

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

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ТЕХНОЛОГИЙ
КАФЕДРА №40 «ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ»

УДК 539.17

**ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА
К БАКАЛАВРСКОЙ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЕ
ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ И ДЕЛЕНИЕ ЯДЕР ПРИ НИЗКИХ И
СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ И ПРОБЛЕМА
МИКРОСТРУКТУРЫ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДЕР**

Студент

_____ Д. А. Ситьков

Научный руководитель,

д.ф.-м.н., доц.

_____ А. Л. Барабанов

Москва 2023

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

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

Студент

_____ Д. А. Ситьков

Научный руководитель,

д.ф.-м.н., доц.

_____ А. Л. Барабанов

Рецензент,

к.ф.-м.н.

_____ С. В. Романов

Секретарь ГЭК,

к.ф.-м.н.

_____ А. А. Кириллов

Зав. каф. №40,

д.ф.-м.н., проф.

_____ М. Д. Скорохватов

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 Моделирование формы деформированного ядра	8
1.1 Вариант параметризации поверхности ядра	8
1.1.1 Симметричная деформация ядра	10
1.2 Потенциал Вудса-Саксона	12
2 Модель симметричного двухцентрового осциллятора	14
2.1 Двухцентровый симметричный осциллятор	16
2.1.1 Угловая функция	16
2.1.2 Радиальная функция	17
2.1.3 Аксиальная функция	19
2.1.4 Энергетические уровни	28
2.2 Ядерное спин-орбитальное взаимодействие	30
2.2.1 Оператор орбитального момента	30
2.2.2 Матричные элементы	32
2.2.3 Новые энергетические уровни	33
3 Реакции с образованием ядер-изомеров	38
3.1 Оценка надёжности вычислений	39
3.2 Образование иттрия-91	40
3.3 Образование стронция-87	41
3.4 Образование индия-114	42
3.5 Образование индия-115	43
Заключение	44
Приложения	46
А Объём деформированного ядра	46

Б	Частота симметричного двухцентрового осциллятора	46
В	Нормировка радиальной функции	47
Г	Преобразования для аксиального квантового числа	48
Список использованных источников		50

ВВЕДЕНИЕ

В процессе деления ядра образуются два возбуждённых осколка. Они, в свою очередь, претерпевают череду распадов, снимающих возбуждение, и в конечном итоге оказываются в своих основных состояниях (либо же в изомерных возбуждённых состояниях). В ходе деления форма ядра меняется. После прохождения вершины барьера между двумя будущими осколками образуется шейка. Предполагается, что быстрый спуск с барьера происходит неадиабатичным образом. После разрыва шейки образуются два разлетающихся осколка [1]. На рисунке 1 схематически показаны основные стадии деления ядра.

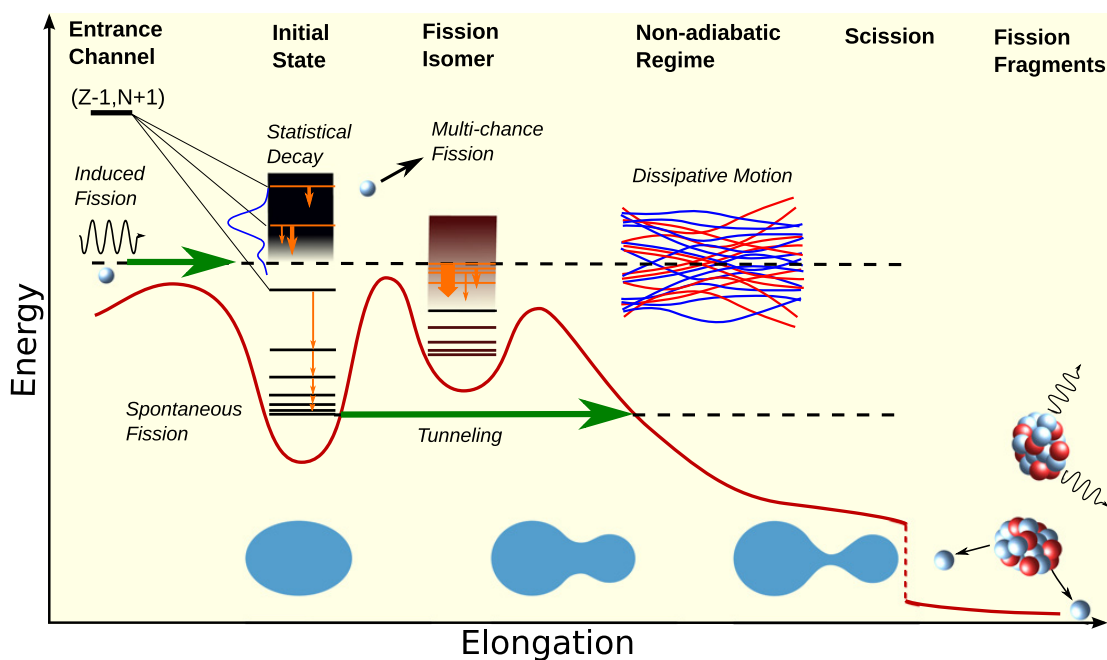


Рисунок 1 — Схематическое изображение процесса ядерного деления [Michael Bender et al // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. — 2020. — v. 47, iss. 11, 113002].

Для описания деления требуется способ описания формы деформирующегося ядра. Глава 1 данной работы посвящена описанию одного из таких способов, использованного, в частности, в работе [2].

Очевидно, что при переходе от сферических ядер к сильно деформированным, например, делящимся ядрам необходима замена одноцентрового самосогласованного ядерного потенциала, удерживающего нуклоны, потенциалом с двумя (как минимум) центрами. Давно было понято, что типичные проблемы обычной оболочечной модели в теории ядерного деления объясняются ограничениями одноцентрового потенциала. Одна из таких проблем состоит в том, что сумма энергий одночастичных состояний неограниченно растёт при больших деформациях. В работе [3] данная особенность объясняется на микроскопическом уровне тем, что нулевой энергетический уровень одночастичного состояния в модели одноцентрового потенциала при больших деформациях растёт до бесконечности. С макроскопической точки зрения это объясняется в [4] тем, что в энергию многочастичного состояния входит слагаемое, связанное с энергией поверхностного натяжения ядра. Поскольку в двухцентровой модели площадь поверхности ядра не растёт до бесконечности при больших деформациях, становится понятно, что данная модель лишена проблем, которые появляются в расчётах с потенциалами нильссоновского типа. Поэтому двухцентровая модель ядерного потенциала представляется подходящей основой для микроскопических расчётов процесса деления [5].

В главе 2 решается задача нахождения одночастичных состояний в модели двухцентрового симметричного гармонического осциллятора из работы [5] сначала без учёта ядерного спин-орбитального взаимодействия, потом — с учётом такого взаимодействия. Наш интерес к выбранному двухцентровому потенциалу обусловлен тем, что решения соответствующего одночастичного уравнения Шрёдингера можно получить аналитически. Таким образом, в явном виде можно получить полный набор собственных функций, которые, в частности, можно использовать в качестве базисных функций при рассмотрении более реалистических (вудс-саксоновского типа) двухцентровых потенциалов.

В главе 3 данной работы рассматривается задача, связанная с ядерным синтезом. Для проектирования установок, в которых предполагается осуществить управляемую реакцию термоядерного синтеза $d + t \rightarrow {}^4\text{He} + n$ с образованием нейтронов с энергией 14,1 МэВ (в системе центра масс), необходимы данные о реакциях, инициируемых этими нейтронами. В част-

ности, во взаимодействии нейтронов с ядрами атомов конструкционных материалов и других элементов, использующихся в данных установках могут образовываться ядра в относительно долгоживущих изомерных состояниях, которые распадаются посредством испускания довольно жёстких гамма-квантов. Учёт этих гамма-квантов важен для оценки радиационной стойкости материалов.

В последней версии библиотеки IRDFF-II (International Reactor Dosimetry and Fusion File) [6] (база данных ENDF) представлены данные только для 4-х реакций с образованием ядер-изомеров.

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

На самом деле таких реакций намного больше. Так, в частности, недавно в НИЦ «Курчатовский институт» были измерены [7] сечения следующих реакций:

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

при энергии падающих нейтронов близкой к 14 МэВ. О надёжности этих данных можно судить, сравнивая их с ранее полученными аналогичными результатами. Однако не для всех подобных реакций такие результаты (в достаточном количестве) имеются. Поэтому представляют интерес численные оценки сечений.

Отметим, что в настоящее время достигнут значительный прогресс в области численного моделирования ядерных реакций. Подходящим примером может служить программный комплекс TALYS-1.9 [8] с открытым кодом. Этот комплекс позволяет моделировать столкновения ядер с лёгкими частицами, в том числе нейтронами, с энергиями до 200 МэВ. Соответственно возник вопрос о возможности использования программного комплекса TALYS-1.9 для предсказания соответствующих сечений. В **главе 3** представлены результаты расчётов сечений перечисленных выше 4-х реакций с образованием ядер-изомеров, выполненных с помощью TALYS-

1.9.

Данный программный комплекс интересен также тем, что в TALYS-1.9 можно внедрять собственные модели. Таким образом, можно, например, использовать одночастичные состояния в двухцентровом потенциале для расчёта плотности многочастичных состояний в сильно деформированных, в частности, делящихся ядрах.

1 МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМЫ ДЕФОРМИРОВАННОГО ЯДРА

1.1 ВАРИАНТ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ЯДРА

Рассмотрим аксиально симметричное деформированное ядро, вытянутое вдоль оси Oz . Для простоты примем, что «центр» левого «осколка» всегда находится в точке $z = 0$, тогда как «центр» правого «осколка» — в точке $z = c_2$.

В работе [2] предложена следующая параметризация поверхности ядра в цилиндрической системе координат:

$$\rho_0(z) = \begin{cases} \rho_1(z) = b_1 \sqrt{1 - \left(\frac{z}{a_1}\right)^2}, & z \leq z_1, \\ \rho_3(z) = -\operatorname{sgn}(d) \sqrt{R_3^2 - (z - c_3)^2} + 1/d, & z_1 < z < z_2, \\ \rho_2(z) = b_2 \sqrt{1 - \left(\frac{z - c_2}{a_2}\right)^2}, & z \geq z_2. \end{cases} \quad (1.1)$$

Параметры a_1, b_1, a_2, b_2 — большая и малая полуоси эллипсоидов первого («левого») и второго («правого») осколков соответственно, величины z_1, z_2 — точки перехода к образующейся шейке, R_3 — радиус элемента окружности, определяющей «профиль» шейки, $(c_3, 1/d)$ — центр элемента окруж-

ности шейки. Система нелинейных уравнений

$$\rho_1(z_1) = \rho_3(z_1), \quad (1.2a)$$

$$\left[\frac{d}{dz} \rho_1(z) = \frac{d}{dz} \rho_3(z) \right]_{z=z_1}, \quad (1.2б)$$

$$\rho_2(z_2) = \rho_3(z_2), \quad (1.2в)$$

$$\left[\frac{d}{dz} \rho_2(z) = \frac{d}{dz} \rho_3(z) \right]_{z=z_2} \quad (1.2г)$$

обеспечивает непрерывность и гладкость поверхности ядра.

Объём ядра, форма которого определяется формулой (1.1), вычисляется следующим образом:

$$V = \pi \int_{-a_1}^{z_1} \rho_1^2(z) dz + \pi \int_{z_1}^{z_2} \rho_3^2(z) dz + \pi \int_{z_2}^{a_2+c_2} \rho_2^2(z) dz. \quad (1.3)$$

Результат этого вычисления представлен в [приложении А](#).

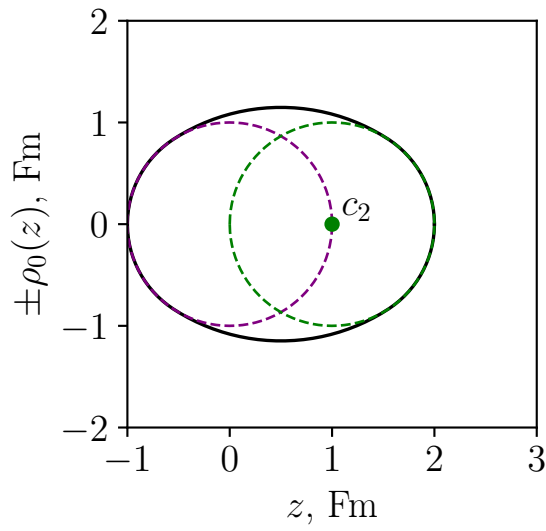
Вид функции $\rho_3(z)$ из (1.1) обусловлен тем, что точка $(c_3, 1/d)$ в плоскости (z, y) — центр окружности радиуса R_3 , а сама функция описывает верхнюю или нижнюю (в зависимости от знака коэффициента перед слагаемым с корнем) дугу этой окружности. На начальном этапе деформации шейка должна быть выпукла ([рисунок 1.1](#)): центр окружности радиуса R_3 лежит в области $y < 0$, следовательно, $1/d < 0$, и $(-\operatorname{sgn} d) = +1$, шейка — верхняя дуга окружности. При дальнейшей деформации ядра шейка должна стать вогнутой: центр окружности в области $y > 0$, поэтому, $1/d > 0$ (параметр d переходит из области отрицательных значений через нуль в область положительных значений), и $(-\operatorname{sgn} d) = -1$, шейка — нижняя дуга окружности.

Всего в задаче имеется 10 параметров: $a_1, b_1, a_2, b_2, z_1, z_2, c_2, c_3, R_3$ и d . Примем для упрощения, что ядро обладает зеркальной симметрией, то есть переходит само в себя при инверсии относительно плоскости, перпендикулярной оси Oz и проходящей через точку $z = c_3$. Тогда $a_1 = a_2, b_1 = b_2, c_3 \equiv c_2/2$, так что остаются 7 параметров. Параметр c_2 , определяющий растяжение ядра, является, очевидно, независимым. Кроме того, из

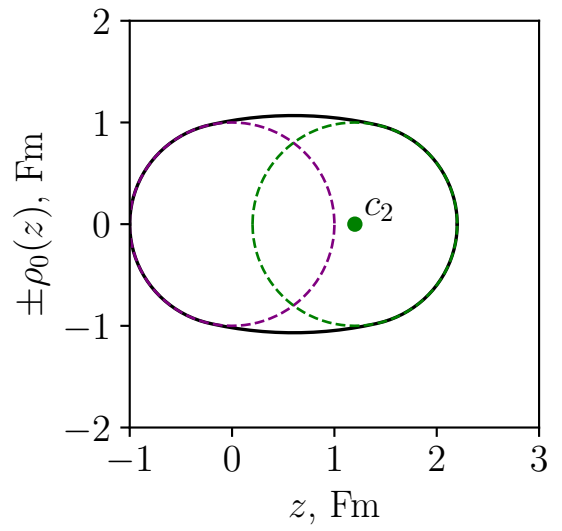
зеркальной симметрии следует, что $c_3 - z_1 = z_2 - c_3$, то есть $z_1 + z_2 = 2c_3$, что уменьшает число «свободных» параметров до 5-ти. Из этих 5-ти параметров 3 параметра находятся из уравнений (1.2а), (1.2б) и (1.3).

1.1.1 СИММЕТРИЧНАЯ ДЕФОРМАЦИЯ ЯДРА

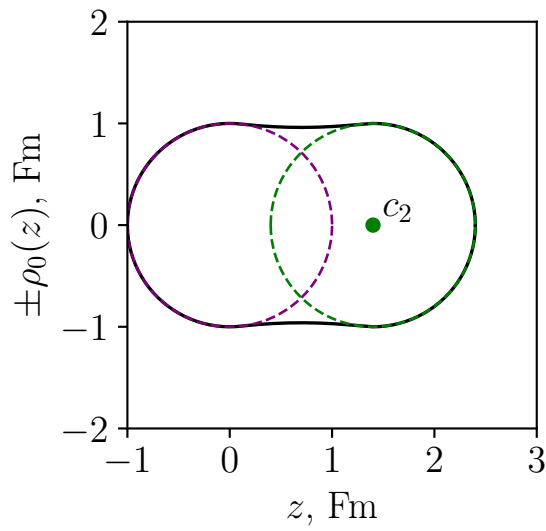
Даже в симметричном случае задача численного поиска параметров z_1 , R_3 и d оказалась очень чувствительной ко входным (нулевой итерации) данным. Тем не менее, процесс зеркально симметричной деформации ядра показан на рисунке 1.1 при $a_1 = b_1 = a_2 = b_2 = 1$ (Fm). Условие (1.3) при этом не учитывалось.



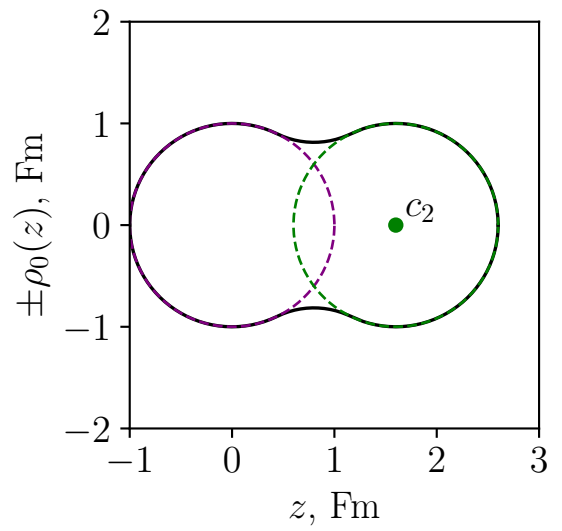
(a) $c_2 = 1,0$ Fm



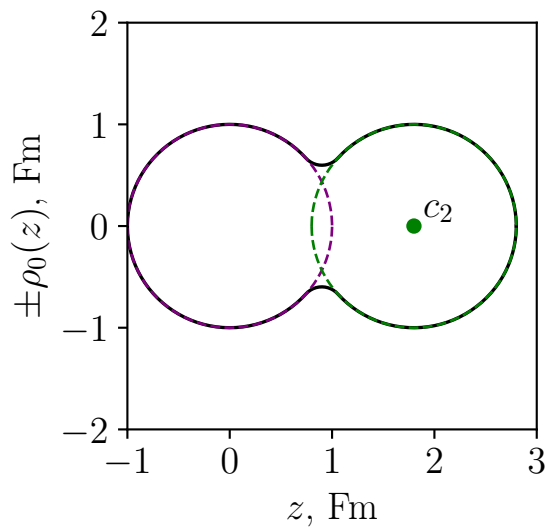
(б) $c_2 = 1,2$ Fm



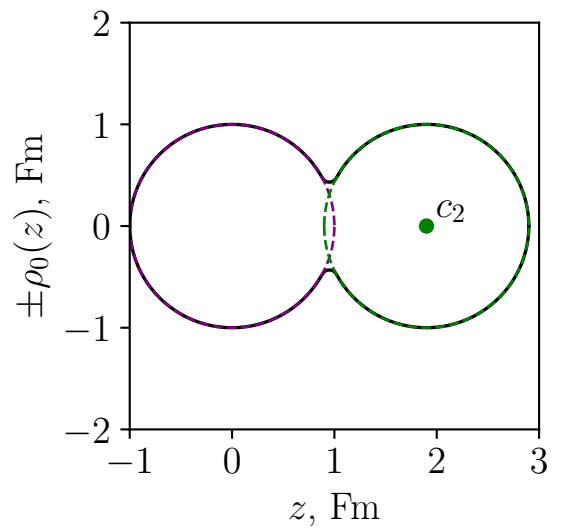
(в) $c_2 = 1,4$ Fm



(г) $c_2 = 1,6$ Fm



(д) $c_2 = 1,8$ Fm



(е) $c_2 = 1,9$ Fm

Рисунок 1.1 — Деформация ядра с образованием двух симметричных осколков.

1.2 ПОТЕНЦИАЛ ВУДСА-САКСОНА

Согласно [9] среднее поле, в котором находятся нуклоны, определяется потенциалом Вудса-Саксона

$$V_{\text{WS}}(\rho, z) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{\Delta(\rho, z)}{a}\right]}, \quad (1.4)$$

где величина V_0 определяет глубину потенциала, параметр a характеризует степень размытости края потенциальной ямы, а функция $\Delta(\rho, z)$ определяет расстояние (взятое с противоположным знаком внутри ядра) между точкой с координатами (z, ρ) и поверхностью ядра.

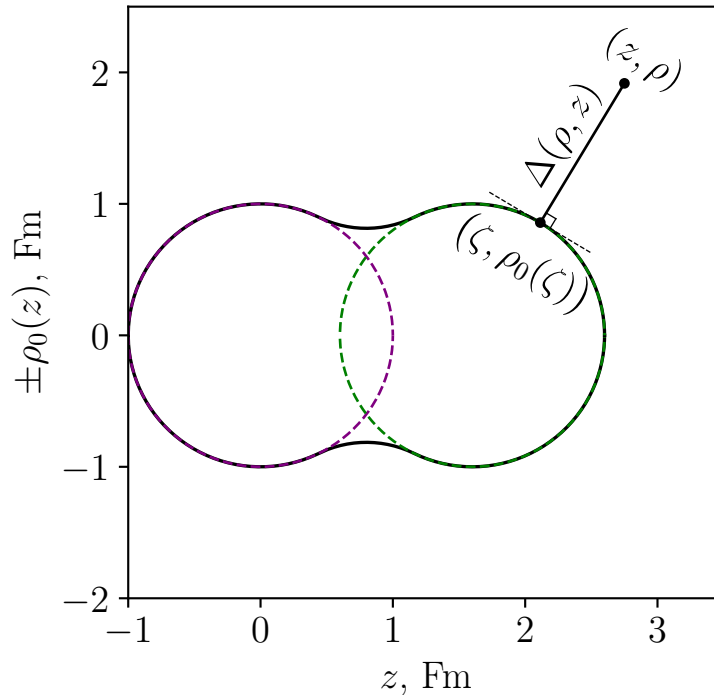


Рисунок 1.2 — Определение расстояния от точки (z, ρ) до поверхности ядра. Здесь $\zeta \approx 2,1145$ Fm.

Расстояние до поверхности ядра (рисунок 1.2) определяется как

$$\Delta(\rho, z) = \sqrt{(z - \zeta)^2 + (\rho - \rho_0(\zeta))^2}, \quad (1.5)$$

где координата ζ определяется из условий¹⁾

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \zeta} = 0, \quad (1.6a)$$

$$\frac{\partial^2 \Delta}{\partial \zeta^2} > 0. \quad (1.6b)$$

Выражение (1.5) непосредственно связывает параметризацию (1.1) и потенциал Вудса-Саксона (1.4).

Ядерное спин-орбитальное взаимодействие описывается дополнительным слагаемым к потенциалу (1.4) вида

$$V_{ls} = -\lambda \left(\frac{1}{2mc} \right)^2 (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s}, \quad (1.7)$$

где $\lambda = 35$ — безразмерная константа взаимодействия, m — масса нуклона, c — скорость света, $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ — оператор импульса, \mathbf{s} — оператор спина.

Уравнение Шрёдингера в полном потенциале

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{WS}(\rho, z) + V_{ls}(\rho, z) \right] \Psi(\rho, z, \varphi) = E \Psi(\rho, z, \varphi) \quad (1.8)$$

не решается аналитически. Однако подходящий базис для разложения решения уравнения (1.8) может быть получен из собственных функций задачи с потенциалом двухцентрового осциллятора.

¹⁾Которые эквивалентны условию минимума функции $D(\zeta) = (z - \zeta)^2 + (\rho - \rho_0(\zeta))^2$.

2 МОДЕЛЬ СИММЕТРИЧНОГО ДВУХЦЕНТРОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Гамильтониан двухцентрового осциллятора с частотами $\omega_{(1,2)\rho}$ и $\omega_{(1,2)z}$ вдоль соответствующих осей в цилиндрической системе координат имеет вид [5]

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + V(\rho, z) + V(\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2) \equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + V(\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2), \quad (2.1)$$

где сумма

$$V(\rho, z) + V(\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2) = \frac{1}{2}m \times \begin{cases} \omega_{1\rho}^2 \rho^2 + \omega_{1z}^2 (z - z_1)^2 + C\mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{s} + D\mathbf{l}_1^2, & z > 0, \\ \omega_{2\rho}^2 \rho^2 + \omega_{2z}^2 (z + z_2)^2 + C\mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{s} + D\mathbf{l}_2^2, & z < 0, \end{cases} \quad (2.2)$$

в которой $\mathbf{l}_{1,2}$ — операторы орбитальных моментов по отношению к двум соответствующим центрам z_1 и $(-z_2)$ на оси Oz , C и D — параметры, подбирающиеся из условия наилучшего описания перехода от одного начального ядра к двум осколкам.

Рассмотрим вначале только \mathbf{l} -независимую часть (2.1) и опишем случай полностью симметричного осциллятора, то есть

$$\omega_{1\rho} = \omega_{2\rho} = \omega_{1z} = \omega_{2z} \equiv \omega. \quad (2.3)$$

Перепишем $V(\rho, z)$ в случае симметричного осциллятора в другом виде — зададим величину $V = \text{const}$:

$$\rho(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z - z_1)^2}, & z > 0, \\ \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z + z_2)^2}, & z < 0. \end{cases} \quad (2.4a)$$

Из условия непрерывности $\rho(0-) = \rho(0+)$ и учитывая, что центры не

должны совпадать, сразу установим, что единственным параметром, определяющим форму потенциала, является положение центров относительно друг друга $z_1 = z_2 \equiv z_0 > 0$. Так, (2.4a) можно записать в виде

$$\rho(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z - z_0)^2}, & z > 0, \\ \sqrt{\frac{2V}{m\omega^2} - (z + z_0)^2}, & z < 0. \end{cases} \quad (2.4б)$$

Условие постоянства объёма

$$\int_{z_{\text{lb}}}^0 \rho^2(z < 0) dz + \int_0^{z_{\text{rb}}} \rho^2(z > 0) dz = \frac{4}{3}R^3, \quad (2.5)$$

где $z_{\text{lb}} = -\frac{\sqrt{2V/m}}{\omega} - z_0 < 0$, $z_{\text{rb}} = \frac{\sqrt{2V/m}}{\omega} + z_0 > 0$, $R = r_0 A^{1/3}$, только лишь выбором частоты ω не может быть удовлетворено для произвольного значения V , поэтому наложим это условие только на эквипотенциальные поверхности, совпадающие с поверхностью ядра, где, согласно [10, §4, п. 1],

$$V = \frac{m\omega_0^2 R^2}{2}, \quad \text{при } r_0 = 1,2 \text{ (Fm) и } \hbar\omega_0 = 40A^{-1/3} \text{ (MeV)}. \quad (2.6)$$

Уравнение (2.5) преобразуется к виду

$$2 \left[\frac{\omega_0 R}{\omega} \right]^3 + 3z_0 \left[\frac{\omega_0 R}{\omega} \right]^2 - z_0^3 - 2R^3 = 0, \quad (2.7)$$

откуда можно получить зависимость частоты от параметра растяжения в виде

$$\omega(z_0) = \omega_0 \frac{r_0}{r(z_0)}, \quad (2.8)$$

где $r(z_0)$ — решение уравнения

$$2r^3 + 3r^2 z_0 - z_0^3 - 2R^3 = 0. \quad (2.9)$$

Явный вид зависимости $r(z_0)$ представлен в [приложении Б](#).

2.1 ДВУХЦЕНТРОВЫЙ СИММЕТРИЧНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Решим задачу без учёта спин-орбитального взаимодействия.

Потенциал можно записать в виде

$$V(\rho, z) = \frac{m\omega^2 \rho^2}{2} + \frac{m\omega^2 (z_0 - |z|)^2}{2}. \quad (2.10)$$

Соответствующее уравнение Шрёдингера $\hat{\mathcal{H}}_0 \phi = E \phi$ в цилиндрических координатах имеет вид

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \rho^2 - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} (|z| - z_0)^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \phi = 0. \quad (2.11)$$

2.1.1 УГЛОВАЯ ФУНКЦИЯ

Разделим переменные в первый раз:

$$\phi(\varphi, \rho, z) = v(\varphi) \Omega(\rho, z). \quad (2.12)$$

Получим, что уравнение (2.11) примет вид

$$\frac{\Omega_{\rho\rho}}{\Omega} \rho^2 + \frac{\Omega_{\rho}}{\Omega} \rho + \frac{\Omega_{zz}}{\Omega} \rho^2 - \frac{m^2 \omega^2 \rho^4}{\hbar^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} (|z| - z_0)^2 \rho^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \rho^2 = -\frac{v''}{v}. \quad (2.13)$$

Поскольку слева от знака равенства стоит функция, зависящая только от (ρ, z) , а справа — только от φ , то

$$-\frac{v''(\varphi)}{v(\varphi)} = A_1^2 = \text{const}, \quad (2.14a)$$

$$v''(\varphi) + A_1^2 v(\varphi) = 0, \quad (2.14b)$$

$$v(\varphi) = \text{const}_1 \cdot e^{iA_1 \varphi} + \text{const}_2 \cdot e^{-iA_1 \varphi}. \quad (2.14v)$$

Из условия $v(\varphi + 2\pi) = v(\varphi)$ получим, что $A_1 = n_\varphi \in \mathbb{Z}$ — целое число.

Физически осмысленно будет взять одно фундаментальное решение в

виде, например, $v(\varphi) = \text{const} \cdot e^{in_\varphi\varphi}$. Из условия нормировки $\int_0^{2\pi} |v|^2 d\varphi = 1$ получим угловую функцию

$$v_{n_\varphi}(\varphi) = \frac{e^{in_\varphi\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad n_\varphi \in \mathbb{Z}. \quad (2.15)$$

2.1.2 РАДИАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ

Разделяя переменные во второй раз:

$$\Omega(\rho, z) = \chi(\rho)\zeta(z), \quad (2.16)$$

получим, что левая часть уравнения (2.13) представима в виде

$$\frac{\zeta''}{\zeta} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} (|z| - z_0)^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n_\varphi^2}{\rho^2} + \frac{m^2\omega^2\rho^2}{\hbar^2} - \frac{\chi''}{\chi} - \frac{1}{\rho} \frac{\chi'}{\chi}. \quad (2.17)$$

Отсюда,

$$\frac{n_\varphi^2}{\rho^2} + \frac{m^2\omega^2\rho^2}{\hbar^2} - \frac{\chi''(\rho)}{\chi(\rho)} - \frac{1}{\rho} \frac{\chi'(\rho)}{\chi(\rho)} = -A_2 = \text{const}, \quad (2.18a)$$

$$\chi''(\rho) + \frac{1}{\rho} \chi'(\rho) + \left(-A_2 - \frac{1}{\rho^2} n_\varphi^2 - \frac{m^2\omega^2\rho^2}{\hbar^2} \right) \chi(\rho) = 0. \quad (2.18б)$$

Воспользуемся заменой вида

$$\chi(\rho) = f(\rho) \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho^{|n_\varphi|}. \quad (2.19)$$

Тогда уравнение (2.18б) преобразуется к виду

$$f''(\rho) + \left(\frac{2|n_\varphi| + 1}{\rho} - \frac{2m\omega\rho}{\hbar} \right) f'(\rho) - \left(A_2 + \frac{2(|n_\varphi| + 1)m\omega}{\hbar} \right) f(\rho) = 0. \quad (2.20)$$

Если рассматривать функцию f как функцию аргумента $x = \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}$, то необходимо произвести замены

$$f(\rho) \rightarrow f(x), \quad (2.21a)$$

$$f'(\rho) \rightarrow \frac{2m\omega\rho}{\hbar} f'(x), \quad (2.21б)$$

$$f''(\rho) \rightarrow \frac{4m^2\omega^2\rho^2}{\hbar^2} f''(x) + \frac{2m\omega}{\hbar} f'(x), \quad (2.21в)$$

где штрихом обозначена производная функции f по её аргументу. Тогда уравнение (2.20) запишется в виде

$$xf''(x) + (|n_\varphi| + 1 - x) f'(x) - \left(\frac{A_2\hbar}{4m\omega} + \frac{|n_\varphi| + 1}{2} \right) f(x) = 0. \quad (2.22)$$

На функцию $\chi(\rho)$ наложены условия

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} |\chi(\rho)| < +\infty, \quad (2.23a)$$

$$\lim_{\rho \rightarrow +\infty} |\chi(\rho)| = 0. \quad (2.23б)$$

Согласно произведённым заменам условие (2.23a) преобразуется в условие на функцию $f(x)$ вида $\lim_{x \rightarrow 0} \left| x^{\frac{|n_\varphi|}{2}} f(x) \right| < +\infty$, которое должно удовлетворяться при любом $n_\varphi \in \mathbb{Z}$. При $n_\varphi = 0$ получим самое сильное¹⁾ условие (подразумевая непрерывность f)

$$|f(0)| < +\infty. \quad (2.24)$$

Условие (2.23б) же будет выполняться, если функция $f(x)$ растёт на бесконечности не быстрее степенной функции. Таким образом, получим второе условие

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} |f(x)| \leq \text{const} \cdot x^N, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (2.25)$$

Уравнение (2.22) с граничными условиями (2.24) и (2.25) имеет ре-

¹⁾В смысле того, что из его удовлетворения следует выполнение условия при $n_\varphi \neq 0$.

шения лишь в виде полиномов, соответствующих выбору

$$-\left(\frac{A_2\hbar}{4m\omega} + \frac{|n_\varphi| + 1}{2}\right) = n_\rho, \quad (2.26)$$

где $n_\rho \in \mathbb{N}_0$ — неотрицательное целое число. То есть, имеем задачу

$$\begin{aligned} x f''(x) + (|n_\varphi| + 1 - x) f'(x) + n_\rho f(x) &= 0, \quad 0 < x < +\infty, \\ |f(0)| < +\infty, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} |f(x)| &\leq \text{const} \cdot x^N, \quad N = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (2.27)$$

Её решения — полиномы Чебышёва-Лагерра:

$$f(x) = \text{const} \cdot L_{n_\rho}^{(|n_\varphi|)}(x). \quad (2.28)$$

Согласно [11, (13.128)] полиномы Чебышёва-Лагерра могут быть выражены через вырожденную гипергеометрическую функцию первого рода (функцию Куммера) как

$$L_{n_\rho}^{(|n_\varphi|)}(x) = \frac{(n_\rho + |n_\varphi|)!}{n_\rho! |n_\varphi|!} M(-n_\rho, |n_\varphi| + 1; x). \quad (2.29)$$

Так, решение задачи (2.186) представляется в виде радиальной функции

$$\begin{aligned} \chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) &= \frac{\exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho^{|n_\varphi|}}{|n_\varphi|!} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{|n_\varphi|+1}{2}} \sqrt{\frac{2(|n_\varphi| + n_\rho)!}{n_\rho!}} \times \\ &\times M\left(-n_\rho, |n_\varphi| + 1; \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right), \quad n_\varphi \in \mathbb{Z}, n_\rho \in \mathbb{N}_0. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Определение нормировочной константы вынесено в [приложение В](#).

2.1.3 АКСИАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ

Из (2.17), (2.18a) и (2.26) получим

$$\frac{\zeta''}{\zeta} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} (|z| - z_0)^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m\omega(2n_\rho + |n_\varphi| + 1)}{\hbar}. \quad (2.31)$$

Рассмотрим область $0 < z < +\infty$. Произведём замену

$$\zeta(z) = \xi(z) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(z - z_0)^2\right). \quad (2.32)$$

Тогда (2.31) преобразуется к виду

$$\xi''(z) - \frac{2m\omega}{\hbar}(z - z_0)\xi'(z) + \frac{2mE - 2m\omega\hbar(2n_\rho + |n_\varphi|) - 3m\omega\hbar}{\hbar^2}\xi(z) = 0. \quad (2.33)$$

Рассмотрим функцию ξ как функцию аргумента $x = \frac{m\omega}{\hbar}(z - z_0)^2$. Тогда

$$\xi(z) \rightarrow \xi(x), \quad (2.34a)$$

$$\xi'(z) \rightarrow \frac{2m\omega}{\hbar}(z - z_0)\xi'(x), \quad (2.34б)$$

$$\xi''(z) \rightarrow \frac{4m^2\omega^2}{\hbar^2}(z - z_0)^2\xi''(x) + \frac{2m\omega}{\hbar}\xi'(x), \quad (2.34в)$$

где штрихом обозначена производная функции ξ по её аргументу. Так, уравнение (2.33) преобразуется к виду

$$x\xi''(x) + \left(\frac{1}{2} - x\right)\xi'(x) + \frac{E - \hbar\omega(2n_\rho + |n_\varphi|) - \frac{3}{2}\hbar\omega}{2\hbar\omega}\xi(x) = 0. \quad (2.35)$$

Поскольку формально изначальное дифференциальное уравнение (2.31) задано на прямой $-\infty < z < +\infty$, то граничного условия в точке $z = 0$ вида $|\zeta(0)| < +\infty$ нет. Поэтому, логика получения полиномов Чебышёва-Лагерра, изложенная в разделе 2.1.2, здесь не применима.

Обозначим постоянный коэффициент при последнем слагаемом как

$$\frac{E - \hbar\omega(2n_\rho + |n_\varphi|) - \frac{3}{2}\hbar\omega}{2\hbar\omega} = \frac{n_z}{2}, \quad (2.36)$$

где $n_z \in \mathbb{R}$ — действительное число, то есть *не обязательно целое*.

Согласно [12, Математическое дополнение Г] общее решение уравнения (2.35) имеет вид

$$\xi(x) = C_1 M\left(\frac{1 - n_z}{2}, \frac{3}{2}; x\right)\sqrt{x} + C_2 M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; x\right), \quad (2.37)$$

где C_1, C_2 — произвольные постоянные.

Так, аксиальная функция при $z > 0$ имеет вид

$$\begin{aligned} \zeta(z > 0) = \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(z - z_0)^2\right) \times \\ \times \left[C_1(z - z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1 - n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z - z_0)^2}{\hbar}\right) + \right. \\ \left. + C_2 M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z - z_0)^2}{\hbar}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Поскольку при замене $z \rightarrow (-z)$ дифференциальное уравнение (2.31) не изменится, то $\zeta(-z > 0) = \zeta(z > 0)|_{z \rightarrow (-z)}$ — его решение в области $-\infty < z < 0$. То есть,

$$\begin{aligned} \zeta(z < 0) = \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(z + z_0)^2\right) \times \\ \times \left[C'_1(z + z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1 - n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z + z_0)^2}{\hbar}\right) + \right. \\ \left. + C'_2 M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z + z_0)^2}{\hbar}\right) \right], \end{aligned} \quad (2.39)$$

где C'_1, C'_2 — произвольные постоянные.

Аксиальная функция должна удовлетворять требованиям непрерывности, то есть

$$[\zeta(z > 0) = \zeta(z < 0)]_{z=0}, \quad (2.40a)$$

$$\left[\frac{d}{dz} \zeta(z > 0) = \frac{d}{dz} \zeta(z < 0) \right]_{z=0}, \quad (2.40б)$$

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} \zeta(z > 0) = 0, \quad (2.40в)$$

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \zeta(z < 0) = 0. \quad (2.40г)$$

Первые два условия дают соответственно²⁾

$$z_0 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) (C'_1 + C_1) +$$

$$+ M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) (C'_2 - C_2) = 0, \quad (2.41a)$$

$$(C'_1 - C_1) \left[\left(\frac{m\omega z_0^2}{\hbar} - 1\right) M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) - \right.$$

$$\left. - \frac{2m\omega z_0^2(1-n_z)}{3\hbar} M\left(\frac{3-n_z}{2}, \frac{5}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) \right] + (C'_2 + C_2) z_0 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times$$

$$\times \left[M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) + 2n_z M\left(\frac{2-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) \right] = 0. \quad (2.41b)$$

При больших значениях третьего аргумента функции Куммера имеем асимптотику [12, (Г, 10)]

$$M(a, c; x) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} x^{a-c} e^x \left(1 + \mathcal{O}(x^{-1})\right), \quad x \rightarrow +\infty, \quad (2.42)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Так, получим³⁾

$$\zeta(z \rightarrow \pm\infty) \sim \exp\left(\frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{2\hbar}\right) \left(\frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right)^{-\frac{1+n_z}{2}} \times$$

$$\times \left[\pm C_{1,1'} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)} + C_{2,2'} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)} \right]. \quad (2.43)$$

²⁾Для условия непрерывности производных использовалось соотношение $\frac{d}{dx} M(a, c; x) = \frac{a}{c} M(a+1, c+1; x)$.

³⁾Нештрихованные индексы отвечают аксиальной функции при $z > 0$, штрихованные — при $z < 0$. Таким образом, в правой части эквивалентности нештрихованным индексам отвечают знаки *сверху*, штрихованным — знаки *снизу*. Разные знаки у C_1 и C'_1 обусловлены выбором положительной ветви корня при затягивании выражения $(z \mp z_0)$ под корень с учётом рассматриваемого предела $z \rightarrow \pm\infty$.

Отсюда, условия (2.40в) и (2.40г) дают

$$\frac{C_1}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)} + \frac{C_2}{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)} = 0, \quad (2.44a)$$

$$\frac{C'_1}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)} - \frac{C'_2}{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)} = 0. \quad (2.44б)$$

Поскольку оператор чётности \mathcal{P} коммутирует с гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}_0$, то собственные функции гамильтониана должны быть собственными функциями оператора чётности, то есть $\mathcal{P}\zeta(z) = P\zeta(z)$, где собственные значения $P = \pm 1$ отвечают соответственно чётной или нечётной аксиальной функции: $\zeta(z < 0) = \zeta(z > 0)|_{z \rightarrow (-z)}$ и $\zeta(z < 0) = -\zeta(z > 0)|_{z \rightarrow (-z)}$. Из явных выражений для $\zeta(z \lesseqgtr 0)$ получим

$$C'_1 = -C_1, \quad C'_2 = C_2 \quad \text{для } P = +1, \quad (2.45a)$$

$$C'_1 = C_1, \quad C'_2 = -C_2 \quad \text{для } P = -1. \quad (2.45б)$$

Видно, что для чётной аксиальной функции требование (2.41a) непрерывности в точке $z = 0$ выполняется автоматически. Аналогично тождественно выполняется условие (2.41б) непрерывности производных в $z = 0$ для нечётной функции⁴⁾. Также для фиксированной чётности условия (2.44a) и (2.44б) оказываются эквивалентными.

Имеем (например, для чётности $P = -1$) однородную систему линейных алгебраических уравнений на коэффициенты⁵⁾ C_1 и C_2 :

$$z_0 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) C_1 - M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega z_0^2}{\hbar}\right) C_2 = 0, \quad (2.46a)$$

$$\frac{1}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)} C_1 + \frac{1}{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)} C_2 = 0. \quad (2.46б)$$

Наличие нетривиальных решений обеспечивается равенством нулю опре-

⁴⁾Для чётной функции по определению выполняется соотношение $f(-x) = f(x)$, следовательно, $\lim_{x \rightarrow 0^-} f(x) = \lim_{x \rightarrow 0^+} f(-x) = \lim_{x \rightarrow 0^+} f(x)$ — чётная функция непрерывна в $x = 0$. Производная нечётной функции — чётная функция, откуда следует автоматическая непрерывность производных.

⁵⁾Штрихованные коэффициенты определяются соответствующей «чётностной» зависимостью.

делителя системы (2.46) — уравнение на собственные значения $n_z = n_z(z_0)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Gamma(-\frac{n_z}{2})} \sqrt{\frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar}} M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar}\right) = \\ = -\frac{1}{2\Gamma(\frac{1-n_z}{2})} M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Аналогичное уравнение на собственные значения n_z для $P = +1$ имеет вид

$$\begin{aligned} \left[\frac{2m\omega(z_0)z_0^2(1-n_z)}{3\hbar} M\left(\frac{3-n_z}{2}, \frac{5}{2}; \frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar}\right) - \left(\frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar} - 1\right) \times \right. \\ \left. \times M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar}\right) \right] \frac{1}{\Gamma(-\frac{n_z}{2})} = z_0 \sqrt{\frac{m\omega(z_0)}{\hbar}} \times \\ \times \left[M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar}\right) + 2n_z M\left(\frac{2-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z_0)z_0^2}{\hbar}\right) \right] \frac{1}{2\Gamma(\frac{1-n_z}{2})}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Изобразим зависимость $n_z(z_0)$ для массового числа $A = 235$.

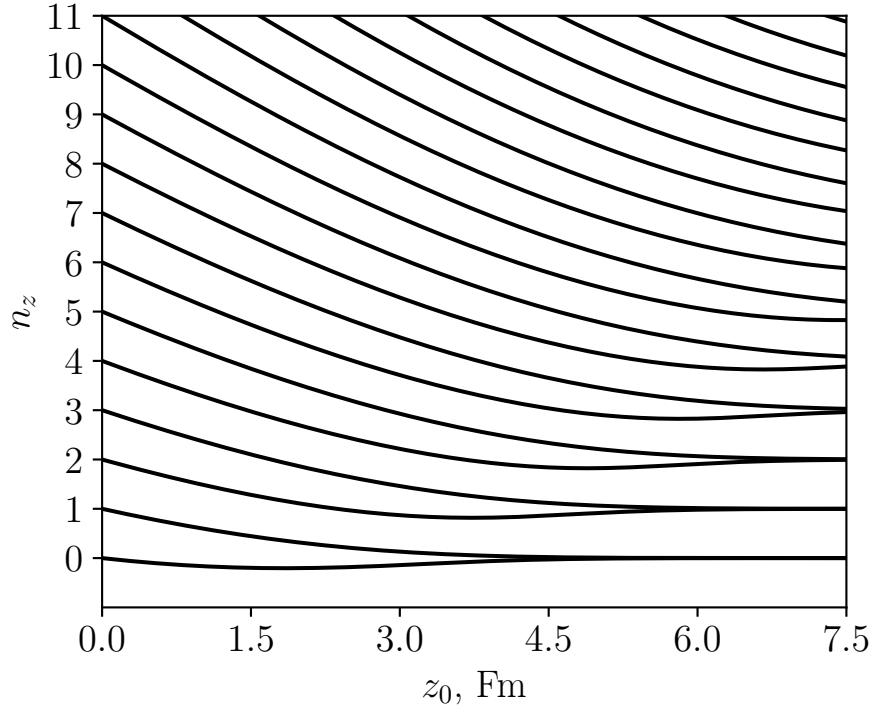


Рисунок 2.1 — Зависимость аксиального квантового числа n_z от относительного положения центров осциллятора z_0 . Линии, выходящие из чётных значений $n_z(z_0 = 0)$, отвечают положительной чётности функции $\zeta(z)$; из нечётных — отрицательной.

Необходимая процедура обезразмеривания некоторых величин, входящих в уравнения на собственные значения, описана в [приложении Г](#).

При $P = -1$ имеем $C'_1 = C_1$ и $C'_2 = -C_2$. При выполнении (2.47) получим, что уравнения системы (2.46) линейно зависимы, поэтому выберем одно из них наиболее простое по виду (содержащее только гамма-функции).

Поскольку для отрицательной чётности все аксиальные квантовые числа $n_z(z_0 = 0)$ принимают нечётные значения, то выражение $(1-n_z)/2$, стоящее под одной из гамма-функций в выбранном выражении, может принимать значения вида «минус чётное число», что даст полюсы этой гамма-функции. Поэтому, выразим все константы так, чтобы гамма-функция от этого аргумента оказалась в знаменателе:

$$C_2 = -\frac{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)}C_1, \quad (2.49a)$$

$$C'_2 = \frac{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)}C_1, \quad C'_1 = C_1. \quad (2.49b)$$

Обозначим⁶⁾ $C_1 \equiv C^{(-)}$. Из выражений (2.38) и (2.39) получим⁷⁾

$$\begin{aligned} \zeta_{n_z=1,3,5,\dots}(z \geq 0) = C^{(-)} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(z \mp z_0)^2\right) \times \\ \times \left[(z \mp z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right) \mp \right. \\ \left. \mp \frac{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)} M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(z \mp z_0)^2}{\hbar}\right) \right], \end{aligned} \quad (2.50)$$

причём зависимости $n_z(z_0)$ определяются из условия $n_z(z_0 = 0) = 1, 3, 5, \dots$, то есть эти квантовые числа отвечают отрицательной чётности аксиальной функции.

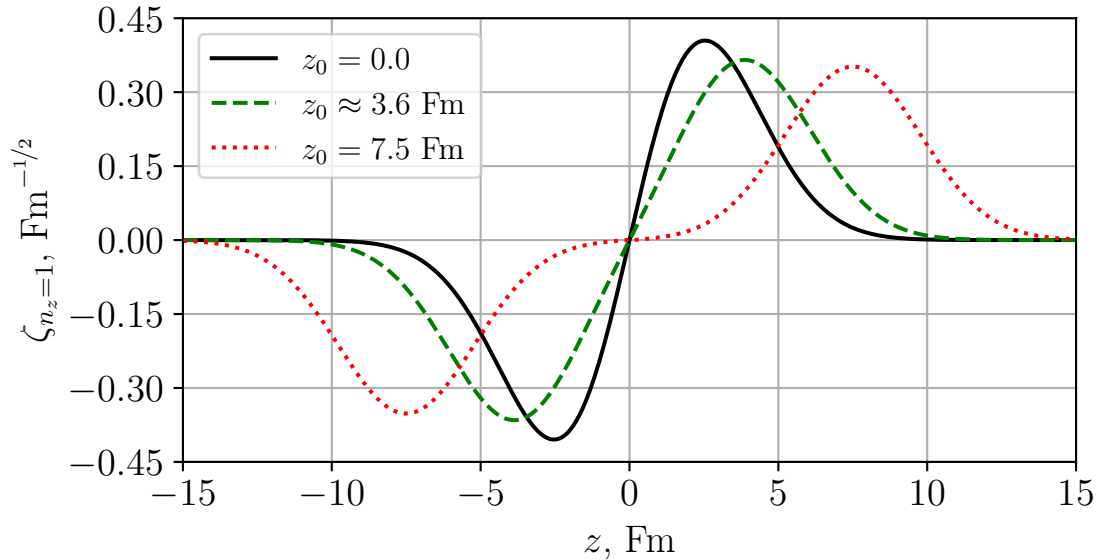


Рисунок 2.2 — Графики нечётных аксиальных функций $\zeta_{n_z=1}(z)$ при определённых параметрах растяжения z_0 и при зависимости $n_z(z_0)$, определяющейся квантовым числом $n_z(z_0 = 0) = 1$.

⁶⁾Нормировочные константы аксиальных функций аналитически не выражаются и вычисляются численно.

⁷⁾В индексах аксиальных функций указывается значение $n_z(z_0 = 0)$.

Аналогично, при $P = +1$ получим

$$\begin{aligned} \zeta_{n_z=0,2,4,\dots}(z) = C^{(+)} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(|z| - z_0)^2\right) \times \\ \times \left[M\left(-\frac{n_z}{2}, \frac{1}{2}; \frac{m\omega(|z| - z_0)^2}{\hbar}\right) - \frac{2\Gamma\left(\frac{1-n_z}{2}\right)}{\Gamma\left(-\frac{n_z}{2}\right)} (|z| - z_0) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times \right. \\ \left. \times M\left(\frac{1-n_z}{2}, \frac{3}{2}; \frac{m\omega(|z| - z_0)^2}{\hbar}\right) \right], \end{aligned} \quad (2.51)$$

причём зависимости $n_z(z_0)$ определяются из условия $n_z(z_0 = 0) = 0, 2, 4, \dots$

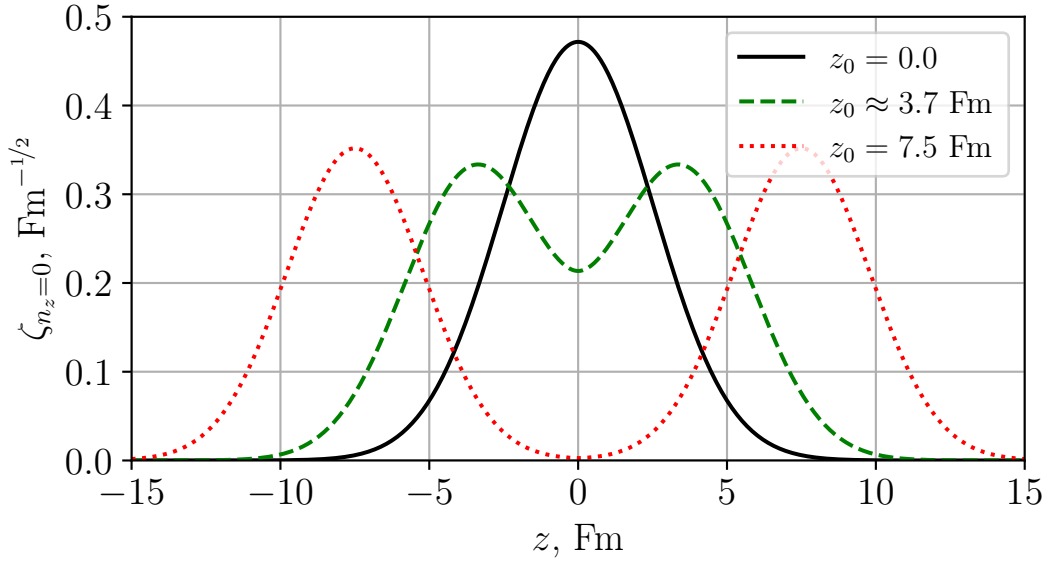


Рисунок 2.3 — Графики чётных аксиальных функций $\zeta_{n_z=0}(z)$ при определённых параметрах растяжения z_0 и при зависимости $n_z(z_0)$, определяющейся квантовым числом $n_z(z_0 = 0) = 0$.

Полученные зависимости на [рисунке 2.2](#) и [рисунке 2.3](#) совпадают с соответствующими зависимостями, изображёнными в работе [13, Fig. 3].

2.1.4 ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ

Согласно зависимости (2.36) энергия связана со всеми тремя квантовыми числами⁸⁾ как

$$E_{n_\varphi n_\rho n_z}^0(z_0) = \hbar\omega(z_0)(|n_\varphi| + 2n_\rho + n_z(z_0) + 3/2), \quad (2.52)$$

где $n_\varphi \in \mathbb{Z}$, $n_\rho \in \mathbb{N}_0$, $n_z(z_0) \in \mathbb{R}$.

Изобразим полученные уровни.

⁸⁾Квантовым числом, связанным с движением вдоль оси деформации ядра, будем называть величину $n_z(z_0 = 0)$.

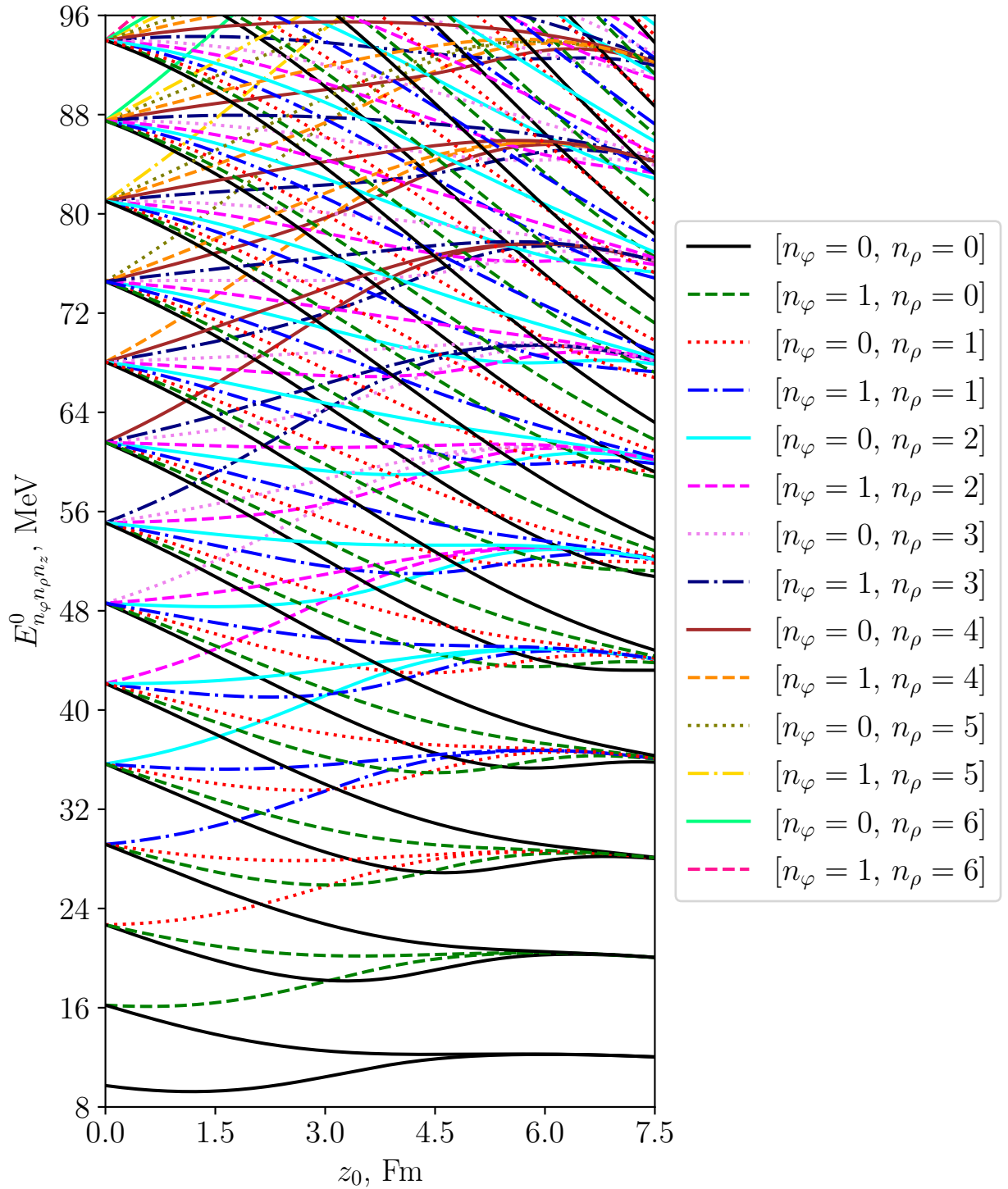


Рисунок 2.4 — Энергетические уровни двухцентрового осциллятора с массовым числом $A = 235$. Каждая новая серия линий начинается с квантовым числом $n_z(z_0 = 0) = 0$, и при движении вверх вдоль оси энергии на новую линию той же серии это число увеличивается на 1.

Из (2.52) видно, что уровни вырождаются по квантовым числам n_φ и n_ρ , а при отсутствии деформации и по $n_z(z_0 = 0)$. Например, на рисунке 2.4 одинаковыми линиями описываются уровни с $n_\varphi = 0, n_\rho = 1$, и $n_\varphi = 2, n_\rho = 0$ и так далее.

Полученные зависимости на [рисунке 2.1](#) и [рисунке 2.4](#) совпадают с зависимостями, отображёнными в работе [5, Fig. 3].

2.2 ЯДЕРНОЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

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

Согласно [13, (3)] спин-орбитальное слагаемое описывается потенциалом

$$V_1(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}) = -\varkappa \hbar \omega(z_0) \cdot 2\boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{s}, \quad (2.53)$$

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

При вводе спин-орбитального взаимодействия у волновых функций появляется спиновая часть:

$$\Phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z, s) = \phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) \sigma(s) \equiv \langle \mathbf{r} \sigma | n_\varphi n_\rho n_z s \rangle, \quad (2.54)$$

где $\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) = v_{n_\varphi}(\varphi) \chi_{n_\varphi n_\rho}(\rho) \zeta_{n_z}(z)$, а $s = \pm 1/2$ — проекция спина на ось деформации.

Для вычисления необходимых матричных элементов необходимо далее выразить оператор $\boldsymbol{\ell}$ через операторы повышения и понижения (ℓ_+, ℓ_-, ℓ_z) в цилиндрических координатах.

2.2.1 ОПЕРАТОР ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА

Согласно [9, (4)] оператор орбитального момента для нуклона, помещённого в потенциал V , имеет вид

$$\mathbf{L} = \nabla V \times \mathbf{p}, \quad \mathbf{L} \equiv \hbar m \omega^2(z_0) \boldsymbol{\ell}. \quad (2.55)$$

В декартовой системе координат

$$\mathbf{L} = -i\hbar \cdot \nabla V \times \nabla = -i\hbar \begin{bmatrix} \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{bmatrix}. \quad (2.56)$$

В цилиндрических координатах

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (2.57a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.57b)$$

Рассматривая потенциал (2.10), не зависящий от угла φ , получим

$$L_x = -i\hbar \left[\sin \varphi \left(\frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho} \cos \varphi \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad (2.58a)$$

$$L_y = -i\hbar \left[\cos \varphi \left(\frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z} \right) - \frac{1}{\rho} \sin \varphi \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad (2.58b)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{1}{\rho} \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.58b)$$

В [11, (4.69)] и [12, Математическое дополнение Б] операторы повышения и понижения вводятся как

$$L_+ \equiv L_x + iL_y, \quad (2.59a)$$

$$L_- \equiv L_x - iL_y. \quad (2.59b)$$

Из выражений (2.58) получим

$$L_{\pm} = \mp \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} \mp i \frac{\partial V}{\partial z} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (2.60a)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{1}{\rho} \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.60b)$$

Из (2.59) следует, что

$$L_x = \frac{L_+ + L_-}{2}, \quad L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i}. \quad (2.61)$$

Отсюда,

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{s} = L_x s_x + L_y s_y + L_z s_z = \frac{1}{2}(L_+ s_- + L_- s_+) + L_z s_z. \quad (2.62)$$

2.2.2 МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + V_1(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}), \quad (2.63)$$

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

Так, его матричный элемент имеет вид

$$\begin{aligned} \langle n'_\varphi n'_\rho n'_z s' | \hat{\mathcal{H}} | n_\varphi n_\rho n_z s \rangle &= E_{n_\varphi n_\rho n_z}^0(z_0) \delta_{n'_\varphi, n_\varphi} \delta_{n'_\rho, n_\rho} \delta_{n'_z, n_z} \delta_{s', s} - \kappa \hbar \omega(z_0) \times \\ &\times \left(\langle n'_\varphi n'_\rho n'_z | \ell_+ | n_\varphi n_\rho n_z \rangle \delta_{s', s-1} + \langle n'_\varphi n'_\rho n'_z | \ell_- | n_\varphi n_\rho n_z \rangle \delta_{s', s+1} + \right. \\ &\quad \left. + 2s n_\varphi \delta_{n'_\varphi, n_\varphi} \delta_{n'_\rho, n_\rho} \delta_{n'_z, n_z} \delta_{s', s} \right). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Рассмотрим низшие энергетические уровни исследуя начальные состояния $\phi_{n_\varphi n_\rho n_z}(\varphi, \rho, z) \equiv \langle \mathbf{r} | n_\varphi n_\rho n_z \rangle$, а именно

$$\phi_{000}(\varphi, \rho, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \cdot \zeta_0(z), \quad (2.65a)$$

$$\phi_{001}(\varphi, \rho, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \cdot \zeta_1(z), \quad (2.65б)$$

$$\phi_{100}(\varphi, \rho, z) = \frac{\exp(i\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho \cdot \frac{m\omega\sqrt{2}}{\hbar} \cdot \zeta_0(z), \quad (2.65в)$$

$$\phi_{101}(\varphi, \rho, z) = \frac{\exp(i\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho \cdot \frac{m\omega\sqrt{2}}{\hbar} \cdot \zeta_1(z). \quad (2.65г)$$

Выпишем ненулевые матричные элементы.

$$\langle 000 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 -1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (2.66)$$

$$\langle 000 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = E_{000}^0, \quad (2.67)$$

$$\langle 101 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 000 +1/2 \rangle = +\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_1 | \mathfrak{z} | \zeta_0 \rangle, \quad (2.68)$$

$$\langle 001 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 -1/2 \rangle = E_{001}^0, \quad (2.69)$$

$$\langle 001 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 +1/2 \rangle = E_{001}^0, \quad (2.70)$$

$$\langle 100 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 001 +1/2 \rangle = +\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_0 | \mathfrak{z} | \zeta_1 \rangle, \quad (2.71)$$

$$\langle 100 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = E_{100}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (2.72)$$

$$\langle 001 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 -1/2 \rangle = -\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_0 | \mathfrak{z} | \zeta_1 \rangle, \quad (2.73)$$

$$\langle 100 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 100 +1/2 \rangle = E_{100}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (2.74)$$

$$\langle 101 -1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 -1/2 \rangle = E_{101}^0 + \varkappa \hbar \omega, \quad (2.75)$$

$$\langle 000 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 -1/2 \rangle = -\varkappa \hbar \omega \langle \zeta_1 | \mathfrak{z} | \zeta_0 \rangle, \quad (2.76)$$

$$\langle 101 +1/2 | \hat{\mathcal{H}} | 101 +1/2 \rangle = E_{101}^0 - \varkappa \hbar \omega, \quad (2.77)$$

где константа $\varkappa = 0,05$ взята из оригинальной работы Nilsson [14], оператор $\mathfrak{z} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} z + \frac{\partial}{\partial z} \right)$.

2.2.3 НОВЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ

Состояние $|000 s\rangle$ является вырожденным только по проекции спина $s = \pm 1/2$. Тогда, новая волновая функция в первом приближении имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_{k=\pm 1/2} a_k |000 k\rangle. \quad (2.78)$$

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

$$\begin{vmatrix} E_{000}^0 - E & 0 \\ 0 & E_{000}^0 - E \end{vmatrix} = 0. \quad (2.79)$$

Таким образом, вырождение уровней в первом приближении не снялось — имеем два уровня⁹⁾

$$E_{1,2}^{(2)} = E_{000}^0. \quad (2.80)$$

Состояние $|001s\rangle$ (а так же и $|100s\rangle$) вырождено по проекции спина s и по квантовым числам $n_\varphi, n_z (z_0 = 0)$. Волновая функция в первом приближении имеет вид

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{q=(001), (100) \\ p=\pm 1/2}} a_{qp} |qp\rangle. \quad (2.81)$$

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

$$\begin{vmatrix} E_{001}^0 - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{001}^0 - E & -\varkappa\varepsilon & 0 \\ 0 & \varkappa\varepsilon & E_{100}^0 - E + \varkappa\hbar\omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{100}^0 - E - \varkappa\hbar\omega \end{vmatrix} = 0, \quad (2.82)$$

⁹⁾Будем обозначать j -ый полученный уровень как $E_j^{(r)}$, где r — кратность вырождения уровня невозмущённого гамильтониана, из волновых функций которого было получено соответствующее секулярное уравнение.

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

$$E_1^{(4)} = E_{001}^0, \quad (2.83a)$$

$$E_2^{(4)} = E_{100}^0 - \varkappa\hbar\omega, \quad (2.83б)$$

$$E_{3,4}^{(4)} = \frac{E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa\hbar\omega}{2} \pm \frac{\sqrt{(E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa\hbar\omega)^2 - 4(\varkappa^2\varepsilon^2 + E_{001}^0(E_{100}^0 + \varkappa\hbar\omega))}}{2}. \quad (2.83в)$$

Приближая (2.83в) до слагаемых первого порядка по \varkappa , получим

$$E_1^{(4)} = E_{001}^0, \quad (2.84a)$$

$$E_2^{(4)} = E_{100}^0 - \varkappa\hbar\omega, \quad (2.84б)$$

$$E_{3,4}^{(4)} \approx \frac{E_{100}^0 + E_{001}^0 + \varkappa\hbar\omega}{2} \pm \frac{\sqrt{(E_{100}^0 - E_{001}^0)^2 + 2(E_{100}^0 - E_{001}^0)\varkappa\hbar\omega}}{2}. \quad (2.84в)$$

Состояние $|101s\rangle$ 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:

$$|\psi\rangle \sim \sum_{k=\pm 1/2} |101k\rangle. \quad (2.85)$$

Соответствующее секулярное уравнение приведёт к уровням

$$E_1^{(8)} \sim E_{101}^0 + \varkappa\hbar\omega, \quad (2.86a)$$

$$E_2^{(8)} \sim E_{101}^0 - \varkappa\hbar\omega. \quad (2.86б)$$

Изобразим все полученные уровни.

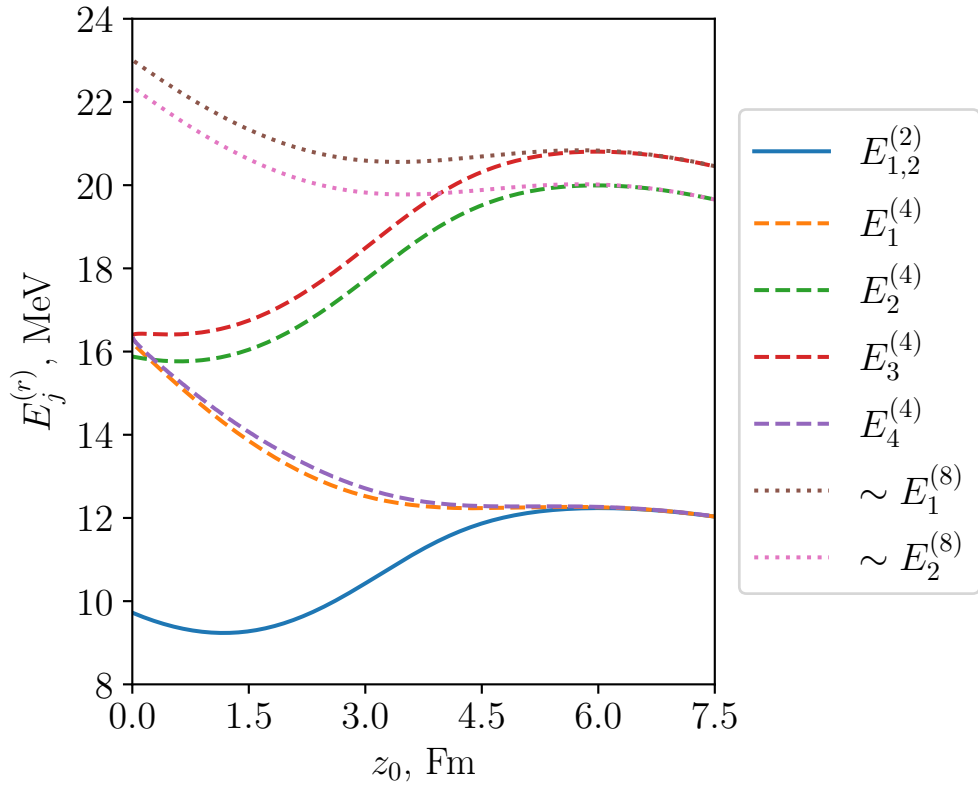
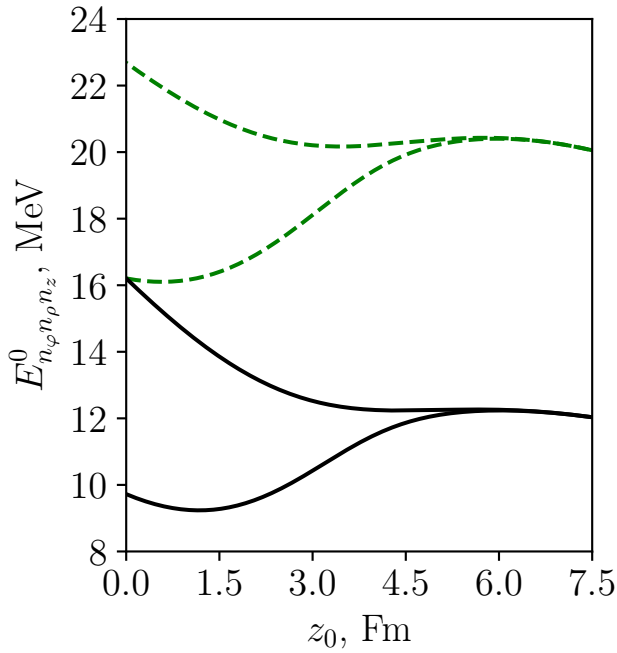
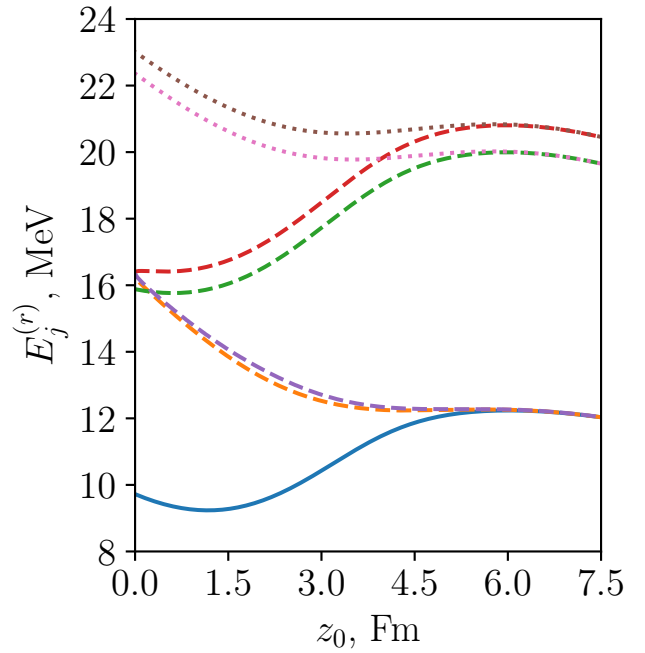


Рисунок 2.5 — Энергетические уровни двухцентрового осциллятора со спин-орбитальным взаимодействием в первом приближении.

Сравним с [рисунком 2.4](#):



(a) $V_1(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}) = 0$.



(б) $V_1(\boldsymbol{\ell}, \mathbf{s}) \neq 0$.

Рисунок 2.6 — Сравнение энергетических уровней двухцентровой осцилляторной модели без спин-орбитального взаимодействия и с ним.

Видно, что двукратно вырожденный уровень E_{000}^0 остался вырожденным, а с четырёхкратно вырожденного (при $z_0 = 0$) уровня E_{100}^0 (а также и E_{001}^0) полностью снялось вырождение, причём появился уровень $E_2^{(4)}$ такой, что $E_2^{(4)}(z_0 = 0) < E_{100}^0(z_0 = 0)$. С восьмикратно вырожденного E_{101}^0 в рассматриваемом оценочном приближении вырождение снимается частично.

3 РЕАКЦИИ С ОБРАЗОВАНИЕМ ЯДЕР-ИЗОМЕРОВ

В вводной части этой работы были изложены причины, по которым мы предприняли вычисления сечений следующих 4-х реакций в диапазоне энергий падающих нейтронов до 20 МэВ:

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

Эти реакции идут с образованием возбуждённых компаунд-ядер, поэтому плотности энергетических уровней этих ядер существенно влияют на значения сечений. В комплекс TALYS-1.9 включены шесть моделей плотности уровней: модель Гильберта-Камерона [15], модель ферми-газа с обратным смещением [16] и сверхтекучая модель, основанная на представлении о сверхтекучем ядре при малых энергиях возбуждения [17]. Следующие три модели основываются на числовых файлах, полученных в различных комбинаторных расчётах, однако надёжность этих моделей не выше, чем у предыдущих трёх.

Каждой из этих моделей поставлено в соответствие некоторое значение параметра `ldmodel` комплекса TALYS-1.9. Таким образом, для каждой реакции было вычислено сечение выхода изомерного (m) состояния конечного ядра с помощью программы TALYS-1.9 с параметрами `ldmodel` 1, 2 и 3 (первые 3 модели плотности уровней) в зависимости от энергии падающего нейтрона от порога реакции до 20 МэВ: $S_1(E)$, $S_2(E)$ и $S_3(E)$ соответственно. К анализу были также привлечены:

- 1) оценённые зависимости сечений от энергии нейтронов (до 20 МэВ) из библиотеки IRDFF-II;
- 2) экспериментальные данные по интересующим нас сечениям, относя-

щиеся к энергии нейтронов до 20 МэВ, из базы данных EXFOR.

3.1 ОЦЕНКА НАДЁЖНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

При сравнении результатов вычислений с оценками и экспериментальными данными выяснилось, что ни одна модель плотности уровней не обладает существенными преимуществами над другими. Поэтому мы предположили, что максимальное расхождение вычисленных сечений

$$\Delta S(E) = \max \{ |S_1(E) - S_2(E)|, |S_1(E) - S_3(E)|, |S_2(E) - S_3(E)| \} \quad (3.1)$$

при любой фиксированной энергии E налетающего нейтрона представляет собой неопределённость теоретического предсказания истинного сечения для этой энергии E . В то же время среднее значение сечения

$$S_{\text{avg}}(E) = \frac{S_1(E) + S_2(E) + S_3(E)}{3} \quad (3.2)$$

можно взять в качестве наиболее вероятного прогноза. Тогда коридор значений $S_{\text{avg}}(\text{max}) = S_{\text{avg}} + \Delta S$, $S_{\text{avg}}(\text{min}) = S_{\text{avg}} - \Delta S$ определяет область, в которой, согласно расчётным значениям, с высокой степенью вероятности находится истинное значение сечения.

3.2 ОБРАЗОВАНИЕ ИТТРИЯ-91

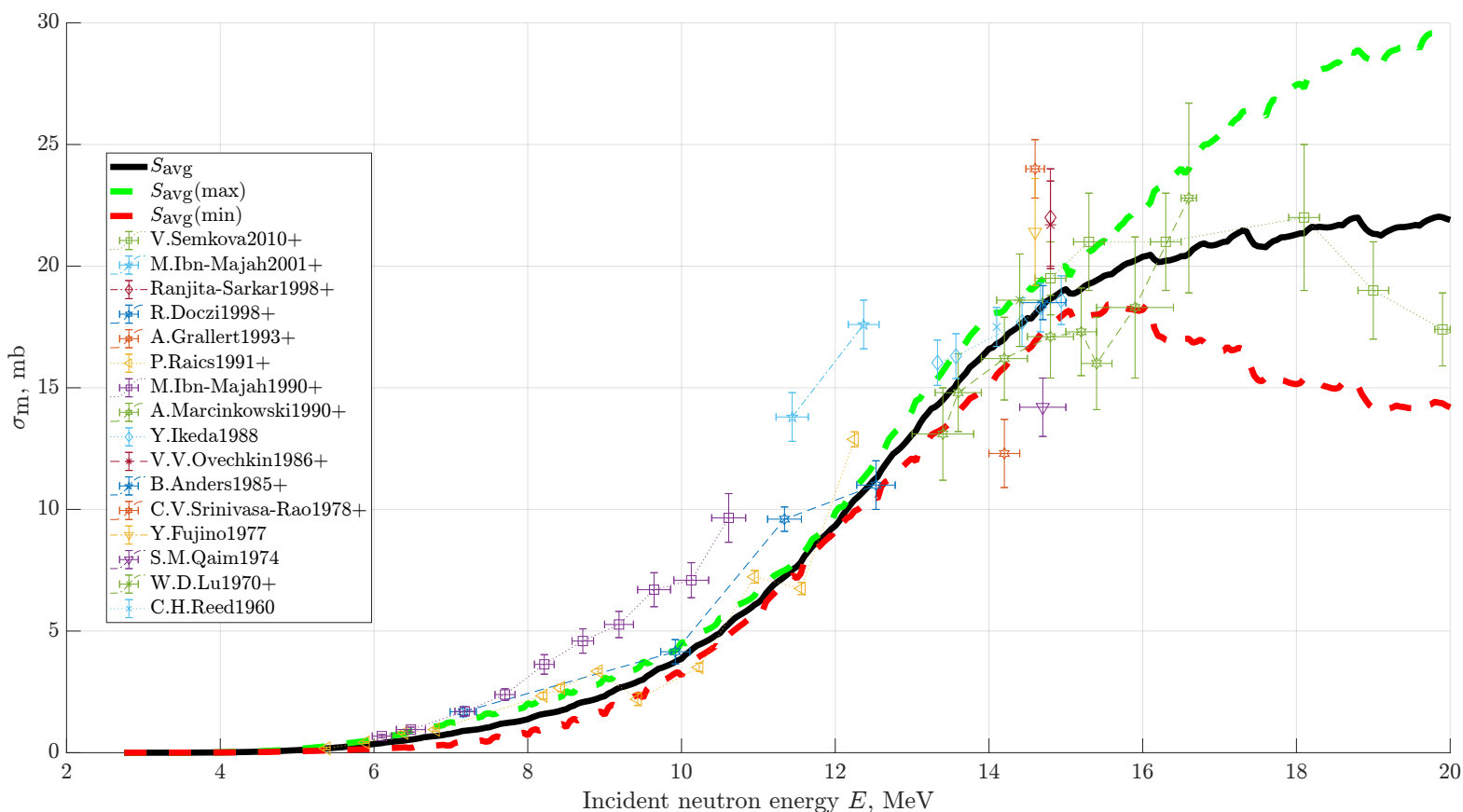


Рисунок 3.1 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{91}Y в реакции $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91}\text{Y}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На [рисунке 3.1](#) представлены сечения выхода изомерного (m) состояния ядра ^{91}Y в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из EXFOR.

В наиболее интересующей нас области 13–15 МэВ имеет место хорошее согласие рассчитанного по TALYS-1.9 «среднего» сечения выхода S_{avg} изомерного (m) состояния с экспериментальными данными из EXFOR.

3.3 ОБРАЗОВАНИЕ СТРОНЦИЯ-87

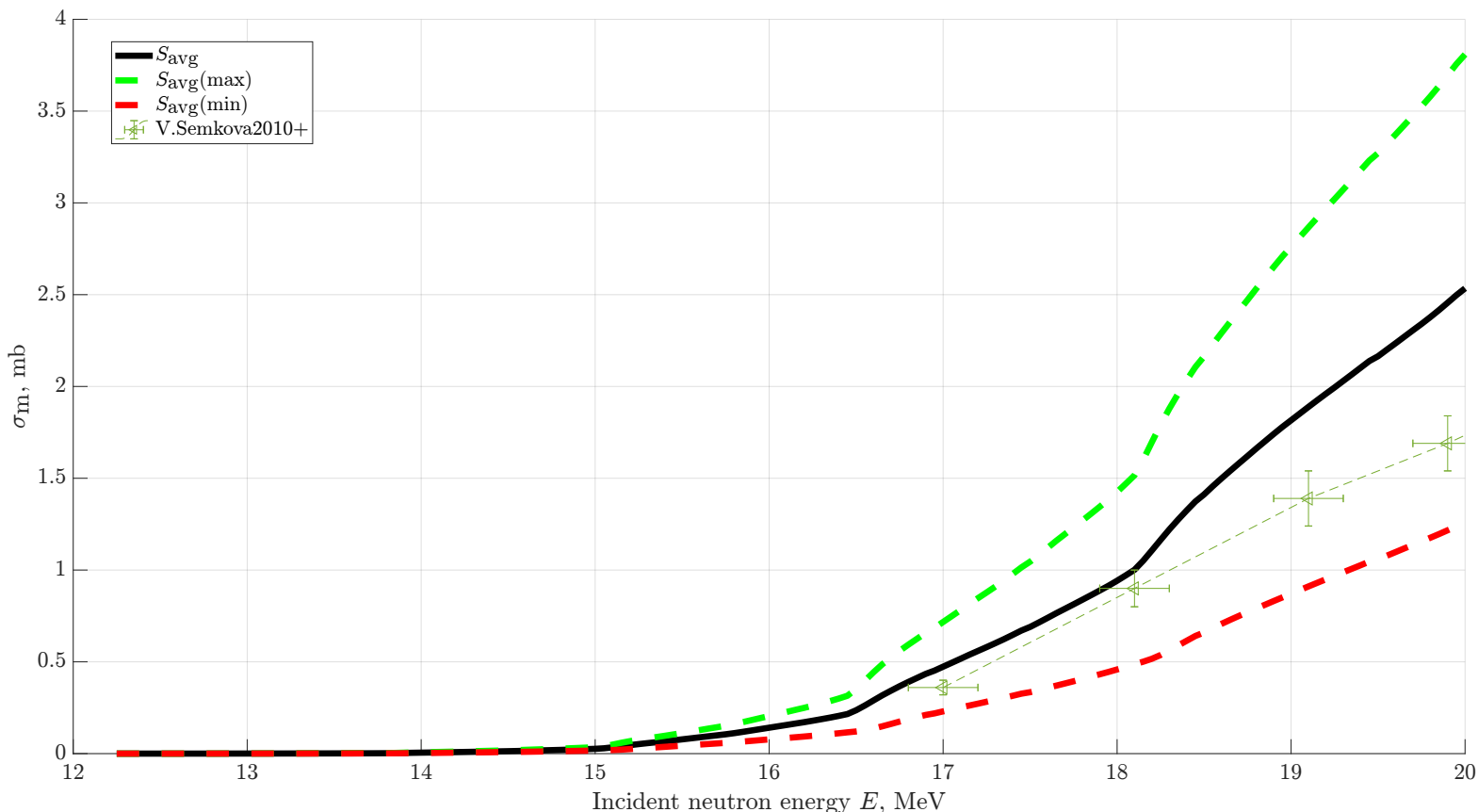


Рисунок 3.2 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{87}Sr в реакции $^{91}\text{Zr}(n, n\alpha)^{87}\text{Sr}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На рисунке 3.2 представлены сечения выхода изомерного (m) состояний ядра ^{87}Sr в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из EXFOR.

На нём видно, что представленные единственные экспериментальные данные для данного сечения незначительно расходятся с полученной оценкой S_{avg} . Однако все значения попадают в коридор от $S_{avg}(min)$ до $S_{avg}(max)$.

3.4 ОБРАЗОВАНИЕ ИНДИЯ-114

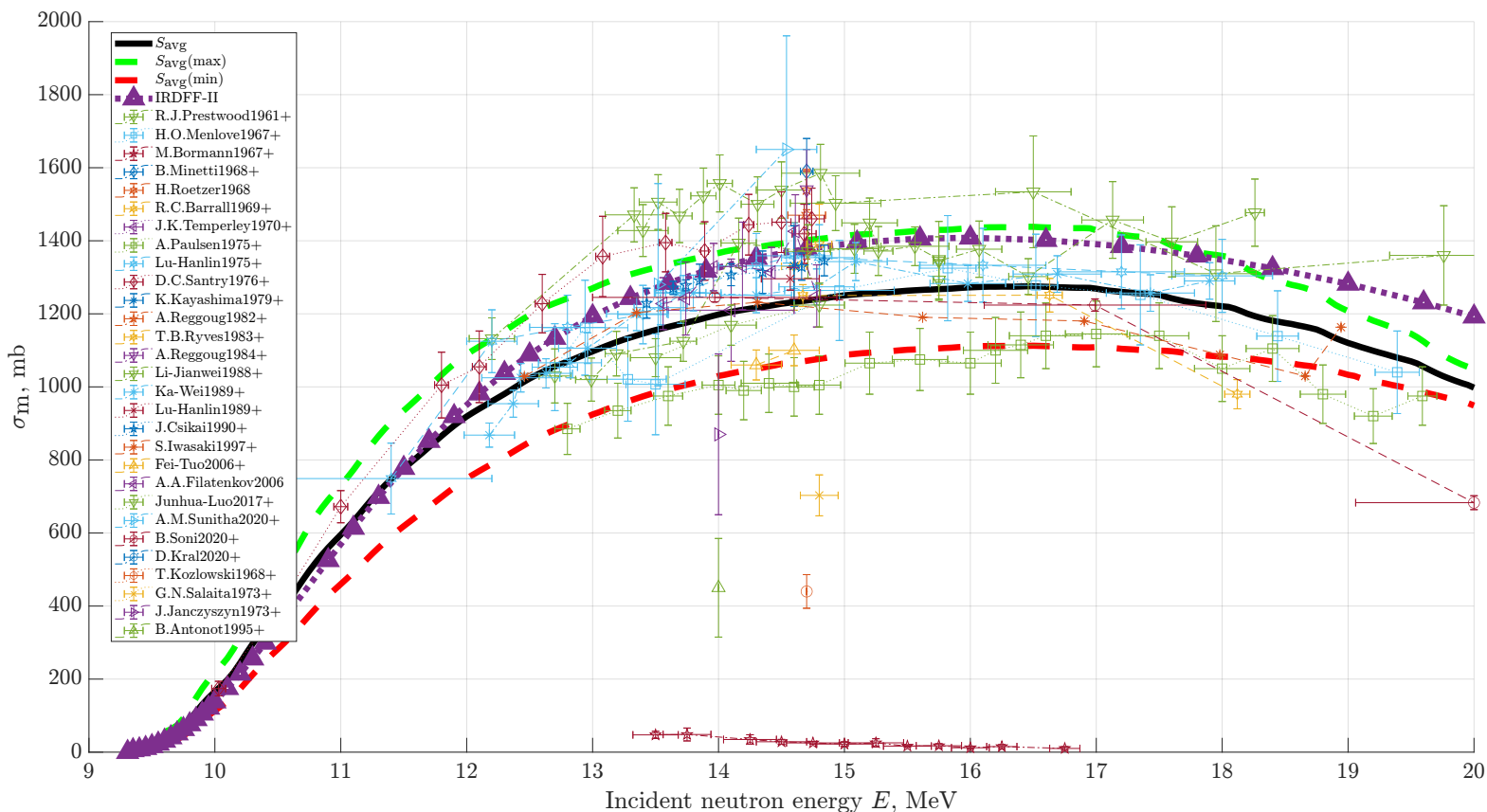


Рисунок 3.3 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{114}In в реакции $^{115}\text{In}(n, 2n)^{114}\text{In}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На рисунке 3.3 представлены сечения выхода изомерного (m) состояния ядра ^{114}In в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR.

На рисунке видно схожее поведение кривых, соответствующих сечению, рассчитанному по TALYS-1.9, и оценкой IRDFF-II. Основной массив экспериментальных данных подтверждает правильность наших оценок сечения.

3.5 ОБРАЗОВАНИЕ ИНДИЯ-115

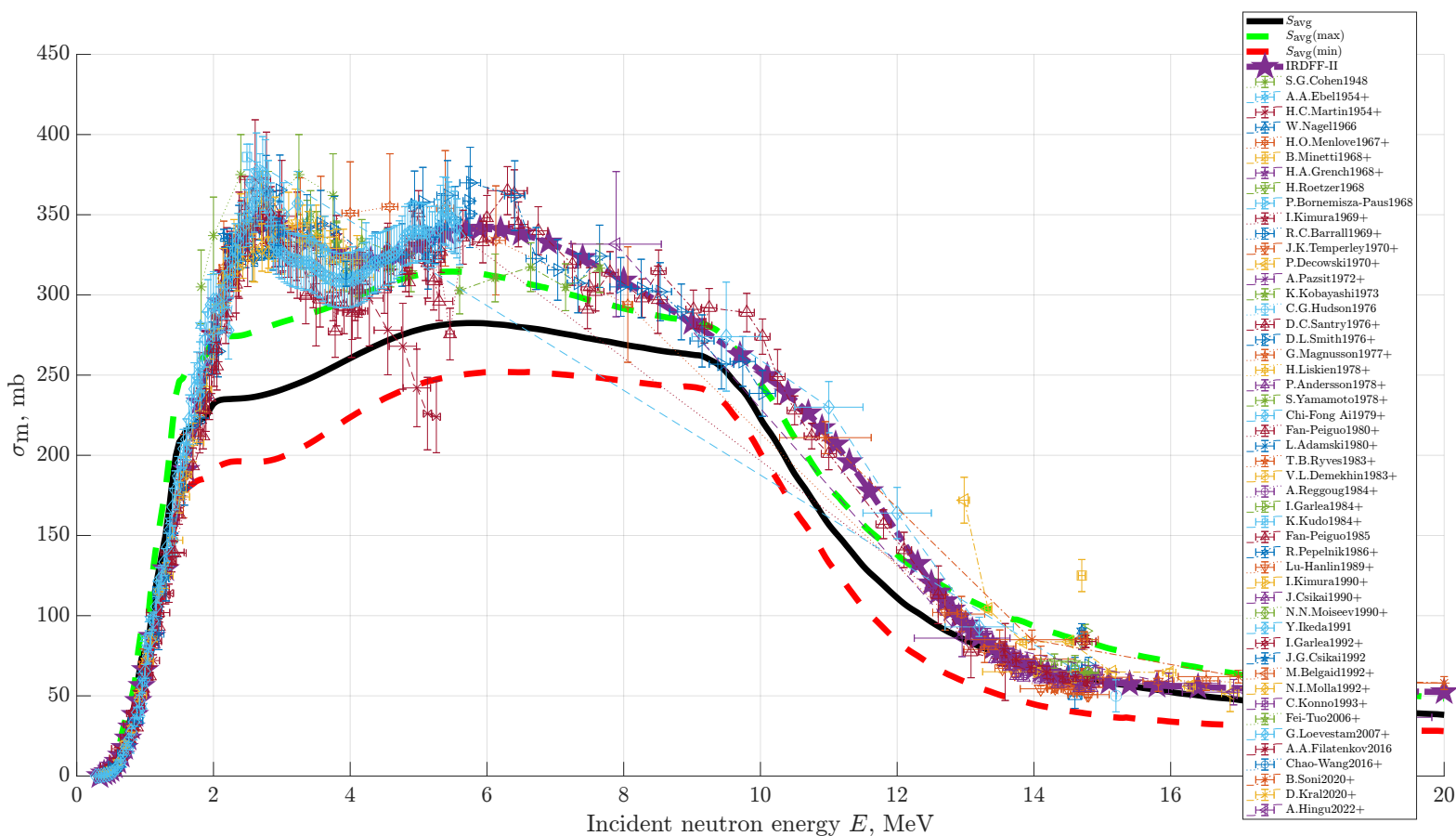


Рисунок 3.4 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{115}In в реакции $^{115}\text{In}(n, n')^{115}\text{In}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На рисунке 3.4 представлены сечения выхода изомерного (m) состояний ядра ^{115}In в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR.

Видно проблемное для комплекса TALYS-1.9 поведение кривых: ни при какой модели плотности уровней ядра двугорбую форму сечения получить не удалось. По всей видимости, для воспроизведения такого хода сечения необходимо точно¹⁾ изменять ряд параметров TALYS-1.9.

При низких энергиях экспериментальные данные не укладываются в коридор значений от $S_{\text{avg}}(\text{min})$ до $S_{\text{avg}}(\text{max})$, однако в интересующей нас области энергий 13–15 МэВ имеет место хорошее согласие «среднего» сечения S_{avg} с оценкой IRDFF-II и экспериментальными данными из EXFOR.

¹⁾В смысле того, что другие реакции таким изменениям подвергнуты не будут.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В первой части данной работы рассмотрена задача симметричного двухцентрового осциллятора с введённым потенциалом ядерного спин-орбитального взаимодействия. Такой вид потенциала является наиболее подходящим для микроскопического описания нуклонных состояний в сильно деформированных ядрах, в частности, делящихся.

Получены энергетические уровни при рассмотрении соответствующих уравнений на ограниченном количестве волновых функций задачи чистого двухцентрового осциллятора. Уровни, изображённые на [рисунке 2.5](#), согласуются с уровнями из работы [13, Fig. 5].

Также получены аналитические выражения одночастичных волновых функций, совпадающие с выражениями из работы [5]. Этот базис может быть использован для последующих расчётов с потенциалом вудс-саксоновского типа.

Во второй части данной работы выполненный анализ показал, что с разумной точностью как экспериментальные данные (из библиотеки EXFOR), так и оценки из IRDFF-II по сечениям выхода воспроизводятся расчётами по TALYS-1.9 со следующими (из числа необязательных) ключевыми словами, которые соответствуют тому или иному набору входных параметров из библиотеки RIPL-3:

- `ldmodel 1` (2 или 3);
- `fullhf y` (учёт всех спиновых состояний);
- `optmodall y` (учёт отличий оптических потенциалов, соответствующих различным ядрам).

В качестве количественной оценки «разумной точности» величин сечений, полученных в результате расчётов по TALYS-1.9, может выступать характерный разброс расчётных значений сечений для разных моделей плотности уровней ядер (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.

Таким образом, 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.

ПРИЛОЖЕНИЯ

А ОБЪЁМ ДЕФОРМИРОВАННОГО ЯДРА

Объём ядра (1.3) выражается через параметры, определяющие форму ядра (1.1), следующим образом:

$$V = \frac{\pi b_1^2 (2a_1 - z_1)(a_1 + z_1)^2}{3a_1^2} + \pi \left(J_1 \cdot (1/d)^2 - 2J_3 \cdot |1/d| + J_2 \right) + \frac{\pi b_2^2 (2a_2 - c_2 + z_2)(a_2 + c_2 - z_2)^2}{3a_2^2}, \quad (\text{A.1})$$

где

$$J_1 = z_2 - z_1, \quad (\text{A.2a})$$

$$J_2 = R_3^2 (z_2 - z_1) - \frac{(z_2 - c_3)^3 - (z_1 - c_3)^3}{3}, \quad (\text{A.2б})$$

$$J_3 = \frac{R_3^2}{2} \left[\arccos \frac{z_1 - c_3}{R_3} - \arccos \frac{z_2 - c_3}{R_3} \right] - \frac{1}{2} \left[(z_1 - c_3) \sqrt{R_3^2 - (z_1 - c_3)^2} - (z_2 - c_3) \sqrt{R_3^2 - (z_2 - c_3)^2} \right]. \quad (\text{A.2в})$$

Б ЧАСТОТА СИММЕТРИЧНОГО ДВУХЦЕНТРОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Зависимость частоты $\omega(z_0)$ симметричного двухцентрового осциллятора от параметра растяжения z_0 определяется выражением (2.8), где необходимо получить зависимость $r(z_0)$, определяющуюся уравнением (2.9). За-

меной $r = x - z_0/2$ данное уравнение приводится к виду

$$x^3 - \frac{3}{4}z_0^2 \cdot x - \frac{z_0^3 + 4R^3}{4} = 0. \quad (\text{Б.1})$$

Дискриминант [18] данного уравнения равен

$$\Delta = - \left(\frac{81}{16}z_0^6 + 54z_0^3R^3 + 108R^6 \right) < 0, \quad (\text{Б.2})$$

значит, уравнение (Б.1) имеет один вещественный корень и два комплексно-сопряжённых корня, которые нас не интересуют.

Соответствующая зависимость $r(z_0)$ имеет вид

$$r(z_0) = \frac{1}{2} \left[\frac{z_0^2}{\left\{ 2\sqrt{2}\sqrt{R^3(2R^3 + z_0^3)} + 4R^3 + z_0^3 \right\}^{1/3}} + \right. \\ \left. + \left\{ 2\sqrt{2}\sqrt{R^3(2R^3 + z_0^3)} + 4R^3 + z_0^3 \right\}^{1/3} - z_0 \right]. \quad (\text{Б.3})$$

В НОРМИРОВКА РАДИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ

Радиальная функция имеет вид

$$\chi(\rho) = C \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right) \rho^{|n_\varphi|} M\left(-n_\rho, |n_\varphi| + 1; \frac{m\omega\rho^2}{\hbar}\right), \quad (\text{Б.1})$$

где

$$C^2 \int_0^{+\infty} |\chi(\rho)|^2 \rho d\rho = 1, \quad (\text{Б.2a})$$

то есть

$$C^2 \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\rho^2\right) \rho^{2|n_\varphi|+1} M^2\left(-n_\rho, |n_\varphi| + 1; \frac{m\omega}{\hbar}\rho^2\right) d\rho = 1. \quad (\text{B.26})$$

Согласно [19, (4.4)]

$$\int_0^{+\infty} x^{2\gamma-1} \exp(-\alpha x^2) M^2(-n, \gamma; \alpha x^2) dx = \frac{1}{2} \frac{n! \Gamma^2(\gamma)}{\alpha^\gamma \Gamma(\gamma + n)}. \quad (\text{B.3})$$

В случае (B.26) имеем

$$\gamma = |n_\varphi| + 1, \quad (\text{B.4a})$$

$$\alpha = m\omega/\hbar, \quad (\text{B.4б})$$

$$n = n_\rho. \quad (\text{B.4в})$$

Итого, получим

$$C = \frac{1}{|n_\varphi|!} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{|n_\varphi|+1}{2}} \sqrt{\frac{2(|n_\varphi| + n_\rho)!}{n_\rho!}}. \quad (\text{B.5})$$

Г ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ АКСИАЛЬНОГО КВАНТОВОГО ЧИСЛА

Во все уравнения на собственные значения n_z входит величина

$$\frac{m\omega(z_0)}{\hbar} \quad (\text{Г.1})$$

с размерностью $[z_0]^{-2}$. Таким образом, если величину (Г.1) выразить в Fm^{-2} , то $[z_0] = \text{Fm}$.

Используем

$$\hbar = 6,582 \cdot 10^{-22} \text{ MeV} \cdot \text{s}, \quad (\Gamma.2a)$$

$$m = 940 \text{ MeV}/c^2, \quad c = 3 \cdot 10^{23} \text{ Fm}/\text{s}. \quad (\Gamma.2б)$$

Поскольку

$$\omega(z_0) = \frac{\omega_0 R}{r(z_0)}, \quad \hbar\omega_0 = 40A^{-1/3} \text{ (MeV)}, \quad R = r_0 \cdot A^{1/3}, \quad r_0 = 1,2 \text{ (Fm)}, \quad (\Gamma.3)$$

то

$$\begin{aligned} \frac{m\omega(z_0)}{\hbar} &= \frac{m\omega_0}{\hbar} \cdot \frac{R}{r(z_0)} = \frac{m \cdot 40 \text{ MeV}}{\hbar^2} \cdot \frac{r_0}{r(z_0)} = \\ &= \frac{40 \text{ MeV} \cdot 940 \text{ MeV}^2}{9 \cdot 10^{46} \frac{\text{Fm}^2}{\text{s}^2} \cdot 6,582^2 \cdot 10^{-44} \text{ MeV}^2 \cdot \text{s}^2} \cdot \frac{r_0}{r(z_0)} = 0,964 \cdot \frac{r_0}{r(z_0)} \text{ Fm}^{-2}. \end{aligned} \quad (\Gamma.4)$$

Если положить $\hbar = 1$ и приравнять (Г.4) и $m\omega(z_0)/\hbar=1$, то получим

$$m = 0,024 \text{ } 1/(\text{MeV} \cdot \text{Fm}^2). \quad (\Gamma.5)$$

Таким образом, имеем величины, которые дают верную размерность $[n_z] = 1$ при использовании $[z_0] = \text{Fm}$:

$$m = 0,024 \text{ MeV}^{-1} \cdot \text{Fm}^{-2}, \quad (\Gamma.6a)$$

$$\omega_0 = 40A^{-1/3} \text{ MeV}, \quad (\Gamma.6б)$$

$$r_0 = 1,2 \text{ Fm}, \quad (\Gamma.6в)$$

$$\hbar = 1. \quad (\Gamma.6г)$$

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Bender M., Bernard R., Bertsch G., Chiba S., Dobaczewski J., Dubray N., Giuliani S. A., Hagino K., Lacroix D., Li Z., Magierski P., Maruhn J., Nazarewicz W., Pei J., Péru S., Pillet N., Randrup J., Regnier D., Reinhard P.-G., Robledo L. M., Ryssens W., Sadhukhan J., Scamps G., Schunck N., Simenel C., Skalski J., Stetcu I., Stevenson P., Umar S., Verriere M., Vretenar D., Warda M., Åberg S.* Future of nuclear fission theory // *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*. — 2020. — v. 47, iss. 11, 113002.
2. *Mirea M.* Supersymmetric two-center shell model for spontaneous heavy-ion emission // *Phys. Rev. C*. — 1996. — v. 54, iss. 1. — p. 302–314.
3. *Mosel U., Greiner W.* On the stability of superheavy nuclei against fission // *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*. — 1969. — v. 222, iss. 3. — p. 261–282.
4. *Strutinsky V. M.* “Shells” in deformed nuclei // *Nuclear Physics A*. — 1968. — v. 122, iss. 1. — p. 1–33. — ISSN 0375-9474.
5. *Holzer P., Mosel U., Greiner W.* Double-centre oscillator and its application to fission // *Nuclear Physics A*. — 1969. — v. 138, iss. 2. — p. 241–252.
6. *Trkov A., Griffin P., Simakov S., Greenwood L., Zolotarev K., Capote R., Aldama D., Chechev V., Destouches C., Kahler A. C. I., Konno C., Kostal M., Majerle M., Malambu E., Ohta M., Pronyaev V. G., Radulovic V., Sato S., Schulc M., Simeckova E., Vavtar I., Wagemans J., White M. C., Yashima H.* IRDFF-II: A New Neutron Metrology Library // *Nuclear Data Sheets*. — 2020. — v. 163. — p. 1–108.

7. *Titarenko Y. E., Pavlov K. V., Titarenko A. Y., Legostaev V. O., Zhigulina M. A., Khalikov R. S., Zhivun V. M., Kulevoy T. V., Kovalishin A. A., Dudnikov A. A., Blandinskiy V. Y., Davidenko V. D., Ioannisian M. V., I. B. V., Dyachkov I. I., Chernov K. G., Malkov M. R., Kuteev B. V., Kashchuk Y. A., Meshchaninov S. A., Obudovsky S. Y., Stankovskiy A. Y., Konobeyev A. Y.* Benchmark Experiments for Verification of Nuclear Data Libraries for Designing Fusion Blankets // Fusion Science and Technology. — 2022. — v. 78, iss. 7. — p. 549–572.
8. *Koning A. J., Rochman D.* Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System // Nuclear Data Sheets. — 2012. — v. 113, iss. 12. — p. 2841–2934.
9. *Mirea M.* Two Center Shell Model with Woods-Saxon Potentials // Romanian Reports in Physics. — 2007. — v. 59, iss. 2. — p. 523–531.
10. *Бор О., Моттельсон Б.* Структура атомного ядра : в 3 т. Т. 1: Одночастичное движение / пер. с англ. Л. А. Слива. — Москва : Мир, 1971.
11. *Arfken G. B., Weber H. J.* Mathematical Methods for Physicists. — 5th ed. — Academic Press, 2001.
12. *Давыдов А. С.* Квантовая механика. — изд. 2-е, перераб. — Москва : Наука, 1973.
13. *Scharnweber D., Greiner W., Mosel U.* The two-center shell model // Nuclear Physics A. — 1971. — v. 164, iss. 2. — p. 257–278.
14. *Nilsson S. G.* Binding states of individual nucleons in strongly deformed nuclei // Kong. Dan. Vid. Sel. Mat. Fys. Med. — 1955. — v. 29, iss. 16. — p. 1–69.
15. *Gilbert A., Cameron A. G. W.* A composite nuclear-level density formula with shell corrections // Can. J. Phys. — 1965. — v. 43. — p. 1446–1496.
16. *Dilg W., Schantl W., Vonach H., Uhl M.* Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range $40 < A < 250$ // Nuclear Physics A. — 1973. — v. 217, iss. 2. — p. 269–298. — ISSN 0375-9474.

17. *Capote R., Herman M., Obložinský P., Young P., Goriely S., Belgya T., Ignatyuk A., Koning A., Hilaire S., Plujko V., Avrigeanu M., Bersillon O., Chadwick M., Fukahori T., Ge Z., Han Y., Kailas S., Kopecky J., Maslov V., Reffo G., Sin M., Soukhovitskii E., Talou P.* RIPL — Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations // Nuclear Data Sheets. — 2009. — v. 110, iss. 12. — p. 3107–3214.
18. *Гусак А. А., Гусак Г. М., Бречикова Е. А.* Справочник по высшей математике. — Минск : ТетраСистемс, 1999.
19. *Saad N., Hall R. L.* Integrals containing confluent hypergeometric functions with applications to perturbed singular potentials // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 2003. — v. 36, iss. 28. — p. 7771–7788.