Микроскопическое моделирование структуры ядер и ядерных реакций

Исполнитель темы
студент группы М23-114 Д. А. Ситьков

Научный руководитель
д-р физ.-мат. наук, доц. А. Л. Барабанов

НИЯУ «МИФИ»

26 декабря 2024 г.

Метод Хартри-Фока

- Нуклоны в ядре находятся в самосогласованном потенциале;
- Параметризация эффективных сил.

Метод Хартри-Фока

Система описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{i}^{N} \hat{t}_i + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j}^{N} \hat{v}_{ij}. \tag{1}$$

Многочастичная волновая функция — определитель Слетера:

$$\Psi_N(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\psi_i(x_j)\} \tag{2}$$

В основном состоянии

$$E_N = \langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle \to \min \iff \frac{\delta E_N}{\delta \psi_i} = 0. \tag{3}$$

Метод Хартри-Фока (2)

Система интегро-дифференциальных уравнений Хартри-Фока на ψ_i и $\varepsilon_i^{\min}$:

$$\hat{t}_i \psi_i(x_i) + \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_j \rangle \, \psi_i(x_i) - \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_i \rangle \, \psi_j(x_i) = \\ = \varepsilon_i^{\min} \psi_i(x_i). \tag{4}$$

Метод Хартри-Фока: силы Скирма

Взаимодействие Скирма представляется в виде потенциала

$$V = \sum_{i<j} v_{ij} + \sum_{i<j<k} v_{ijk}. \tag{5}$$

Для чётно-чётных ядер трёхчастичный потенциал равносилен двухчастичному плотностно-зависимому

$$v_{12} \propto \rho\big((\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2\big). \tag{6}$$

Параметры взаимодействия

$$v_{ij} = v_{ij}\big(t_0, t_1, t_2, t_3, x_0, W_0\big) \tag{7}$$

подбираются под экспериментальные данные.

Метод Хартри-Фока: силы Скирма (2)

Основное состояние ядра — определитель Слетера

$$\phi(x_1, x_2, \ldots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det\{\phi_i(x_j)\}. \quad (8)$$

Условие минимальности энергии $E = \langle \phi | T + V | \phi \rangle$ даёт

$$\left[-\left(\boldsymbol{\nabla}, \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \boldsymbol{\nabla} \right) + U_q(\mathbf{r}) + \left(\mathbf{W}_q(\mathbf{r}), (-i)(\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\sigma}) \right) \right] \phi_i = e_i \phi_i. \quad (9)$$

Система *дифференциальных* нелинейных уравнений с

$$m_q^*,\ U_q,\ \mathbf{W}_q \text{ — функции } \rho \sim |\phi_i|^2,\ \tau \sim |\boldsymbol{\nabla} \phi_i|^2,\ \mathbf{J} \sim \boldsymbol{\nabla} \phi_i. \quad (10)$$

Рассматривается приближение сферической симметрии

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, \tau) = \frac{R_{qnlj}(r)}{r} \mathscr{Y}_{ljm}(\mathbf{n}, \sigma) \chi_q(\tau), \quad (11)$$

Парные корреляции

- Ряд свойств, которые не описываются в рамках Хартри-Фока:
  - *энергетическая щель*: характерная разница в спектрах чётных и нечётных ядер;
  - *плотности уровней*: для низколежащих уровней возбуждения $\rho_{\text{эксп}} = \frac{1}{2}\rho_{\text{теор}}$;
  - *чётно-нечётный эффект*: $M_{A_{\text{неч}}} > (M_{A-1} + M_{A+1})/2$ и другие.
- М. Гёперт-Майер предположила [Mayer M. G. // Physical Review. — 1950. — v. 78, iss. 1], что выгодна *парно скоррелированная* конфигурация.
- Парное взаимодействие аналогично эффекту сверхпроводимости $\rightarrow$ Бардин, Купер, Шриффер (БКШ).

Схема БКШ

Основное состояние чётно-чётного ядра

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{k>0} \left(u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger\right) |0\rangle \,, \tag{12}$$

где для сферического базиса

$$|k\rangle = |nljm\rangle \,, \quad \left|\bar{k}\right\rangle = |nlj - m\rangle \,, \quad m > 0. \tag{13}$$

Величины v_k^2 и u_k^2 являются вероятностями того, что определённое парное состояние $(k, \bar{k})$ занято или нет.

Схема БКШ: парный потенциал

В случае парного потенциала гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_{k>0} \epsilon_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}) - G \sum_{k,k'>0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'}. \tag{14}$$

Число частиц в состоянии $|\Psi_0\rangle$ не является фиксированным.

Потребуем для заданного количества N нуклонов

$$\langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle = N \iff 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N. \tag{15}$$

Вариационная задача $\delta \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = 0$ с условием (15) равносильна безусловной вариационной задаче для

$$H' = H - \lambda \hat{N}. \tag{16}$$

Схема БКШ: парный потенциал (2)

Прямым вычислением можно установить

$$\left(u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}^\dagger_{\bar{k}}\right)|\Psi_0\rangle = 0, \quad \left(u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}^\dagger_{k}\right)|\Psi_0\rangle = 0. \tag{17}$$

Основное состояние $|\Psi_0\rangle$ — вакуумное состояние по квазичастицам b:

$$b_k = u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}^\dagger_{\bar{k}}, \quad b_{\bar{k}} = u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}^\dagger_{k}. \tag{18}$$

Гамильтониан H' можно привести к виду

$$H' = H'_0 + \sum_{k>0} E_k \left(b^\dagger_k b_k + b^\dagger_{\bar{k}} b_{\bar{k}}\right). \tag{19}$$

Вариационная задача $\delta \langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle = 0$ равносильна этому условию.

Схема БКШ: парный потенциал (3)

Искомый вид:

$$H' = H_0' + \sum_{k>0} E_k(b_k^\dagger b_k + b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}). \tag{20}$$

Выражая H' через операторы b, получим

$$H' \approx \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta^2}{G} + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2)(\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b) + \\ + \sum_{k>0} \left(\tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k - \Delta(u_k^2 - v_k^2)\right)(b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k), \tag{21}$$

где $\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - \lambda$ и $\Delta = G \sum_{k>0} u_k v_k (1 - n_k^b - n_{\bar{k}}^b)$.

Дополнительное условие на неизвестные коэффициенты u_k, v_k:

$$\tilde{\epsilon}_k (2u_k v_k) - \Delta(u_v^2 - v_k^2) \equiv 0. \tag{22}$$

Схема БКШ: парный потенциал (4)

Решение на коэффициенты u_k и v_k имеет вид

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}\right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}\right). \tag{23}$$

Представим Δ в виде

$$\Delta = \Delta_0 + \tilde{\Delta}, \quad \Delta_0 \equiv \langle \Psi_0 | \hat{\Delta} | \Psi_0 \rangle \,. \tag{24}$$

Так,

$$\Delta^2 \approx \Delta_0^2 + 2\Delta_0 \tilde{\Delta}, \tag{25}$$

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

Схема БКШ: парный потенциал (5)

Результирующий гамильтониан H' имеет вид

$$H' \approx \underbrace{\sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta_0^2}{G}}_{H_0'} + \sum_{k>0} \underbrace{\left(\tilde{\epsilon}_k(u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0(2u_k v_k)\right)}_{E_k} (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b). \quad (26)$$

Энергия квазичастиц b даётся выражением

$$E_k = \tilde{\epsilon}_k(u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0(2u_k v_k) \approx \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}. \quad (27)$$

Возбуждённое состояние ядра $|\Psi\rangle = \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k |\Psi_0\rangle$ — нуклон-дырочное возбуждение. При возбуждении ядра его энергия повышается на

$$E_\Psi - E_{\Psi_0} \approx E_{k'} + E_k. \quad (28)$$

Схема БКШ: парный потенциал (6)

Система уравнений

$$\sum_{k>0} 2v_k^2(\epsilon_j, \lambda, \Delta_0) = N, \tag{29а}$$

$$\frac{G}{2} \sum_{k>0} 2u_k(\epsilon_j, \lambda, \Delta_0) v_k(\epsilon_j, \lambda, \Delta_0) = \Delta_0 \tag{29б}$$

при заданной силе G парных корреляций и одночастичных уровнях ϵ_j определяет химический потенциал λ и энергетическую щель БКШ Δ_0.

Численные расчёты

- Численное решение уравнений Хартри-Фока с последующим наложением схемы БКШ было осуществлено при помощи программного комплекса наших коллег из НИИЯФ МГУ [*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].

Численные расчёты (2)

- Одночастичные уровни ϵ_j определяются задачей Хартри-Фока о нахождении нуклонов в самосогласованном потенциале.
- Два набора значений параметров скирмовских сил: `SG II` и `SLy4`.
- Независимое рассмотрение нейтронов и протонов:

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle = \prod_{k_1>0} \left(u_{k_1}^{(p)} + v_{k_1}^{(p)} a_{k_1}^{(p)\dagger} a_{\bar{k}_1}^{(p)\dagger} \right) \times \\ \times \prod_{k_2>0} \left(u_{k_2}^{(n)} + v_{k_2}^{(n)} a_{k_2}^{(n)\dagger} a_{\bar{k}_2}^{(n)\dagger} \right) |0\rangle \, . \end{aligned} \tag{30}$$

- Величина парных сил G_q подобрана так, чтобы энергетическая щель была равна

$$\Delta_q = -\frac{1}{4}\left(S_q(A - 1_q) + S_q(A + 1_q) - 2S_q(A)\right). \tag{31}$$

Численные расчёты: изотопы кислорода

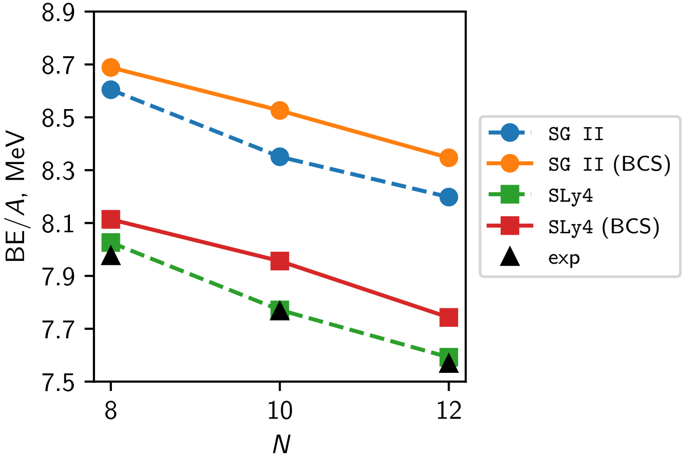

Рисунок 1 — Энергии связи (на нуклон) изотопов кислорода ^{16}O, ^{18}O, ^{20}O в зависимости от числа нейтронов N в ядре.

Численные расчёты: изотопы никеля

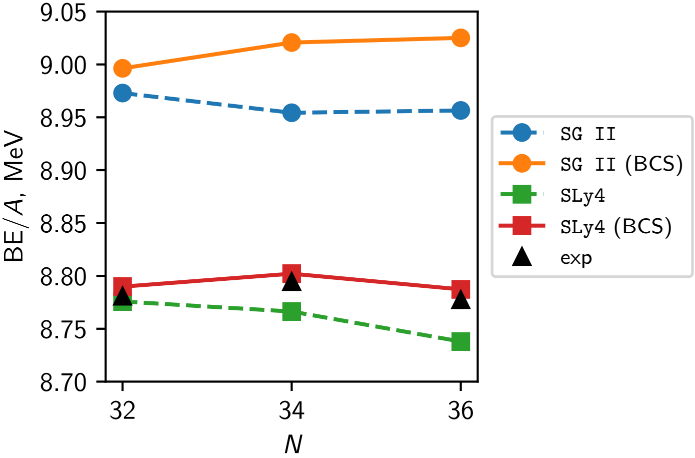

Рисунок 2 — Энергии связи (на нуклон) изотопов никеля ^{60}Ni, ^{62}Ni, ^{64}Ni в зависимости от числа нейтронов N в ядре.

Заключение

В ходе проделанной работы

- изучен метод Хартри-Фока с плотностно-зависимыми силами Скирма. Рассмотрен формализм БКШ, позволяющий описать учёт парных корреляций нуклонов в ядре;
- получены уравнения для определения энергетической щели БКШ для чётно-чётных ядер. Вычислены энергии связи (на нуклон) для двух цепочек изотопов: кислорода и никеля;
- показано, что независимое рассмотрение протонов и нейтронов обосновано для тяжёлых ($A \gtrsim 60$) ядер, а для лёгких приводит к завышению оценок энергий связи.

Планируется дальнейшее освоение рассматриваемого формализма:

- включение в рассмотрение нечётных, деформированных ядер.

Дополнительные слайды

Уравнение (9) имеет вид локального уравнения Шрёдингера с эффективной массой $m_q^*(\mathbf{r})$, которая зависит от нуклонной плотности:

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\rho + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\rho_q. \tag{32}$$

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

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = t_0\big[(1 + x_0/2)\rho - (x_0 + 1/2)\rho_q\big] + \frac{1}{4}t_3(\rho^2 - \rho_q^2) - \\ - \frac{1}{8}(3t_1 - t_2)\nabla^2\rho + \frac{1}{16}(3t_1 + t_2)\nabla^2\rho_q + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\tau + \\ + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\tau_q - \frac{1}{2}W_0(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}_q) + \delta_{q,+1/2}V_C(\mathbf{r}), \end{aligned} \tag{33}$$

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

Дополнительные слайды (2)

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

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} W_0 (\boldsymbol{\nabla}\rho + \boldsymbol{\nabla}\rho_q) + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\mathbf{J}_q(\mathbf{r}). \tag{34}$$

Соответствующие плотности:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)|^2, \tag{35}$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\boldsymbol{\nabla}\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)|^2, \tag{36}$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = (-i) \sum_{i,\sigma,\sigma'} \phi_i^*(\mathbf{r},\sigma,q)\Big(\boldsymbol{\nabla}\phi_i(\mathbf{r},\sigma',q) \times \big\langle \sigma \big| \boldsymbol{\sigma} \big| \sigma' \big\rangle \Big). \tag{37}$$