

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 2025

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
1 Метод Хартри-Фока	5
1.1 Уравнения Хартри-Фока	5
1.2 Силы Скирма	6
2 Парные корреляции: схема Бардина-Купера-Шриффера	10
2.1 Представление чисел заполнения	10
2.2 Волновая функция	12
2.3 Короткодействующий парный потенциал	13
2.3.1 Уравнение для $\Delta = \Delta_0$ в основном состоянии системы	18
3 Численные расчёты	19
3.1 Энергии связи цепочки изотопов кислорода	20
3.2 Энергии связи цепочки изотопов никеля	21
3.3 Энергии связи цепочки изотопов железа	22
3.4 Одночастичные уровни	23
3.4.1 Основное состояние железа-60	23
3.4.2 Основное и возбуждённое состояние никеля-62	24
Заключение	26
Список использованных источников	27

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 парного потенциала.

1 МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

1.1 УРАВНЕНИЯ ХАРТРИ-ФОКА

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

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

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 $\varepsilon_i^{\min}$.

1.2 СИЛЫ СКИРМА

Взаимодействие Скина [10] имеет вид потенциала

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

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

Двухчастичный потенциал берётся в виде короткодействующего взаимодействия:

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

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 наличию двухчастичного плотностно-зависимого взаимодействия

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

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 ($\sigma = \pm 1$) и изоспи-

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

Энергия такого состояния

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

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 :

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

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla \phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2, \quad (1.12б)$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -i \sum_{i,\sigma,\sigma'} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) (\nabla \phi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \times \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle), \quad (1.12в)$$

или в спинорной записи

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_i \phi_i^\dagger(\mathbf{r}, q) \phi_i(\mathbf{r}, q), \quad (1.13a)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_i (\nabla \phi_i^\dagger(\mathbf{r}, q), \nabla \phi_i(\mathbf{r}, q)) \quad (1.13б)$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -i \sum_i \phi_i^\dagger(\mathbf{r}, q) (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \phi_i(\mathbf{r}, q), \quad (1.13в)$$

где $\phi_i(\mathbf{r}, q)$ — двухкомпонентный спинор в спиновом пространстве, вектор $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \equiv (\sigma_+ + \sigma_-, -i(\sigma_+ - \sigma_-), \sigma_z)$.

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

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} t_0 [(1 + x_0/2) \rho^2 - (x_0 + 1/2) (\rho_n^2 + \rho_p^2)] + \frac{1}{4} (t_1 + t_2) \rho \tau + \\ &+ \frac{1}{8} (t_2 - t_1) (\rho_n \tau_n + \rho_p \tau_p) + \frac{1}{16} (t_2 - 3t_1) \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{32} (3t_1 + t_2) (\rho_n \nabla^2 \rho_n + \rho_p \nabla^2 \rho_p) + \\ &+ \frac{1}{16} (t_1 - t_2) (\mathbf{J}_n^2 + \mathbf{J}_p^2) + \frac{1}{4} t_3 \rho_n \rho_p \rho + \mathcal{H}_C(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} W_0 (\rho \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho_n \nabla \cdot \mathbf{J}_n + \rho_p \nabla \cdot \mathbf{J}_p), \end{aligned} \quad (1.14)$$

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 (прене-

брегая обменной частью) $\mathcal{H}_C(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}V_C(\mathbf{r})\rho_p(\mathbf{r})$, где

$$V_C(\mathbf{r}) = \int \rho_p(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r'. \quad (1.15)$$

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 :

$$\frac{\delta}{\delta \phi_i} \left(E - \sum_j e_j \int |\phi_j(\mathbf{r})|^2 d^3r \right) = 0. \quad (1.16)$$

Пренебрегая слагаемым $\frac{1}{16}(t_1 - t_2)(\mathbf{J}_n^2 + \mathbf{J}_p^2)$ в (1.14), получим набор уравнений

$$\left[- \left(\nabla, \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \nabla \right) + U_q(\mathbf{r}) + (\mathbf{W}_q(\mathbf{r}), (-i)(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})) \right] \phi_i = e_i \phi_i, \quad (1.17)$$

где индекс q отвечает за заряд одночастичного состояния i . Уравнение (1.17) имеет вид локального уравнения Шрёдингера с эффективной массой $m_q^*(\mathbf{r})$, которая зависит от плотности:

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\rho + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\rho_q. \quad (1.18)$$

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

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = & t_0 \left[(1 + x_0/2)\rho - (x_0 + 1/2)\rho_q \right] + \frac{1}{4}t_3(\rho^2 - \rho_q^2) - \frac{1}{8}(3t_1 - t_2)\nabla^2\rho + \\ & + \frac{1}{16}(3t_1 + t_2)\nabla^2\rho_q + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\tau + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\tau_q - \frac{1}{2}W_0(\nabla \cdot \mathbf{J} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q) + \\ & + \delta_{q,+1/2}V_C(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.19)$$

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

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}W_0(\nabla\rho + \nabla\rho_q) + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\mathbf{J}_q(\mathbf{r}). \quad (1.20)$$

Нелинейные дифференциальные уравнения (1.17) определяют одночастичные функции ϕ_i и энергии e_i этих состояний. В данной работе будет рассматриваться приближение сферической симметрии, то есть

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, \mathbf{t}) = \frac{R_{qnlj}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\mathbf{n}, \sigma) \chi_q(\mathbf{t}), \quad (1.21)$$

где

$$\mathcal{Y}_{\ell jm}(\mathbf{n}, \sigma) = \sum_{m_\ell m_s} \langle \ell \frac{1}{2} m_\ell m_s | jm \rangle Y_{\ell m_\ell}(\mathbf{n}) \chi_{m_s}(\sigma), \quad (1.22)$$

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 ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ: СХЕМА БАРДИНА-КУПЕРА-ШРИФФЕРА

2.1 ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

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 абсолютно антисимметричные нормированные N -частичные волновые функции

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

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

$$\Phi_{\{\nu_j\}_{j=1}^N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\psi_{\nu_j}(x_i)\}_{i,j=1}^N. \quad (2.3)$$

Многочастичную волновую функцию (2.3) можно характеризовать набором чисел $\{n_{\nu_k}\}_{k=1}^N$ (числа заполнения), который показывает сколько раз определённое одночастичное состояние $|\nu_k\rangle$ встречается в этом многочастичном состоянии $\Phi_{\{\nu_j\}_{j=1}^N}$. Для фермионов произвольное число заполнения n_{ν_k} может принимать значение, равное 0 или 1 (иначе многочастичная волновая функция (2.3) тождественно обратится в нуль). Следовательно, $\sum_\nu n_\nu = N$.

На основе этого можно построить гильбертово пространство $\mathcal{H}$, содержащее вакуум (0-частичное состояние) $|0\rangle$, всевозможные одночастичные состояния, всевозможные антисимметризованные двухчастичные состояния и так далее:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{N=1} \oplus \mathcal{H}_{N=2} \oplus \cdots$$

Волновые функции $\Phi_{\{\nu_j\}_{j=1}^N} \equiv \Phi_{\{n_{\nu_k}\}_{k=1}^N}$ соответствуют базисным состояниям $|n_1, n_2, \dots\rangle$ в этом гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ (представление чисел заполнения):

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

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

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

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

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

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

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

$$|k\rangle = |n\ell j m\rangle, \quad |\bar{k}\rangle = |n\ell j -m\rangle, \quad m > 0. \quad (2.16)$$

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

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

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

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

2.3 КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИЙ ПАРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

В случае короткодействующего 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.

Одночастичные энергии ϵ_k получаются в результате решения уравнений Хартри-Фока со скирмовскими силами. Естественным образом вводятся нуклонная плотность, плотность кинетической энергии и спиновая плотность, учитывающие парные корреляции:

$$\rho_q(\mathbf{r}) = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \phi_k^\dagger(\mathbf{r}, q) \phi_k(\mathbf{r}, q), \quad (2.23a)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = 2 \sum_{k>0} v_k^2 (\nabla \phi_k^\dagger(\mathbf{r}, q), \nabla \phi_k(\mathbf{r}, q)) \quad (2.23b)$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -2i \sum_{k>0} v_k^2 \phi_k^\dagger(\mathbf{r}, q) (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \phi_k(\mathbf{r}, q). \quad (2.23b)$$

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

$$\langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle \equiv \langle \Psi_0 | \sum_{k>0} (\hat{n}_k + \hat{n}_{\bar{k}}) | \Psi_0 \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N. \quad (2.24)$$

Такую условную вариационную задачу можно привести к безусловной вариационной

задаче для гамильтониана

$$H' = H - \lambda \hat{N}, \quad (2.25)$$

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 $N = \langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle$:

$$\lambda = \frac{dE}{dN}. \quad (2.26)$$

Можно установить [11], что

$$(u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_k^\dagger) |\Psi_0\rangle = 0, \quad (2.27a)$$

$$(u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}_k^\dagger) |\Psi_0\rangle = 0. \quad (2.27b)$$

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

$$b_k^\dagger = u_k \hat{a}_k^\dagger - v_k \hat{a}_{\bar{k}}, \quad b_{\bar{k}}^\dagger = u_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger + v_k \hat{a}_k, \quad (2.28a)$$

$$b_k = u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger, \quad b_{\bar{k}} = u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}_k^\dagger. \quad (2.28b)$$

В силу (2.19) соблюдается верное антикоммутиационное соотношение

$$\{b_k, b_{k'}^\dagger\} = (u_k^2 + v_k^2) \delta_{kk'} = \delta_{kk'}. \quad (2.29)$$

Можно показать [11; 12], что вариационная задача $\delta \langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle = 0$ равносильна условию упрощённого вида гамильтониана

$$H' = \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}) - G \sum_{k, k'>0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'}, \quad \tilde{\epsilon}_k \equiv \epsilon_k - \lambda, \quad (2.30)$$

в квазичастичных операторах b и $b^\dagger$:

$$H' \equiv H'_0 + \sum_{k>0} E_k (b_k^\dagger b_k + b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}). \quad (2.31)$$

Из этого условия определяются коэффициенты u_k , v_k и E_k — энергии квазичастиц b , то есть спектр возбуждения ядра.

Прямыми вычислениями, получим

$$H' = \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b) + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k (b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k) - G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right), \quad (2.32)$$

где введены обозначения

$$\hat{n}_k^b \equiv b_k^\dagger b_k, \quad \hat{n}_{\bar{k}}^b \equiv b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}, \quad (2.33a)$$

$$\hat{\Delta} \equiv G \sum_{k>0} u_k v_k (1 - \hat{n}_k^b - \hat{n}_{\bar{k}}^b), \quad (2.33b)$$

$$\hat{F} \equiv \sum_{k>0} (u_v^2 b_{\bar{k}} b_k - v_k^2 b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger). \quad (2.33b)$$

Вторая строка в (2.32) содержит «лишние» слагаемые. Рассмотрим последнее слагаемое этой строчки, пренебрегая произведением $\hat{F}$ и $\hat{F}^\dagger$.

$$-G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right) \approx -\frac{\hat{\Delta}^2}{G} - \hat{\Delta} \hat{F} - \hat{F}^\dagger \hat{\Delta}. \quad (2.34)$$

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,

$$-G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right) \approx -\frac{\Delta^2}{G} - \Delta \sum_{k>0} (u_k^2 - v_k^2) (b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k). \quad (2.35)$$

Итого,

$$H' \approx \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta^2}{G} + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b) + \sum_{k>0} (\tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k - \Delta (u_k^2 - v_k^2)) (b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k). \quad (2.36)$$

Отсюда, условие уничтожения «лишних» членов имеет вид

$$\tilde{\epsilon}_k (2u_k v_k) - \Delta (u_k^2 - v_k^2) \equiv 0. \quad (2.37)$$

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

$$(u_k^2 - v_k^2)^2 + (2u_k v_k)^2 = 1 \iff u_k^2 - v_k^2 = \cos \chi, \quad 2u_k v_k = \sin \chi \geq 0. \quad (2.38)$$

Тогда

$$\tilde{\epsilon}_k \sin \chi - \Delta \cos \chi = 0 \quad \Big| : \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}, \quad (2.39)$$

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

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

$$\chi = \varphi + \pi n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2.40)$$

Отсюда,

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

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

$$\cos \chi = \cos \varphi = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}. \quad (2.42)$$

Итого, условия для зануления «лишних» слагаемых в H' имеют вид

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

$$u_k^2 - v_k^2 = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}. \quad (2.43b)$$

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

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right), \quad (2.44a)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right), \quad (2.44b)$$

Представим Δ в виде

$$\Delta = \Delta_0 + \tilde{\Delta}, \quad \Delta_0 \equiv \langle \Psi_0 | \hat{\Delta} | \Psi_0 \rangle. \quad (2.45)$$

Отсюда,

$$\tilde{\Delta} = -G \sum_{k>0} u_k v_k (n_k^b + n_k^b). \quad (2.46)$$

Так,

$$\Delta^2 = (\Delta_0 + \tilde{\Delta})^2 = \Delta_0^2 \left(1 + \frac{\tilde{\Delta}}{\Delta_0}\right)^2 \approx \Delta_0^2(1 + 2\tilde{\Delta}/\Delta_0) = \Delta_0^2 + 2\Delta_0\tilde{\Delta}, \quad (2.47)$$

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

$$-\frac{\Delta^2}{G} \approx -\frac{\Delta_0^2}{G} - \frac{2}{G}\Delta_0\tilde{\Delta}. \quad (2.48)$$

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

$$H' \approx \underbrace{\sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta_0^2}{G}}_{H'_0} + \underbrace{\sum_{k>0} (\tilde{\epsilon}_k(u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0(2u_k v_k))}_{E_k} (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b). \quad (2.49)$$

Отсюда, энергия квазичастиц b даётся выражением

$$E_k = \tilde{\epsilon}_k(u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0(2u_k v_k) \approx \frac{\tilde{\epsilon}_k^2}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} + \frac{\Delta_0^2}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}. \quad (2.50)$$

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,

$$\begin{aligned} H' |\Psi\rangle &= H' \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k |\Psi_0\rangle = u_{k'} v_k H' b_{k'}^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger |\Psi_0\rangle = (H'_0 + E_{k'} + E_k) u_{k'} v_k |\Psi_0\rangle = \\ &= (H'_0 + E_{k'} + E_k) |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Энергия данного состояния будет равна¹⁾

$$E_\Psi = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = H'_0 + E_{k'} + E_k + \lambda \langle N \rangle_\Psi, \quad (2.52)$$

где

$$\langle N \rangle_\Psi = \frac{\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = N + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{k'}}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_{k'}^2 + \Delta_0^2}} - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} \right). \quad (2.53)$$

То есть, при возбуждении ядра его энергия повышается на

$$E_\Psi - E_{\Psi_0} \approx E_{k'} + E_k, \quad (2.54)$$

¹⁾Вспомогательный гамильтониан H' отличается от истинного H слагаемым λN .

пренебрегая нарушающими среднее число нуклонов слагаемыми в (2.53). Это можно интерпретировать как то, что при возбуждении ядра рождаются пары частиц b с энергиями (2.50).

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

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

$$\Delta_0 = G \sum_{k>0} u_k v_k, \quad 2u_k v_k = \frac{\Delta_0}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}}, \quad (2.55a)$$

$$\frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta_0}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} = \Delta_0. \quad (2.55b)$$

Решение $\Delta_0 = 0$ всегда присутствует в (2.55b). При численном расчёте сумма в (2.55b) будет кончатся некоторой оболочкой Λ . Для достаточно больших G и/или дальней (в смысле отсчёта от уровня Ферми) оболочке Λ будет присутствовать решение $\Delta_0 \neq 0$.

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 и одночастичных уровней с учётом парных корреляций для цепочек изотопов кислорода ($A = 16; 18; 20$), никеля ($A = 60; 62; 64$) и железа ($A = 56; 58; 60$) в основном состоянии. 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 ($q = n$).

Также были рассчитаны однонуклонные уровни изотопов ^{16}O и ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni в их возбуждённых состояниях (с энергиями возбуждения до 30 МэВ) без учёта парных корреляций. Данные уровни можно использовать при комбинаторных расчётах плотности возбуждённых уровней, что важно знать при моделировании ядерных реакций.

3.1 ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ЦЕПОЧКИ ИЗОТОПОВ КИСЛОРОДА

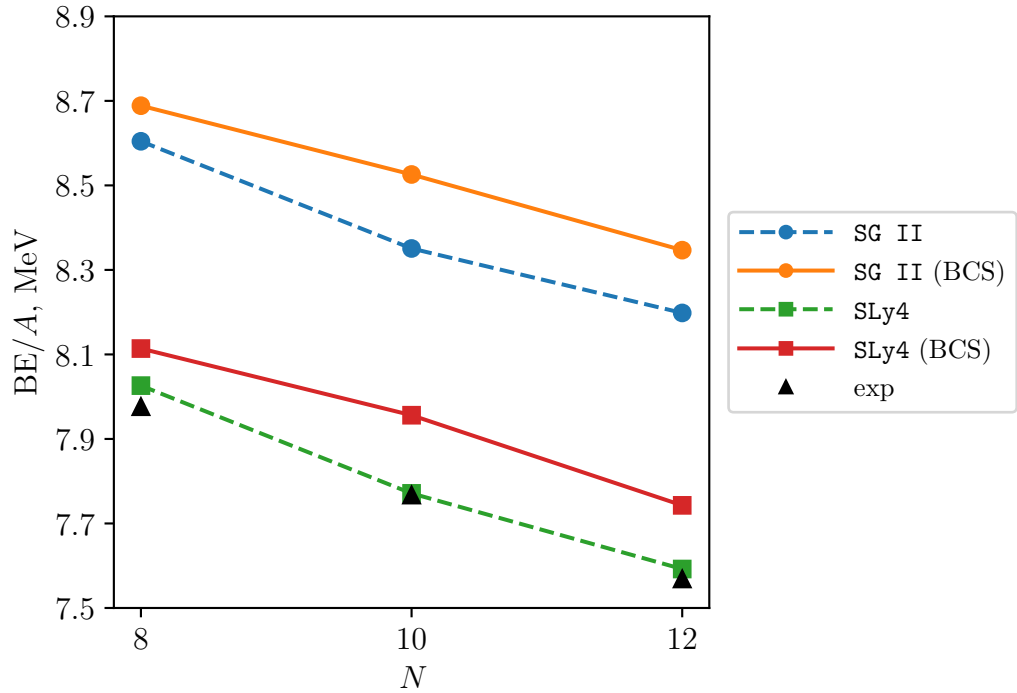


Рисунок 3.1 — Удельные энергии связи изотопов кислорода ^{16}O , ^{18}O , ^{20}O в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта. Экспериментальные точки — [16].

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. Также необходимо учесть, что (практически) все наборы параметров скирмовских сил (в том числе и набор SLy4) подбирались с целью воспроизвести наблюдаемые у дважды магических ядер, поэтому можно сказать, что парные корреляции уже эффективно учтены в силу значений параметров скирмовских сил.

3.2 ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ЦЕПОЧКИ ИЗОТОПОВ НИКЕЛЯ

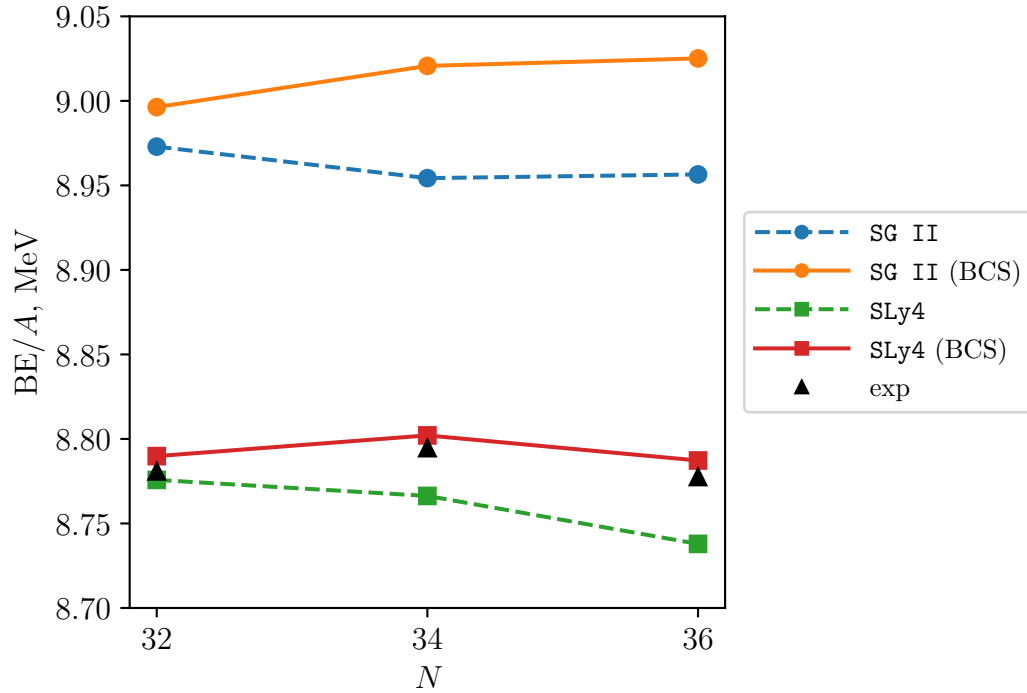


Рисунок 3.2 — Удельные энергии связи изотопов никеля ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта. Экспериментальные точки — [16].

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.

3.3 ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ЦЕПОЧКИ ИЗОТОПОВ ЖЕЛЕЗА

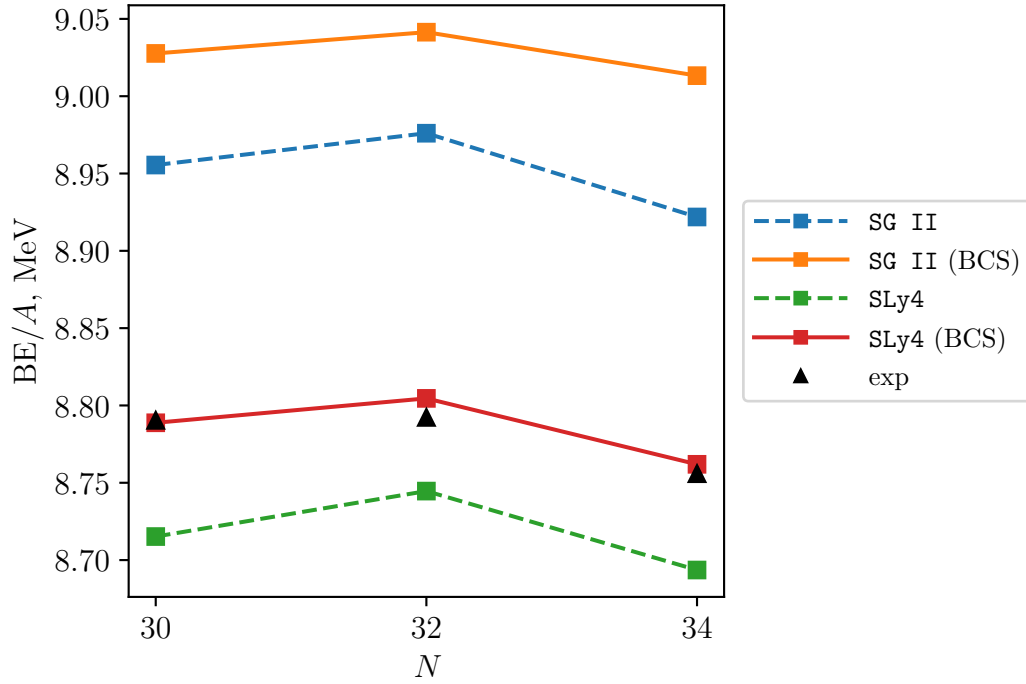


Рисунок 3.3 — Удельные энергии связи изотопов железа ^{56}Fe , ^{58}Fe , ^{60}Fe в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта. Экспериментальные точки — [16].

На [рисунке 3.3](#) изображены вычисленные энергии связи для изотопов железа ^{56}Fe , ^{58}Fe , ^{60}Fe . Для данной цепочки показаны удельные энергии связи, вычисленные в параметризациях SLy4 и SG II. Полученные значения в параметризации SLy4 с учётом парных корреляций разумным образом согласуются с экспериментальными данными.

Таким образом, рассмотрев энергии связи для цепочек изотопов кислорода, никеля и железа, можно предположить, что для ядер с $A \gtrsim 56$ протоны и нейтроны при учёте парных корреляций можно рассматривать независимо.

3.4 ОДНОЧАСТИЧНЫЕ УРОВНИ

3.4.1 ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ЖЕЛЕЗА-60

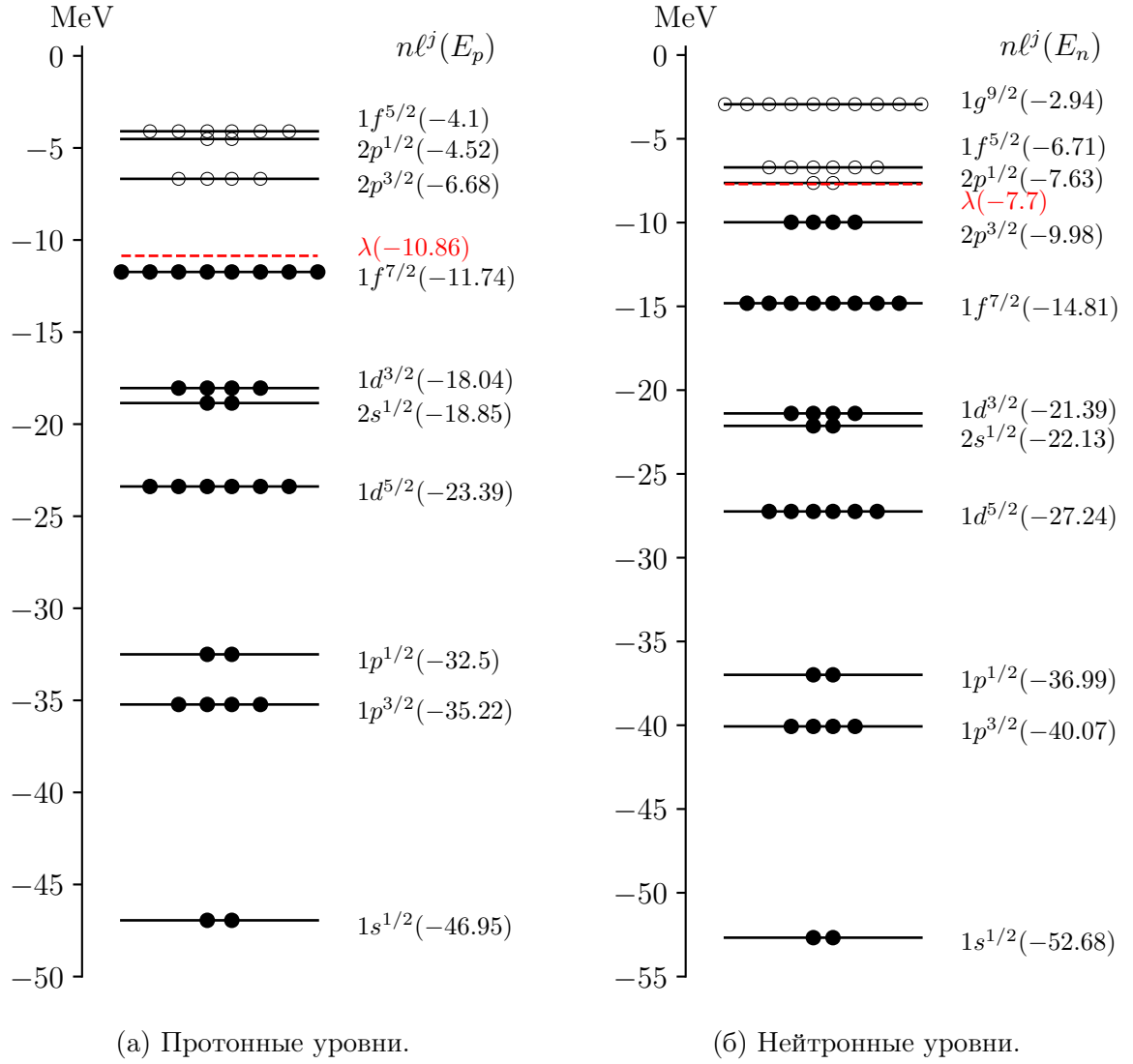


Рисунок 3.4 — Однуклонные уровни основного состояния ядра ^{60}Fe с учётом парных корреляций.

На рисунке 3.4 изображены вычисленные однуклонные ((а) — протонные, (б) — нейтронные) энергетические уровни основного состояния ядра ^{60}Fe с учётом парных корреляций и схематически¹⁾ показано расположение нуклонов по уровням.

¹⁾При учёте парных корреляций можно говорить о вероятности v_k^2 нахождения нуклона на том или ином уровне k . Уровень Ферми λ в таком подходе отражает энергетический уровень (который может и не являться доступным для заселения), выше которого вероятность обнаружить нуклон равна $v_k^2 < 1/2$.

3.4.2 ОСНОВНОЕ И ВОЗБУЖДЁННОЕ СОСТОЯНИЕ НИКЕЛЯ-62

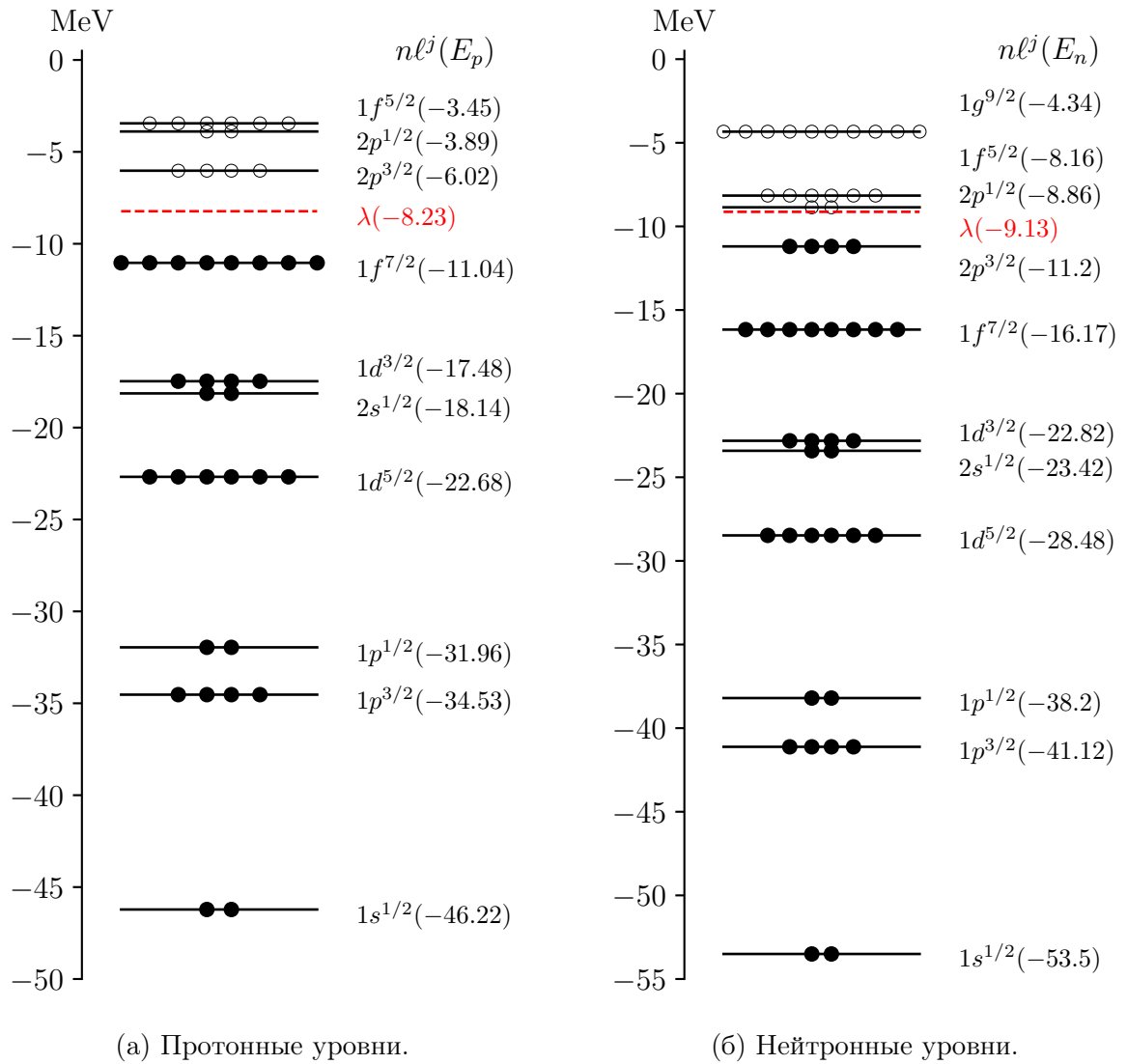
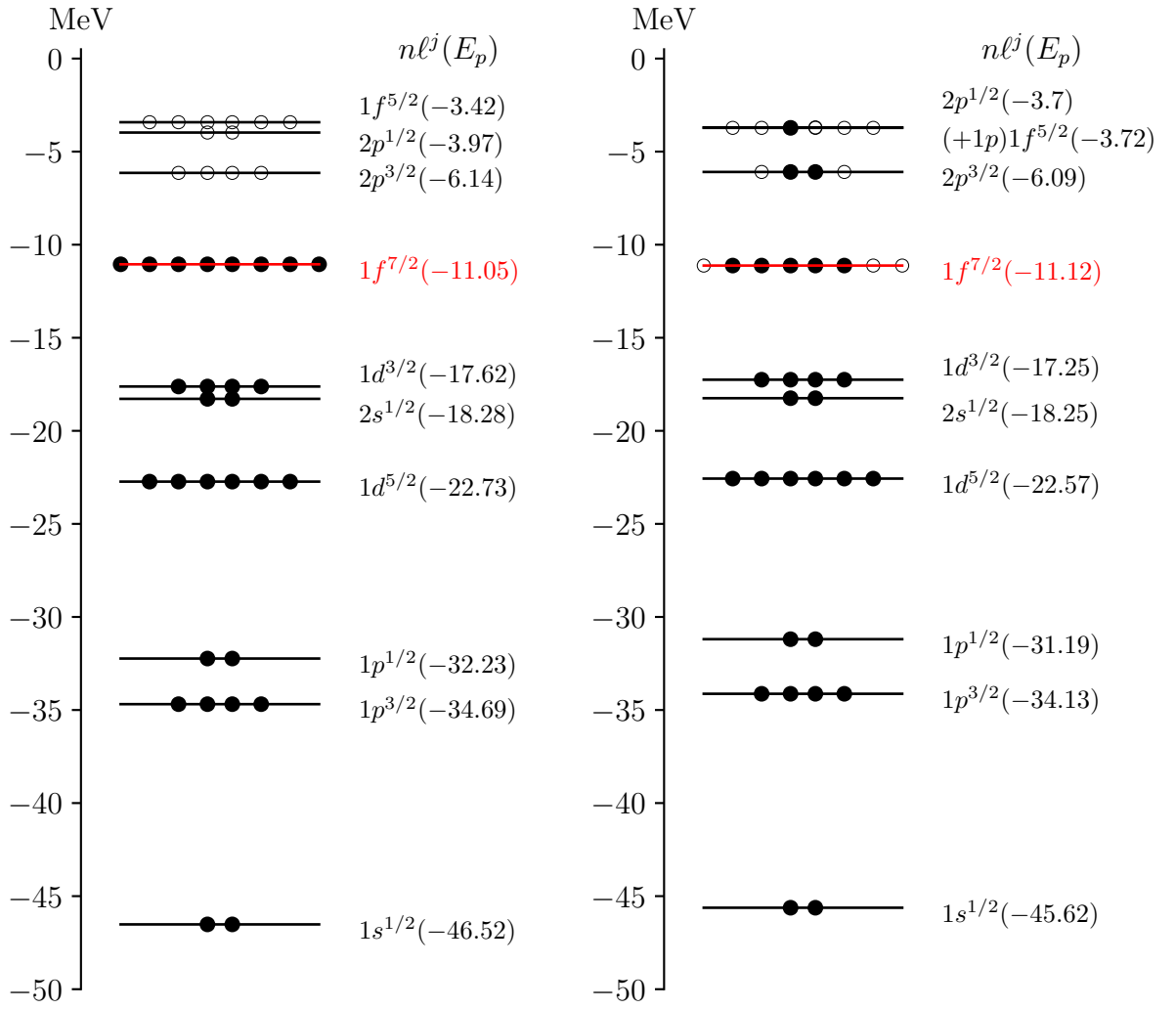


Рисунок 3.5 — Однуклонные уровни основного состояния ядра ^{62}Ni с учётом парных корреляций.

На **рисунке 3.5** изображены вычисленные однуклонные ((а) — протонные, (б) — нейтронные) энергетические уровни основного состояния ядра ^{62}Ni с учётом парных корреляций и схематически показано расположение нуклонов по уровням.



(а) Протонные уровни основного состояния.

(б) Протонные уровни возбуждённого состояния.

Рисунок 3.6 — Протонные одночастичные уровни ядра ^{62}Ni без учёта парных корреляций.

На рисунке 3.6 изображены протонные энергетические уровни ядра ^{62}Ni без учёта парных корреляций и показано расположение протонов по уровням, где (а) — протонные уровни основного состояния ядра, (б) — протонные уровни возбуждённого состояния ядра. Для приведённой возбуждённой конфигурации ядра можно проследить характерное поведение уровней при возбуждении ядра: они могут сдвинуться и поменять порядок следования (здесь это будут уровни $2p^{1/2}$ и $1f^{5/2}$).

Подобные уровни были рассчитаны для всевозможных возбуждённых конфигураций ядер никеля ($A = 60; 62; 64$) и ядра кислорода-16 (с учётом как протонных, так и нейтронных возбуждений) с энергиями возбуждения до 30 МэВ. Данные уровни можно использовать при комбинаторных расчётах плотности возбуждённых уровней, что важно знать при моделировании ядерных реакций.

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 итерационно численно решены, а затем рассмотрены получающиеся удельные энергии связи и одночастичные уровни для цепочек изотопов: кислорода (^{16}O , ^{18}O , ^{20}O), железа (^{56}Fe , ^{58}Fe , ^{60}Fe) 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. Также данная параметризация (как и многие другие) уже эффективно учитывает парные корреляции, поскольку значения параметров подбирались с целью воспроизведения наблюдаемые дважды магических ядер. Это привело к завышению оценок энергий связи при учёте протон-протонных и нейтрон-нейтронных парных корреляций. Для цепочек изотопов никеля и железа также ближе всего к экспериментальным данным были получены значения в параметризации SLy4, но с учётом парных корреляций. Так, можно предположить, что для ядер с $A \gtrsim 56$ приближение независимого рассмотрения нейтронов и протонов при учёте парных корреляций является обоснованным.

Также были рассчитаны однонуклонные уровни изотопов ^{16}O и ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni в их возбуждённых состояниях (с энергиями возбуждения до 30 МэВ) без учёта парных корреляций. Данные уровни можно использовать при комбинаторных расчётах плотности возбуждённых уровней, что важно знать при моделировании ядерных реакций.

Рассматриваемый формализм может быть обобщён, в частности, на включение в рассмотрение нечётных ядер (как следствие — рассмотрение возбуждённых состояний чётных ядер с учётом парных корреляций), 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.