

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

ОТЧЁТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЯДЕР И
ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

Студент

_____ Д. А. Ситьков

Научный руководитель,

д.ф.-м.н., доц.

_____ А. Л. Барабанов

Москва 2024

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
1 Уравнения Хартри-Фока	5
1.1 Плотностно-независимые силы	5
1.2 Силы Сكيرма	6
2 Схема БКШ: парные корреляции	9
2.1 Представление чисел заполнений	9
2.2 Волновая функция	11
2.3 Короткодействующий парный потенциал	12
2.3.1 Уравнение для $\Delta = \Delta_0$ в основном состоянии системы	16
3 Численные расчёты	17
3.1 Цепочка изотопов кислорода	18
3.2 Цепочка изотопов никеля	19
Заключение	20
Список использованных источников	21

ВВЕДЕНИЕ

Давно было понятно, что среднее поле, в котором находятся нуклоны в атомных ядрах, должно получаться из приближений типа Хартри-Фока [1]. Существуют разные аппроксимации нуклон-нуклонного взаимодействия, которые включают в себя довольно сложные и долгие расчёты. Этим объясняется надобность в другом подходе, а именно в расчётах с помощью метода Хартри-Фока, использующего некоторые вводимые эффективные взаимодействия. Данный подход, хотя и не является фундаментальным, позволяет производить вычисления там, где более реалистичные вычисления не представляются возможными. Также этот подход даёт возможность производить исследования с наименьшими трудозатратами.

В данной работе рассматривается метод Хартри-Фока, использующий параметризацию эффективных сил. Такие силы могут быть: 1) плотностно-независимыми [2–4], расчёты с которыми обычно испытывают трудности при описании радиусов ядер или же полных энергий связи, и всегда плохо описывают плотности одночастичных состояний тяжёлых ядер; 2) плотностно-зависимыми, которые в наименьшей степени испытывают перечисленные выше трудности. К взаимодействиям последнего типа относятся силы Скирма [5].

Однако в ядрах наблюдается ряд важных свойств, которые нельзя описать в рамках метода Хартри-Фока [6]. Например, наблюдается *чётно-нечётный эффект*. Он заключается в том, что энергия связи чётно-нечётного ядра оказывается меньше, чем среднее арифметическое энергий связи двух соседних чётно-чётных ядер. Отсюда, вытекает соотношение для масс соседних ядер: $M_{A_{\text{неч}}} > (M_{A-1} + M_{A+1})/2$. Для понимания этого и других феноменов необходимо учитывать корреляции, вызванные остаточной частью нуклон-нуклонного взаимодействия.

Наблюдения о том, что чётно-чётные ядра в основном состоянии имеют спин $I_0 = 0$, а спин чётно-нечётных ядер определяется угловым моментом нечётного нуклона привели М. Гёшперт-Майер [7] к предположению, что для *короткодействующих, притягивающих, двух-нуклонных сил* спаривание двух нуклонов на оболочке данного момента j к паре с моментом $I = 0$ является более энергетически выгодным среди всех других возможных конфигураций. Для ядер с незаполненной последней оболочкой наиболее энергетически выгодна будет конфигурация, в которой все нуклоны (кроме последнего в случае чётно-нечётного ядра) парно скоррелированы. Таким образом, для возбуждения чётно-чётного ядра нужно будет разорвать хотя бы одну пару, а для чётно-нечётного ядра будет достаточно возбудить неспаренный нуклон.

Такое парное взаимодействие не может рассматриваться как некоторый вклад

в статический средний потенциал типа потенциала Хартри-Фока. Это эффект другой природы, который даёт начало так называемому парному потенциалу. Данный эффект аналогичен эффекту сверхпроводимости в металлах, теория которого была разработана Бардином, Купером и Шриффером (БКШ) [8], методы которой можно применить и при исследовании ядер [9].

В данной работе рассматривается подход Хартри-Фока со средним потенциалом, в котором находятся нуклоны внутри ядра, с последующим учётом парных корреляций путём наложения схемы БКШ. На данной стадии работы мы рассматривали чётно-чётные ядра в приближении сферической симметрии в случае короткодействующего (чистого) парного потенциала.

1 УРАВНЕНИЯ ХАРТРИ-ФОКА

1.1 ПЛОТНОСТНО-НЕЗАВИСИМЫЕ СИЛЫ

Дан гамильтониан системы из N частиц, включающий в себя потенциалы для одной частицы (например, оператор кинетической энергии) и взаимодействия двух частиц

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{v}_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \hat{v}_{ij}. \quad (1.1)$$

Многочастичная (фермионная) волновая функция представляется в виде определителя Слетера

$$\Psi_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \vdots & \psi_1(x_N) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \vdots & \psi_2(x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(x_1) & \psi_N(x_2) & \vdots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}, \quad (1.2)$$

где $\psi_i(x_j) = \phi_i(\mathbf{r}_j)\chi_i(\sigma_j)$ — ортонормированные одночастичные волновые функции, состоящие из координатной и спиновой частей. Идея метода заключается в поиске таких одночастичных функций, что матричный элемент $\langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle$ будет принимать на них минимум. Этот матричный элемент можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle &= \sum_k \langle \psi_k | \hat{v}_k | \psi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_l \psi_k | \hat{v}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_k \psi_l | \hat{v}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle \equiv \\ &\equiv \sum_k \langle \psi_k | \hat{v}_k | \psi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_l \psi_k | \hat{\tilde{v}}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle, \end{aligned} \quad (1.3)$$

где \tilde{v} обозначает антисимметризованный матричный элемент.

Пусть известны все одночастичные волновые функции, кроме $|\psi_i\rangle$. Тогда требование минимальности соотношения (1.3) определит эту функцию:

$$\langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle = \langle \psi_i | \hat{v}_i | \psi_i \rangle + \sum_{j \neq i} \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_j \psi_i \rangle - \sum_{j \neq i} \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_i \psi_j \rangle + \text{const} \rightarrow \min_{|\psi_i\rangle}. \quad (1.4)$$

Согласно вариационному принципу задача (1.4) эквивалентна задаче Шрёдингера

$$\hat{v}_i \psi_i(x_i) + \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_j \rangle \psi_i(x_i) - \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_i \rangle \psi_j(x_i) = \varepsilon_i^{\min} \psi_i(x_i), \quad (1.5)$$

что и будет являться системой нелинейных интегро-дифференциальных уравнений Хартри-Фока на волновые функции ψ_i и энергии ε_i^{\min} .

1.2 СИЛЫ СКИРМА

В своём первоначальном [10] виде взаимодействие Скирма записывается как потенциал

$$V = \sum_{i < j} v_{ij} + \sum_{i < j < k} v_{ijk}, \quad (1.6)$$

где v_{ij} — двухчастичный, а v_{ijk} — трёхчастичный потенциалы.

Двухчастичный потенциал берётся в виде короткодействующего взаимодействия:

$$v_{12} = t_0(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{1}{2} t_1 [\delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k}^2 + (\mathbf{k}')^2 \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] + \quad (1.7) \\ + t_2(\mathbf{k}', \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k}) + i W_0(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2, (\mathbf{k}' \times \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k})),$$

где $\mathbf{k} = (\nabla_1 - \nabla_2)/2i$ — оператор относительного импульса двух нуклонов, действующий направо; $\mathbf{k}' = -(\nabla_1 - \nabla_2)/2i$ — оператор, действующий налево; $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2))$ — спин-обменный оператор.

Трёхчастичный потенциал также представляется как короткодействующая сила:

$$v_{123} = t_3 \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta^{(3)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3). \quad (1.8)$$

Для вычислений в рамках уравнений Хартри-Фока для чётно-чётных ядер данный потенциал равносильен двухчастичному плотностно-зависимому взаимодействию

$$v_{12} = \frac{1}{6} t_3 (1 + \hat{P}_\sigma) \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho\left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right). \quad (1.9)$$

Параметры t_0, t_1, t_2, t_3, x_0 и W_0 подбираются такими, чтобы удовлетворить экспериментально найденным энергиям связи и радиусам ядер.

Основное состояние ядра с массовым числом A также описывается определителем Слетера ϕ на одночастичных состояниях ϕ_i :

$$\phi(x_1, x_2, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det\{\phi_i(x_j)\}, \quad \phi_i(x_j) \equiv \langle x_j | i \rangle, \quad (1.10)$$

где координата $x = \{\mathbf{r}, \sigma, q\}$ — набор пространственных, спиновых и изоспиновых ($q = +1/2$

для протонов, $q = -1/2$ для нейтронов) координат.

Энергия такого состояния

$$\begin{aligned}
E &= \langle \phi | (T + V) \phi \rangle = \sum_i \left\langle i \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right| i \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle ij | \tilde{v}_{12} | ij \rangle + \frac{1}{6} \sum_{i \neq j \neq k} \langle ijk | \tilde{v}_{123} | ijk \rangle = \\
&= \int \mathcal{H}(\mathbf{r}) d^3r.
\end{aligned} \tag{1.11}$$

Для скирмовских сил плотность энергии $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ зависит от нуклонных плотностей ρ_n и ρ_p , плотностей кинетических энергий τ_n и τ_p и спиновых плотностей \mathbf{J}_n и \mathbf{J}_p . Эти величины, в свою очередь, зависят от одночастичных состояний ϕ_i :

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2, \tag{1.12}$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla \phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2, \tag{1.13}$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = (-i) \sum_{i,\sigma,\sigma'} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) (\nabla \phi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \times \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle). \tag{1.14}$$

Для чётно-чётных ядер плотность энергии принимает вид [1]

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} t_0 [(1 + x_0/2) \rho^2 - (x_0 + 1/2) (\rho_n^2 + \rho_p^2)] + \frac{1}{4} (t_1 + t_2) \rho \tau + \\
&+ \frac{1}{8} (t_2 - t_1) (\rho_n \tau_n + \rho_p \tau_p) + \frac{1}{16} (t_2 - 3t_1) \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{32} (3t_1 + t_2) (\rho_n \nabla^2 \rho_n + \rho_p \nabla^2 \rho_p) + \\
&+ \frac{1}{16} (t_1 - t_2) (\mathbf{J}_n^2 + \mathbf{J}_p^2) + \frac{1}{4} t_3 \rho_n \rho_p \rho + \mathcal{H}_C(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} W_0 (\rho \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho_n \nabla \cdot \mathbf{J}_n + \rho_p \nabla \cdot \mathbf{J}_p),
\end{aligned} \tag{1.15}$$

где $\rho \equiv \rho_n + \rho_p$, $\tau \equiv \tau_n + \tau_p$ и $\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p$. Прямое кулоновское взаимодействие (пренебрегая обменной частью) $\mathcal{H}_C(\mathbf{r})$ равно $\frac{1}{2} V_C(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r})$, где

$$V_C(\mathbf{r}) = \int \rho_p(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r'. \tag{1.16}$$

Уравнения Хартри-Фока со взаимодействием Скирма получаются из условия минимальности полной энергии E по отношению к вариациям одночастичных состояний ϕ_j с учётом нормировки этих состояний $\int |\phi_j|^2 d^3r = 1$, что производится путём введения множителей Лагранжа e_j :

$$\frac{\delta}{\delta \phi_i} \left(E - \sum_j e_j \int |\phi_j(\mathbf{r})|^2 d^3r \right) = 0. \tag{1.17}$$

Пренебрегая слагаемым $\frac{1}{16}(t_1 - t_2)(\mathbf{J}_n^2 + \mathbf{J}_p^2)$ в (1.15), получим набор уравнений

$$\left[-\left(\nabla, \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \nabla \right) + U_q(\mathbf{r}) + (\mathbf{W}_q(\mathbf{r}), (-i)(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})) \right] \phi_i = e_i \phi_i, \quad (1.18)$$

где индекс q отвечает за заряд одночастичного состояния i . Уравнение (1.18) имеет вид локального уравнения Шрёдингера с эффективной массой $m_q^*(\mathbf{r})$, которая зависит от плотности:

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\rho + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\rho_q. \quad (1.19)$$

Потенциал $U_q(\mathbf{r})$ также зависит от плотности кинетической энергии:

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = & t_0[(1 + x_0/2)\rho - (x_0 + 1/2)\rho_q] + \frac{1}{4}t_3(\rho^2 - \rho_q^2) - \frac{1}{8}(3t_1 - t_2)\nabla^2\rho + \\ & + \frac{1}{16}(3t_1 + t_2)\nabla^2\rho_q + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\tau + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\tau_q - \frac{1}{2}W_0(\nabla \cdot \mathbf{J} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q) + \\ & + \delta_{q,+1/2}V_C(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Форм-фактор $\mathbf{W}_q(\mathbf{r})$ однонуклонного спин-орбитального потенциала даётся выражением

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}W_0(\nabla\rho + \nabla\rho_q) + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\mathbf{J}_q(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

Нелинейные дифференциальные уравнения (1.18) определяют одночастичные функции ϕ_i и энергии e_i этих состояний. В данной работе будет рассматриваться приближение со сферической симметрией, то есть

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, \tau) = \frac{R_{qnlj}(r)}{r} \mathcal{Y}_{ljm}(\mathbf{n}, \sigma) \chi_q(\tau), \quad (1.22)$$

где

$$\mathcal{Y}_{ljm}(\mathbf{n}, \sigma) = \sum_{m_l m_s} \langle l \frac{1}{2} m_l m_s | jm \rangle Y_{l m_l}(\mathbf{n}) \chi_{m_s}(\sigma), \quad (1.23)$$

а индекс i обозначает следующий набор квантовых чисел: проекция изоспина q , главное квантовое число n , орбитальный угловой момент l , полный угловой момент j и проекцию полного углового момента m .

2 СХЕМА БКШ: ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ

2.1 ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЙ

Пусть нам дан полный ортонормированный набор одночастичных состояний $|\nu\rangle$. В координатном представлении:

$$\psi_\nu(x_i) \equiv \langle x_i | \nu \rangle = \langle \mathbf{r}_i, \sigma_i | \nu \rangle = \psi_\nu(\mathbf{r}_i, \sigma_i). \quad (2.1)$$

На основе этих функций можно составить набор абсолютно антисимметричных N -частичных волновых функций

$$\Phi_{\nu_1\nu_2\dots\nu_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1}^N \cdots \sum_{i_N=1}^N \epsilon_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{\nu_1}(x_{i_1}) \psi_{\nu_2}(x_{i_2}) \cdots \psi_{\nu_N}(x_{i_N}), \quad (2.2)$$

где $\epsilon_{i_1 i_2 \dots i_N}$ — абсолютно антисимметричный тензор ранга N .

Любую антисимметричную N -частичную волновую функцию можно разложить по этим волновым функциям:

$$\Psi_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{\nu_1\nu_2\dots\nu_N} C_{\nu_1\nu_2\dots\nu_N} \Phi_{\nu_1\nu_2\dots\nu_N}(x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (2.3)$$

Многочастичную волновую функцию (2.2) можно характеризовать набором чисел заполнения $\{n_\nu\}$, который показывает сколько раз определённое одночастичное состояние $|\nu\rangle$ встречается в этом многочастичном состоянии $(\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N)$ ¹⁾. Для фермионов, очевидно, n_ν может принимать значения, равные 0 или 1. Следовательно, $\sum_\nu n_\nu = N$.

Так, волновые функции $\Phi_{\nu_1\nu_2\dots\nu_N} \equiv \Phi_{\{n_\nu\}}$ соответствуют базисным состояниям $|n_1, n_2, \dots\rangle$ в функциональном гильбертовом пространстве, которое содержит вакуумное состояние, всевозможные одночастичные состояния, всевозможные антисимметричные двухчастичные состояния и так далее. Причём,

$$\Phi_{\{n_\nu\}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \langle x_1, x_2, \dots, x_N | n_1, n_2, \dots \rangle. \quad (2.4)$$

¹⁾После какого-то состояния все числа заполнения будут равны 0, так как рассматриваем конечное количество частиц в системе.

Эти состояния ортонормированы:

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_\nu, \dots | n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \cdots \delta_{n_\nu n'_\nu} \cdots \quad (2.5)$$

Обыкновенным образом вводятся операторы уничтожения и рождения

$$\hat{a}_\nu |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle, \quad \hat{a}_\nu |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = 0, \quad (2.6)$$

$$\hat{a}_\nu^\dagger |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle, \quad \hat{a}_\nu^\dagger |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = 0, \quad (2.7)$$

которые подчиняются антикоммутиационным соотношениям

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu^\dagger\} = \delta_{\mu\nu}, \quad (2.8)$$

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu\} = 0, \quad \{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\nu^\dagger\} = 0. \quad (2.9)$$

Можно показать [6], что в представлении чисел заполнения любой аддитивный *одночастичный* оператор $\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}_i$ можно представить в виде

$$\hat{F} = \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'}, \quad (2.10)$$

где $f_{\nu\nu'} = \langle \nu | \hat{f} | \nu' \rangle$.

Например, кинетическая энергия N -частичной системы

$$\hat{T} = \sum_i \hat{t}_i \equiv \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad (2.11)$$

представится в виде

$$\hat{T} = \sum_{\nu\nu'} \sum_x \psi_\nu^\dagger(x) \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi_{\nu'}(x) \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \equiv \sum_{\nu\nu'} e_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'}, \quad (2.12)$$

где принято обозначение $\sum_x \equiv \sum_\sigma \int d^3r$.

Аналогичный вид можно придать и *двучастичному* оператору $\hat{V} = \sum_{i<j=1}^N \hat{v}_{ij}$ системы, а именно

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} v_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'} = \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'}, \quad (2.13)$$

где $\tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} = \langle \mu\nu | v | \mu'\nu' \rangle - \langle \mu\nu | v | \nu'\mu' \rangle$ — антисимметризованный матричный элемент.

Так, многочастичная система из фермионов может быть описана гамильтонианом в общем виде

$$H = \hat{F} + \hat{V} = \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'}. \quad (2.14)$$

2.2 ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Аналогично методу Хартри-Фока, в схеме БКШ для учёта парных корреляций важно задать вид многочастичной волновой функции основного состояния ядра. Для *чётно-чётного* ядра оно задаётся в виде

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle, \quad (2.15)$$

где $|0\rangle$ — вакуум по частицам, а u_k и v_k — вариационные параметры, смысл которых будет установлен позже. В произведении участвует только лишь половина доступных состояний нуклонов, что обозначено индексом $k > 0$. Для каждого нуклонного состояния $k > 0$ существует «сопряжённое» состояние $\bar{k} < 0$. Все пары состояний $\{k, \bar{k}\}$ составляют полное одночастичное пространство. Например, для сферического базиса

$$|k\rangle = |nljm\rangle, \quad |\bar{k}\rangle = |nlj-m\rangle, \quad m > 0. \quad (2.16)$$

Рассмотрим анзац (2.15) для, например, четырёх доступных нуклонных состояниях: 2 состояния $|k\rangle$ и 2 состояния $|\bar{k}\rangle$. Тогда

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= \prod_{k=1}^2 (u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle = (u_1 + v_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{\bar{1}}^\dagger) (u_2 + v_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_{\bar{2}}^\dagger) |0\rangle = \\ &= (u_1 u_2 + u_1 v_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_{\bar{2}}^\dagger + u_2 v_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{\bar{1}}^\dagger + v_1 v_2 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{\bar{1}}^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_{\bar{2}}^\dagger) |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Видно, что выбранный для основного состояния анзац описывает суперпозицию состояний, в которых нуклоны в различных состояниях либо отсутствуют, либо присутствуют в парах $\{k, \bar{k}\}$.

Условие нормировки состояния $|\Psi_0\rangle$ в общем виде запишется как

$$\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = \prod_{k>0} (u_k^2 + v_k^2) = 1. \quad (2.18)$$

Для коэффициентов u_k и v_k потребуем

$$u_k^2 + v_k^2 \equiv 1. \quad (2.19)$$

Введём операторы *заселённости* состояний $|k\rangle$ и $|\bar{k}\rangle$ соответственно:

$$\hat{n}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad \hat{n}_{\bar{k}} \equiv \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}. \quad (2.20)$$

По определению они совпадают с операторами количества частиц в состояниях $|k\rangle$ и

$|\bar{k}\rangle$, присутствующих в произвольном состоянии $|\Psi\rangle$. Так, для анзаца $|\Psi_0\rangle$ получим

$$n_k \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}_k | \Psi_0 \rangle = v_k^2, \quad (2.21a)$$

$$n_{\bar{k}} \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}_{\bar{k}} | \Psi_0 \rangle = v_{\bar{k}}^2. \quad (2.21b)$$

Отсюда, вместе с условием (2.19), можно установить смысл коэффициентов u_k и v_k : величины v_k^2 и $u_{\bar{k}}^2$ являются вероятностями того, что определённое парное состояние (k, \bar{k}) занято или нет.

2.3 КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИЙ ПАРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

В случае чистого парного потенциала гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_{k>0} \epsilon_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}) - G \sum_{k,k'>0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'}, \quad (2.22)$$

где первая сумма описывает одночастичные состояния, а вторая — остаточное взаимодействие, действующее на пары нуклонов.

Параметры u_k и v_k волновой функции (2.15) определяются минимизацией энергии данного состояния, то есть вариационной задачей. Из (2.21a) и (2.21b) следует, что число частиц в состоянии $|\Psi_0\rangle$ не является фиксированным. Можно потребовать, чтобы среднее количество частиц в состоянии $|\Psi_0\rangle$ было равно заданному количеству N нуклонов, то есть

$$\langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle \equiv \langle \Psi_0 | \sum_{k>0} (\hat{n}_k + \hat{n}_{\bar{k}}) | \Psi_0 \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N. \quad (2.23)$$

Такую условную вариационную задачу можно привести к безусловной вариационной задаче для гамильтониана

$$H' = H - \lambda \hat{N}, \quad (2.24)$$

где λ — множитель Лагранжа, называемый химическим потенциалом или энергией Ферми, поскольку он определяет изменение в энергии $E = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$ при изменении количества частиц $N = \langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle$:

$$\lambda = \frac{dE}{dN}. \quad (2.25)$$

Можно установить [11], что

$$(u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger) | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (2.26a)$$

$$(u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}_k^\dagger) | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (2.26b)$$

Тогда можно считать, что $|\Psi_0\rangle$ — вакуумное состояние по квазичастицам b , операторы рождения/уничтожения которых даются выражениями

$$b_k^\dagger = u_p \hat{a}_k^\dagger - v_k \hat{a}_{\bar{k}}, \quad b_{\bar{k}}^\dagger = u_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger + v_k \hat{a}_k, \quad (2.27a)$$

$$b_k = u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger, \quad b_{\bar{k}} = u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}_k^\dagger. \quad (2.27b)$$

Причём соблюдается верное антикоммутиационное соотношение

$$\{b_k, b_{k'}^\dagger\} = (u_k^2 + v_k^2) \delta_{kk'} = \delta_{kk'} \quad (2.28)$$

в силу (2.19).

Гамильтониан

$$H' = \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}) - G \sum_{k,k'>0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'}, \quad \tilde{\epsilon}_k \equiv \epsilon_k - \lambda, \quad (2.29)$$

выраженный через операторы b и b^\dagger должен иметь «правильный» вид:

$$H' = H'_0 + \sum_{k>0} E_k (b_k^\dagger b_k + b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}). \quad (2.30)$$

Из этого условия определяются коэффициенты u_k , v_k и E_k — энергии квазичастиц b , то есть спектр возбуждений ядра. Можно показать [11; 12], что вариационная задача $\delta \langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle = 0$ равносильна данному условию.

Прямыми вычислениями, получим

$$\begin{aligned} H' = & \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b) + \\ & + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k (b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k) - G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

где введены обозначения

$$\hat{n}_k^b \equiv b_k^\dagger b_k, \quad \hat{n}_{\bar{k}}^b \equiv b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}, \quad (2.32a)$$

$$\hat{\Delta} \equiv G \sum_{k>0} u_k v_k (1 - \hat{n}_k^b - \hat{n}_{\bar{k}}^b), \quad (2.32b)$$

$$\hat{F} \equiv \sum_{k>0} (u_k^2 b_{\bar{k}} b_k - v_k^2 b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger). \quad (2.32b)$$

Вторая строка в (2.31) содержит «неправильные» члены. Рассмотрим последнее слагаемое этой строки, пренебрегая произведением \hat{F} и \hat{F}^\dagger .

$$-G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right) \approx -\frac{\hat{\Delta}^2}{G} - \hat{\Delta} \hat{F} - \hat{F}^\dagger \hat{\Delta}. \quad (2.33)$$

Поскольку мы заинтересованы в исследовании $\langle H' \rangle$ на различных состояниях $|\Psi\rangle = b_{k_1}^\dagger b_{k_2}^\dagger \cdots |\Psi_0\rangle$, то оператор $\hat{\Delta}$ можно заменить на число $\Delta = G \sum_{k>0} u_k v_k (1 - n_k^b - n_{\bar{k}}^b)$, где n_k^b и $n_{\bar{k}}^b$ — числа заполнения квазичастиц b в состоянии $|\Psi\rangle$. Так,

$$-G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right) \approx -\frac{\Delta^2}{G} - \Delta \sum_{k>0} (u_k^2 - v_k^2) (b_k^\dagger b_k^\dagger + b_{\bar{k}} b_k). \quad (2.34)$$

Итого,

$$\begin{aligned} H' \approx & \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta^2}{G} + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b) + \\ & + \sum_{k>0} (\tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k - \Delta (u_k^2 - v_k^2)) (b_k^\dagger b_k^\dagger + b_{\bar{k}} b_k). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Отсюда, условие уничтожения «неправильных» членов имеет вид

$$\tilde{\epsilon}_k (2u_k v_k) - \Delta (u_k^2 - v_k^2) \equiv 0. \quad (2.36)$$

Возводя условие нормировки $u_k^2 + v_k^2 = 1$ в квадрат, получим

$$(u_k^2 - v_k^2)^2 + (2u_k v_k)^2 = 1 \iff u_k^2 - v_k^2 = \cos \chi, \quad 2u_k v_k = \sin \chi \geq 0. \quad (2.37)$$

Тогда

$$\tilde{\epsilon}_k \sin \chi - \Delta \cos \chi = 0 \quad \Big| : \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}, \quad (2.38)$$

$$\cos \varphi \sin \chi - \sin \varphi \cos \chi = 0,$$

$$\sin(\chi - \varphi) = 0,$$

$$\chi = \varphi + \pi n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2.39)$$

Отсюда,

$$\sin \chi = \sin(\varphi + \pi n) = (-1)^n \sin \varphi \geq 0 \implies n = 0, \pm 2, \pm 4, \dots,$$

$$\sin \chi = \sin \varphi = \frac{\Delta}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}, \quad (2.40)$$

$$\cos \chi = \cos \varphi = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}. \quad (2.41)$$

Итого, условия для зануления «неправильных» членов в H' имеют вид

$$2u_k v_k = \frac{\Delta}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}, \quad (2.42a)$$

$$u_k^2 - v_k^2 = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}. \quad (2.42b)$$

При отсутствии парных сил $\Delta = 0$ и $v_k^2 = 1$, $u_k^2 = 0$ для занятых состояний ($\tilde{\epsilon} < 0$). Тогда, единственное решение на коэффициенты u_k и v_k имеет вид

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right), \quad (2.43a)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right), \quad (2.43b)$$

Представим Δ в виде

$$\Delta = \Delta_0 + \tilde{\Delta}, \quad \Delta_0 \equiv \langle \Psi_0 | \hat{\Delta} | \Psi_0 \rangle. \quad (2.44)$$

Отсюда,

$$\tilde{\Delta} = -G \sum_{k>0} u_k v_k (n_k^b + n_{\bar{k}}^b). \quad (2.45)$$

Так,

$$\Delta^2 = (\Delta_0 + \tilde{\Delta})^2 = \Delta_0^2 \left(1 + \frac{\tilde{\Delta}}{\Delta_0} \right)^2 \approx \Delta_0^2 (1 + 2\tilde{\Delta}/\Delta_0) = \Delta_0^2 + 2\Delta_0 \tilde{\Delta}, \quad (2.46)$$

пренебрегая слагаемыми порядка $(\tilde{\Delta}/\Delta_0)^2$. Отсюда,

$$-\frac{\Delta^2}{G} \approx -\frac{\Delta_0^2}{G} - \frac{2}{G} \Delta_0 \tilde{\Delta}. \quad (2.47)$$

Итого, гамильтониан H' без «неправильных» членов имеет вид (обратно подставляя $n_{k,\bar{k}}^b \rightarrow \hat{n}_{k,\bar{k}}^b$ в $\tilde{\Delta}$)

$$H' \approx \underbrace{\sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta_0^2}{G}}_{H'_0} + \sum_{k>0} \underbrace{(\tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0 (2u_k v_k))}_{E_k} (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b). \quad (2.48)$$

Отсюда, энергия квазичастиц b даётся выражением

$$E_k = \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0 (2u_k v_k) \approx \frac{\tilde{\epsilon}_k^2}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} + \frac{\Delta_0^2}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}. \quad (2.49)$$

Величина Δ_0 называется энергетической щелью БКШ.

Физический смысл данной энергии заключается в следующем. Основное состояние ядра можно считать вакуумом по отношению к квазичастицам b . Пусть в основном состоянии ядра все состояния $k < k_F$ заполнены, а $k' > k_F$ — свободны. Тогда возбуждённое состояние ядра задаётся как $|\Psi\rangle = \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k |\Psi_0\rangle$ — нуклон-дырочное возбуждение. Так,

$$\begin{aligned} H' |\Psi\rangle &= H' \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k |\Psi_0\rangle = u_{k'} v_k H' b_{k'}^\dagger b_k^\dagger |\Psi_0\rangle = (H'_0 + E_{k'} + E_k) u_{k'} v_k |\Psi_0\rangle = \\ &= (H'_0 + E_{k'} + E_k) |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Энергия данного состояния будет равна²⁾

$$E_\Psi = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = H'_0 + E_{k'} + E_k + \lambda \langle N \rangle_\Psi, \quad (2.51)$$

где

$$\langle N \rangle_\Psi = \frac{\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = N + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{k'}}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_{k'}^2 + \Delta_0^2}} - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} \right). \quad (2.52)$$

То есть, при возбуждении ядра его энергия повышается на

$$E_\Psi - E_{\Psi_0} \approx E_{k'} + E_k, \quad (2.53)$$

пренебрегая нарушающими среднее число нуклонов слагаемыми в (2.52). Это можно интерпретировать как то, что при возбуждении ядра рождаются пары частиц b с энергиями (2.49).

2.3.1 УРАВНЕНИЕ ДЛЯ $\Delta = \Delta_0$ В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ СИСТЕМЫ

В основном состоянии системы $|\Psi_0\rangle$ числа заполнения квазичастиц будут равны $n_k^b = n_k^{\bar{b}} = 0$. Тогда

$$\Delta_0 = G \sum_{k>0} u_k v_k, \quad 2u_k v_k = \frac{\Delta_0}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}}, \quad (2.54a)$$

$$\frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta_0}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} = \Delta_0. \quad (2.54b)$$

Решение $\Delta_0 = 0$ всегда присутствует в (2.54b). При численном расчёте сумма в (2.54b) будет кончатся некоторой оболочкой Λ . Для достаточно больших G и/или далёкой (в смысле отсчёта от уровня Ферми) оболочке Λ будет присутствовать решение $\Delta_0 \neq 0$.

²⁾ Вспомогательный гамильтониан H' отличается от истинного H слагаемым λN .

3 ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЁТЫ

Численное решение уравнений Хартри-Фока с последующим наложением схемы БКШ было осуществлено при помощи программного комплекса наших коллег из МГУ, исследовавшими влияние тензорных сил на ядра с избыточным количеством нейтронов [13].

В нашей работе мы не затрагивали тензорные силы, поэтому все расчёты велись с использованием наборов значений параметров для скирмовских сил под названиями SG II [14] и SLy4 [15], которые соответствуют уравнениям, представленным в разделе 1.2.

В последующих разделах будут представлены результаты расчётов энергий связи для цепочек изотопов кислорода ($A = 16; 18; 20$) и никеля ($A = 60; 62; 64$). Величина парных сил G_q для каждого изотопа была подобрана так, чтобы получающаяся в результате процедуры БКШ энергетическая щель для каждого изотопа была равна

$$\Delta_q = -\frac{1}{4}(S_q(A - 1_q) + S_q(A + 1_q) - 2S_q(A)), \quad (3.1)$$

где S_q — энергия связи протона ($q = p$) или нейтрона ($q = n$).

3.1 ЦЕПОЧКА ИЗОТОПОВ КИСЛОРОДА

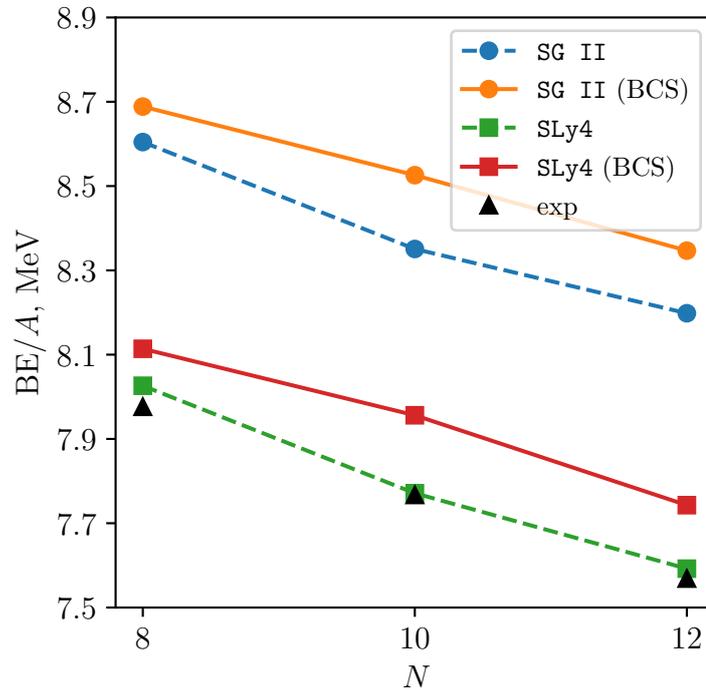


Рисунок 3.1 — Энергии связи (на нуклон) изотопов кислорода ^{16}O , ^{18}O , ^{20}O в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта. Экспериментальные точки — [16].

На [рисунке 3.1](#) изображены вычисленные энергии связи для изотопов кислорода ^{16}O , ^{18}O , ^{20}O . Видно, что наилучшим образом для данной цепочки себя показала параметризация SLy4 без учёта парных корреляций. Данный факт может быть объяснён тем, что учёт парных корреляций в рассматриваемой модели производится независимо для нейтронов и протонов, то есть протон-нейтронными парными корреляциями было пренебрежено. Данное приближение хорошо обосновано для тяжёлых ядер, а для лёгких приводит к завышению оценок энергий связи.

3.2 ЦЕПОЧКА ИЗОТОПОВ НИКЕЛЯ

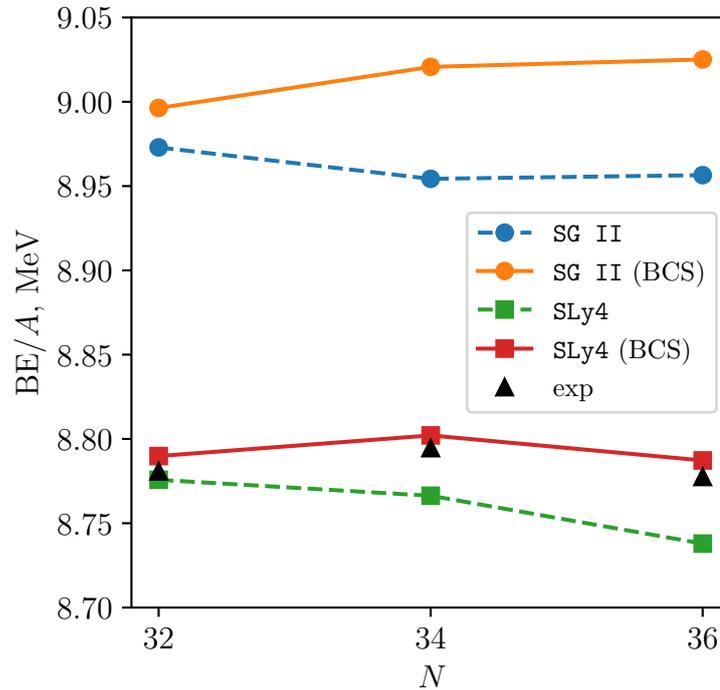


Рисунок 3.2 — Энергии связи (на нуклон) изотопов никеля ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта. Экспериментальные точки — [16].

На [рисунке 3.2](#) изображены вычисленные энергии связи для изотопов никеля ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni . Для данной цепочки вновь ближе всего к экспериментальным данным легли точки, вычисленные в параметризации SLy4 , но уже с учётом парных корреляций. Таким образом, можно предположить, что для ядра с $A \gtrsim 60$ протоны и нейтроны при учёте парных корреляций можно рассматривать независимо.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе данной работы было произведено ознакомление с методом Хартри-Фока вычисления одночастичных уровней нуклонов в ядрах с силами, зависящими от нуклонных плотностей — силами Скирма. Также был рассмотрен формализм БКШ, позволяющий описать учёт парных корреляций нуклонов в ядре.

Были получены уравнения для определения энергетической щели БКШ для чётно-чётных ядер — величины, описывающей характерную разницу в спектрах возбуждения, плотности уровней чётных и нечётных ядер; а также объясняющей чётно-нечётный и другие эффекты, связанные с присутствием парных корреляций в ядрах. При помощи программного комплекса наших коллег из МГУ [13] эти уравнения были численно, итерационно решены, а затем рассмотрены получающиеся энергии связи (на нуклон) для двух цепочек изотопов: кислорода (^{16}O , ^{18}O , ^{20}O) и никеля (^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni).

Решение уравнений Хартри-Фока рассматривалось для двух параметризаций сил Скирма: наборы значений скирмовских параметров под названиями *SG II* и *SLy4*. Для цепочки изотопов кислорода наилучшим образом себя показала параметризация *SLy4* без учёта парных корреляций. Этот факт может быть объяснён тем, что для лёгких ядер необходимо учитывать протон-нейтронные парные корреляции, которыми в данной работе было пренебрежено. Это привело к завышению оценок энергий связи при учёте только протон-протонных и нейтрон-нейтронных парных корреляций. Для цепочки изотопов никеля также ближе всего к экспериментальным данным были получены значения в параметризации *SLy4*, но уже с учётом парных корреляций. Так, можно предположить, что для ядер с $A \gtrsim 60$ приближение независимого рассмотрения нейтронов и протонов при учёте парных корреляций является обоснованным.

Планируется дальнейшее освоение рассматриваемого формализма. В частности, включение в рассмотрение нечётных ядер, а впоследствии деформированных ядер.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Vautherin D., Brink D. M.* Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei // *Physical Review C*. — 1972. — v. 5, iss. 3. — p. 626–647.
2. *Brink D. M., Boeker E.* Effective interactions for Hartree-Fock calculations // *Nuclear Physics A*. — 1967. — v. 91, iss. 1. — p. 1–26.
3. *Volkov A. B.* Equilibrium deformation calculations of the ground state energies of 1p shell nuclei // *Nuclear Physics*. — 1965. — v. 74, iss. 1. — p. 33–58.
4. *Nestor C. W., Davies K. T. R., Krieger S. J., Baranger M.* An effective nucleon-nucleon potential for use in nuclear Hartree-Fock calculations // *Nuclear Physics A*. — 1968. — v. 113, iss. 1. — p. 14–26.
5. *Skyrme T. H. R.* The effective nuclear potential // *Nuclear Physics*. — 1958. — v. 9, iss. 4. — p. 615–634.
6. *Ring P., Schuck P.* The Nuclear Many-Body Problem. — New York : Springer, 1980. — (Texts and Monographs in Physics).
7. *Mayer M. G.* Nuclear Configurations in the Spin-Orbit Coupling Model. II. Theoretical Considerations // *Physical Review*. — 1950. — v. 78, iss. 1. — p. 22–23.
8. *Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R.* Theory of Superconductivity // *Physical Review*. — 1957. — v. 108, iss. 5. — p. 1175–1204.
9. *Belyaev S. T.* Effect of Pairing Correlation on Nuclear Properties // *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* — 1959. — v. 31, iss. 11. — p. 1–55.
10. *Skyrme T. H. R.* CVII. The nuclear surface // *Philosophical Magazine*. — 1956. — v. 1, iss. 11. — p. 1043–1054.
11. *Беляев С. Т.* Квантовая механика систем многих тождественных частиц : Учебное пособие. — Москва : МФТИ, 2014.
12. *Suhonen J.* From Nucleons to Nucleus : Concepts of Microscopic Nuclear Theory. — Springer Berlin Heidelberg, 2007. — (Theoretical and Mathematical Physics).
13. *Sidorov S. V., Kornilova A. S., Tretyakova T. Yu.* Tensor force impact on shell evolution in neutron-rich Si and Ni isotopes // *Chinese Physics C*. — 2024. — v. 48, iss. 4, 044101.
14. *Van Giai N., Sagawa H.* Spin-isospin and pairing properties of modified Skyrme interactions // *Physics Letters B*. — 1981. — v. 106, iss. 5. — p. 379–382.

15. *Chabanat E., Bonche P., Haensel P., Meyer J., Schaeffer R.* A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities // Nuclear Physics A. — 1998. — v. 635, iss. 1/2. — p. 231–256.
16. *Wang M., Huang W., Kondev F., Audi G., Naimi S.* The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references // Chinese Physics C. — 2021. — v. 45, iss. 3, 030003.