

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 2023

Содержание

Введение	3
1 Аналитические формулы плотности состояний и уровней с учётом проекции результирующего спина	5
1.1 Прямое преобразование Лапласа	5
1.2 Обобщение на случай системы из двух подсистем	7
1.3 Метод перевала	7
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	11
1.5.3 Использование метода перевала	11
1.5.4 Равенство плотностей одночастичных состояний для протонов и нейтронов	11
1.6 Получение формулы количества состояний в зависимости от энергии	11
1.7 Получение формулы количества уровней	11
1.8 Плотность уровней в зависимости от энергии	12
2 Алгоритм перебора многочастичных состояний	13
2.1 Перебор многочастичных состояний для подсистемы	13
2.2 Перевод размерных величин в безразмерные	14
2.3 Получение распределения плотности состояний в зависимости от энергии возбуждения	14
2.4 Получение распределения плотности состояний в зависимости от проекции углового момента	14
2.5 Получение распределения плотности уровней в зависимости от полного углового момента J	15
3 Подходы к моделированию других авторов	15
4 Модель прямоугольной ямы конечной глубины	16
4.1 Описание модели	16
4.2 Моделирование многочастичных состояний	17
5 Модель одномерного гармонического осциллятора	18
5.1 Моделирование одномерного осциллятора	18
5.2 Ограничения аналитической формулы	19
6 Модель модифицированного осциллятора	21
6.1 Плотность состояний в зависимости от энергии возбуждения	21
6.2 Плотность состояний в зависимости от проекции углового момента	22
6.3 3-мерное распределение плотности состояний	23
6.4 Распределение плотности уровней в зависимости от энергии	24
6.5 Распределение плотности уровней в зависимости от энергии	24
6.6 Сверка с экспериментальными данными	25
6.6.1 Проверка для ^{43}Sc и ^{45}Sc	25
6.6.2 Проверка для ^{45}Ti	26
6.6.3 Проверка для ядер Ni	27
7 Моделирование реакций в программе Talys	28
7.1 Методика построения полученных данных	28
7.2 Результаты для ^{58}Ni	28
7.3 Результаты для ^{59}Co	29

7.4	Результаты для ^{112}Cd	29
7.5	Результаты для ^{113}In	30
8	Заключение	31
8.1	Планы на будущее	31
	Список литературы	32

Введение

Атомное ядро представляет из себя систему из связанных протонов и нейтронов, взаимодействующих посредством ядерных сил. Эти силы имеют радиус взаимодействия порядка $r_0 \sim 10^{-13}$ см. Нуклоны находятся в самосогласованном потенциале, создаваемом всеми остальными нуклонами, как описано в монографии [1]. Заполненные ядерные оболочки формируют изотропный потенциал, для которого удобно ввести следующие квантовые числа:

- n — главное квантовое число.
- l — орбитальный момент.
- l_z — проекция орбитального момента на ось z .

Также каждый нуклон обладает спином $s = 1/2$. Поэтому образуется полный угловой момент $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$, его значение равно $j = l \pm 1/2$. Тогда, например, если $n = 1, l = 1$, то возникнут два термина: $1P_{1/2}$ и $1P_{3/2}$. В первом случае на уровне будут располагаться два нуклона ($2j + 1 = 2$), а во втором — четыре. Проекция полного углового момента у этих нуклонов находится в диапазоне от $-j_z$ до j_z . Энергия у термов будет различна. Также у состояний есть чётность: $P = (-1)^l$.

Таким образом, одночастичное состояние можно охарактеризовать следующими величинами:

- Порядковый номер
- Энергия
- Значение полного углового момента j
- Проекция полного углового момента j_z
- Чётность P

Теперь можно построить «многочастичное состояние», то есть распределить нуклоны по одночастичным состояниям. Тогда это образование будет иметь определённую энергию, проекцию углового момента и чётность. Также можно ввести энергию возбуждения как разницу между текущим и основным многочастичными состояниями.

Предположим, произошла некоторая ядерная реакция с образованием компаунд-ядра (составного ядра) C^* : $a + A \rightarrow C^* \rightarrow b + B$. Поскольку C^* находится в возбуждённом состоянии, то оно через некоторое время перейдёт в состояние с меньшей энергией.

Ядерные реакции — это переход ядер из одних многочастичных состояний в другие. В статье [2] ядерные реакции поясняются рисунком 1. Здесь изображены переходы из одних многочастичных состояний в другие через разные каналы распада (n — испускание нейтрона, p — протона, f — деление, ...). Компаунд-ядро находится в правом верхнем углу. Чем левее ядро на диаграмме, тем меньше у него нейтронов, чем ниже — тем меньше протонов. Для каждого ядра существуют дискретные низколежащие уровни. При больших энергиях возбуждения количество уровней на определённый интервал энергией становится настолько велико, что приходится вводить плотность уровней.

Теперь возникает вопрос: какова вероятность того, что ядро из некоторого возбуждённого состояния с энергией E перейдёт в какое-нибудь другое в интервале $[E' - \Delta E', E' + \Delta E']$? Понятно, что чем

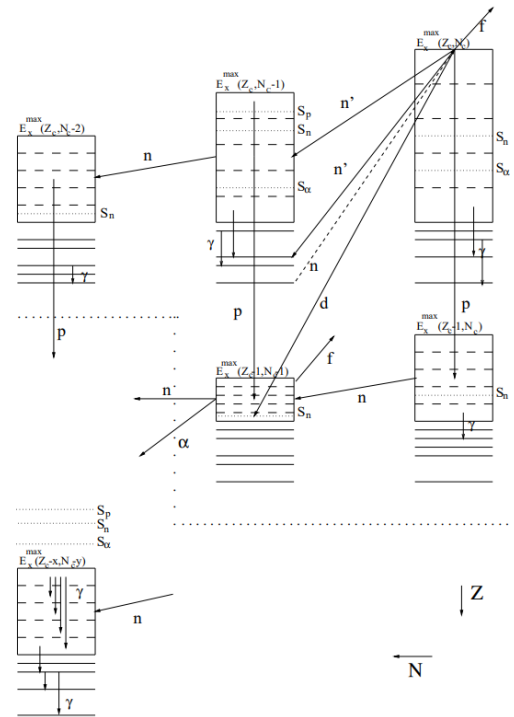


Рисунок 1 — Иллюстрация возможных путей распада из [2]

больше состояний в этом диапазоне, тем больше вероятность перехода именно в них. Для этого требуется знать плотность многочастичных состояний.

Аналитические формулы получены для модели Ферми газа в первом разделе. Эта модель была предложена Бете ещё в 1937 году и основана на предположениях эквидистантности возбуждённых уровней и отсутствия коллективных уровней.

Существует много моделей ядра. Следующий шаг — модифицированная модель ферми-газа с обратным смещением [3, 4], которая применяется для описания плотности низколежащих уровней. Здесь вводится дополнительное слагаемое в энергию возбуждения U и модифицируется плотность уровней ρ_{BFM}^{tot} :

$$U = at^2 - t, \quad \rho_{BFM}^{\text{tot}}(E) = \left[\frac{1}{\rho_F^{\text{tot}}(E)} + \frac{1}{\rho_0(t)} \right]^{-1}, \quad \rho_0(t) = e \frac{a}{12\sigma} \exp(a^2 t^2), \quad t = \sqrt{U/a}$$

Есть также составная модель Гильберга-Камерона [3, 4]: при малых энергиях используется экспоненциальное приближение, а при больших — соотношение для ферми-газа:

$$\rho(U, J, \pi) = \frac{1}{2} R(U, J) \cdot \begin{cases} \exp\left(-\frac{U-U_0}{T_0}\right), & U < U_M \\ \rho_F(U), & U > U_M \end{cases}$$

Здесь U_M — граничная энергия (M — matching), в которой надо сделать сшивку:

$$\begin{cases} \exp\left(-\frac{U-U_0}{T_0}\right) \Big|_{U_M} = \rho_F(U_M) \\ \frac{d}{dU} \left(\exp\left[\frac{U-U_0}{T_0}\right] \right) \Big|_{U_M} = \frac{d\rho_F(U)}{dU} \Big|_{U_M} \end{cases}$$

Существует также сверхтекучая модель ядра, учитывающая коллективные эффекты, вызванные остаточным взаимодействием [4].

$$\rho(E, J) = \rho_{qp}(U, J) K_{vibr}(U) K_{rot}(U)$$

Здесь ρ_{qp} — плотность уровней, вызванная исключительно квазичастицами. $K_{vibr}(U)$ и $K_{rot}(U)$ — поправки, учитывающие колебательные и вращательные эффекты.

Существует много моделей ядра, но мы остановимся на самом простом случае, на модели ферми-газа с постоянной температурой.

В ходе работы были проделаны основные моменты:

- Были воспроизведены выводы аналитических формул для плотности состояний и уровней.
- Проведено моделирование плотности состояний и уровней для различных моделей ядер.
- Полученные результаты сравнены с теоретическими вычислениями и с другими подходами к моделированию плотности уровней.
- Проведено моделирование некоторых реакций в программе Talys.

Сначала рассматриваются аналитические способы получения плотности состояний и уровней. Затем рассказывается про результаты моделирования плотности для различных моделей ядра, параллельно проводится сравнение с теоретическими формулами. Далее описываются результаты моделирования в Talys.

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

Здесь приводятся рассуждения, аналогичные [1, 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 $-\beta\varepsilon + \alpha - km^+ = x(\varepsilon)$

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

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

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

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

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 $\Phi(\lambda)$:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
S(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k) &\approx S_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} \Big|_{\beta_0} (\beta - \beta_0)^2 + \dots + \frac{\partial^2 S}{\partial \beta \partial \alpha_Z} \Big|_{\beta_0, \alpha_{z_0}} (\beta - \beta_0)(\alpha_Z - \alpha_{z_0}) + \dots = \\
&= S_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} \Big|_{\beta_0} (\beta - \beta_0)^2 + \dots + \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_Z} \Big|_{\beta_0, \alpha_{z_0}} (\beta - \beta_0)(\alpha_Z - \alpha_{z_0}) + \dots
\end{aligned} \tag{6}$$

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

$$\beta = \beta_0 + ix_1, \quad \alpha_Z = \alpha_{z_0} + ix_2, \quad \alpha_N = \alpha_{N_0} + ix_3, \quad k = k_0 + ix_4$$

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

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} :

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

Напомним, что $\ln Q = \frac{\overline{g_Z} \alpha_Z^2}{2\beta} + \frac{\overline{g_N} \alpha_N^2}{2\beta} + \frac{a}{\beta} + \frac{k^2 \cdot \overline{g} \cdot m^2}{2\beta}$. 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 $g(E > E_F) = 0$: $Z = \int g_Z dE_Z = g_Z E_{ZF}$, $N = g_N E_{NF}$, $E_0 = \int g_Z E_Z dE_Z + \int g_N E_N dE_N = \frac{g_Z E_{ZF}^2}{2} + \frac{g_N E_{NF}^2}{2}$

$$\begin{aligned}
\alpha_Z &= \frac{Z\beta}{gZ} = \frac{g_Z E_{ZF} \beta}{gZ} = \beta E_{ZF}, \quad \alpha_N = \beta E_{NF} \\
U &= E - E_0 = \frac{g_Z \alpha_Z^2}{2\beta^2} + \frac{g_N \alpha_N^2}{2\beta^2} + \frac{a}{\beta^2} + \frac{k^2 g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} - \frac{g_Z E_{ZF}^2}{2} - \frac{g_N E_{NF}^2}{2} = \\
&= \frac{a}{\beta^2} + k^2 \cdot \frac{g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} = \frac{a}{\beta^2} + \left(\frac{M\beta}{g \cdot \overline{m^2}} \right)^2 \cdot \frac{g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} = \frac{a}{\beta^2} + \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \\
\frac{a}{\beta^2} &= U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \\
D &= 2gg_Z g_N \overline{am^2} / \beta^6 \xrightarrow{g_Z \approx g_N \approx g/2} \frac{g^3 \overline{am^2}}{2\beta^6} = \frac{\overline{gm^2} \cdot (6/\pi^2)^2 a^3}{2\beta^6} = \frac{\overline{gm^2}}{2} \left(\frac{6}{\pi^2} \right)^2 \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)^3 \quad (8) \\
S &= \beta E - \alpha_Z Z - \alpha_N - kM + \ln Q = \dots = \frac{2a}{\beta} = 2\sqrt{a \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)}
\end{aligned}$$

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

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

- 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 $\langle l_x^2 \rangle = \langle l_y^2 \rangle = \langle l_z^2 \rangle$, $\langle l_x^2 \rangle + \langle l_y^2 \rangle + \langle l_z^2 \rangle = \langle l^2 \rangle$. 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 $J = \frac{2}{5} m R^2$. Тогда

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2g\langle m^2 \rangle} &= \frac{\hbar^2}{2J} = \frac{\hbar^2}{\frac{4}{5} m R^2} = \frac{\hbar^2 c^2}{\frac{4}{5} m c^2 R^2} \\
\frac{\hbar^2}{2J} &= \frac{\hbar^2 c^2}{2 \cdot \frac{2}{5} m c^2 R^2}, \quad R = r_0 \cdot A^{1/3}
\end{aligned}$$

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 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:

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

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

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

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

$$\boxed{\omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \cdot \frac{\exp\left(2\sqrt{aU}\right)}{a^{1/4} U^{5/4}}} \quad (10)$$

1.7 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):

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

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

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

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:

$$\boxed{\rho(U, I) \approx \frac{2I + 1}{12} \sqrt{a} \left(\frac{\hbar^2}{2J}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{\exp\left(2\sqrt{a\left(U - \frac{I(I+1)\hbar^2}{2J}\right)}\right)}{\left(U - \frac{I(I+1)\hbar^2}{2J}\right)^2}} \quad (11)$$

1.8 Плотность уровней в зависимости от энергии

Получим $\rho(U)$ из $\rho(U, I)$ по аналогии с формулой (10). Здесь удобнее от I перейти обратно к M . Разложим показатель экспоненты и знаменатель:

$$2\sqrt{a\left(U - \frac{M^2\hbar^2}{2J}\right)} \approx 2\sqrt{aU} - \frac{M^2}{2\sigma^2}, \quad \sigma^2 = \frac{J}{\hbar^2} \sqrt{\frac{U}{a}}, \quad \sigma = \sqrt{\frac{J}{\hbar^2}} \left(\frac{U}{a}\right)^{1/4}$$

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

$$\rho(U) = \sum_M \approx \int_0^\infty \rho(U, M) dM = \int_0^\infty \frac{2M}{12} \sqrt{a} \frac{\exp\left(2\sqrt{aU} - \frac{M^2}{2\sigma^2}\right)}{2\sqrt{2}\sigma^3 a^{3/4} U^{5/4}} dM = \frac{\exp\left(2\sqrt{aU}\right)}{12\sqrt{2}a^{1/4}U^{5/4}\sigma^3} \int_0^\infty M \cdot \exp\left(-\frac{M^2}{2\sigma^2}\right) dM \ominus$$

$$\int_0^\infty M \cdot \exp\left(-\frac{M^2}{2\sigma^2}\right) dM = \frac{1}{2} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{M^2}{2\sigma^2}\right) d\left(\frac{M^2}{2\sigma^2}\right) \cdot 2\sigma^2 = \sigma^2 \cdot \int_0^\infty e^{-x} dx = \sigma^2$$

$$\ominus \frac{\exp\left(2\sqrt{aU}\right)}{12\sqrt{2}a^{1/4}U^{5/4}\sigma} = \frac{\exp\left(2\sqrt{aU}\right)}{12U^{3/2}} \cdot \sqrt{\frac{\hbar^2}{2J}}$$

$$\boxed{\rho(U) \approx \sqrt{\frac{\hbar^2}{2J}} \cdot \frac{\exp\left(2\sqrt{aU}\right)}{12U^{3/2}}} \quad (12)$$

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. Основное состояние ядра будет выглядеть как $\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, \dots\}$.

Вычисления проводились в предположении, что протоны и нейтроны находятся 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 (Nilsson Model).
4. Получение распределений количества многочастичных состояний по энергии возбуждения U , по проекции углового момента j_z , а также распределений количества уровней по энергии возбуждения U и по спину ядра I .

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 остатком 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 более подробного объяснения надо смотреть код программы.

Пусть в результате работы алгоритма мы получили $\omega^n(u, 2J_z, P)$ и $\omega^p(u, 2J_z, P)$ — количество многочастичных состояний для нейтронной и протонной подсистем соответственно для безразмерной энергии возбуждения в интервале $[u - \Delta u/2; u + \Delta u/2)$, удвоенной проекции углового момента на ось z и чётности. Далее надо получить все интересующие нас распределения.

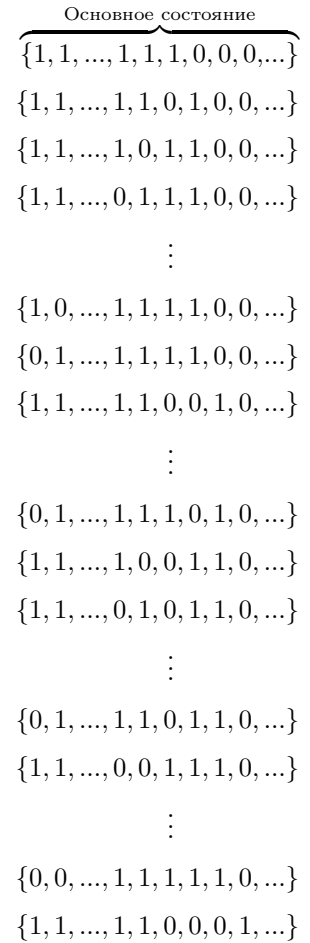


Рисунок 2 — Алгоритм перебора многочастичных состояний

2.2 Перевод размерных величин в безразмерные

Пользователь вводит энергию U_{\max} в МэВ, до которой надо посчитать распределения. В программе работа ведётся в безразмерных целых единицах (поскольку при использовании типа float будет проблематично сравнение на эквивалентность, а также будет накапливаться ошибка). Надо ввести некоторую характерную для данной модели энергию. В модели 3-мерного осциллятора, например, размерный множитель будет $\hbar\omega \approx 40A^{-1/3}$, согласно [1], формула (2.131). Безразмерную энергию u_{\max} можно получить как $\frac{U_{\max}}{\hbar\omega} \cdot 1000$. Так, если $U_{\max} = 20$ МэВ, ядро 40Ca , $\hbar\omega = 40 \cdot 40^{-1/3} = 11.696$ МэВ, то $u_{\max} = 1709$. Оптимальный шаг безразмерной энергии Δu был выбран равным 10.

2.3 Получение распределения плотности состояний в зависимости от энергии возбуждения

Цель — получить $\omega(u) \equiv \frac{\Delta N}{\Delta U}$. Для этого сначала надо из $\omega^n(u^n, 2J_z^n, P)$ и $\omega^p(u^p, 2J_z^p, P)$ получить $\omega^n(u^n)$ и $\omega^p(u^p)$ соответственно, то есть просуммировать по всем $2J_z^n$ и $2J_z^p$, а также по чётностям. Затем надо при определённой энергии возбуждения u перебрать все возможные случаи, когда эта энергия идёт в разных пропорциях в протонную и нейтронную подсистемы, то есть $\omega(u, P) = \sum_{i=0}^u \omega^n(i) \omega^p(u-i)$. Таким образом, получаем:

$$\omega(u) = \sum_{i=0}^u \omega^n(i) \omega^p(u-i) = \sum_{i=0}^u \left[\sum_P \sum_{2J_z^n} \omega^n(i, 2J_z^n, P) \right] \left[\sum_P \sum_{2J_z^p} \omega^p(u-i, 2J_z^p, P) \right] \quad (13)$$

2.4 Получение распределения плотности состояний в зависимости от проекции углового момента

Сейчас мы хотим получить $\omega(u, 2J_z, P)$ и построить распределение по $2J_z$, но надо проделать ряд нетривиальных манипуляций с $\omega^n(u^n, 2J_z^n, P^n)$ и $\omega^p(u^p, 2J_z^p, P^p)$.

Предположим, мы хотим получить количество состояний с проекцией $J_z = 0$ с некоторой чётностью P . Границы распределения по $2J_z^n$ и $2J_z^p$ составляют от -50 до 50 включительно. Тогда надо взять сумму элементов из протонного и нейтронного массива так, чтобы в каждом слагаемом выполнялось условие $J_z^n + J_z^p = J_z = 0$. То есть берём $\omega^n(u^n, -50, P^n)$ и умножаем на $\omega^p(u^p, 50, P^p)$, затем $\omega^n(u^n, -49, P^n) \cdot \omega^p(u^p, 49, P^p)$ и так далее до $\omega^n(u^n, 50, P^n) \cdot \omega^p(u^p, -50, P^p)$. Теперь надо учесть, что в протонную и нейтронную подсистему может пойти разное количество энергии, лишь бы выполнялось равенство $u_n + u_p = u$. Также надо учесть, что произведение чётной (Ч) и нечётной (Н) подсистем даёт (Н), также как и (Н)×(Ч). Для (Ч) тоже два варианта: (Ч)×(Ч) и (Н)×(Н) Тогда получим:

$$\omega(u, 0, P) = \sum_{i=0}^u \sum_{k=-50}^{50} \left[\omega^n(i, k, P^n) \cdot \omega^p(u-i, -k, P^p) + \omega^n(i, k, -P^n) \cdot \omega^p(u-i, -k, -P^p) \right]$$

Здесь $P = P^n \cdot P^p = (-P^n) \cdot (-P^p)$. Чтобы теперь получить значения для $2J_z \neq 0$, надо сделать некоторую «сдвигку», поскольку мы не сможем получить $2J_z = 1$, складывая $2J_z^n = -50$ с $2J_z^p = 51$, поскольку пределы установлены равными с обеих сторон и равными 50, то есть не существует элемента в массиве с $2J_z^p = 51$. Надо складывать, начиная с $2J_z^n = -49$, $2J_z^p = 50$ и заканчивая $2J_z^n = 50$, $2J_z^p = -49$.

В массивах $\omega^n(u^n, 2J_z^n, P^n)$ и $\omega^p(u^p, 2J_z^p, P^p)$ половина значений нулевые в силу закона сохранения количества движения (если, например, N_p нечётно, то $2J_z^p$ будет нечётно). Тогда можно оптимизировать алгоритм и перемножать только ненулевые элементы. Для более подробного объяснения требуется посмотреть код программы.

Ожидается некоторое распределение, напоминающее кривую Гаусса. Теоретически оно описывается формулой (9) при фиксированной энергии, имеет максимум в нуле и фиксированные границы распределения, т.к. слагаемое $\frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle}$ не может быть больше U .

2.5 Получение распределения плотности уровней в зависимости от полного углового момента J

Чтобы получить плотность уровней $\rho(u, 2J, P)$ из плотности состояний $\omega(u, 2J, P)$, надо взять только те состояния, у которых проекция углового момента равна J . Тогда можно записать:

$$\rho(u, 2J, P) = \omega(u, 2J_z, P) - \omega(u, 2J_z + 2, P), \quad 2J = 2J_z \geq 0 \quad (14)$$

Также можно получить зависимость от энергии возбуждения:

$$\rho(U) = \sum_{2J} \sum_P \rho(u, 2J, P) \quad (15)$$

3 Подходы к моделированию других авторов

В серии статей [5, 6, 7] развивается комбинаторный подход к моделированию плотности состояний. Всё построено на использовании «частиц» и «дырок», аналогично «1» и «0» в описанном ранее алгоритме. Также в статье [6] говорится, что явное различие между частицами и дырками возможно только при условии отсутствия парных корреляций. В [7] одночастичные состояния задаются следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_i^1 = \varepsilon_{Z+i}^\pi - \varepsilon_Z^\pi \\ m_i^1 = 2m_{Z+i}^\pi \\ p_i^1 = p_{Z+i}^\pi \\ \Delta_i^1 = \Delta_{Z+i}^\pi \\ i = 1, \dots, I_1 \\ \text{Протоны-дырки} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_i^2 = \varepsilon_Z^\pi - \varepsilon_{Z-i+1}^\pi \\ m_i^2 = -2m_{Z-i+1}^\pi \\ p_i^2 = p_{Z-i+1}^\pi \\ \Delta_i^2 = \Delta_{Z-i+1}^\pi \\ i = 1, \dots, I_2 \\ \text{Протоны-частицы} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_i^3 = \varepsilon_{N+i}^\nu - \varepsilon_N^\nu \\ m_i^3 = 2m_{N+i}^\nu \\ p_i^3 = p_{N+i}^\nu \\ \Delta_i^3 = \Delta_{N+i}^\nu \\ i = 1, \dots, I_3 \\ \text{Нейтроны-дырки} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_i^4 = \varepsilon_N^\nu - \varepsilon_{N-i+1}^\nu \\ m_i^4 = -2m_{N-i+1}^\nu \\ p_i^4 = p_{N-i+1}^\nu \\ \Delta_i^4 = \Delta_{N-i+1}^\nu \\ i = 1, \dots, I_4 \\ \text{Нейтроны-частицы} \end{array} \right.$$

Буква π соответствует протонам, ν — нейтронам. Энергии выстроены в порядке возрастания $\varepsilon_1, \varepsilon_2 < \dots < \varepsilon_n < \dots$. Здесь m_i — проекция углового момента, p_i — чётность, Δ_i — энергия взаимодействия, соответствующая диагональным элементам матрицы обменного взаимодействия. На деле $I_2 = Z$, $I_4 = N$, лучше сохранить обозначение I_k для удобства. Далее вводится некоторая производящая функция:

$$\mathcal{Z}(x_1, x_2, x_3, x_4, y, z) = \prod_{k=1}^4 \prod_{i=1}^{I_k} \left(1 + x_k p_i^k y^{\varepsilon_i^k} z^{m_i^k} \right)$$

Эта функция может быть разложена по степеням x_k , y и z как

$$\mathcal{Z}(x_1, x_2, x_3, x_4, y, z) = \sum_{\mathcal{N}} \sum_U \sum_M \sum_{P=-1, +1} C_{\mathcal{N}}(U, M, P) y^U z^M x_1^{N_1} x_2^{N_2} x_3^{N_3} x_4^{N_4}$$

Здесь \mathcal{N} обозначает всевозможные комбинации (N_1, N_2, N_3, N_4) в случае N_1 π -дырок, N_2 π -частиц, N_3 ν -дырок, N_4 ν -частиц, а коэффициент $C_{\mathcal{N}}(U, M, P)$ — количество возбуждённых состояний с энергией U для (N_1, N_2, N_3, N_4) . Целью ставится вычисление коэффициентов $C_{\mathcal{N}}(U, M, P)$.

4 Модель прямоугольной ямы конечной глубины

4.1 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 1, в которой отражена вся нужная информация по одночастичным состояниям в данной модели.

Таблица 1 — 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 ограничились максимальной энергией: $\varepsilon_{\text{ceiling}} = 38$. 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: $\left\{ \underbrace{\bullet, \bullet}_{\varepsilon_1=3}, \underbrace{\bullet, \bullet, \dots}_{\varepsilon_2=6}, \underbrace{\bullet, \dots}_{\varepsilon_3=9}, \underbrace{\bullet, \dots}_{\varepsilon_4=11}, \underbrace{\bullet, \dots}_{\varepsilon_5=12}, \underbrace{\bullet, \dots, \bullet, \circ, \dots}_{\varepsilon_6=14}, \underbrace{\circ, \dots}_{\varepsilon_7=17}, \dots \right\}$

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

4.2 Моделирование многочастичных состояний

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

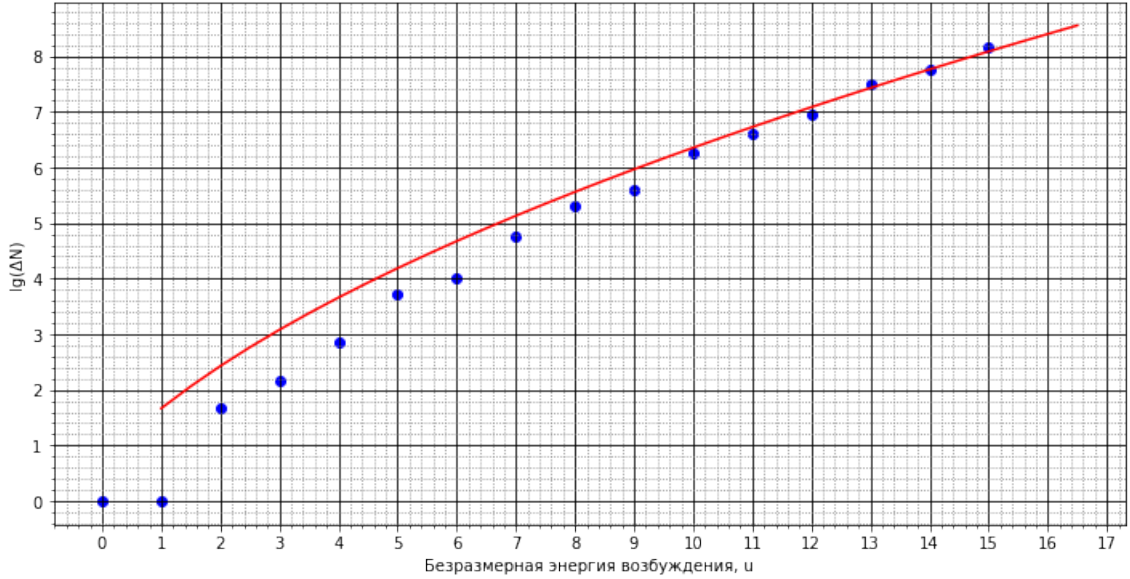


Рисунок 3 — Результаты для $N = Z = 22$. Безразмерный параметр $a = 10.0$

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 [3] 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 :

- 20+20 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.637 \text{ МэВ} \implies a = \frac{10.5}{2.637} = 3.982 \text{ МэВ}^{-1}$. Табличное: $a({}^{41}\text{Ca}) = 5.44 \text{ МэВ}^{-1}$.
- 22+22 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.475 \text{ МэВ} \implies a = \frac{10}{2.475} = 4.041 \text{ МэВ}^{-1}$. Табличное: $a({}^{45}\text{Ti}) = 6.84 \text{ МэВ}^{-1}$.
- 24+24 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.335 \text{ МэВ} \implies a = \frac{15}{2.335} = 6.423 \text{ МэВ}^{-1}$. Табличное: $a({}^{50}\text{Cr}) = 6.54 \text{ МэВ}^{-1}$.
- 26+26 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.214 \text{ МэВ} \implies a = \frac{19}{2.214} = 8.582 \text{ МэВ}^{-1}$. 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 .

5 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 $\sigma = \pm 1$.
- Эквиливантность \implies Плотность состояний $\frac{\Delta N}{\Delta E} = \frac{1}{\hbar\omega} = g_0 = \text{const}$

5.1 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 $\mathcal{K}_n(u = 2) = 9$.

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 2).

Таблица 2 — Зависимость $\mathcal{K}_n(u)$ для подсистемы из 20 частиц

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

Таблица 3 — 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	...

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

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 [1, 3] 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 $N_{\text{new}} = N + 2$, то $u = \frac{N_{\text{new}}}{2} + 1$ уже возбуждает частицу в состоянии 0^+ или 0^- . Поэтому в данном случае количество многочастичных состояний будет различным.

5.2 Ограничения аналитической формулы

Ожидается, что при $u > \frac{N}{2}$ начнутся отклонения от аналитической формулы (10). 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

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

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

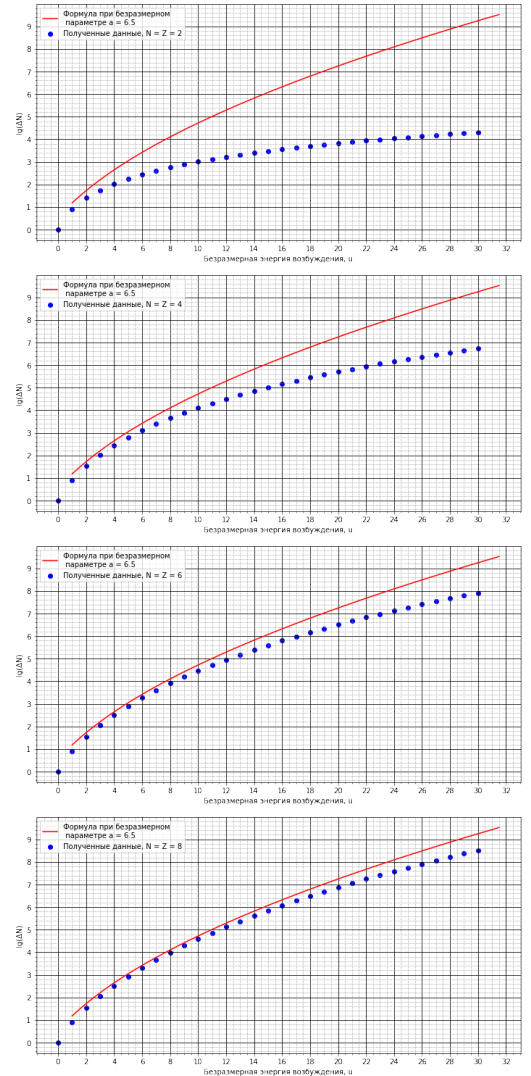


Рисунок 5 — Результаты для спектра одномерного осциллятора для $N = Z = 2, 4, 6, 8, 10$ соответственно.

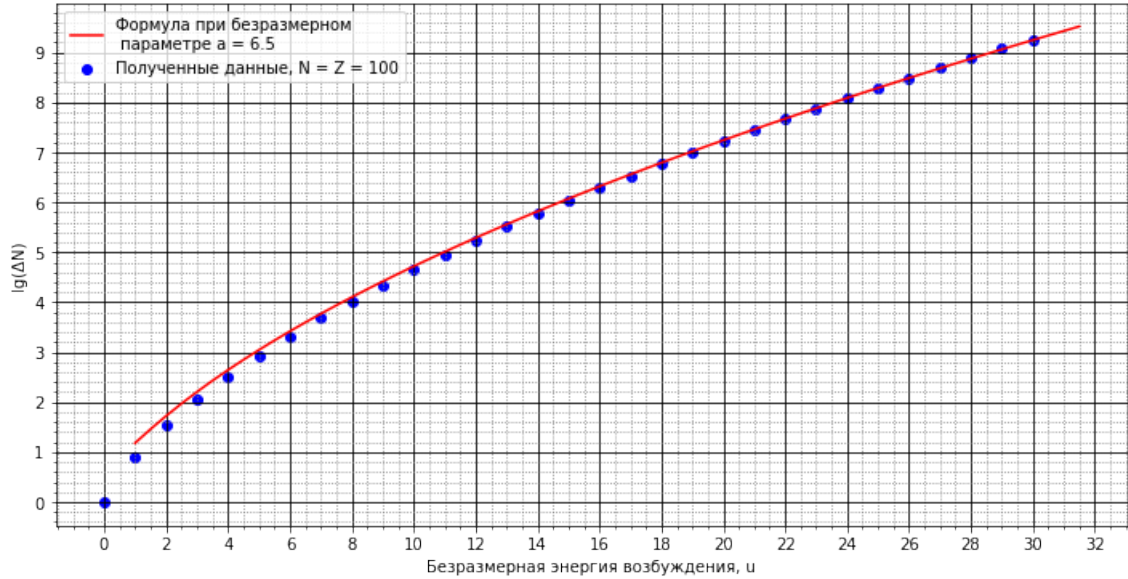


Рисунок 4 — Одномерный осциллятор. Безразмерный параметр $a = 6.5$

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 $\frac{\Delta N_{\text{теор}}}{\Delta N_{\text{модель}}}$: если бы оно было меньше, чем 2, то соответствующая энергия возбуждения u была бы меньше.

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

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

6 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. Посмотрим на некоторые результаты для данной модели.

6.1 Плотность состояний в зависимости от энергии возбуждения

Рассмотрим, к примеру, ядро $40K$. На рисунке 7 изображены красные и синие точки, посчитанные методом (13), а также чёрная линия, которая отвечает теоретической зависимости (10). Красные точки отвечают за количество состояний, приходящихся на интервал энергии $[U - \Delta U, U + \Delta U]$. Здесь шаг безразмерной энергии Δu был выбран равным 10, что соответствует шагу размерной энергии $\Delta U = \frac{10}{1000} \cdot \hbar\omega = \frac{11.696 \text{ МэВ}}{100} = 116.96 \text{ КэВ}$. По рисунку видно, что некоторых точек нет; это потому, что в данном интервале энергий количество многочастичных состояний равно нулю. По оси ординат используется логарифмический масштаб, поэтому нули не рисуются.

Синие точки означают полное количество возможных состояний с энергией до заданной. Видно, что у красных точек довольно большой разброс в силу малости шага по энергиям. Если сделать $\Delta u = 100$ вместо 10, то красные точки будут более монотонно возрастать.

Значение параметра плотности a для аналитической зависимости взято из программы Talys [2], structure/density/ground/ctm (ctm - constant temperature model).

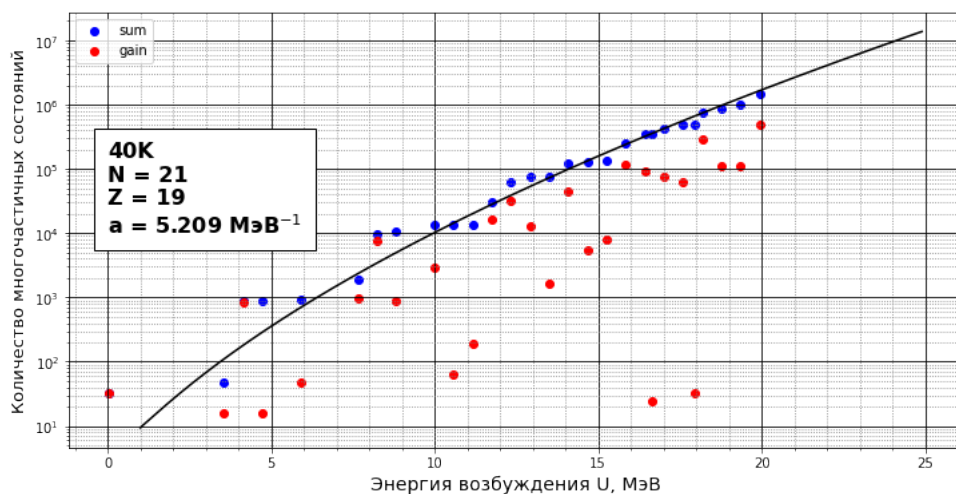


Рисунок 7 — Зависимость количества состояний от энергии

Видно, что при малых энергиях (до 10 МэВ) довольно сильно сказываются дискретные уровни;

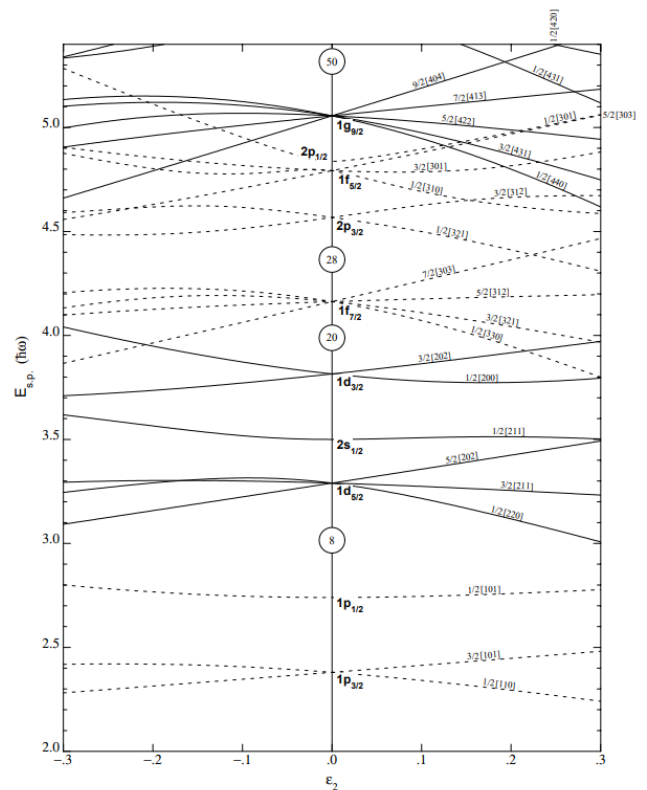


Figure 4. Nilsson diagram for protons or neutrons, $Z, N \leq 50$ ($\epsilon_4 = 0$).

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

при больших энергиях наблюдается согласие смоделированных данных в модели 3-мерного осциллятора и аналитической формулы.

6.2 Плотность состояний в зависимости от проекции углового момента

Здесь красные точки отвечают состояниям с положительной чётностью, синие — с отрицательной, которые попали в диапазон энергии $[U - \Delta U, U + \Delta U]$, $U = 11.696$ МэВ, $2\Delta U = 0.117$ МэВ, $\hbar\omega = 11.696$ МэВ. Значения были получены с помощью метода, описанного ранее 2.4. Видно, что здесь есть многочастичные состояния только при целых j_z , поскольку массовое число A чётное. Также распределение симметрично. Это означает, что выполняется закон сохранения углового момента.

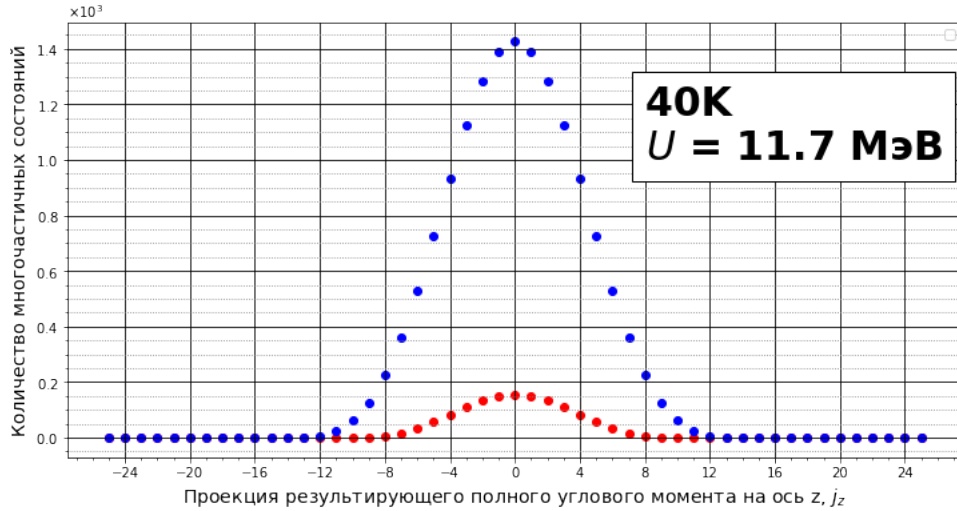


Рисунок 8 — Зависимость количества состояний от проекции углового момента

В основном состоянии ядро 40K нечётно, т.к. 21-й нейтрон находится на $1f_{7/2}$, $P = -1$, 19-й протон — на $1d_{3/2}$, $P = +1$. Тогда максимально возможная проекция углового момента j_z будет равна $7/2 + 3/2 = 10/2 = 5$, что и наблюдается на рисунке 9.

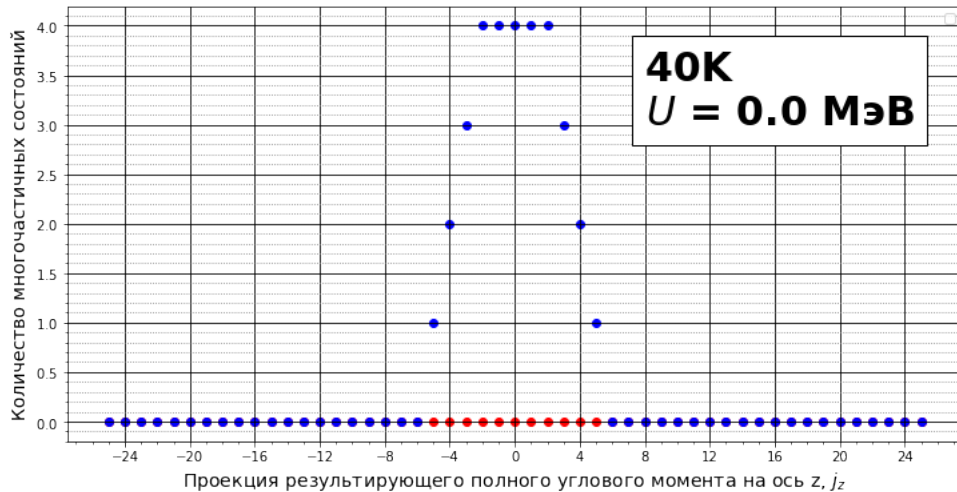


Рисунок 9 — Зависимость количества состояний от проекции углового момента

Чтобы свериться с аналитической формулой (9), надо просуммировать по чётностям, т.к. при выводе они полагаются равными, а также просуммировать все состояния, соответствующие предыдущим энергиям (то есть мы на рисунке 7 смотрим на синюю точку в плоскости yz , перпендикулярно рисунку). На рисунке 18 видно, что при энергии $U = 11.7$ МэВ при выборе параметров a и r_0 наблюдается практически идеальное соответствие. Однако для малых энергий аналитическая формула работает хуже.

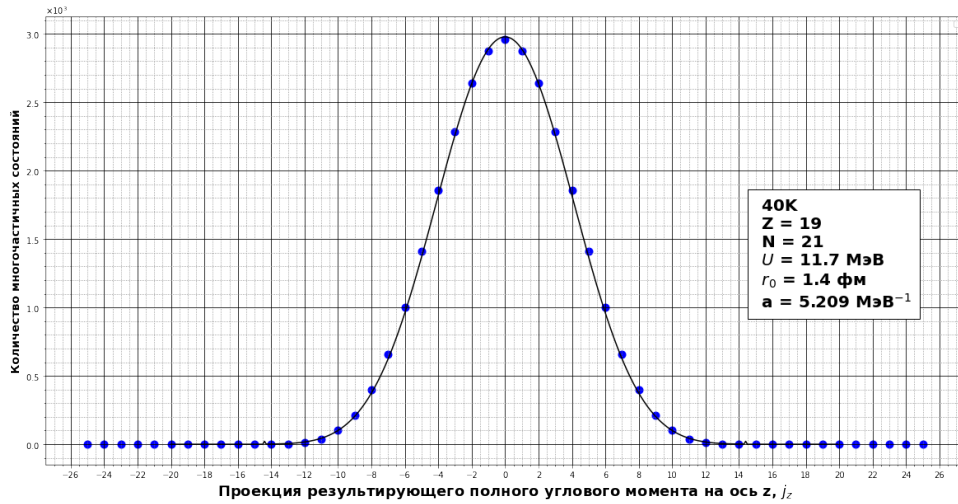
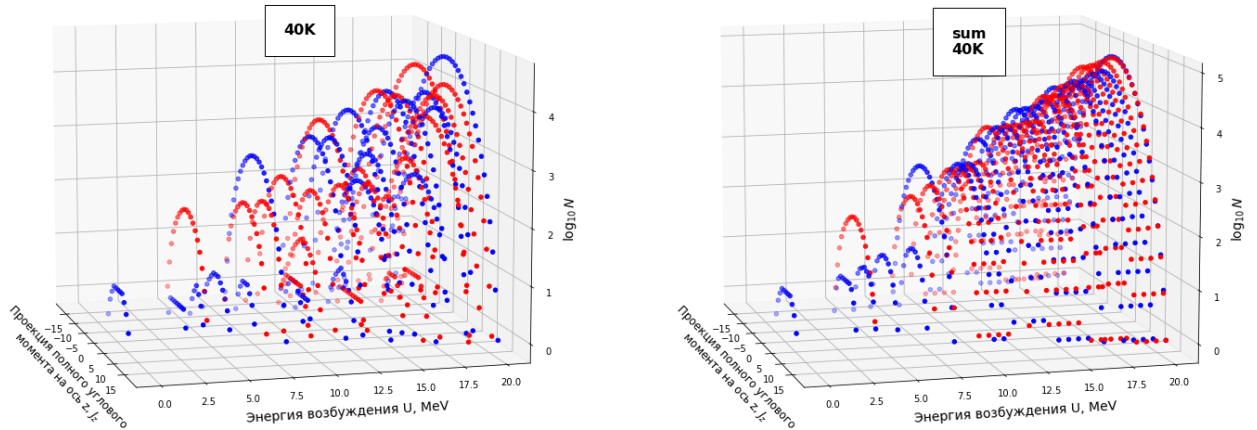


Рисунок 10 — Зависимость количества состояний от проекции углового момента

6.3 3-мерное распределение плотности состояний

Покажем 3-мерные картины плотности состояний. Рассмотрим рисунок 22а. Здесь красные и синие точки отвечают логарифму количества многочастичных состояний с положительной и отрицательной чётностями соответственно в диапазоне энергий $[U - \Delta U, U + \Delta U]$. Если просуммировать состояния по j_z и чётностям, то получатся красные точки на рисунке 7. В логарифмическом масштабе "нулевые" состояния не рисуются.

На рисунке 22б изображены состояния в диапазоне $[0, U]$. Если просуммировать состояния по j_z и чётностям, то получатся синие точки на рисунке 7.



(a) Плотность состояний в диапазонах $[U - \Delta U, U + \Delta U]$

(b) Плотность состояний в диапазоне $[0, U]$

Рисунок 11 — Плотности состояний

Сравнимся с теоретической формулой (9). Здесь видно, что при больших энергиях наблюдается сходство, а при малых — явное различие то в большую, то в меньшую сторону. Также стоит отметить особенность аналитической формулы: в знаменателе стоит выражение вида $U - \frac{M^2}{2g(m^2)}$, которое либо при больших угловых моментах, либо при малых энергиях может становиться неограниченно большим. Это дефект формулы, поскольку при её выводе использовалось низкотемпературное приближение 1.5.2.

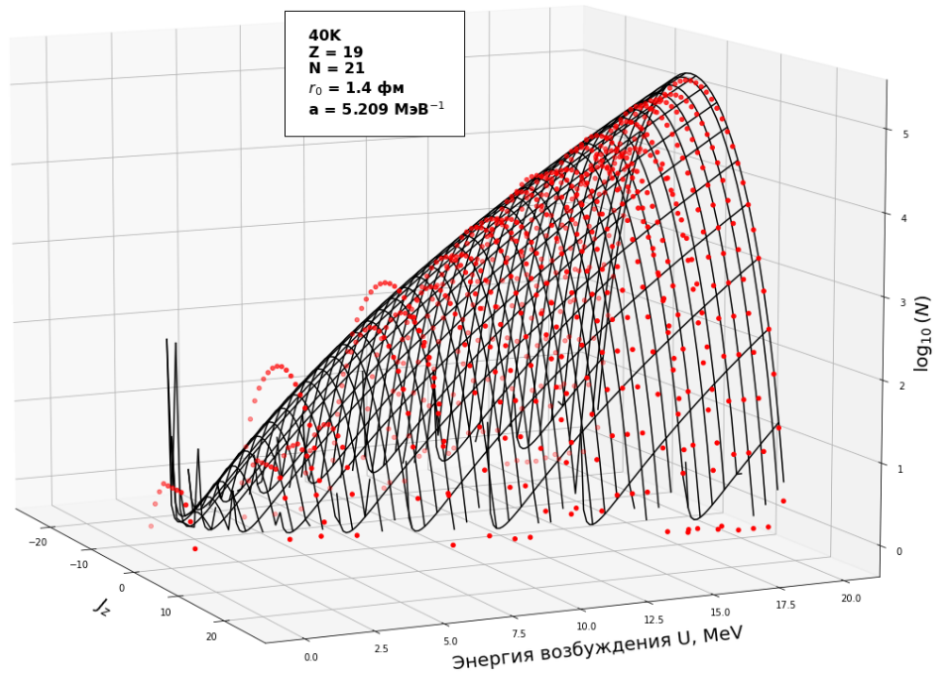


Рисунок 12 — Сравнение полученного распределения плотности уровней с формулой (9)

6.4 Распределение плотности уровней в зависимости от энергии

Здесь смоделированные значения получены с помощью метода (14) в диапазоне энергий от 0 до U . Производится сравнение с аналитической формулой (11). Энергия возбуждения была выбрана $U = 11.7$ МэВ. В силу приближений, использованных при выводе (11), кривая получается немного завышенной.

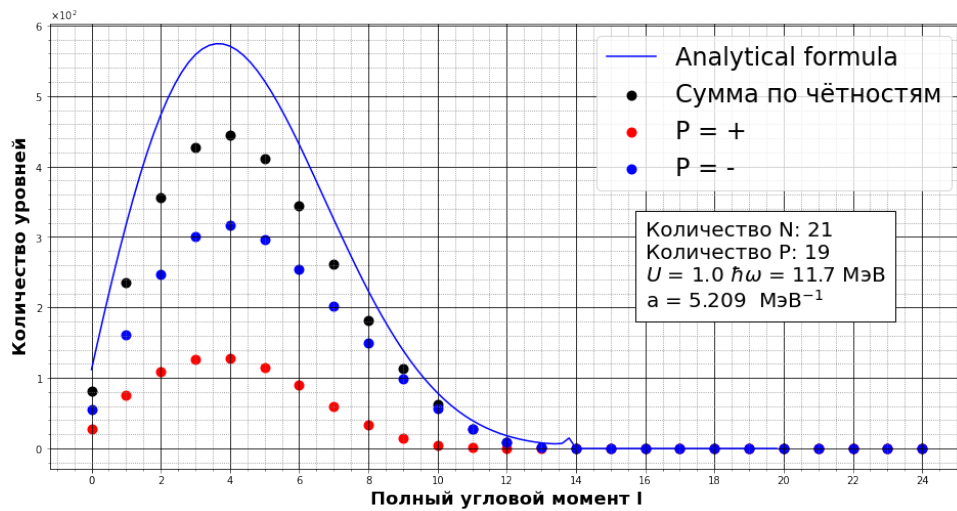


Рисунок 13 — Распределение плотности уровней в зависимости от углового момента

6.5 Распределение плотности уровней в зависимости от энергии

Проводилось сравнение с формулой (12). Смоделированные значения получены методом (15). Синие точки — количество уровней в диапазоне от 0 до U , красные — от $U - \Delta U$ до $U + \Delta U$. Наблюдается картина, схожая с 7: при малых энергиях наблюдается расхождение значений аналитической формулы и смоделированных данных, а при больших — сходство.

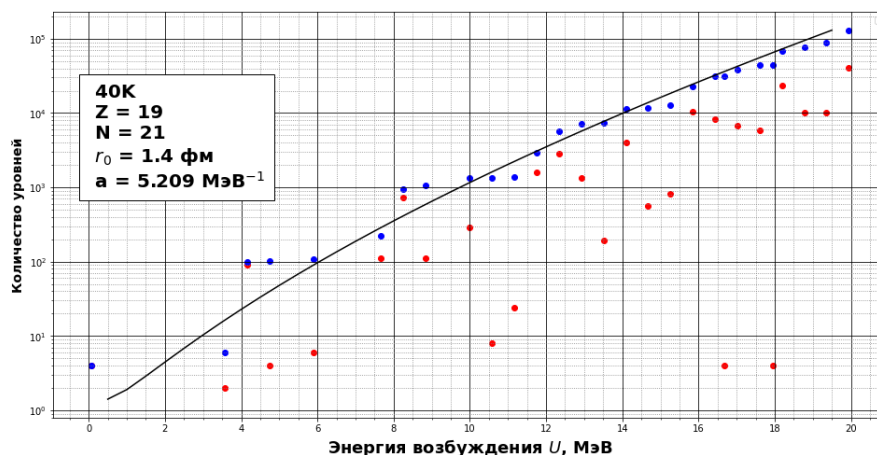


Рисунок 14 — Распределение плотности уровней в зависимости от энергии возбуждения

6.6 Сверка с экспериментальными данными

В статье [8] рассказывается о некоторых экспериментальных методах, в частности, о «методе Осло». Он уникальный в том смысле, что позволяет одновременно определить плотность уровней и «силовую функцию γ -лучей» без каких-либо предположений о модели для этих функций. Возбуждение ядра происходит посредством таких реакций, как $(d,p\gamma)$, $(p,p'\gamma)$ и $({}^3\text{He},\alpha\gamma)$. Метод основан на известном спектре γ -лучей. Тогда энергия выходной заряженной частицы говорит об энергии возбуждения.

Для проведения эксперимента использовались 64 кремниевых телескопа (SiRi), размещенных в вакуумной камере (CACTUS).

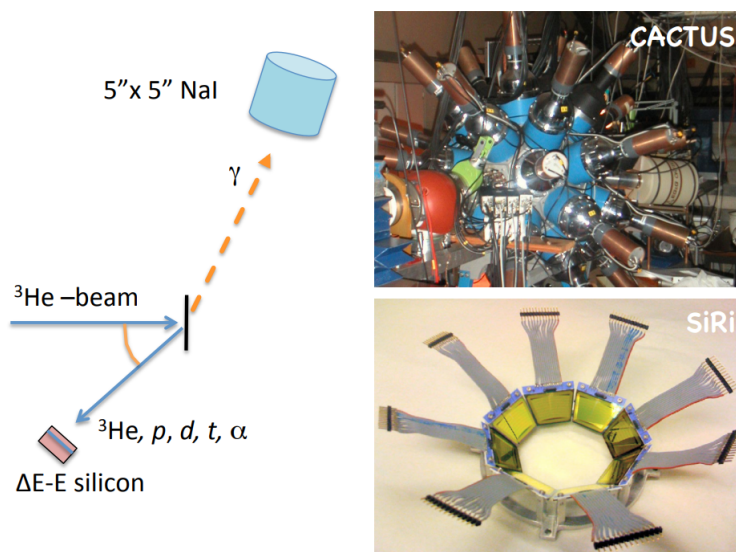
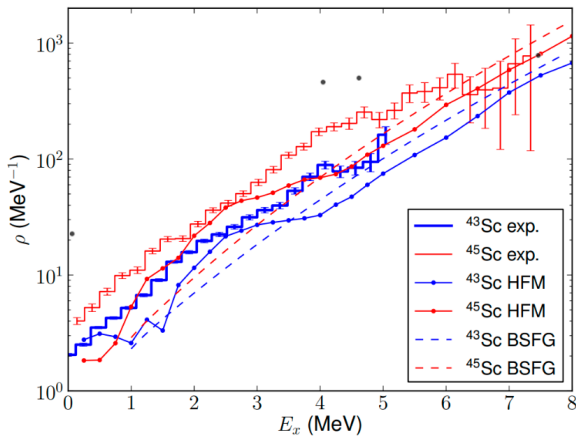


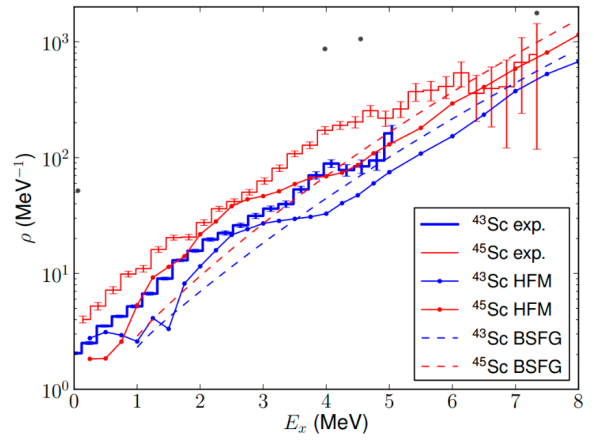
Рисунок 15 — Экспериментальная установка [8]

6.6.1 Проверка для ${}^{43}\text{Sc}$ и ${}^{45}\text{Sc}$

В статье [9] есть результаты для плотности уровней. Данные получены как экспериментально, так и расчётно. Чёрными точками обозначены смоделированные данные (4 точки). Видно, что полученные результаты лежат выше экспериментальных.



(a) ^{43}Sc . Сверка с синими кривыми



(b) ^{45}Sc . Сверка с красными кривыми

Рисунок 16 — Плотности уровней для Sc из статьи [9]

6.6.2 Проверка для ^{45}Ti

В статье [10] приводятся экспериментальные данные (чёрные квадраты), полученные с помощью «метода Осло». Видно, что полученные значения (красные точки) снова превосходят экспериментальные и модельные данные.

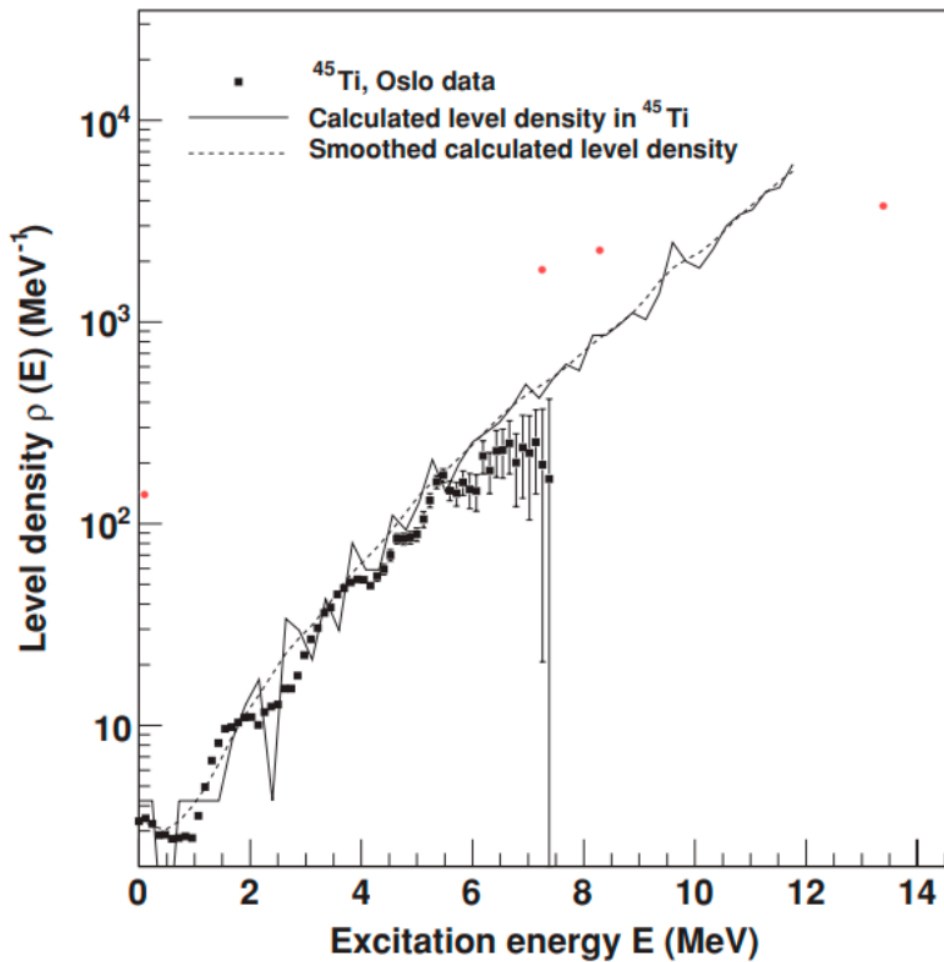


Рисунок 17 — Распределение плотности уровней в зависимости от энергии возбуждения

6.6.3 Проверка для ядер Ni

Здесь чёрные точки — собственные данные. В статье [11] синие точки — данные, полученные «вспомогательно-полевым квантовым методом Монте-Карло» (AFMC — auxiliary-field quantum Monte Carlo). Коричневая кривая — данные из подсчёта уровней при низких энергиях. Зелёные квадраты соответствуют испарению протонов, красные треугольники — нейтронов при охлаждении горячих ядер.

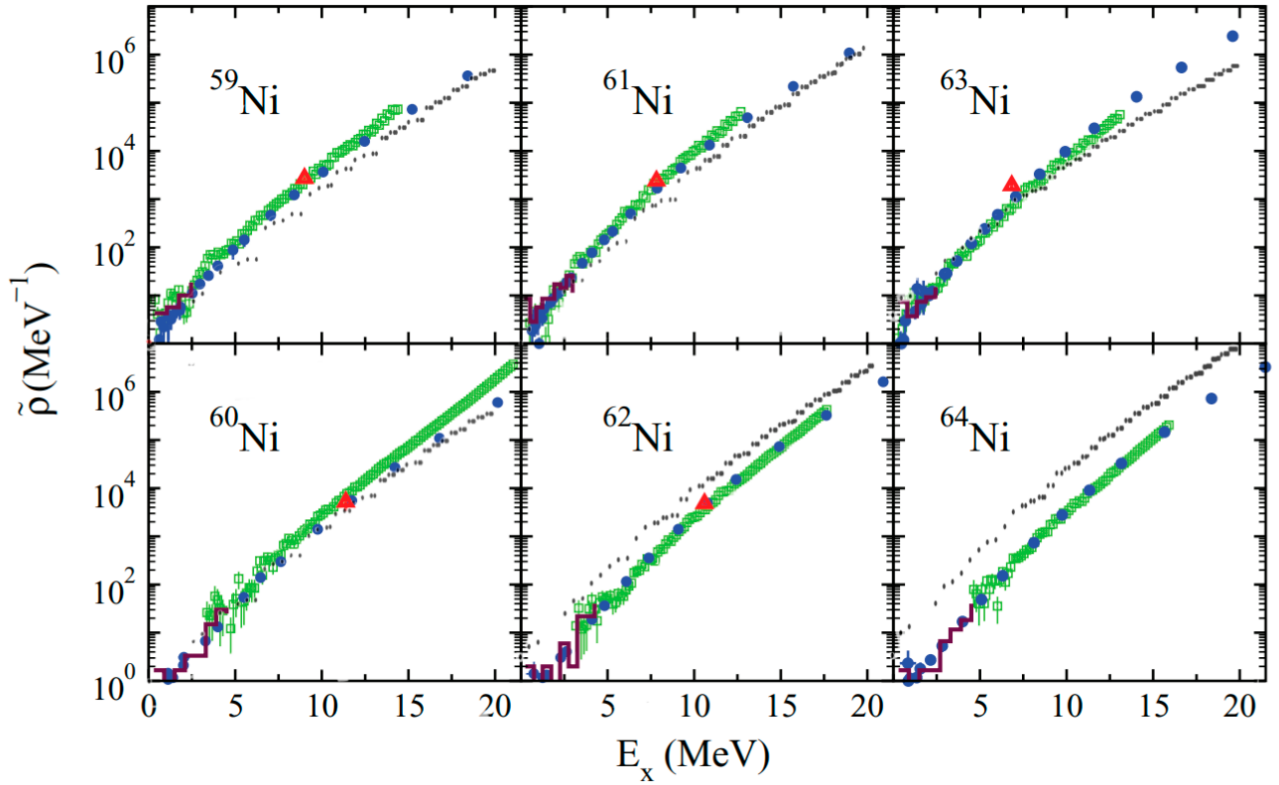
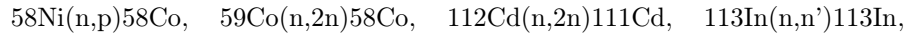


Рисунок 18 — Сравнение плотности уровней из экспериментальных и смоделированных данных

7 Моделирование реакций в программе Talys

Talys — программный комплекс с открытым исходным кодом для моделирования ядерных реакций, который позволяет моделировать столкновения ядер с лёгкими частицами, в том числе нейтронами, с энергиями до 200 МэВ. В целях унификации создан набор входных параметров для ядерных моделей — Reference Input Parameter Library (RIPL-3) [4], который Talys использует по-умолчанию. Было проведено моделирование четырёх реакций в разных версиях Talys: 1.9 и 1.95.



Интерес представляли разные модели плотности уровней (ключевое слово — `ldmodel`). В Talys есть 6 моделей плотности; первые три представляют из себя аналитическую формулу, оставшиеся три — комбинаторный расчёт. Было проведено моделирование с использованием первых трёх моделей.

Получены сечения для образования изомерных и основных состояний ядер. Сравнение полученных данных проводилось с библиотеками TENDL-2021, IRDFF-II (модельные данные), а также EXFOR (экспериментальные данные).

7.1 Методика построения полученных данных

Для каждой реакции исходно имеется для изомерного и основного сечений по 3 файла: `ldmodel 1`, `ldmodel 2`, `ldmodel 3`. Требуется построить усреднённую кривую с погрешностями, т.е. с учётом разброса сечения в зависимости от модели плотности уровней. Для краткости обозначим `ldmodel n` за L_n . Тогда среднее сечение может быть посчитано как

$$\sigma_{\text{av}}(E) = \frac{L_1(E) + L_2(E) + L_3(E)}{3}$$

Погрешность выбиралась как максимальное отклонение между любыми двумя моделями:

$$\Delta\sigma(E) = \max(|L_1 - L_2|, |L_1 - L_3|, |L_2 - L_3|)$$

Затем строился корридор значений, т.е. две кривые, между которыми, согласно смоделированным данным, скорее всего, находится истинное значение сечения.

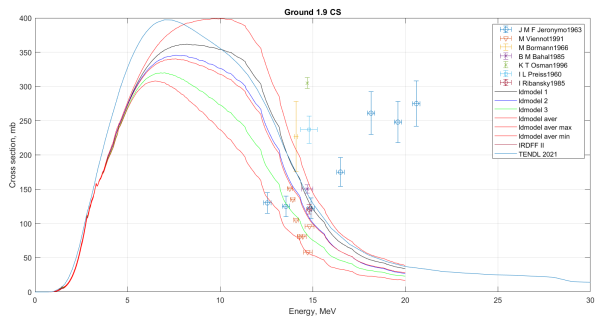
$$\sigma_{\text{max}}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) + \Delta\sigma(E), \quad \sigma_{\text{min}}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) - \Delta\sigma(E),$$

7.2 Результаты для ${}^{58}\text{Ni}$

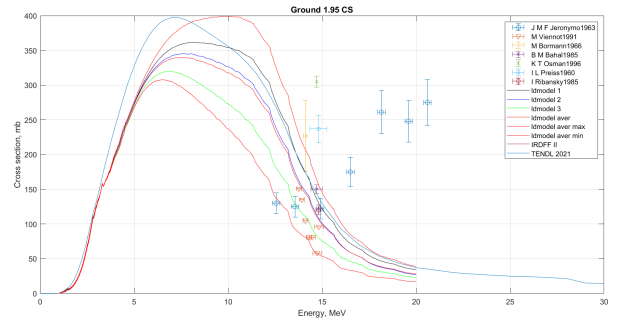
На рисунках представлены сечения образования ${}^{58}\text{Co}$ в основном и изомерном состояниях для разных версий Talys в реакции ${}^{58}\text{Ni}(n,p){}^{58}\text{Co}$. Видно, что для основного состояния наблюдаются разногласия между данными из EXFOR и модельными данными (TENDL-2021, IRDFF-II, собственные данные).

Для изомерного состояния ${}^{58}\text{Co}$ наблюдается разумное согласие данных из библиотек и смоделированных данных. Различие между сечениями в версиях Talys минимально, поэтому далее показана информация только по Talys 1.95.

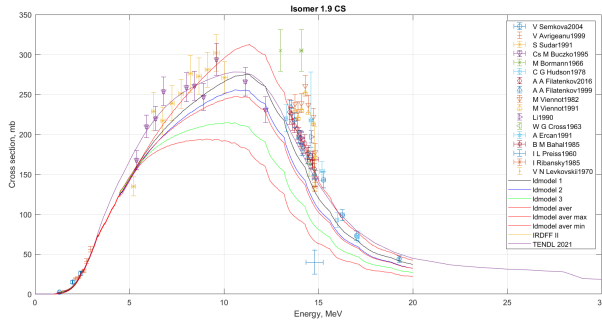
На картинках для изомеров видно, что кривые осциллируют. Это не наблюдалось при большем шаге по энергиям — при 1 МэВ. Сейчас же для моделирования был выбран шаг 0.05 МэВ. Почему так происходит, на данный момент не ясно. Для выяснения причины, возможно, придётся анализировать исходный код программы и выяснять, как считались сечения реакций.



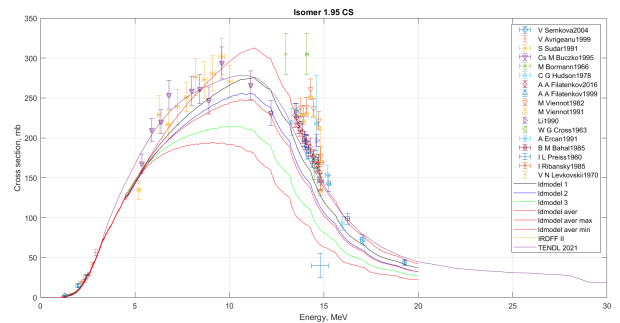
(a) Основное состояние. Talys 1.9



(b) Основное состояние. Talys 1.95



(c) Изомерное состояние. Talys 1.95

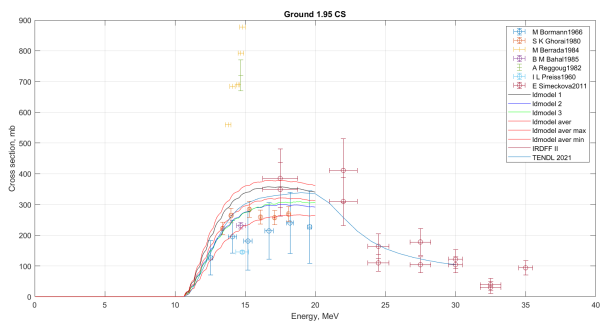


(d) Изомерное состояние. Talys 1.95

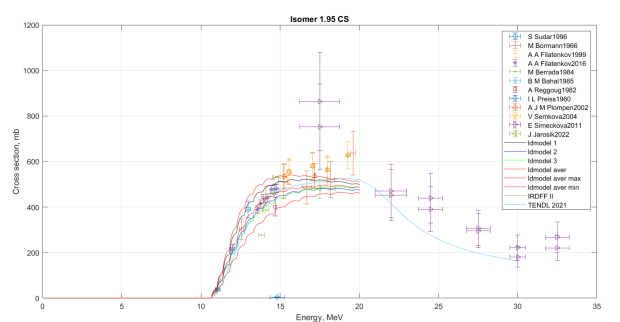
Рисунок 19 — Сечения для реакции $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$

7.3 Результаты для ^{59}Co

Для ядра ^{59}Co , как и для ^{58}Ni , наблюдаются осцилляции, наиболее заметные для изомерного состояния. В целом наблюдается согласие с экспериментальными данными; многие данные попадают в корридор ожидаемых значений.



(a) Основное состояние. Talys 1.9



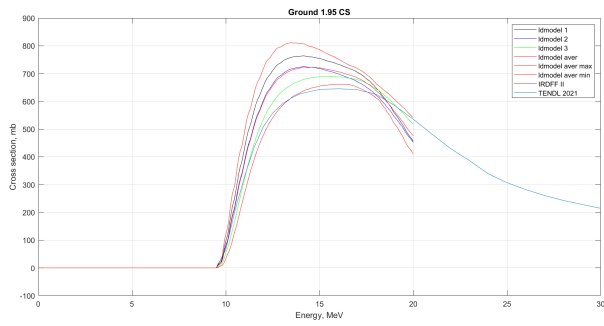
(b) Изомерное состояние. Talys 1.95

Рисунок 20 — Сечения для реакции $^{59}\text{Co}(n,2n)^{58}\text{Co}$

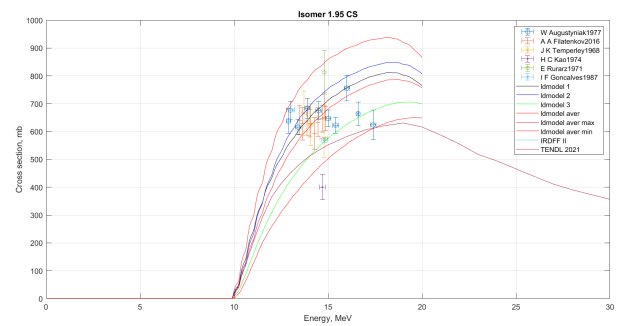
7.4 Результаты для ^{112}Cd

В библиотеке экспериментальных данных EXFOR не было данных по образованию основного состояния ^{111}Cd . Также можно заметить, что теперь осцилляции кривых Talys пропали.

Можно видеть, что экспериментальные данные, полученные из EXFOR, находятся в разумных пределах относительно полученных σ_{\max} и σ_{\min} .



(a) Основное состояние. Talys 1.9

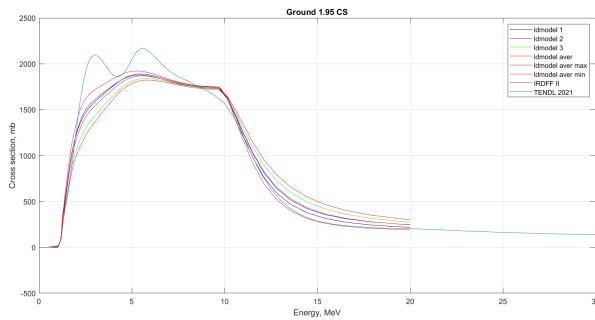


(b) Изомерное состояние. Talys 1.95

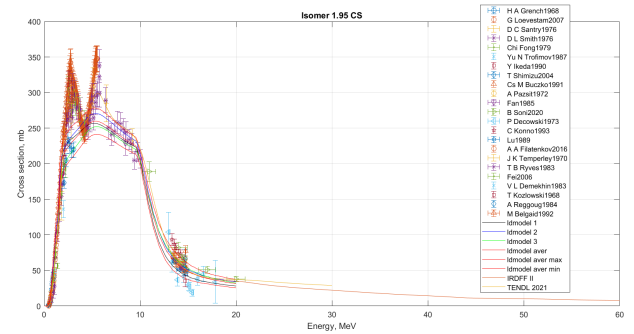
Рисунок 21 — Сечения для реакции $^{112}\text{Cd}(n,2n)^{111}\text{Cd}$

7.5 Результаты для ^{113}In

Здесь также не было данных в EXFOR для основного состояния. Можно видеть одну особенность: согласно библиотекам ядерных данных, ядро ^{113}In имеет некоторую «двугорбость» при малых энергиях. Эту особенность не удалось воспроизвести ни в одной из моделей плотности уровней. Почему так происходит, пока не ясно. Это требует дальнейшего анализа того, что заложено в коде Talys.



(a) Основное состояние. Talys 1.9



(b) Изомерное состояние. Talys 1.95

Рисунок 22 — Сечения для реакции $^{113}\text{In}(n,n')^{113}\text{In}$

8 Заключение

В работе развивались три направления:

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

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

Особенность полученных данных заключается в том, что при малых энергиях возбуждения доминирует определённая чётность, что может повлиять на вероятность протекания реакции.

Также была проведена сверка с некоторыми экспериментальными результатами при малых энергиях. Различие составляет около одного порядка, происходит переоценивание количества уровней.

Результаты проведённого моделирования в программе Talys находятся в разумном согласии с библиотеками ядерных данных.

8.1 Планы на будущее

- Провести моделирование в Talys с использованием собственной плотности состояний и уровней.
- Ввести в алгоритм перебора многочастичных состояний учёт деформации ядра.

Список литературы

- [1] О. Бор, Б. Мотгельсон. Структура атомного ядра. Том 1. Одночастичное движение. - Москва, Мир, 1971.
- [2] A. Koning, S. Hilaire, S. Goriely. TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. - 2017.
- [3] Ю. В. Соколов. Плотность уровней атомных ядер. - Москва, Энергоатомиздат, 1990.
- [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] S. Hilaire, J. E. Delaroche, A. J. Koning. Generalized particle-hole state densities within the equidistant spacing model. - Nuclear Physics A, v. 632, p. 417-441, 1998.
- [6] S. Hilaire, J. E. Delaroche, M. Girod. Combinatorial nuclear level densities based on the Gogny nucleon-nucleon effective interaction. - The European Physical Journal A, v. 12, p. 169-184, 2001.
- [7] S. Hilaire, S. Goriely. Global microscopic nuclear level densities within the HFB plus combinatorial method for practical applications. - Nuclear Physics A, v. 779, p. 63-81, 2006.
- [8] M. Guttormsen, M. Aiche, F.L. Bello Garrote et al. Experimental level densities of atomic nuclei. - The European Physical Journal A 51, 2015.
- [9] A. Burger, A.C. Larsen, S. Hilaire et al. Nuclear Level Density and Gamma-Ray Strength Function of ^{43}Sc . - Phys. Rev. C 85, 064328, 2012.
- [10] N. U. H. Syed, A. C. Larsen, A. Burger et al. Extraction of thermal and electromagnetic properties in ^{45}Ti . - Phys. Rev. C 80, 044309, 2009.
- [11] Y. Alhassid. Nuclear level densities: from empirical models to microscopic methods. - Center for Theoretical Physics, Sloane Physics Laboratory, Yale University, 2021.