

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

УДК 539.17

ОТЧЁТ  
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ  
**ПЛОТНОСТЬ ЯДЕРНЫХ УРОВНЕЙ И  
ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ**

Студент \_\_\_\_\_ Л. Е. Трофимов

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

Москва 2023

# Содержание

<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>1 Моделирование ядерных реакций в программном комплексе TALYS</b>	<b>5</b>
1.1 Метод оценки надёжности вычислений . . . . .	5
1.2 Конференция AYSS-2023 . . . . .	6
<b>2 Эффективное взаимодействие Скирма</b>	<b>6</b>
<b>3 Метод Хартри-Фока</b>	<b>7</b>
3.1 Вычисления при $N = Z$ . . . . .	8
<b>4 Программы для решения уравнений Хартри-Фока</b>	<b>9</b>
4.1 Программа HFVTHO . . . . .	9
4.2 Программа HFODD . . . . .	10
<b>5 Комбинаторный метод вычисления плотности состояний и уровней</b>	<b>10</b>
5.1 Перебор многочастичных состояний для подсистемы . . . . .	10
5.2 Работа алгоритма в одночастичном спектре HFVTHO . . . . .	11
5.2.1 Распределение по энергии . . . . .	12
5.2.2 Распределение по проекциям углового момента . . . . .	12
5.3 Работа алгоритма в одночастичном спектре HFODD . . . . .	13
5.3.1 Распределение по энергиям . . . . .	14
<b>6 Заключение</b>	<b>14</b>
<b>Список использованных источников</b>	<b>14</b>

# Введение

Ядро является системой связанных нуклонов, взаимодействующих посредством ядерных сил. Если нуклонов достаточно много, то они формируют самосогласованный потенциал. Отсюда возникает задача на собственные значения и собственные функции гамильтониана:

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (1)$$

В сформированном потенциале возникают одночастичные состояния, которые характеризуются набором квантовых чисел, получающихся из симметрии самого потенциала. Далее можно сформировать уровни, объединяя состояния с определённым значением квантовых чисел. Так, если ядерная оболочка заполнена, то формируется изотропный потенциал, в котором при решении в сферических координатах одночастичные состояния характеризуются такими числами, как:  $n$  — главное квантовое число,  $l$  — орбитальный момент,  $l_z$  — проекция орбитального момента на ось  $z$ . Также можно ввести полный угловой момент  $\vec{j}$ , равный  $\vec{l} + \vec{s}$  и его проекцию  $j_z$ .

Таким образом, одночастичное состояние в сферическом потенциале можно охарактеризовать следующими величинами:

- Порядковый номер
- Энергия
- Главное квантовое число  $n$
- Значение орбитального момента  $l$
- Значение полного углового момента  $j$
- Проекция полного углового момента  $j_z$
- Чётность  $p$

Набор одночастичных состояний в данном потенциале можно выстроить в порядке увеличения энергии. Это называется одночастичный спектр. Если распределить нуклоны по одночастичным состояниям (подействовать операторами рождения на вакуумное состояние и сформировать волновую функцию протонов или нейтронов), то получится «многочастичное состояние». Далее можно ввести энергию возбуждения как разницу энергий некоторого ядра в возбуждённом состоянии и в основном.

Рассмотрим протекание ядерной реакции  $a + A \rightarrow B^* \rightarrow c + C^*$  через компаунд-ядро (составное ядро)  $B^*$ . При низкой энергии возбуждения существуют дискретные низколежащие уровни ядра, но при увеличении энергии нужно рассматривать квазинепрерывный спектр, то есть плотность уровней  $dN/dE$ .

Тогда возникает вопрос: какова вероятность перехода из одного многочастичного состояния  $B^*$  в некоторое другое  $C^*$  в некотором интервале энергий  $[E - \Delta E, E + \Delta E]$ ? Для ответа на вопрос нужно знать плотность уровней.

В работе [1], посвящённой описанию программного комплекса TALYS, ядерные реакции поясняются рисунком 1. На диаграмме компаунд-ядро находится в правом верхнем углу; далее оно может распасться по различным каналам. TALYS позволяет рассчитывать сечения реакций с энергиями налетающих частиц до 200 МэВ. К преимуществам можно отнести то, что программа бесплатная, у неё открытый исходный код и

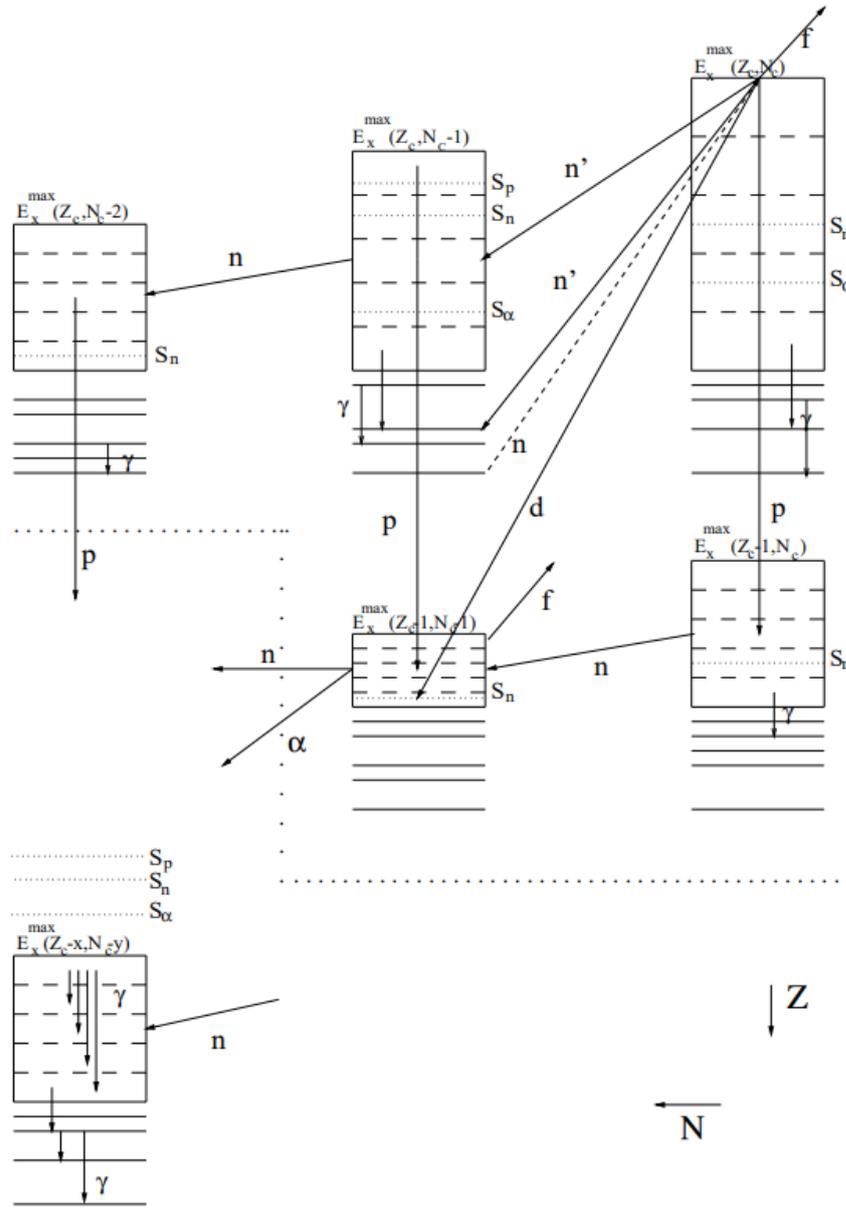


Рисунок 1 — Иллюстрация возможных путей распада [1]

хорошая документация. С помощью этого программного комплекса ранее были получены результаты, на основе которых написана статья в *PEPAN Letters*; на данный момент она принята в печать. Подробнее о результатах будет рассказано в первой главе.

В статье были продемонстрированы сечения реакций с различными моделями плотности ядерных уровней. По полученным зависимостям можно судить, что одним из ключевых моментов в моделировании ядерных реакций является плотность уровней. Бакалаврская дипломная работа была посвящена, в частности, этой проблеме: был разработан алгоритм, основанный на комбинаторном переборе всех многочастичных состояний, удовлетворяющих ограничению на энергию возбуждения. Он позволяет получить распределения  $dN/dE$ ,  $dN/dJ_z$  и  $dN/dJ$ , зная информацию об одночастичном спектре.

В этом семестре была проведена работа по ознакомлению с программной стороной оценки плотности ядерных уровней, с методом Хартри-Фока, в частности, с взаимодействием Скирма. Данный метод позволяет получить одночастичный спектр в самоогласованном поле, который далее будет обработан написанной ранее программой для получения различных распределений плотности уровней.

Но помимо численного подсчёта плотности уровней существует ещё аналитический подход. Одной из самых простых моделей является ферми-газ [2], то есть модель невзаимодействующих частиц. Также есть феноменологические модификации: ферми-газ с обратным смещением [3] и модель Гильберта-Камерона [4] и сверхтекучая модель, которая хорошо описана в работах [5, 6]. Вывод аналитической формулы для модели ферми-газа, основанный на работах [2, 5, 6, 7], был воспроизведён в предыдущем семестре.

# 1 Моделирование ядерных реакций в программном комплексе TALYS

TALYS — программный комплекс с открытым кодом, 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) [6], который Talys использует по-умолчанию. Ранее было проведено моделирование реакции  $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58\text{m}}\text{Co}$ .

Эта реакция интересна тем, что она является одной из тех, которые изучались в недавних экспериментах [8], выполненных в НИЦ “Курчатовский институт” при энергии падающих нейтронов, близкой к 14 МэВ. Данные реакции протекают в конструкционных материалах установок, в которых в процессе  $d+t \rightarrow \alpha+n$  рождаются термоядерные нейтроны.

Указанная реакция идёт с образованием компаунд-ядра, поэтому плотности уровней существенно влияют на сечения. Talys позволяет использовать 6 моделей плотности уровней, первые три являются аналитическими: модель Гильберта-Камерона (модель 1), модель ферми-газа с обратным смещением (модель 2) и сверхтекучая модель, основанная на представлении о сверхтекучем ядре при малых энергиях возбуждения (модель 3). В моделях 4–6 Talys используются числовые файлы, полученные в различных комбинаторных расчётах, однако надёжность этих моделей не выше, чем моделей 1–3. В данной работе получены сечения образования изомерных и основных состояний ядер в указанной реакции. Выполнено сравнение этих результатов с оценками из библиотек TENDL-2021, IRDFF-II, а также EXFOR, т.е. с экспериментальными данными.

## 1.1 Метод оценки надёжности вычислений

Для реакции  $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58\text{m}}\text{Co}$  вычислялись сечения  $\sigma_1(E)$ ,  $\sigma_2(E)$ ,  $\sigma_3(E)$  образования состояний конечного ядра для моделей 1–3 плотности уровней в интервале энергий падающих нейтронов от нуля до 20 МэВ. При сравнении результатов вычислений с оценками и экспериментальными данными было обнаружено, что ни одна модель не имеет преимуществ перед другими. При этом при каждой энергии нейтрона  $E$  максимальное отклонение между любыми двумя моделями

$$\Delta\sigma(E) = \max(|\sigma_1(E) - \sigma_2(E)|, |\sigma_1(E) - \sigma_3(E)|, |\sigma_2(E) - \sigma_3(E)|), \quad (2)$$

в сущности, представляет собой неопределённость теоретического предсказания истинного сечения. Тогда среднее сечение

$$\sigma_{\text{av}}(E) = \frac{\sigma_1(E) + \sigma_2(E) + \sigma_3(E)}{3} \quad (3)$$

можно интерпретировать как наиболее вероятный прогноз. Таким образом, можно построить коридор значений, т.е. две кривые

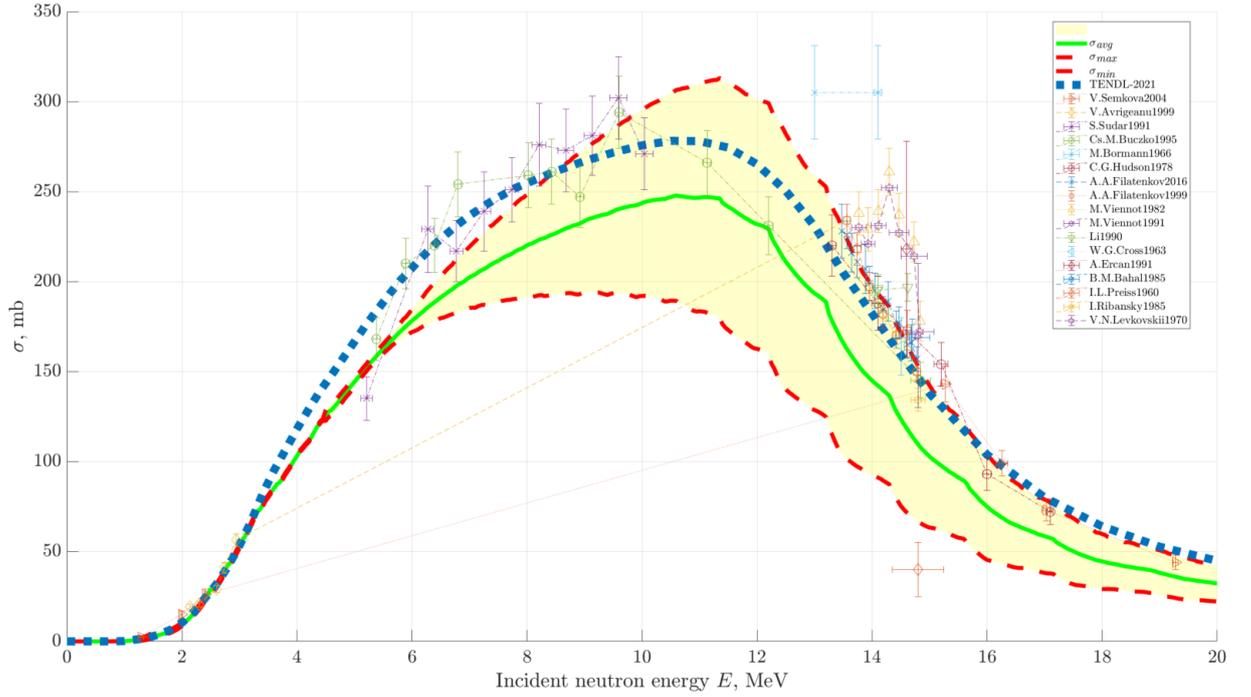


Рисунок 2 — Сечение реакции образования ядра  $^{58}\text{Co}$  в изомерном состоянии. Красные линии — максимальное и минимальное сечения с учётом теоретических ошибок. Жёлтая область между ними — область допустимых значений. Зелёная линия — среднее значение сечения.

$$\sigma_{\max}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) + \Delta\sigma(E), \quad \sigma_{\min}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) - \Delta\sigma(E), \quad (4)$$

между которыми, согласно смоделированным данным, скорее всего, находится истинное значение сечения.

## 1.2 Конференция AYSS-2023

Недавно прошла конференция AYSS-2023 (The XXVII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists), на которой была представлена работа, основанная на реакциях, изучавшихся в НИЦ “Курчатовский институт”:



По результатам конференции было предложено написать статью на соответствующую тему, которая будет опубликована в PEPAN Letters (Physics of Particles and Nuclei Letters). В частности, рисунок 2 был представлен в статье. Область допустимых значений получена из  $\sigma_1(E)$ ,  $\sigma_2(E)$ ,  $\sigma_3(E)$  и отмечена жёлтым цветом.

## 2 Эффективное взаимодействие Скирма

При попытках построения модели взаимодействия нуклонов в ядре возникает ряд трудностей, связанных с реалистичностью взаимодействия. Избежать этого можно, перейдя к предельному случаю, когда взаимодействие происходит в точке. Несмотря на такие упрощения, данный подход позволяет с хорошей точностью предсказывать характеристики одночастичных состояний, в частности, энергий. Такое взаимодействие называется взаимодействием Скирма и может быть записано [9, 10] в виде потенциала

$$\hat{U} = \sum_{i<j} \hat{v}_{ij} + \sum_{i<j<k} \hat{v}_{ijk}, \quad (6)$$

где  $\hat{v}_{ij}$  отвечает двухчастичному взаимодействию, а  $\hat{v}_{ijk}$  — трёхчастичному. При этом в обоих слагаемых полагается предельный случай близкогодействия, то есть  $\hat{v}_{ij} \sim \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ ,  $\hat{v}_{ijk} \sim \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\delta(\vec{r}_j - \vec{r}_k)$  в координатном представлении. В самом простом случае [10] взаимодействие  $\hat{v}_{12}$  может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \hat{v}_{12} = & t_0(1 + x_0\hat{P}_\sigma)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \frac{1}{2}t_1[\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\hat{k}_1^2 + \hat{k}_2^2\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] + \\ & + t_2\hat{k}_2\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \hat{k}_1 + iW_0(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \hat{k}_2 \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\hat{k}_1, \quad (7) \end{aligned}$$

где  $\hat{k}_1$  — оператор  $(\nabla_1 - \nabla_2)/2i$ , действующий на правую часть, а  $\hat{k}_2 = -(\nabla_1 - \nabla_2)/2i$  — на левую часть.  $t_0$  отвечает за вклад «прямого» взаимодействия.  $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$  — спин-обменный оператор, за вклад которого отвечает  $x_0$ . Термы с параметрами  $t_1$  и  $t_2$  зависят от импульса частиц, а терм с  $W_0$  является спин-орбитальным слагаемым.

Для трёхчастичного взаимодействия также полагается близкогодействие:

$$\hat{v}_{123} = t_3\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3). \quad (8)$$

### 3 Метод Хартри-Фока

Метод Хартри-Фока является вариационным методом и заключается в нахождении волновой функции  $|\Psi\rangle$  и потенциала  $V$  из условия

$$\delta \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \longrightarrow \min, \quad (9)$$

что эквивалентно решению уравнения Шрёдингера. Рассмотрим ядро в основном состоянии. Для учёта тождественности начальная волновая функция  $N$  частиц берётся в виде слэтеровского детерминанта

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \dots & \psi_1(x_N) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \dots & \psi_2(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(x_1) & \psi_N(x_2) & \dots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix} = \langle x_1 | \dots | x_N | \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\substack{ij\dots \\ N}} \varepsilon_{ij\dots} \underbrace{|i\rangle \dots |j\rangle}_{N} \dots, \quad (10)$$

где  $\varepsilon_{ij\dots}$  — абсолютно антисимметричный тензор,  $|i\rangle \equiv |\psi_i\rangle$ . Тогда полную энергию ядра можно выразить как

$$\begin{aligned} E = \langle \Psi, (\hat{T} + \hat{U})\Psi \rangle = & \sum_i \left\langle i \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| i \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | \hat{v}_{12} | ij \rangle + \\ & + \frac{1}{6} \sum_{ijk} \langle ijk | \hat{v}_{123} | ijk \rangle = \int H(\vec{r}) d^3r, \quad (11) \end{aligned}$$

где  $\bar{v}$  — антисимметризованный матричный элемент, а  $H(\vec{r})$  — плотность энергии, зависящая от плотности ядерной материи  $\rho_n$  ( $\rho_p$ ), кинетической энергии  $\tau_n$  ( $\tau_p$ ) и плотности спинов  $\vec{J}_n$  ( $\vec{J}_p$ ):

$$\rho_q(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\psi_i(\vec{r},\sigma,q)|^2 \quad (12)$$

$$\tau_q(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla \psi_i(\vec{r},\sigma,q)|^2 \quad (13)$$

$$\vec{J}_q(\vec{r}) = (-i) \sum_{i,\sigma,\sigma'} \psi_i^*(\vec{r},\sigma,q) [\nabla \psi_i(\vec{r},\sigma',q) \times \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle]. \quad (14)$$

Здесь буква  $q$  соответствует протонам  $q \rightarrow p$  или нейтронам  $q \rightarrow n$ .

### 3.1 Вычисления при $N = Z$

Явный вид  $H(\vec{r})$  был получен в [10]. Однако вычисление с таким  $H(\vec{r})$  затруднительно, поэтому в качестве первого шага мы ограничимся ядрами с  $N = Z$ . Тогда плотность энергии упростится до

$$H(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \tau + \frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^3 + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho \tau + \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) (\nabla \rho)^2 - \frac{3}{4} W_0 \rho \nabla \cdot \vec{J}. \quad (15)$$

Далее для получения уравнений Хартри-Фока на энергии и волновые функции одночастичных состояний нужно проварьировать одночастичные волновые функции  $\psi_i$ . Полную энергию  $E$  при вариации мы положили постоянной:

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i} \left( E - \sum_i \varepsilon_i \int |\psi_i(\vec{r})|^2 d^3 r \right) = \frac{\delta}{\delta \psi_i} \int \left( H(\vec{r}) - \sum_i \varepsilon_i |\psi_i|^2 \right) d^3 r = 0. \quad (16)$$

Отсюда, зная  $H(\vec{r})$ , можно получить локальное уравнение Шрёдингера

$$\left[ -\nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\vec{r})} \nabla + U_q(\vec{r}) + \vec{W}_q(\vec{r}) \cdot (-i)(\nabla \times \vec{\sigma}) \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_i, \quad (17)$$

где вводятся эффективная масса  $m_q^*(\vec{r})$ , потенциал  $U_q(\vec{r})$  и одночастичный спин-орбитальный потенциал  $\vec{W}$ . В модели с  $N = Z$  указанные параметры уравнения упрощаются:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*(\vec{r})} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho(\vec{r}), \quad (18)$$

$$U(\vec{r}) = \frac{3}{4} t_0 \rho + \frac{3}{16} t_3 \rho^2 + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \tau + \frac{1}{32} (5t_2 - 9t_1) \nabla^2 \rho - \frac{3}{2} W_0 \nabla \cdot \vec{J}, \quad (19)$$

$$\vec{W}(\vec{r}) = \frac{3}{4} W_0 \nabla \rho + \frac{1}{16} (t_1 - t_2) \vec{J}. \quad (20)$$

Далее, численно решая эту систему нелинейных дифференциальных уравнений, можно получить искомые параметры задачи.

Однако как описано в [11], метод Хартри-Фока подразумевает решение нелинейных дифференциальных уравнений. Это означает, что самосогласованный потенциал зависит не только от исходного гамильтониана, но ещё и от решения. Поэтому потенциал не обязательно наследует симметрии гамильтониана. Тогда происходит нарушение симметрии (например, вращательной симметрии или сохранение числа частиц). Далее надо производить такую процедуру, как восстановление нарушенных симметрий. На данный момент не все современные программы производят это восстановление.

## 4 Программы для решения уравнений Хартри-Фока

На методе Хартри-Фока со скирмовскими взаимодействиями основано несколько программ с открытым исходным кодом. Они позволяют получить данные об одночастичных состояниях, в частности, энергии, проекции угловых моментов и чётности.

### 4.1 Программа HFVTHO

Одна из таких программ — HFVTHO. Название программы означает Hartree-Fock-Vogolubov Transformed Harmonic Oscillator. Все версии программы [12, 13, 14] имеют одну особенность — работа производится в цилиндрических координатах, поскольку исходно предполагается деформация ядра вдоль оси  $z$ . Но HFVTHO также можно применить для решения задачи в сферических ядрах, т.е. ядрах с заполненными оболочками.

В работе [10] были рассмотрены, в частности, сферические ядра  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ , а также получены энергии одночастичных состояний. Далее будут продемонстрированы результаты расчётов в программе HFVTHO, где производится сравнение результатов.

	Нейтроны		Протоны	
	Расчёты [10]	HFVTHO	Расчёты [10]	HFVTHO
$1s_{1/2}$	-32.96	-33.32	-28.76	-29.74
$1p_{3/2}$	-20.81	-19.90	-16.77	-16.48
$1p_{1/2}$	-13.84	-13.56	-9.94	-10.25
$1d_{5/2}$	-8.16	-7.29	-4.33	-4.07
$2s_{1/2}$	-3.27	-4.08		

Таблица 1 — Энергии уровней в МэВ для ядра  $^{16}\text{O}$ . Двойной чертой отмечен уровень Ферми.

	Нейтроны		Протоны	
	Расчёты [10]	HFVTHO	Расчёты [10]	HFVTHO
$1s_{1/2}$	-41.04	-43.82	-32.84	-36.32
$1p_{3/2}$	-32.17	-32.68	-24.18	-25.38
$1p_{1/2}$	-28.44	-28.57	-20.51	-21.37
$1d_{5/2}$	-22.16	-21.35	-14.37	-14.30
$2s_{1/2}$	-15.67	-16.65	-7.88	-9.64
$1d_{3/2}$	-14.95	-14.29	-7.31	-7.43
$1f_{7/2}$	-11.25	-10.01	-3.69	-3.23
$2p_{3/2}$	-4.46	-5.63		
$2p_{1/2}$	-2.37	-3.13		
$2f_{5/2}$	-1.23	-1.11		

Таблица 2 — Энергии уровней в МэВ для ядра  $^{40}\text{Ca}$ . Двойной чертой отмечен уровень Ферми.

Помимо энергий одночастичных состояний HFVTHO выдаёт также проекции  $j_z$  и чётности  $p$ , которые далее можно использовать для получения различных распределений.

## 4.2 Программа HFODD

Данная программа [15] имеет ряд особенностей, отличающих её от HFVТНО. Главное отличие — при решении методом Хартри-Фока полагается нарушение  $T$ -симметрии. Благодаря этому есть возможность рассматривать ядра с нечётным количеством нейтронов или протонов, а также снимаются все вырождения по энергиям одночастичных состояний. Как будет показано далее, при таком подходе плотность многочастичных состояний становится более плавной, однако становится проблематичным построение распределений по проекции углового момента.

## 5 Комбинаторный метод вычисления плотности состояний и уровней

Данный метод был разработан для модели независимых частиц. Он позволяет вычислять распределения по энергии, проекции углового момента и полному угловому моменту ядра, зная только лишь одночастичный спектр.

Однако если из заполненной сферической оболочки перенести нуклон с энергией  $\varepsilon_1$  на другое одночастичное состояние с энергией  $\varepsilon_2$ , то энергия возбуждения, вообще говоря, не будет равна разнице энергий  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_1$ . Дело в том, что возбуждённое состояние ядра будет описываться другой волновой функцией (10), и сформируется некоторый другой самосогласованный потенциал с новыми собственными значениями и функциями. В данном алгоритме эти поправки не учитываются. Возможно, это будет реализовано в будущем.

В модели независимых частиц 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 задаётся числами заполнения  $\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, \dots\}$ . В некотором многочастичном состоянии  $|i\rangle$  можно найти число нуклонов  $N_i$ , их полную энергию  $E_i$  и полную проекцию  $M_i$  углового момента на ось  $z$ , зная числа заполнения  $n_i$  — набор из нулей и единиц,  $\varepsilon_i$  и  $m_i$  — энергии и проекции углового момента одночастичных состояний:

$$N_i = \sum_j n_i(j), \quad (21)$$

$$E_i = \sum_j \varepsilon_j(i) n_j(i), \quad (22)$$

$$M_i = \sum_j m_j(i) n_j(i). \quad (23)$$

Далее будет представлена идея работы алгоритма. Можно выделить несколько основных этапов: во-первых, перебор многочастичных состояний для протонной и нейтронной подсистем независимо. Во-вторых, комбинирование этих распределений  $\Delta N_n(E_n, J_{nz}, P_n)$ ,  $\Delta N_p(E_p, J_{pz}, P_p)$  в одно для всего ядра  $\Delta N(E, J_z, P)$ . В-третьих, можно просуммировать по некоторым переменным для получения других распределений, например, по  $J_z$  и  $P$ , чтобы получить  $\Delta N(E)$ .

### 5.1 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 си-

стему в исходное положение, кроме самой последней частицы — мы перемещаем её из  $(N+1)$  в  $(N+2)$ , а с отстатком проводим ту же самую операцию до тех пор, пока не окажемся в состоянии  $\{0, 1, \dots, \underbrace{1}_N, 0, 1, 0, \dots\}$ . Потом сдвигаем

остаток системы влево кроме  $N$ -й частицы, которая идёт в  $(N+1)$  состояние, и получается  $\{1, 1, \dots, 0, \underbrace{0}_N, 1, 1, 0, \dots\}$ .

Продолжая действовать подобным образом, можно построить итерационный алгоритм, который перебирает абсолютно все многочастичные состояния, которых оказывается ровно  $C_n^k$ ,  $n$  — общее количество свободных и занятых ячеек,  $k$  — количество занятых частицами ячеек. Это схематично изображено на рисунке 3.

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.

В программе можно выбрать энергетическое разрешение  $\Delta U$  В МэВ; это определяет количество диапазонов  $[U, U + \Delta U)$ , в которые могут попасть многочастичные состояния. Но если выбрать  $\Delta U$  слишком маленьким, то появятся скачки плотности энергии, поскольку в одном диапазоне может быть много одночастичных состояний, а в соседнем гораздо меньше. Также отметим, что в программе удобно перейти к целым числам в случае угловых моментов, то есть использовать  $2J_z$  вместо  $J_z$ .

## 5.2 Работа алгоритма в одночастичном спектре HFВТНО

Как было описано ранее, программа HFВТНО позволяет получить данные об одночастичных состояниях путём решения уравнений Хартри-Фока. Отсюда можно извлечь количество возбуждённых многочастичных состояний  $\Delta N$  в некотором интервале энергий  $[U, U + \Delta U)$ , при некоторых проекциях угловых моментов  $J_z$  и чётностях  $P$ . Рассмотрим сферическое ядро  $^{40}\text{Ca}$ , полученное с параметрами по-умолчанию.

Сравнение проводится с аналитической формулой, которая была получена в предыдущих работах:

$$\omega(U, J_z) = \frac{dN(U, J_z)}{dU} = \frac{1}{12\sqrt{2g\langle m^2 \rangle}} \frac{\exp\left(2\sqrt{a\left(U - \frac{J_z^2}{2g\langle m^2 \rangle}\right)}\right)}{\left(U - \frac{J_z^2}{2g\langle m^2 \rangle}\right)^{3/2}}, \quad (24)$$

где  $a = \frac{\pi^2}{6}g$  — параметр плотности уровней,  $\langle m^2 \rangle$  — средний квадрат проекции углового

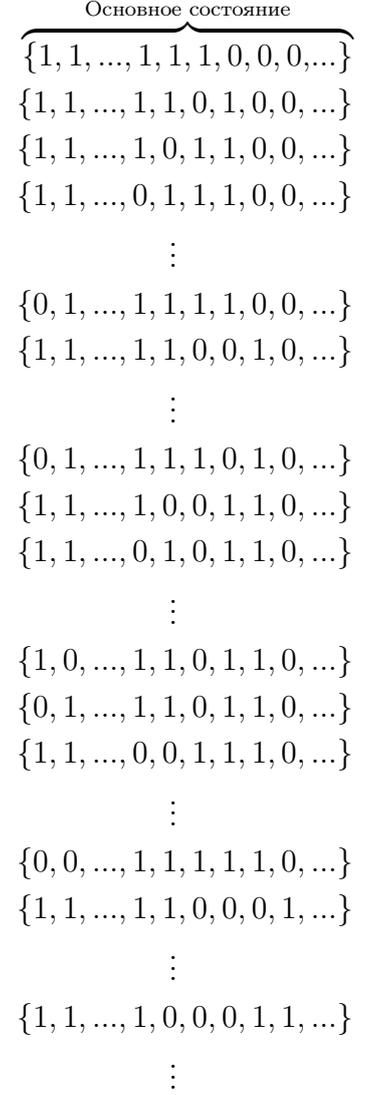


Рисунок 3 — Алгоритм перебора многочастичных состояний без ограничений на энергию

момента, а  $\frac{1}{2g\langle m^2 \rangle}$  для сферического ядра равно  $\frac{\hbar^2 c^2}{\frac{4}{5} mc^2 R^2}$ ,  $R = r_0 A^{1/3}$ .

### 5.2.1 Распределение по энергии

Чтобы получить распределение по энергиям, нужно просуммировать по проекциям  $J_z$  и чётностям  $P$ . Тогда формула (24) сводится к

$$\omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{e^{2\sqrt{aU}}}{a^{1/4} U^{5/4}}. \quad (25)$$

На рисунке 4 для сферического ядра  $^{40}\text{Ca}$  изображена зависимость  $\Delta N(U)$  при одночастичном спектре из HFВТНО, которая сравнивается с зависимостью (25).

Здесь явно заметны скачки по энергиям. Дело в том, что одночастичный спектр получается сильно вырожденным, и сказываются оболочки ядра. Если учесть остаточное взаимодействие, то произойдёт снятие вырождения, и плотность энергии  $dN/dE$  будет более плавно себя вести.

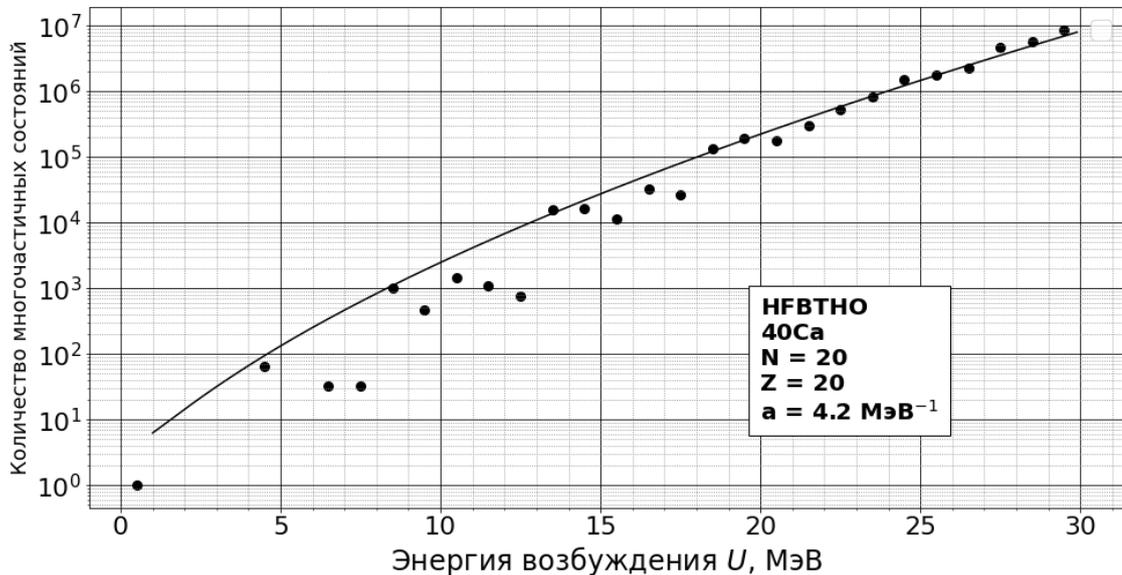


Рисунок 4 — Распределение  $dN/dE$  для ядра  $^{40}\text{Ca}$  при энергии возбуждения до 20 МэВ в программе HFВТНО.

### 5.2.2 Распределение по проекциям углового момента

Распределение  $dN/dJ_z$  представляет из себя количество многочастичных состояний  $\Delta N$  в определённом интервале  $[U, U + \Delta U)$  и с некоторой чётностью  $P$  в зависимости от  $J_z$ . На рисунке 5 представлена данная зависимость.

Синие точки соответствуют отрицательной чётности, красные — положительной. Видно, что при нарастании энергии доминирует то отрицательная чётность, то положительная, а на последнем рисунке они становятся одного порядка. Это означает, что при относительно больших энергиях происходит переход в «классическую» физику, где чётности полагаются равными.

Далее, если просуммировать  $dN/dJ_z$  по чётностям, то можно будет сравнить с аналитической формулой (24) при фиксированной энергии возбуждения  $U$ , что отражено на рисунке 6.

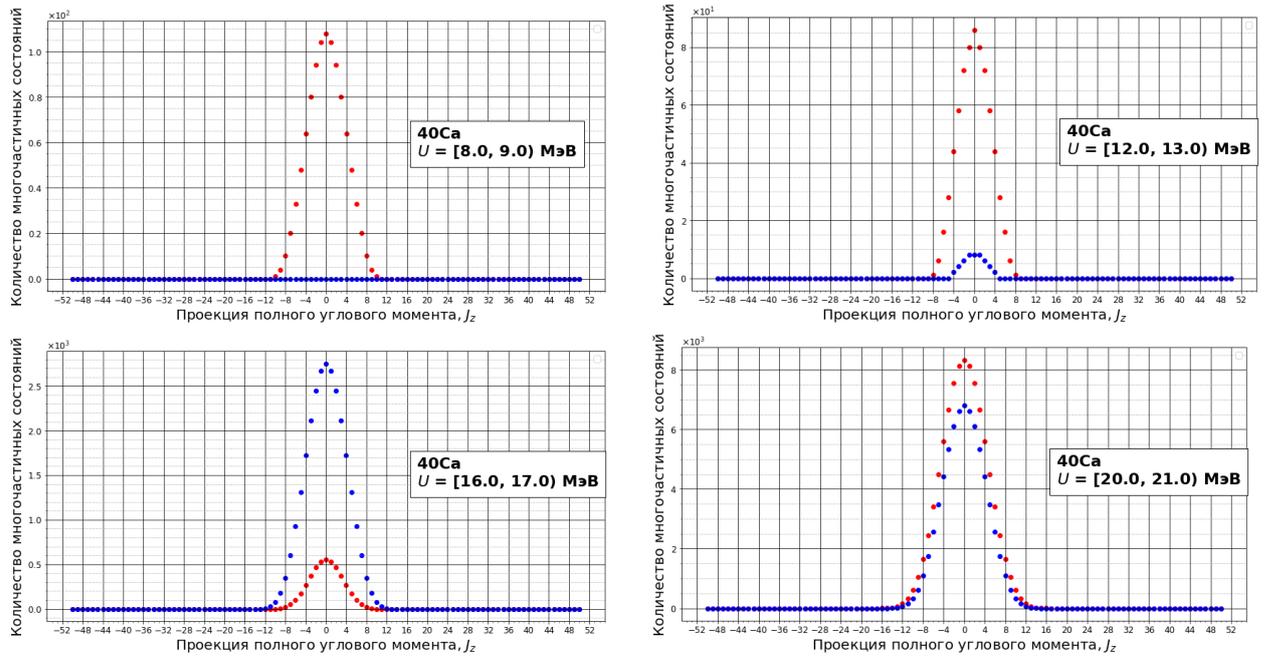


Рисунок 5 — Распределение  $dN/dJ_z$  в определённых интервалах  $[U, U+\Delta U)$  в программе HFVTHO.

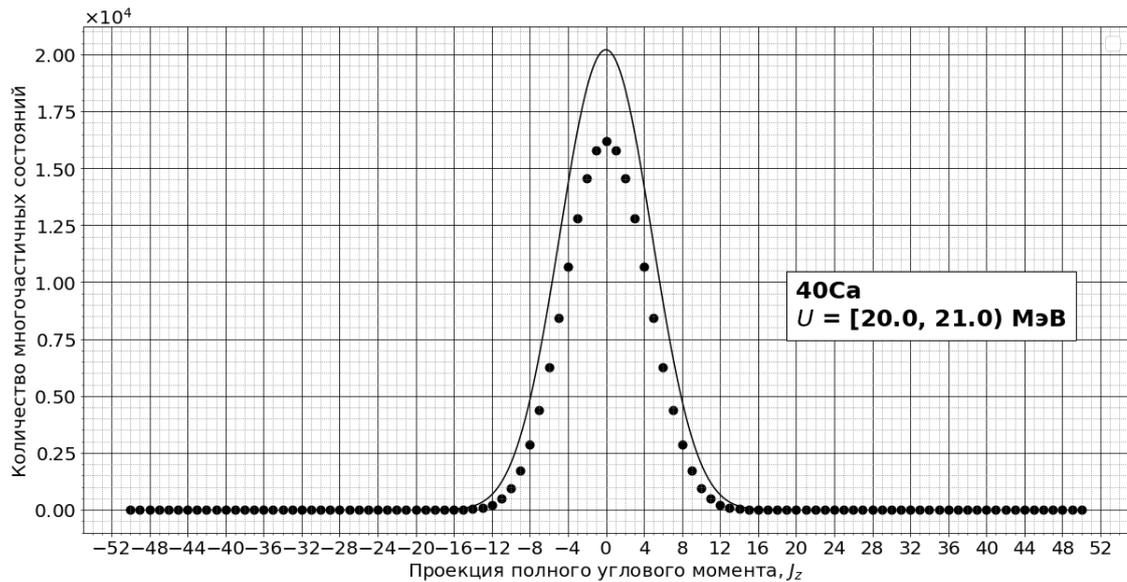


Рисунок 6 — Распределение  $dN/dJ_z$ , просуммированное по чётностям в интервале  $[20, 21)$  МэВ в программе HFVTHO.

### 5.3 Работа алгоритма в одночастичном спектре HFODD

В данной программе имеется некоторое уникальное распределение одночастичных состояний по энергиям и проекциям угловых моментов, отличное от ранее описаной программы HFVTHO. Из-за заложенного в программу нарушения  $T$ -чётности аналогичные состояния с  $+j_z$  и  $-j_z$  имеют различную энергию. Для более глубокого понимания заложенной физики требуются дальнейшие исследования в данном направлении.

Тогда становится затруднительным построение распределений по  $J_z$  и, соответственно, по  $J$ . Однако можно попробовать получить  $dN/dE$ , при котором надо просто просуммировать по всем  $J_z$  и  $P$ .

### 5.3.1 Распределение по энергиям

Примечательно то, что при использовании HFODD получается такой одночастичный спектр, при котором  $dN/dE$  становится довольно плавным (см. рисунок 7), в то время как в HFВТНО заметны большие скачки. Для выяснения причин таких различий требуется дальнейшее изучение методов, на которых основаны программы.

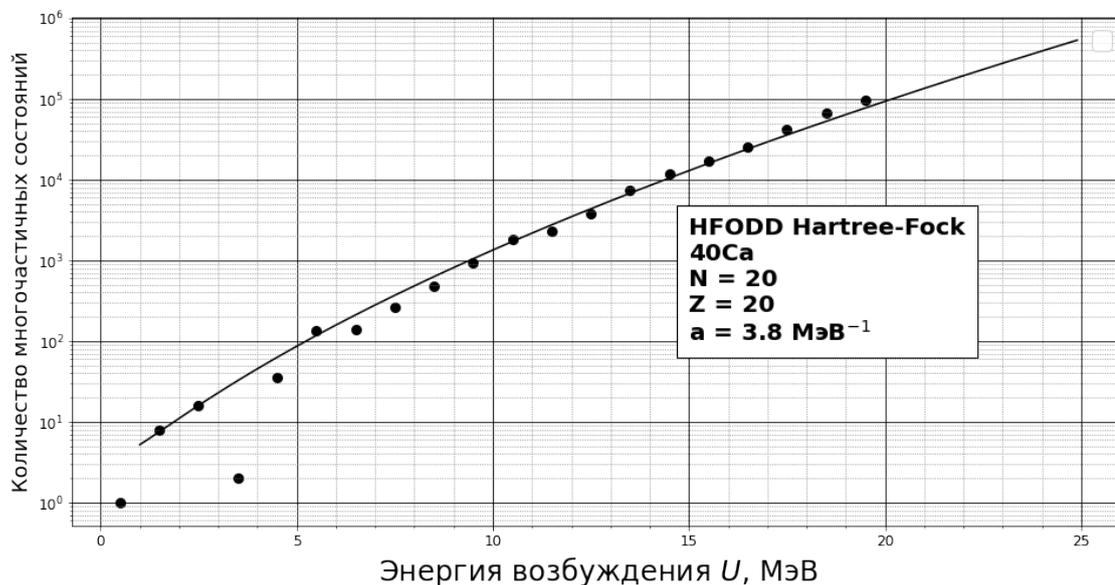


Рисунок 7 — Распределение  $dN/dE$  для ядра  $^{40}\text{Ca}$  при энергии возбуждения до 20 МэВ в программе HFODD.

## 6 Заключение

В данном семестре основной частью работы являлось изучение взаимодействия Скирма, метода Хартри-Фока и Хартри-Фока-Боголюбова. С помощью программы HFВТНО, основанной на этой теории, был получен одночастичный спектр, описывающий энергии, проекции угловых моментов в чётности одночастичных состояний. Данная программа предоставляет обширный выбор параметров. На данном этапе они были выбраны по умолчанию. Есть также программа HFODD, но она имеет несколько особенностей, с которыми ещё предстоит разобраться.

Используя программу, полученную в результате бакалаврской работы, построены распределения многочастичных состояний в зависимости от энергий и проекций угловых моментов.

Также по результатам конференции AYSS-2023 принята в печать статья в ЭЧАЯ (PEPAN Letters).

## Список использованных источников

- [1] Hilaire S. Koning A. *TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual.* 2017.
- [2] Н. А. Бете. «An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus». В: *Phys. Rev.* 50 (4 авг. 1936), с. 332–341. DOI: 10.1103/PhysRev.50.332. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.50.332>.

- [3] W. Dilg и др. «Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range  $40 < A < 250$ ». В: *Nuclear Physics* 217 (1973), с. 269–298. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:121679347>.
- [4] Arnold Gilbert и Alastair Graham Walter Cameron. «A COMPOSITE NUCLEAR-LEVEL DENSITY FORMULA WITH SHELL CORRECTIONS». В: *Canadian Journal of Physics* 43 (1965), с. 1446–1496. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:120720212>.
- [5] Ю.В. Соколов. *Плотность уровней атомных ядер*. Москва: Энергоатом, 1990.
- [6] Roberto Capote и др. «RIPL—reference input parameter library for calculation of nuclear reactions and nuclear data evaluations». В: *Nuclear Data Sheets* 110 (январь 2009), с. 3107–3214.
- [7] О. Бор и Б. Моттelson. *Структура атомного ядра. Том 1. Одночастичное движение*. Мир, 1971.
- [8] Yu Titarenko и др. «Benchmark Experiments for Verification of Nuclear Data Libraries for Designing Fusion Blankets». В: *Fusion Science and Technology* 78 (июнь 2022), с. 1–24. DOI: 10.1080/15361055.2022.2076999.
- [9] P.D. Stevenson и M.C. Barton. «Low-energy heavy-ion reactions and the Skyrme effective interaction». В: *Progress in Particle and Nuclear Physics* 104 (январь 2019), с. 142–164. ISSN: 0146-6410. DOI: 10.1016/j.pnpnp.2018.09.002. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.pnpnp.2018.09.002>.
- [10] D. Vautherin и D. M. Brink. «Hartree-Fock Calculations with Skyrme’s Interaction. I. Spherical Nuclei». В: *Phys. Rev. C* 5 (3 март 1972), с. 626–647. DOI: 10.1103/PhysRevC.5.626. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.5.626>.
- [11] P. Ring и P. Shuck. *The Nuclear Many-Body Problem*. English. New York: Springer-Verlag, 1980. 717 с.
- [12] M.V. Stoitsov и др. «Axially deformed solution of the Skyrme–Hartree–Fock–Bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis. The program HFBTHO (v1.66p)». В: *Computer Physics Communications* 167.1 (апр. 2005), с. 43–63. ISSN: 0010-4655. DOI: 10.1016/j.cpc.2005.01.001. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2005.01.001>.
- [13] M. V. Stoitsov и др. *Axially deformed solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogolyubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (II) HFBTHO v2.00d: a new version of the program*. 2013. arXiv: 1210.1825 [nucl-th].
- [14] Petar Marević и др. «Axially-deformed solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (IV) hfbtho (v4.0): A new version of the program». В: (окт. 2021).
- [15] J Dobaczewski и др. «Solution of universal nonrelativistic nuclear DFT equations in the Cartesian deformed harmonic-oscillator basis. (IX) HFODD (v3.06h): a new version of the program». В: *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* 48.10 (сентябрь 2021), с. 102001. ISSN: 1361-6471. DOI: 10.1088/1361-6471/ac0a82. URL: <http://dx.doi.org/10.1088/1361-6471/ac0a82>.