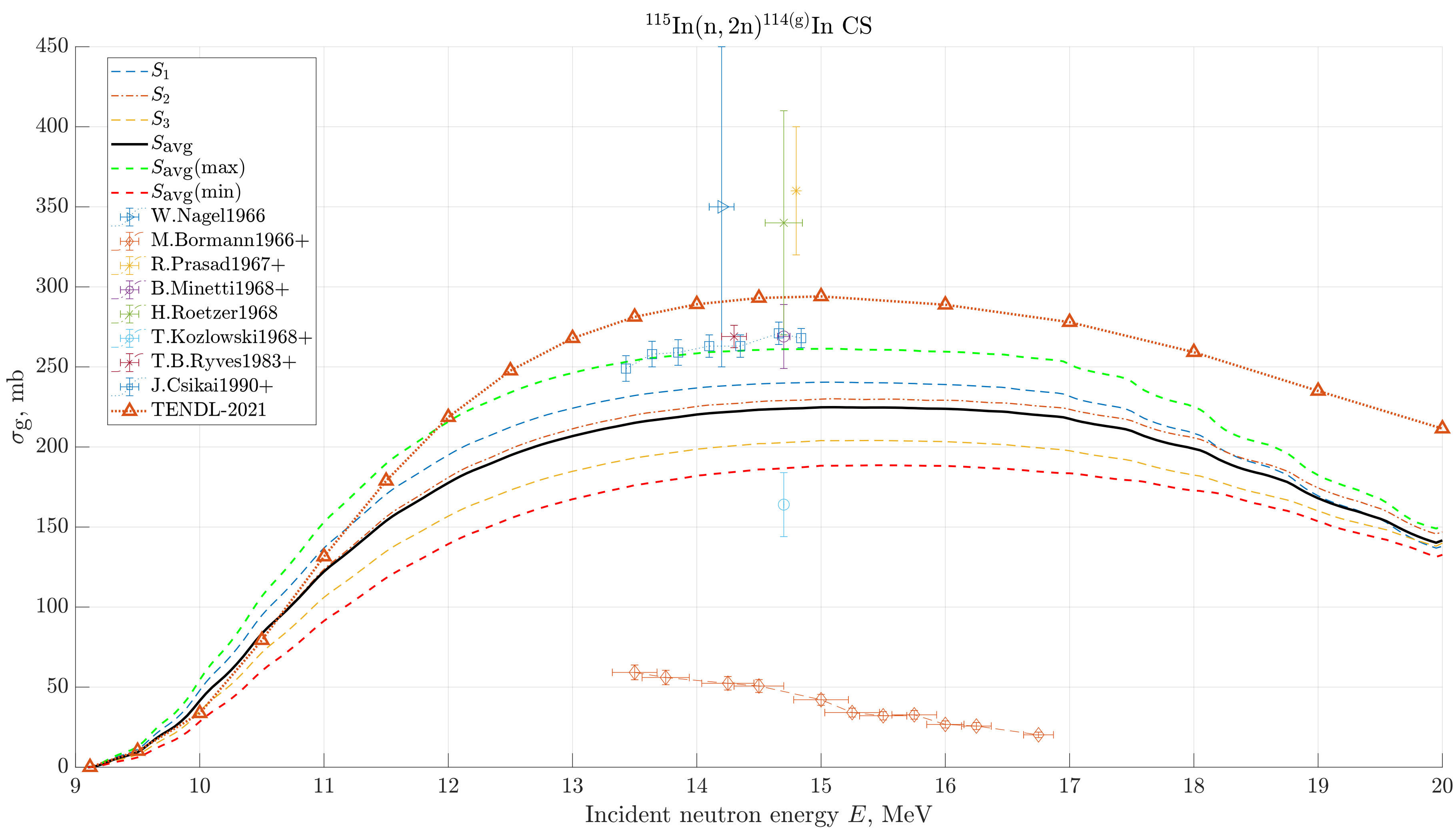

Рисунок 11.5 — Сечение выхода основного (g) состояния ядра ^{114}In в реакции ^{115}In(n, 2n)^{114}In в зависимости от энергии нейтрона.

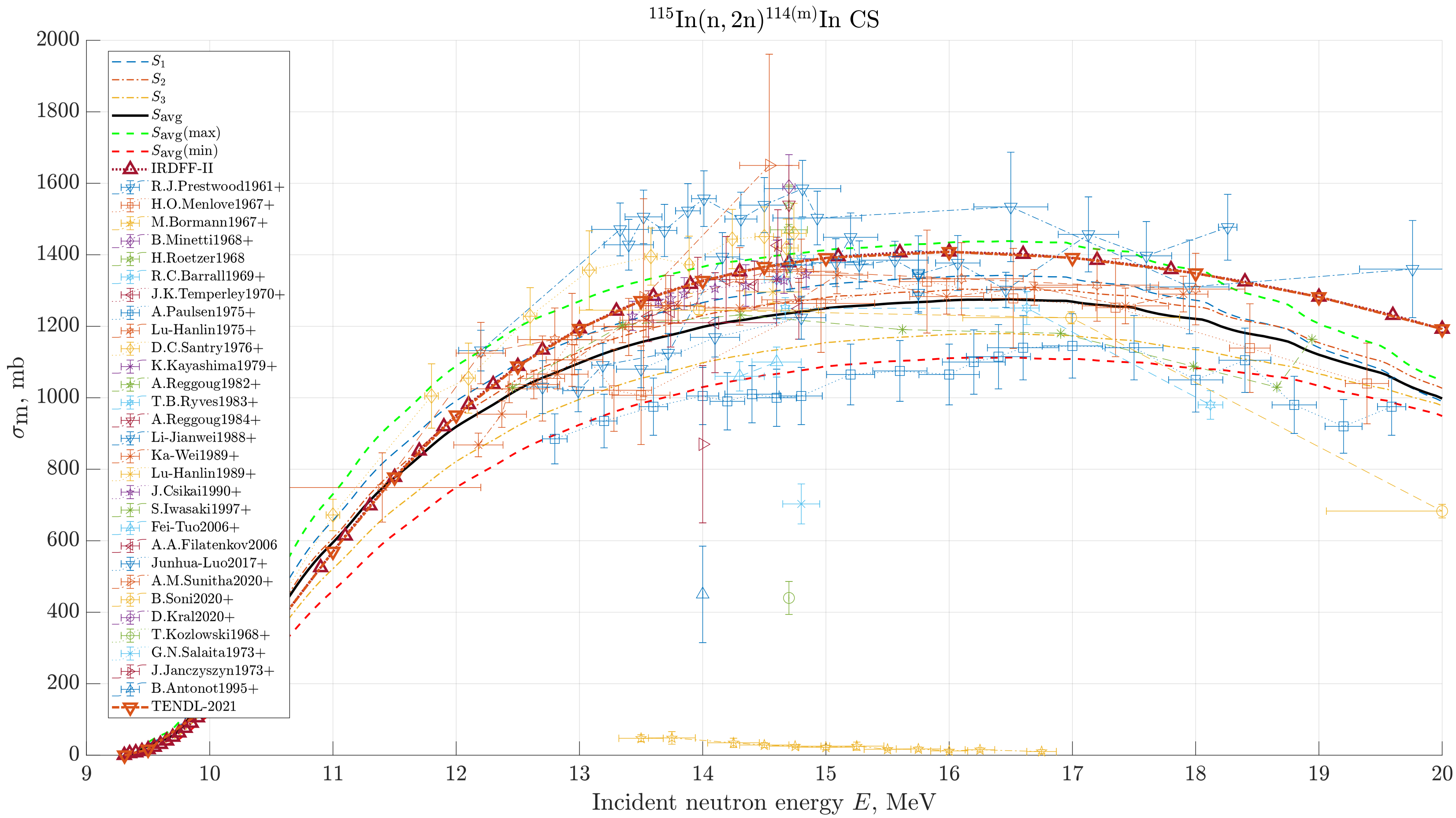

Рисунок 11.6 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{114}In в реакции ^{115}In(n, 2n)^{114}In в зависимости от энергии нейтрона.

11.4 Образование ^{115}In

На рисунках 11.7 и 11.8 представлены сечения выхода основного (g) и изомерного (m) состояний соответственно ядра ^{115}In в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR. На данных рисунках видно проблемное для комплекса TALYS-1.9 поведение кривых: ни при какой модели плотности уровней ядра двугорбую форму сечения получить не удалось.

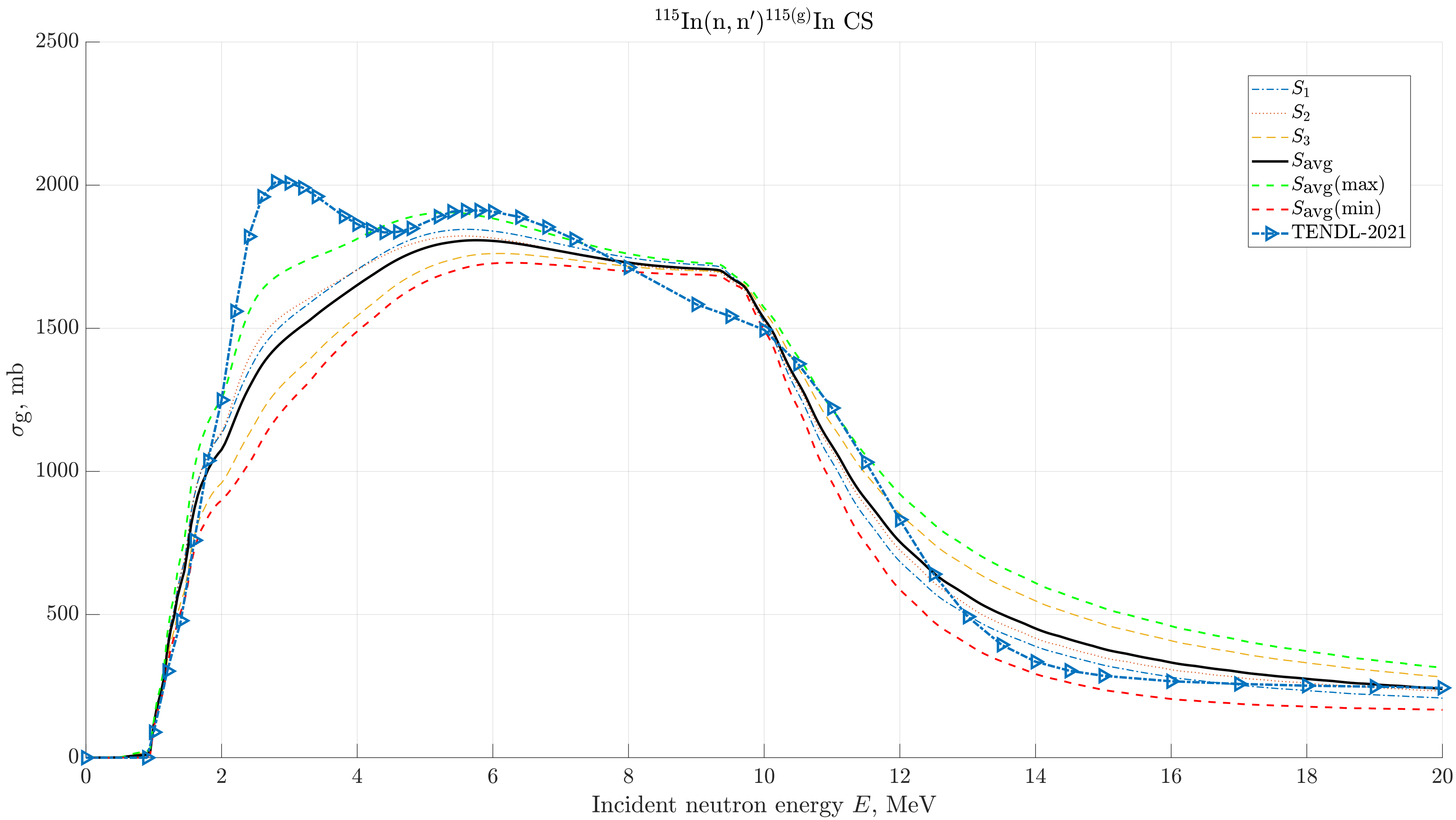

Рисунок 11.7 — Сечение выхода основного (g) состояния ядра ^{115}In в реакции $^{115}\mathrm{In}(\mathrm{n},\mathrm{n}')^{115}\mathrm{In}$ в зависимости от энергии нейтрона.

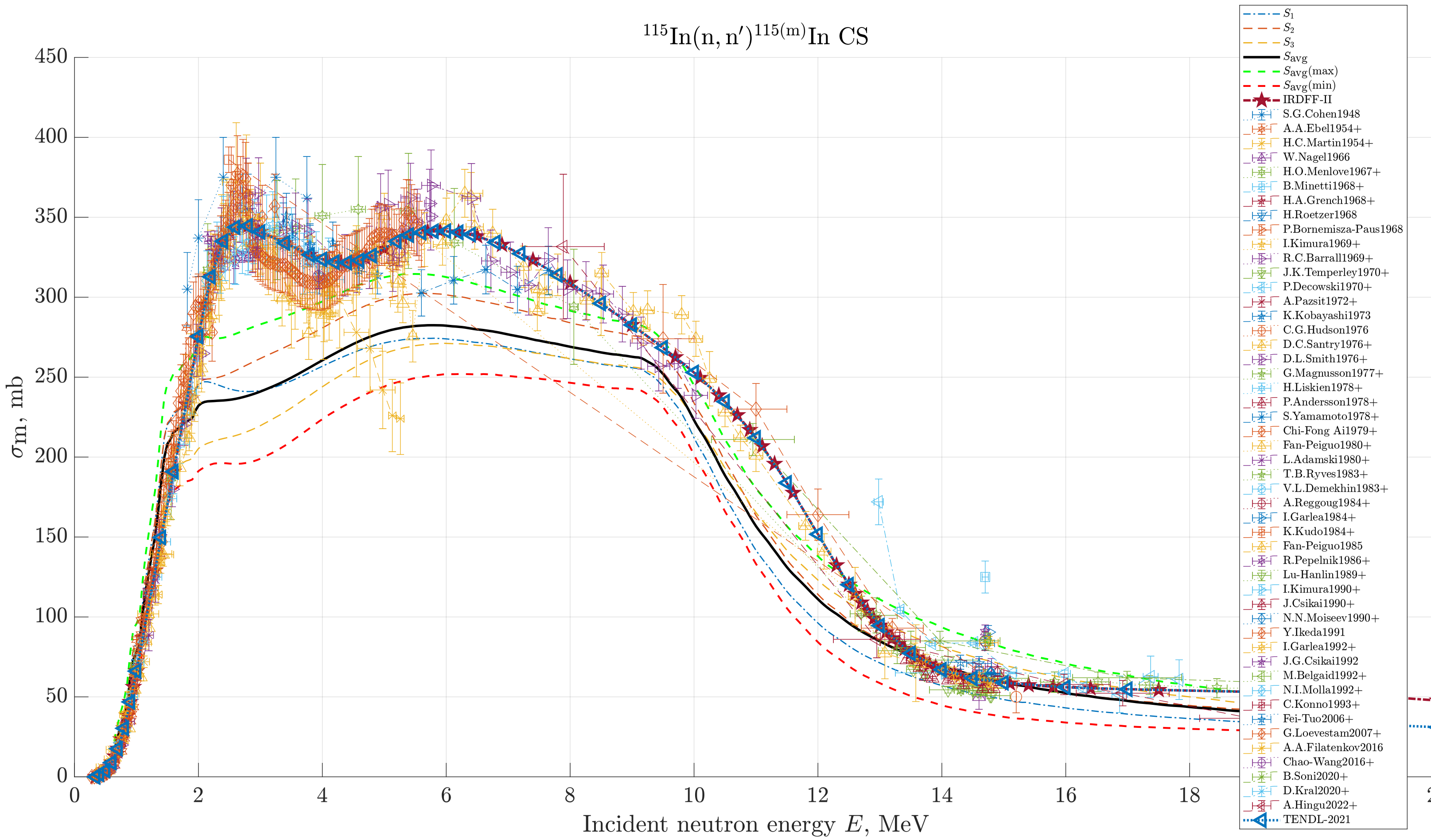

Рисунок 11.8 — Сечение выхода основного (g) состояния ядра ^{115}In в реакции ^{115}In(n, n′)^{115}In в зависимости от энергии нейтрона.

Заключение

Таким образом, в данной работе была рассмотрена задача симметричного двухцентрового осциллятора со введённым потенциалом ядерного спин-орбитального взаимодействия и были получены новые энергетические уровни при рассмотрении соответствующих уравнений на ограниченном количестве волновых функций. Полученные уровни, изображённые на рисунках 9.1 и 10.1, отражают похожие уровни из работы [6, Fig. 5].

Следующим шагом развития модели будет служить рассмотрение задачи со спин-орбитальным взаимодействием в общем случае, на неограниченном базисе из волновых функций невозмущённой задачи двухцентрового осциллятора, а также введение $\boldsymbol{\ell}^2$-слагаемого с целью получения энергетических уровней наиболее приближенных к реальным уровням делящегося ядра.

Во второй части данной работы выполненный анализ показал, что в качестве количественной оценки «разумной точности» воспроизведения расчётами TALYS-1.9 как экспериментальных данных (из EXFOR), так и оценок из IRDFF-II, может выступать характерный разброс расчётных значений сечений для разных моделей плотности уровней ядер `ldmodel` (при этом основанных на одной и той же модели ферми-газа). Данная характеристика сравнима с разбросом экспериментальных точек, с отличием оценки IRDFF-II от этих точек, а также с отличием «среднего» (по разным `ldmodel`) сечения от экспериментальных точек и оценочной кривой.

Значит, в ряде случаев, используя заложенные в программный комплекс TALYS-1.9 модели плотности уровней ядер, а также ряд других параметров (`fullhf` и `optmodall`), имеется возможность получать адекватные оценки сечений, то есть использовать TALYS-1.9 в качестве предсказательного инструмента.

Далее следует изучить различия между оценочными и экспериментальными кривыми сечений, не описывающихся разбросом комплекса TALYS-1.9, с целью углубления понимания работы программного комплеса.

Список литературы

1. P. Holzer, U. Mosel, and W. Greiner, “Double-centre oscillator and its application to fission”, — *Nuclear Physics A*, v. 138, iss. 2, p. 241–252, 1969.
2. A. Trkov *et al.*, “IRDFF-II: A New Neutron Metrology Library”, — *Nuclear Data Sheets*, v. 163, p. 1–108, 2020. DOI: `10.1016/j.nds.2019.12.001`.
3. A. J. Koning and D. Rochman, “Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System”, — *Nuclear Data Sheets*, v. 113, iss. 12, p. 2841–2934, 2012. DOI: `10.1016/j.nds.2012.11.002`.
4. R. Capote *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. DOI: `https://doi.org/10.1016/j.nds.2009.10.004`.
5. О. Бор и Б. Моттельсон, *Структура атомного ядра. Том 1. Одночастичное движение.* — Москва: Мир, 1971.
6. D. Scharnweber, W. Greiner, and U. Mosel, “The two-center shell model”, — *Nuclear Physics A*, v. 164, iss. 2, p. 257–278, 1971.
7. M. Mirea, “Two Center Shell Model with Woods-Saxon Potentials”, — *Romanian Reports in Physics*, v. 59, iss. 2, p. 523–531, 2007.
8. G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists.* — 5th ed. Academic Press, 2001.
9. А. С. Давыдов, *Квантовая механика.* — 2-е изд. Москва: Наука, 1973.
10. N. Saad and R. L. Hall, “Integrals containing confluent hypergeometric functions with applications to perturbed singular potentials”, — *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 36, iss. 28, p. 7771–7788, 2003.
11. S. G. Nilsson, “Binding states of individual nucleons in strongly deformed nuclei”, — *Kong. Dan. Vid. Sel. Mat. Fys. Med.*, v. 29N16, p. 1–69, 1955.