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»

21 мая 2025 г.

Метод Хартри-Фока и парные корреляции

- Метод Хартри-Фока:
  - нуклоны в ядре находятся в самосогласованном потенциале;
  - параметризация эффективных сил.
- Учёт парных корреляций:
  - наряду с расчётами по методу Хартри-Фока можно попытаться учесть парные корреляции аналогично методу Бардина-Купера-Шриффера (БКШ).

1. *Vautherin D., Brink D. M.* // Phys. Rev. C. — 1972. — v. 5, iss. 3. — p. 626–647.
2. *Ring P., Schuck P.* The Nuclear Many-Body Problem. — New York : Springer, 1980.

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

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

на волновые функции ψ_i и одночастичные уровни $\varepsilon_i^{\text{min}}$.

Метод Хартри-Фока: силы Скирма

Взаимодействие Скирма имеет вид

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

Для чётно-чётных ядер трёхчастичный точечный потенциал

$$v_{123} = t_3 \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta^{(3)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \tag{6}$$

равносилен двухчастичному

$$v_{12} \propto \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\rho\big((\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2\big). \tag{7}$$

Параметры взаимодействия

$$v_{ij} = v_{ij}(t_0, t_1, t_2, t_3, x_0, W_0) \tag{8}$$

подбираются под экспериментальные данные.

Метод Хартри-Фока: силы Скирма (2)

Основное состояние ядра — определитель Слетера

$$\phi(x_1, x_2, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det\{\phi_i(x_j)\}. \tag{9}$$

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

$$\left[-\left(\boldsymbol{\nabla}, \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})}\boldsymbol{\nabla}\right) + U_q(\mathbf{r}) + \left(\mathbf{W}_q(\mathbf{r}), (-i)(\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\sigma})\right)\right]\phi_i = e_i\phi_i. \tag{10}$$

Система *дифференциальных* уравнений с зависимостью от

$$\rho_q = \sum_i \phi_i^\dagger \phi_i;\ \tau_q = \sum_i \left(\boldsymbol{\nabla}\phi_i^\dagger, \boldsymbol{\nabla}\phi_i\right);\ \mathbf{J}_q = -i\sum_i \phi_i^\dagger (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\sigma})\phi_i. \tag{11}$$

Рассматривается приближение сферической симметрии

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, \mathfrak{t}) = \frac{R_{qn\ell j}(r)}{r} \mathscr{Y}_{\ell jm}(\mathbf{n}, \sigma)\chi_q(\mathfrak{t}). \tag{12}$$

Парные корреляции

- Ряд свойств, которые не описываются в рамках Хартри-Фока:
  - *чётно-нечётный эффект*: $M_{A_{\text{неч}}} > (M_{A-1} + M_{A+1})/2$;
  - *плотности уровней*: для низколежащих уровней возбуждения $\rho_{\text{эксп}} \sim \frac{1}{2}\rho_{\text{теор}}$;
  - характерная разница в спектрах чётных и нечётных деформированных ядер (рисунок 1) и другие.

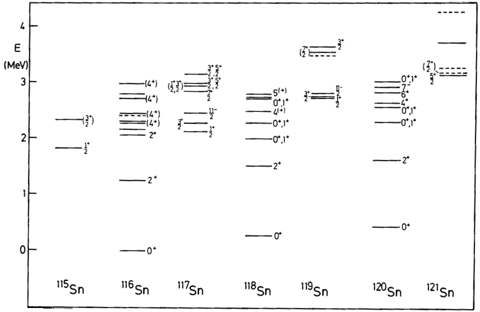


Рисунок 1 — Спектры возбуждения изотопов $_{50}$Sn [*Ring P., Schuck P.* The Nuclear Many-Body Problem. — 1980].

Схема БКШ

Основное состояние чётно-чётного ядра

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{k>0} \left(u_k + v_k \hat{a}^\dagger_k \hat{a}^\dagger_{\bar{k}}\right) |0\rangle, \tag{13}$$

где для сферического базиса

$$|k\rangle = |n\ell jm\rangle, \quad \left|\bar{k}\right\rangle = |n\ell j - m\rangle, \quad m > 0. \tag{14}$$

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

Энергии уровней ϵ_k получены из уравнений Хартри-Фока. Функции плотностей обобщаются как

$$\rho_q(\mathbf{r}) = 2\sum_{k>0} v_k^2 \phi^\dagger_k \phi_k, \quad \tau_q(\mathbf{r}) = 2\sum_{k>0} v_k^2 \left(\nabla\phi^\dagger_k, \nabla\phi_k\right), \tag{15а}$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -2i\sum_{k>0} v_k^2 \phi^\dagger_k (\nabla \times \boldsymbol{\sigma})\phi_k. \tag{15б}$$

Схема БКШ: короткодействующий потенциал

Гамильтониан системы с короткодействующим потенциалом:

$$H = \sum_{k>0} \epsilon_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}) - G \sum_{k,k'>0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'}. \tag{16}$$

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

Потребуем для заданного количества N нуклонов

$$\langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle = N \iff 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N. \tag{17}$$

Вариационная задача $\delta \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = 0$ с условием (17) равносильна безусловной вариационной задаче для

$$H' = H - \lambda \hat{N}. \tag{18}$$

Схема БКШ: короткодействующий потенциал (2)

Прямым вычислением можно установить

$$(u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}^\dagger_{\bar{k}}) \left|\Psi_0\right\rangle = 0, \quad (u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}^\dagger_k) \left|\Psi_0\right\rangle = 0. \tag{19}$$

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

$$b_k = u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}^\dagger_{\bar{k}}, \quad b_{\bar{k}} = u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}^\dagger_k. \tag{20}$$

Гамильтониан H' можно привести к виду

$$H' = H'_0 + \sum_{k>0} E_k (b^\dagger_k b_k + b^\dagger_{\bar{k}} b_{\bar{k}}). \tag{21}$$

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

Схема БКШ: короткодействующий потенциал (3)

Коэффициенты u_k и v_k имеют вид

$$u_k^2 \approx \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}}\right), \quad v_k^2 \approx \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}}\right), \tag{22}$$

где $\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - \lambda$, $\Delta_0 \equiv G \sum_{k>0} u_k v_k$.

Гамильтониан H' приобретёт вид

$$H' \approx \underbrace{\sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta_0^2}{G}}_{H_0'} + \sum_{k>0} \underbrace{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}}_{E_k \text{ — энергия квазичастиц } b}(b_k^\dagger b_k + b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}). \tag{23}$$

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

$$E_\Psi - E_{\Psi_0} \approx E_{k'} + E_k. \tag{24}$$

Схема БКШ: короткодействующий потенциал (4)

Система уравнений

$$2\sum_{k>0} v_k^2(\epsilon_j, \lambda, \Delta_0) = N, \tag{25а}$$

$$G\sum_{k>0} u_k(\epsilon_j, \lambda, \Delta_0) v_k(\epsilon_j, \lambda, \Delta_0) = \Delta_0 \tag{25б}$$

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 // Chin. Phys. 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:

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle = \prod_{k_1>0} \left(u_{k_1}^{(p)} + v_{k_1}^{(p)} a_{k_1}^{(p)\dagger} a_{\bar{k}_1}^{(p)\dagger} \right) \times \\ \times \prod_{k_2>0} \left(u_{k_2}^{(n)} + v_{k_2}^{(n)} a_{k_2}^{(n)\dagger} a_{\bar{k}_2}^{(n)\dagger} \right) |0\rangle \,. \end{aligned} \tag{26}$$

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

$$\Delta_q = -\frac{1}{4}\big(S_q(A-1_q) + S_q(A+1_q) - 2S_q(A)\big). \tag{27}$$

Удельные энергии связи изотопов Fe

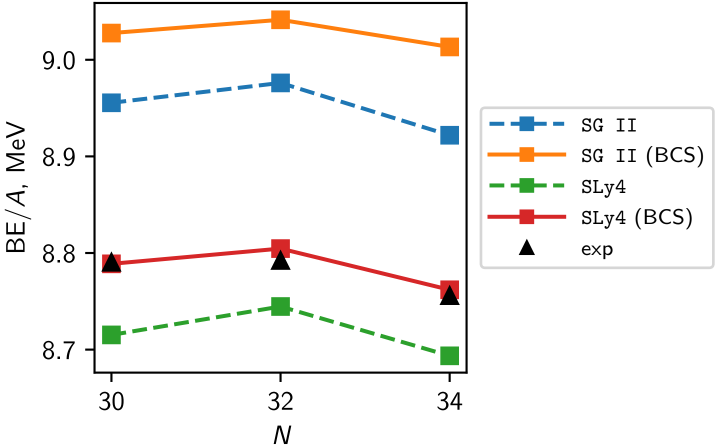
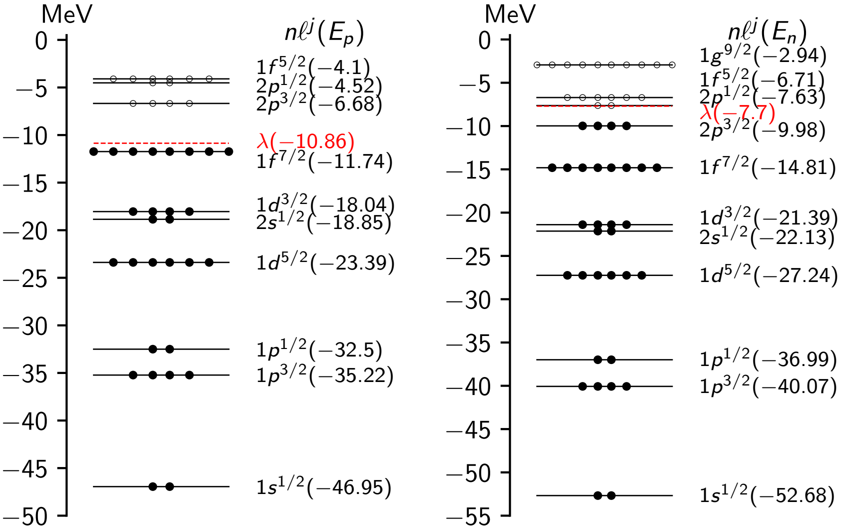


Рисунок 2 — Удельные энергии связи изотопов железа ^{56}Fe, ^{58}Fe, ^{60}Fe в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Экспериментальные данные — [*Wang M., Huang W., Kondev F., Audi G., Naimi S.* // Chin. Phys. C. — 2021. — v. 45, iss. 3].

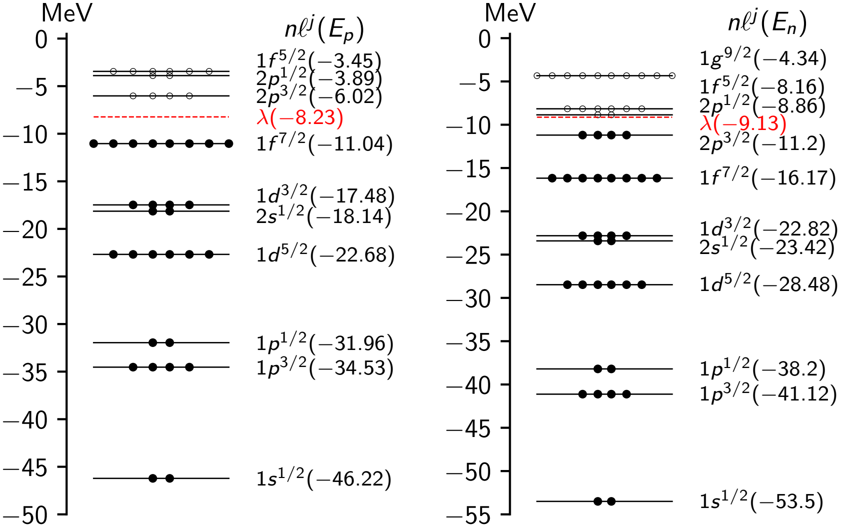
Одночастичные уровни ^{60}Fe



(а) Протонные уровни.　　(б) Нейтронные уровни.

Рисунок 3 — Уровни основного состояния ядра ^{60}Fe с учётом парных корреляций.

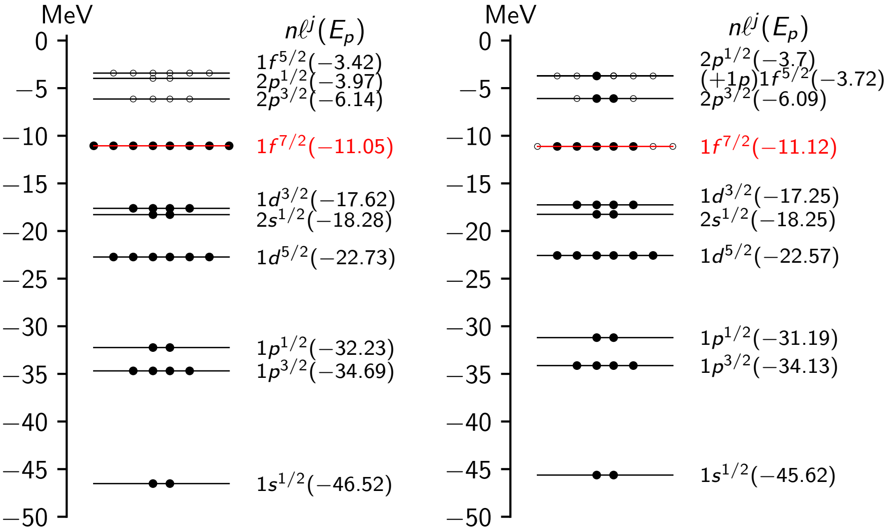
Одночастичные уровни ^{62}Ni



(а) Протонные уровни. (б) Нейтронные уровни.

Рисунок 4 — Уровни основного состояния ядра ^{62}Ni с учётом парных корреляций.

Одночастичные протонные уровни ^{62}Ni



(а) Основное состояние.　(б) Возбуждённое состояние.

Рисунок 5 — Протонные уровни ядра ^{62}Ni без учёта парных корреляций.

Заключение 1/2

- Вычислены удельные энергии связи для цепочки изотопов железа с целью дальнейшей проверки выбора набора скирмовских параметров.
- Получены схемы одночастичных уровней изотопов кислорода, железа и никеля, в том числе, уровней возбуждённых состояний ядер, которые нужны для комбинаторных расчётов плотности уровней для моделирования ядерных реакций.
- Независимое рассмотрение протонов и нейтронов обосновано для тяжёлых ($A \gtrsim 56$) ядер, а для лёгких приводит к завышению оценок энергий связи.

Заключение 2/2

Рассматриваемый формализм может быть обобщён на:

- включение в рассмотрение нечётных ядер $\rightarrow$ возбуждённые состояния с учётом парных корреляций;
- рассмотрение деформированных ядер.

Дополнительные слайды

Уравнение (10) имеет вид локального уравнения Шрёдингера с эффективной массой $m_q^*(\mathbf{r})$, которая зависит от нуклонной плотности:

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\rho + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\rho_q. \tag{28}$$

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

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = t_0\big[(1 + x_0/2)\rho - (x_0 + 1/2)\rho_q\big] + \frac{1}{4}t_3(\rho^2 - \rho_q^2) - \\ - \frac{1}{8}(3t_1 - t_2)\nabla^2\rho + \frac{1}{16}(3t_1 + t_2)\nabla^2\rho_q + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\tau + \\ + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\tau_q - \frac{1}{2}W_0(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}_q) + \delta_{q,+1/2}V_\mathrm{C}(\mathbf{r}), \end{aligned} \tag{29}$$

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

Дополнительные слайды (2)

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

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} W_0 (\boldsymbol{\nabla} \rho + \boldsymbol{\nabla} \rho_q) + \frac{1}{8} (t_1 - t_2) \mathbf{J}_q(\mathbf{r}). \tag{30}$$

Соответствующие плотности:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2, \tag{31}$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\boldsymbol{\nabla} \phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2, \tag{32}$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = (-i) \sum_{i,\sigma,\sigma'} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) \Big(\boldsymbol{\nabla} \phi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \times \left\langle \sigma \middle| \boldsymbol{\sigma} \middle| \sigma' \right\rangle \Big). \tag{33}$$

Дополнительные слайды (3): изотопы кислорода

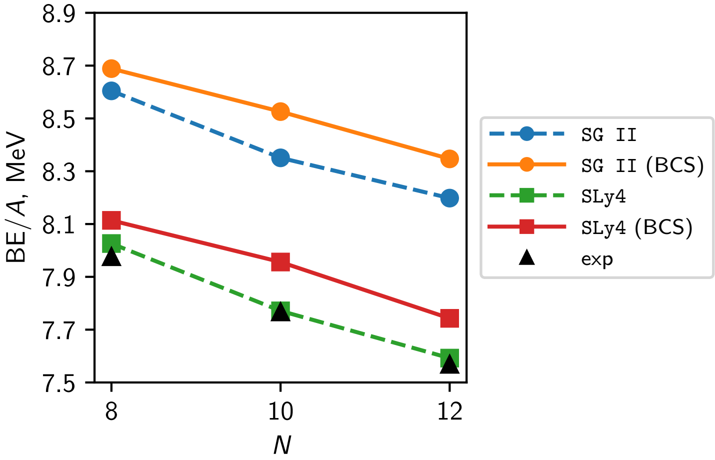


Рисунок 6 — Удельные энергии связи изотопов кислорода ^{16}O, ^{18}O, ^{20}O в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Экспериментальные данные — [*Wang M., Huang W., Kondev F., Audi G., Naimi S.* // Chin. Phys. C. — 2021. — v. 45, iss. 3].

Дополнительные слайды (4): изотопы никеля

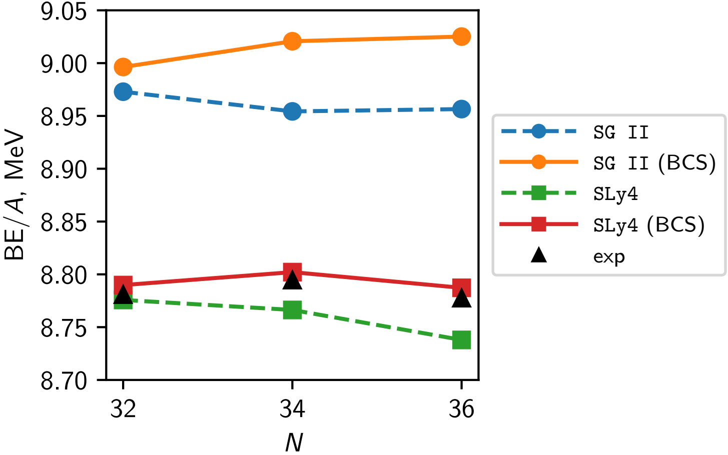


Рисунок 7 — Удельные энергии связи изотопов никеля ^{60}Ni, ^{62}Ni, ^{64}Ni в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Экспериментальные данные — [*Wang M., Huang W., Kondev F., Audi G., Naimi S.* // Chin. Phys. C. — 2021. — v. 45, iss. 3].

Дополнительные слайды (5): схема БКШ

Искомый вид:

$$H' = H'_0 + \sum_{k>0} E_k(b^\dagger_k b_k + b^\dagger_{\bar{k}} b_{\bar{k}}). \tag{34}$$

Выражая H' через операторы b, получим

$$\begin{aligned} H' \approx \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta^2}{G} + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2)(\hat{n}^b_k + \hat{n}^b_{\bar{k}}) + \\ + \sum_{k>0} \left(\tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k - \Delta(u_k^2 - v_k^2)\right)(b^\dagger_k b^\dagger_{\bar{k}} + b_{\bar{k}} b_k), \end{aligned} \tag{35}$$

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

Дополнительное условие на неизвестные коэффициенты u_k, v_k:

$$\tilde{\epsilon}_k (2u_k v_k) - \Delta(u_v^2 - v_k^2) \equiv 0. \tag{36}$$

Дополнительные слайды (6): схема БКШ

Решение на коэффициенты u_k и v_k имеет вид

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}\right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}\right). \tag{37}$$

Представим Δ в виде

$$\Delta = \Delta_0 + \tilde{\Delta}, \quad \Delta_0 \equiv \langle \Psi_0 | \hat{\Delta} | \Psi_0 \rangle \,. \tag{38}$$

Так,

$$\Delta^2 \approx \Delta_0^2 + 2\Delta_0\tilde{\Delta}, \tag{39}$$

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

Дополнительные слайды (7): схема БКШ

Результирующий гамильтониан H' имеет вид

$$H' \approx \underbrace{\sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta_0^2}{G}}_{H_0'} + \sum_{k>0} \underbrace{\left(\tilde{\epsilon}_k(u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0(2u_k v_k)\right)}_{E_k}(\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b). \quad (40)$$

Энергия квазичастиц b даётся выражением

$$E_k = \tilde{\epsilon}_k(u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0(2u_k v_k) \approx \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}. \quad (41)$$