

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

**ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА
К МАГИСТЕРСКОЙ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЕ
МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛОТНОСТИ
ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМНЫХ ЯДЕР**

Студент

_____ Л. Е. Трофимов

Научный руководитель,
д.ф.-м.н., проф.

_____ А. Л. Барабанов

Москва 2025

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРА

МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛОТНОСТИ ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМНЫХ ЯДЕР

Студент

_____ Л. Е. Трофимов

Научный руководитель,

д.ф.-м.н., проф.

_____ А. Л. Барабанов

Рецензент,

к.ф.-м.н.

_____ Н. Б. Шульгина

Секретарь ГЭК,

к.ф.-м.н.

_____ А. А. Кириллов

Зав. каф. №40,

д.ф.-м.н., проф.

_____ М. Д. Скорохватов

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	5
1 Аналитические формулы плотности состояний и уровней	9
1.1 Преобразование Лапласа плотности состояний подсистемы нейтронов	10
1.2 Обобщение на случай системы из двух подсистем	13
1.3 Метод перевала	14
1.4 Обратное преобразование Лапласа	17
1.5 Используемые приближения	22
1.5.1 Замена функции g на среднее значение	22
1.5.2 Низкотемпературное приближение	22
1.5.3 Использование метода перевала	23
1.5.4 Равенство плотностей одночастичных состояний для протонов и нейтронов	23
1.6 Плотность состояний в зависимости от энергии	23
1.7 Плотность уровней в зависимости от энергии и спина	24
1.8 Плотность уровней в зависимости от энергии	25
2 Комбинаторный метод вычисления плотности состояний и уровней	26
2.1 Алгоритм перебора многочастичных состояний для подсистемы нейтронов или протонов	26
2.2 Получение распределения плотности состояний в зависимости от энергии возбуждения	28
2.3 Получение распределения плотности многочастичных состояний в зависимости от проекции углового момента	28
2.4 Получение распределения плотности уровней	30

3	Модель прямоугольной ямы с непроницаемыми стенками	31
3.1	Описание модели	31
3.2	Моделирование плотности многочастичных состояний	33
4	Модель модифицированного осциллятора	35
4.1	Плотность состояний в зависимости от энергии возбуждения	36
4.2	Плотность состояний в зависимости от проекции углового мо- мента	37
4.3	Трёхмерное распределение плотности состояний	39
4.4	Распределение плотности уровней в зависимости от полного углового момента	41
4.5	Распределение плотности уровней в зависимости от энергии	42
4.6	Сверка с экспериментальными данными	43
4.6.1	Проверка для ядер Ni	43
5	Модель самосогласованного потенциала с учётом эффекта спаривания нуклонов	46
5.1	Метод Хартри-Фока	46
5.1.1	Плотностно-независимые силы	46
5.1.2	Плотностно-зависимые силы Скирма	47
5.2	Учёт эффекта спаривания нуклонов. Применение теории сверх- проводимости Бардина-Купера-Шриффера к ядерной материи	48
5.3	Применение метода Хартри-Фока с учётом эффекта спари- вания нуклонов для вычисления плотности многочастичных состояний в приближении замороженного остова	49
5.3.1	Эффективный учёт остаточного взаимодействия . . .	50
5.3.2	Асимметрия чётности в новом одночастичном базисе	53
5.4	Учёт изменения самосогласованного поля при возбуждении ядра	56
6	Моделирование реакций в программе Talys	58
6.1	Метод оценки надёжности вычислений	59
6.2	Результаты для ^{58}Ni	60
6.3	Результаты для ^{59}Co	63
6.4	Результаты для ^{112}Cd	64

6.5 Результаты для ^{113}In	66
Заключение	68
Приложения	69
А Описание алгоритма перебора многочастичных состояний . . .	69
А.1 Входные параметры	69
А.2 Внутренние переменные	69
А.3 Описание работы алгоритма	72
Список использованных источников	80

ВВЕДЕНИЕ

Атомное ядро является системой связанных протонов и нейтронов, взаимодействующих посредством ядерных и электромагнитных сил. Если нуклонов достаточно много, то каждый из них движется в самосогласованном потенциале, создаваемом всеми остальными нуклонами [1]. Тогда можно поставить задачу на собственные значения и собственные функции одночастичного гамильтониана:

$$H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle.$$

В сформированном потенциале возникают одночастичные состояния, которые характеризуются набором квантовых чисел, получающихся из симметрии самого потенциала. Если одночастичные состояния обладают одинаковой энергией, то они формируют уровень с характерной кратностью вырождения. Так, если ядерная оболочка заполнена, то формируется изотропный потенциал, в котором при решении в сферических координатах одночастичные состояния характеризуются такими числами, как: n — главное квантовое число, l — орбитальный момент, l_z — проекция орбитального момента на ось z , чётность p . Также можно ввести полный угловой момент $\vec{j}$, равный $\vec{l} + \vec{s}$ и его проекцию j_z .

Применяя вариационный метод [2]

$$\delta \langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle = 0$$

к задаче на собственные числа и функции, можно получить «одночастичные состояния», которые характеризуются определёнными квантовыми числами. Изменение параметров взаимодействия в гамильтониане или учёт новых эффектов сказываются на энергии одночастичных состояний.

Важное свойство нуклонов в ядре — парное взаимодействие. Оно влияет, в частности, на энергию связи E_b : известно, что масса ядра с нечётным

числом нуклонов A больше, чем средняя масса двух соседних чётных ядер из-за появления нуклона, который не участвует в парном взаимодействии. Эта разница является энергией спаривания и может быть записана как

$$\Delta \approx M(^AX) - \frac{M(^{A+1}X) + M(^{A-1}X)}{2}.$$

Различие в массах чётных и нечётных ядер было известно ещё в 1930-х годах; в 1936 году была разработана капельная модель ядра и формула Вайцзеккера. В 1957 году была опубликована работа [3], в которой давалось объяснение эффекту сверхпроводимости: электроны при низких энергиях образуют связанные состояния (куперовские пары) и понижают общую энергию. Далее эта теория была применена к ядерной материи [4; 5] для учёта эффекта различия масс из-за спаривания нуклонов. В данной работе был учтён эффект спаривания нуклонов.

Далее, зная одночастичные состояния в самосогласованном поле, можно получить возбуждённые многочастичные состояния ядра (без учёта остаточного взаимодействия). При этом чем больше энергия возбуждения, тем больше плотность уровней $\rho(E, J_z, P)$ и плотность многочастичных состояний $\omega(E, J_z, P)$, что играет важную роль в протекании ядерных реакций.

Рассмотрим некоторую ядерную реакцию с образованием компаунд-ядра (составного ядра) C^* : $a + A \rightarrow C^* \rightarrow b + B^*$. Поскольку C^* находится в возбуждённом состоянии, то оно через некоторое время распадётся на частицу b и ядро B^* с меньшей энергией возбуждения.

Таким образом, в ядерных реакциях происходят переходы ядер из одних многочастичных состояний в другие. В работе [6], посвящённой описанию вычислительного комплекса Talys, ядерные реакции поясняются рисунком 1. Здесь изображены переходы из одних многочастичных состояний в другие через разные каналы распада (n — испускание нейтрона, p — протона, d — дейтрона, f — деление). Компаунд-ядро находится в правом верхнем углу. Чем левее ядро на диаграмме, тем меньше у него нейтронов, чем ниже — тем меньше протонов. Для каждого ядра существуют дискретные низколежащие уровни. При больших энергиях возбуждения количество уровней на определённый интервал энергией становится настолько велико, что приходится вводить плотность уровней, которая определяет вероятность перехода ядра в другие состояния с меньшей энергией в ин-

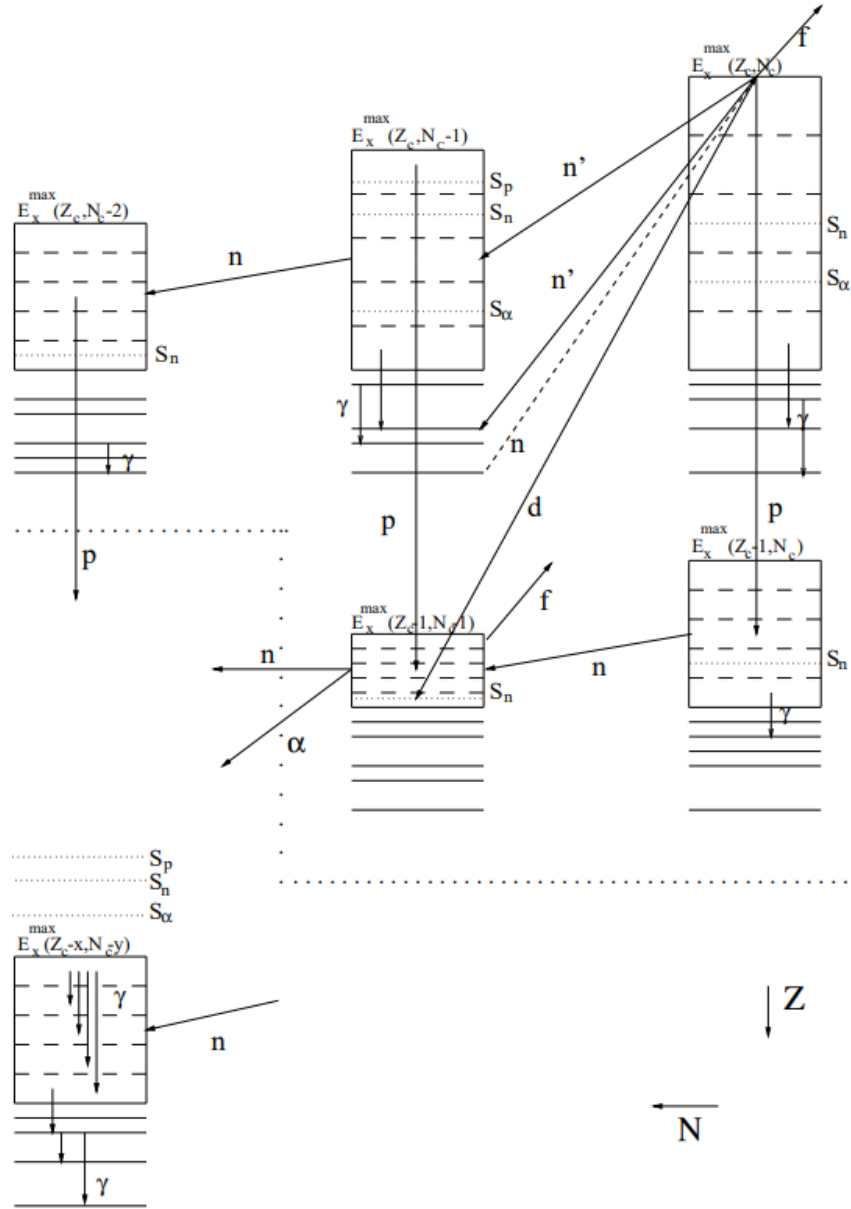


Рисунок 1 — Иллюстрация возможных путей распада [6]

тервале $[E - \Delta E/2, E + \Delta E/2]$.

Аналитические формулы для этой плотности получены в модели ферми-газа в первом разделе. Эта модель независимых частиц была предложена Бете в 1936 году [7] и далее разрабатывалась другими авторами [1; 8].

Основная часть данной работы посвящена разработке комбинаторного метода вычисления плотности ядерных уровней. Метод заключается в переборе многочастичных состояний путём перераспределения нуклонов по одночастичным состояниям. Представлены результаты соответствующих расчётов, выполненных для одночастичных состояний изначально в прямоугольной трёхмерной яме с непроницаемыми стенками, одномерном

гармоническом осцилляторе и модифицированном трёхмерном осцилляторе. Далее в качестве одночастичного базиса был использован реалистичный самосогласованный потенциал, полученный методом Хартри-Фока; в расчёте был учтён эффект спаривания нуклонов.

1 АНАЛИТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ И УРОВНЕЙ

В этом разделе представлен обзор основных результатов по плотности уровней ядер в модели идеального ферми-газа, основанный на работах [1; 7–9]. Целью является получение формулы, показывающей, сколько многочастичных состояний dN находится в интервале энергий возбуждения $(U, U + dU)$ с проекцией полного углового момента $(M, M + dM)$. Эта характеристика называется плотностью многочастичных состояний и обозначается $\omega(U, M)$. Далее будут получены следствия из этой формулы, в частности, плотность уровней.

Стоит отметить, что существуют также и другие модели, феноменологические модификации модели независимых частиц, которые применяются для описания плотности возбуждённых уровней реальных ядер. К ним, в частности, относятся модель ферми-газа с обратным смещением [10] и модель Гильберта-Камерона [11]. Существует также подход к вычислению плотности состояний в сверхтекучей модели ядра, в которой учитывается остаточное взаимодействие нуклонов, приводящее к их спариванию при относительно низких энергиях возбуждения. Но и в этой модели выше некоторой энергии возбуждения (“точки фазового перехода”) плотность состояний описывается так же, как в модели независимых частиц. Перечисленные выше модификации модели ферми-газа рассмотрены, например, в работах [8; 9].

Мы остановимся на модели идеального ферми-газа и получим соответствующие формулы плотности многочастичных состояний и уровней.

1.1 ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛАПЛАСА ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ПОДСИСТЕМЫ НЕЙТРОНОВ

Рассмотрим для начала систему, состоящую из невзаимодействующих нуклонов одного типа, например, нейтронов, движущихся в некотором потенциале. Пусть индекс j нумерует одночастичные состояния; ε_j и m_j — энергия и проекция углового момента на ось z нейтрона в состоянии j , а n_j — числа заполнения (0 или 1) состояния j . Многочастичные состояния $|i\rangle$ системы нейтронов определяются набором чисел заполнения $n_j(i)$, которые задают число нейтронов

$$N_i = \sum_j n_j(i), \quad (1.1.1)$$

энергию

$$E_i = \sum_j \varepsilon_j(i) n_j(i), \quad (1.1.2)$$

и полную проекцию углового момента на ось z

$$M_i = \sum_j m_j n_j(i) \quad (1.1.3)$$

в состоянии $|i\rangle$. Плотность состояний такой системы, зависящая от непрерывных переменных E, N и M , задаётся следующей формулой

$$\omega(E, N, M) = \sum_i \delta(E - E_i) \delta(N - N_i) \delta(M - M_i). \quad (1.1.4)$$

Для приведения правой части этой формулы к виду, плавно зависящему от E, N и M , выполним преобразование Лапласа. Для функции одной переменной $f(t)$ это преобразование и обратное преобразование определены формулами:

$$F(p) = \int_0^\infty e^{-pt} f(t) dt, \quad f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{Re}(p)-i\infty}^{\text{Re}(p)+i\infty} e^{pt} F(p) dp. \quad (1.1.5)$$

В нашей задаче мы имеем дело с функцией трёх переменных. Пусть $Q(\beta, \alpha, k)$ — результат преобразования Лапласа плотности состояний $\omega(E, N, M)$:

$$Q(\beta, \alpha, k) = \int_0^\infty dE \int_0^\infty dN \int_0^\infty dM e^{-\beta E + N\alpha + kM} \omega(E, N, M) = \sum_i e^{-\beta E_i + N_i \alpha + k M_i}. \quad (1.1.6)$$

Здесь β, α, k — параметры преобразования. Знаки этих параметров в показателе экспоненты выбираем апостериори, т.к. потом они приобретут некоторый смысл. Поскольку правая часть (1.1.6) аналогичная большой статистической сумме, то, например, $1/\beta = T$ имеет смысл температуры. Перейдём в формуле (1.1.6) от многочастичных характеристик E_i, N_i, M_i к одночастичным ε_j, n_j, m_j :

$$Q(\beta, \alpha, k) = \sum_i e^{\sum_j (-\beta \varepsilon_j + \alpha + k m_j) n_j(i)} = \sum_i e^{(-\beta \varepsilon_1 + \alpha + k m_1) n_1(i)} e^{(-\beta \varepsilon_2 + \alpha + k m_2) n_2(i)} \dots \quad (1.1.7)$$

Поскольку $n_j(i)$ принимает значения 0 или 1, и мы суммируем по всем многочастичным состояниям $|i\rangle$, то ряд (1.1.7) можно представить в виде:

$$Q(\beta, \alpha, k) = (1 + e^{-\beta \varepsilon_1 + \alpha + k m_1}) (1 + e^{-\beta \varepsilon_2 + \alpha + k m_2}) \dots = \prod_j (1 + e^{-\beta \varepsilon_j + \alpha + k m_j}). \quad (1.1.8)$$

Если возьмём логарифм, то получим:

$$\ln Q(\beta, \alpha, k) = \sum_j \ln (1 + e^{-\beta \varepsilon_j + \alpha + k m_j}). \quad (1.1.9)$$

Перейдём от суммирования к интегрированию, введём плотность одночастичных состояний $g(\varepsilon)$, а также выделим явно положительные и отрица-

тельные проекции моментов $m^+ \geq 0$ и $m^- = |m^-| > 0$:

$$\begin{aligned} \sum_j \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon_j + \alpha + km_j}) &= \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon + \alpha + km}) d\varepsilon = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon + \alpha + km^+}) d\varepsilon + \frac{1}{2} \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon + \alpha - km^-}) d\varepsilon, \end{aligned} \quad (1.1.10)$$

где

$$g(\varepsilon) = \sum_j \delta(\varepsilon - \varepsilon_j). \quad (1.1.11)$$

Вычислим первый интеграл. Выделим пределы интегрирования удобным образом, а затем рассмотрим низкотемпературное приближение: $(\alpha + km) \gg 1$. Обозначим для краткости $-\beta\varepsilon + \alpha - km^+ = x(\varepsilon)$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln(1 + e^x) d\varepsilon &= \int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) \underbrace{\ln(1 + e^x)}_{e^x(1 + e^{-x})} d\varepsilon + \int_{\frac{\alpha + km^+}{\beta}}^\infty g(\varepsilon) \ln(1 + e^x) d\varepsilon = \\ &= \underbrace{\int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) x d\varepsilon}_{(1)} + \underbrace{\int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) \ln(1 + e^{-x}) d\varepsilon}_{(2)} + \underbrace{\int_{\frac{\alpha + km^+}{\beta}}^\infty g(\varepsilon) \ln(1 + e^x) d\varepsilon}_{(3)}. \end{aligned} \quad (1.1.12)$$

$$(1) = \int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g(\varepsilon) (-\beta\varepsilon + \alpha - km^+) d\varepsilon = \dots = \bar{g} \cdot \frac{(\alpha + km^+)^2}{2\beta}. \quad (1.1.13)$$

$$(2) \xrightarrow[\varepsilon = -y + (\alpha + km^+)/\beta]{\beta\varepsilon - \alpha + km^+ = -\beta y} \int_{\frac{\alpha + km^+}{\beta}}^0 g \ln(1 + e^{-\beta y}) d(-y) = \int_0^{\frac{\alpha + km^+}{\beta}} g \ln(1 + e^{-\beta y}) dy. \quad (1.1.14)$$

$$(3) \xrightarrow[\varepsilon = y + (\alpha + km^+)/\beta]{-\beta\varepsilon + \alpha - km^+ = -\beta y} \int_0^\infty g \ln(1 + e^{-\beta y}) dy = \bar{g} \frac{1}{\beta} \int_0^\infty \ln(1 + e^{-\beta y}) d(\beta y) = \frac{\bar{g}}{\beta} \cdot \frac{\pi^2}{12}. \quad (1.1.15)$$

Используя «низкотемпературное приближение» $(\alpha + km^+) \gg 1$ (интегрируем до ∞), а также то, что интеграл $\int_0^\infty \ln(1 + e^{-x}) dx = \frac{\pi^2}{12}$ и вынося g из-под интеграла как среднее, приводим сумму интегралов (1.1.12) к виду:

$$\bar{g} \cdot \frac{(\alpha + km^+)^2}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} \cdot \bar{g} \cdot \frac{\pi^2}{12} + \frac{1}{2\beta} \cdot \bar{g} \cdot \frac{\pi^2}{12} = \frac{\bar{g}}{2} \left(\frac{(\alpha + km^+)^2}{2\beta} + \frac{\pi^2}{6\beta} \right). \quad (1.1.16)$$

Мы получили первый интеграл в выражении (1.1.10). Второй будет аналогичный с заменой m^+ на $-m^-$. Тогда, преобразовывая (1.1.10), получаем:

$$\ln Q(\beta, \alpha, k) \approx \frac{\bar{g}(\alpha + km^+)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}(\alpha - km^-)^2}{4\beta} + \frac{\bar{g}\pi^2}{6\beta}. \quad (1.1.17)$$

1.2 ОБОБЩЕНИЕ НА СЛУЧАЙ СИСТЕМЫ ИЗ ДВУХ ПОДСИСТЕМ

Протонная и нейтронная системы независимы в том смысле, что гамильтониан ядра является суммой гамильтонианов протонной и нейтронной подсистем. Тогда $\Omega = \Omega_1 \cdot \Omega_2$, то есть статсумма является произведением статсумм подсистем. При этом $\ln \Omega = \ln \Omega_N + \ln \Omega_Z$, а $\ln \Omega_N$ известно — это (1.1.17). Также введём индексы Z и N , чтобы различать протонную и нейтронную подсистемы.

$$\begin{aligned}
\ln Q(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k) &\approx \frac{\overline{g_Z}(\alpha_Z + km_Z^+)^2}{4\beta} + \frac{\overline{g_Z}(\alpha_Z - km_Z^-)^2}{4\beta} + \frac{\overline{g_Z}\pi^2}{6\beta} + \\
&+ \frac{\overline{g_N}(\alpha_N + km_N^+)^2}{4\beta} + \frac{\overline{g_N}(\alpha_N - km_N^-)^2}{4\beta} + \frac{\overline{g_N}\pi^2}{6\beta} = \quad (1.2.1) \\
&= \frac{\overline{g_Z}\alpha_Z^2}{2\beta} + \frac{\overline{g_N}\alpha_N^2}{2\beta} + \frac{a}{\beta} + \frac{k^2 \cdot \overline{g} \cdot \overline{m^2}}{2\beta}.
\end{aligned}$$

Здесь положено $m_Z^+ = m_Z^-$, $m_N^+ = m_N^-$, то есть $\langle m \rangle = 0$. Также введены новые обозначения: $g = \overline{g_Z} + \overline{g_N}$ — полная плотность одночастичных состояний, $a = \frac{\pi^2}{6}g$ — параметр плотности уровней, $\overline{m^2} = \frac{1}{g}(m_Z^2\overline{g_Z} + m_N^2\overline{g_N})$.

Мы получили выражение для $\ln Q(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k)$. Теперь из него нужно получить плотность состояний $\omega(E, Z, N, M)$, плавно зависящую от своих аргументов. Для этого потребуются «метод перевала» и обратное преобразование Лапласа.

1.3 МЕТОД ПЕРЕВАЛА

Метод перевала известен из теории функций комплексного переменного. Его также можно применить к нашей задаче [8]. Он нам понадобится, поскольку в обратном преобразовании Лапласа интегрирование производится вдоль мнимой оси.

Пусть имеется некоторая функция $F(\lambda)$ вида

$$F(\lambda) = \int_C f(z)e^{\lambda S(z)} dz, \quad (1.3.1)$$

где C — некоторый контур интегрирования, а функция $S(z)$ удовлетворяет следующим условиям:

- 1) $S(z)$ определена и имеет производную в каждой точке области G , содержащей кривую C (которая может быть неограниченной).
- 2) Существует единственная точка z_0 , в которой первая производная $S'(z_0) = 0$.
- 3) В точке z_0 вторая производная $S''(z_0) = 0$.

Тогда

$$F(\lambda) \xrightarrow[\lambda \in \mathbb{R}]{\lambda \rightarrow +\infty} f(z_0) \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda |S''(z_0)|}} \cdot e^{\lambda S(z_0)} e^{i\varphi_m}, \quad (1.3.2)$$

где

$$\varphi_m = \frac{\pi - \theta}{2} + m\pi, \theta = \arg(S''(z_0)). \quad (1.3.3)$$

Для доказательства рассмотрим сначала действительную функцию

$$\Phi(\lambda) = \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda h(x)} dx. \quad (1.3.4)$$

Здесь $h(x)$ — дифференцируемая функция на отрезке (a, b) . Существует единственная точка x_0 , в которой первая производная $h'(x_0)$ равна 0 и вторая производная $h''(x_0)$ отрицательна. Вблизи точки x_0 можно разложить функцию $h(x)$ как

$$h(x) \approx h(x_0) + \frac{1}{2} h''(x_0) (x - x_0)^2 \quad (1.3.5)$$

и положить $\varphi(x) \approx \varphi(x_0)$. Здесь нет слагаемого с $h'(x_0)$, поскольку в x_0 оно равно нулю по условию.

Введём функцию $H(\lambda, x) = e^{\lambda(h(x) - h(x_0))}$. При $\lambda \gg 1$ эта функция будет выглядеть как очень резкий пик с центром в точке x_0 , значение $H(\lambda, x_0) = 1$. Значение интеграла набирается именно около этой точки. Вне окрестности $(x_0 - \delta, x_0 + \delta)$ значение $H(\lambda, x)$ будет мало. Тогда можно преобразовать $\Phi(\lambda)$:

$$\begin{aligned} \Phi(\lambda) &= \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda h(x)} dx = \int_a^b \varphi(x) e^{\lambda(h(x) - h(x_0))} e^{\lambda h(x_0)} dx \approx \\ &\approx \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} \varphi(x_0) e^{\lambda h(x_0) + \frac{1}{2} \lambda h''(x_0) (x - x_0)^2 - \lambda h(x_0)} \cdot e^{\lambda h(x_0)} dx = \\ &= \varphi(x_0) e^{\lambda h(x_0)} \int_{x_0 - \delta}^{x_0 + \delta} e^{\frac{1}{2} \lambda h''(x_0) (x - x_0)^2} dx. \end{aligned}$$

Сделаем замену

$$t = \sqrt{-\lambda h''(x_0)(x - x_0)^2} = \sqrt{-\lambda h''(x_0)} \cdot (x - x_0), \quad dx = \frac{dt}{\sqrt{-\lambda h''(x_0)}}. \quad (1.3.6)$$

Тогда

$$\Phi(\lambda) = \frac{\varphi(x_0)e^{\lambda h(x_0)}}{\sqrt{-\lambda h''(x_0)}} \underbrace{\int_{-\delta\sqrt{-\lambda h''(x_0)}}^{\delta\sqrt{-\lambda h''(x_0)}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt}_{\xrightarrow{\lambda \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{t^2}{2}} dt = \sqrt{2\pi}} \rightarrow \varphi(x_0)e^{\lambda h(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{-\lambda h''(x_0)}}. \quad (1.3.7)$$

Теперь рассмотрим наш случай: $z = x + iy$, $S(z) = u(x, y) + iv(x, y)$. Здесь S предполагается аналитической функцией. Тогда можно записать условие Коши-Римана:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} \quad \text{или} \quad \begin{cases} \partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2 = 0; \\ \partial^2 v / \partial x^2 + \partial^2 v / \partial y^2 = 0. \end{cases} \quad (1.3.8)$$

Поскольку $S''(z_0)$ по условию $\neq 0$, то тогда если $\partial^2 u / \partial x^2 > 0$, будет $\partial^2 u / \partial y^2 < 0$. То же самое для функции v . Получается, в окрестности z_0 нет ни максимума, ни экстремума; есть только точка перегиба. Поэтому эта точка называется «седловой точкой». Функции u и v имеют вид гиперболического параболоида.

Для доказательства сперва надо отметить, что по теореме Коши интеграл от аналитической функции не зависит от пути интегрирования, а определяется только начальной z_1 и конечной z_2 точками кривой C , которую выбираем удобным образом: пусть $\operatorname{Re}(S)$ убывает наиболее быстро, а $\operatorname{Im}(S) = \operatorname{const}$.

Введём обозначения
$$\begin{cases} S''(z_0) = re^{i\theta}; \\ z - z_0 = \rho e^{i\varphi}. \end{cases} \quad (1.3.9)$$

В окрестности z_0 будет $S(z) \approx S(z_0) + S''(z_0) \frac{(z - z_0)^2}{2} = S(z_0) + r\rho^2 e^{i(\theta+2\varphi)}$.
$$(1.3.10)$$

Получаем
$$\begin{cases} u(x,y) = u(x_0,y_0) + r\rho^2 \cos(\theta + 2\varphi); \\ v(x,y) = v(x_0,y_0) + r\rho^2 \sin(\theta + 2\varphi). \end{cases} \quad (1.3.11)$$

Отсюда видно, что линия наибоыстрейшего спада $\text{Re}(S)$ определяется $\cos(\theta + 2\varphi) = -1$, $\varphi_1 = \frac{\pi - \theta}{2}$. Этому условию удовлетворяют также углы $\varphi_m = \varphi_1 + \pi m$, $m \in \mathbb{Z}$. Заодно получается, что $\sin(\theta + \varphi_m) = 0$, следовательно, $v(x,y) = v(x_0,y_0) = \text{const}$, что гарантирует отсутствие осцилляций.

Продельывая рассуждения для $F(\lambda)$, аналогичные описанным ранее для $\Phi(\lambda)$, получаем:

$$F(\lambda) \xrightarrow[\lambda \in \mathbb{R}]{\lambda \rightarrow +\infty} f(z_0) \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda |S''(z_0)|}} \cdot e^{\lambda S(z_0)} e^{i\varphi_m}, \quad (1.3.12)$$

где

$$\varphi_m = \frac{\pi - \theta}{2} + \pi m, \quad \theta = \arg(S''(z_0)) \quad (1.3.13)$$

1.4 ОБРАТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛАПЛАСА

Обратное преобразование Лапласа от $Q(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k)$ к плотности одностатичных состояний $\omega(E, Z, N, M)$ выглядит следующим образом:

$$\omega(E, Z, N, M) = \frac{1}{(2\pi i)^4} \int Q(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k) \cdot e^{\beta E - \alpha_Z Z - \alpha_N N - kM} d\beta d\alpha_Z d\alpha_N dk. \quad (1.4.1)$$

Этот интеграл в основном набирается в окрестности седловой точки, в

окрестности пика функции

$$S = \beta E - \alpha_Z Z - \alpha_N N - kM + \ln Q. \quad (1.4.2)$$

В окрестности седловой точки первые производные по параметрам равны нулю. Следовательно, в некоторой окрестности этой точки $(\beta_0, \alpha_{Z0}, \alpha_{N0}, k_0)$ S определяется приближённым равенством

$$\begin{aligned} S(\beta, \alpha_Z, \alpha_N, k) &\approx S_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} \bigg|_{\beta_0} (\beta - \beta_0)^2 + \dots + \frac{\partial^2 S}{\partial \beta \partial \alpha_Z} \bigg|_{\beta_0, \alpha_{Z0}} (\beta - \beta_0)(\alpha_Z - \alpha_{Z0}) + \dots = \\ &= S_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} \bigg|_{\beta_0} (\beta - \beta_0)^2 + \dots + \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_Z} \bigg|_{\beta_0, \alpha_{Z0}} (\beta - \beta_0)(\alpha_Z - \alpha_{Z0}) + \dots \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

Поскольку мы интегрируем в обратном преобразовании Лапласа вдоль мнимой оси, удобно ввести следующие переменные:

$$\beta = \beta_0 + ix_1, \quad \alpha_Z = \alpha_{Z0} + ix_2, \quad \alpha_N = \alpha_{N0} + ix_3, \quad k = k_0 + ix_4. \quad (1.4.4)$$

Тогда можно преобразовать (1.4.1) как

$$\omega = \frac{1}{(2\pi)^4} \int e^{S_0 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} x_1^2 - \dots - \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_Z} x_1 x_2 - \dots} dx_1 dx_2 dx_3 dx_4. \quad (1.4.5)$$

Интеграл (1.4.5) можно записать в общем виде:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} \sum a_{ij} x_i x_j} dx_1 \dots dx_n = (2\pi)^{n/2} D^{-1/2}, \quad (1.4.6)$$

где $D = \det(a_{ij})$. Докажем это соотношение. Для начала заметим, что матрица $A = (a_{ij}) = (a_{ji})$ является симметричной, поскольку порядок дифференцирования $\ln(Q)$ по переменным $\beta, \alpha_Z, \alpha_N$ и k не важен, так как Q является непрерывной и гладкой функцией.

Для симметричных матриц существует ортогональное преобразование

$$B^T AB = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n), \quad B^T B = I, \quad \det(A) = \det(\Lambda) = \lambda_1 \dots \lambda_n \equiv D, \quad (1.4.7)$$

где B — ортогональная матрица, Λ — диагональная матрица с собственными значениями $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Чтобы применить это к нашему случаю, сделаем замену переменных $\mathbf{x} = B \cdot \mathbf{y}$, где $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$, $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$:

$$\sum a_{ij} x_i x_j = \mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \mathbf{y}^T B^T A B \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \Lambda \mathbf{y} = \sum \lambda_i y_i^2, \quad (1.4.8)$$

$$\begin{aligned} \int e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2} dy_1 \dots dy_n &= \prod_{i=1}^n \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} \lambda_i y_i^2} dy_i}_{\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_i}}} = (2\pi)^{n/2} \prod_{i=1}^n \lambda_i^{-1/2} = \\ &= (2\pi)^{n/2} \left(\prod_{i=1}^n \lambda_i \right)^{-1/2} = (2\pi)^{n/2} D^{-1/2}. \end{aligned} \quad (1.4.9)$$

Тогда остаётся только вычислить определитель вторых производных и e^{S_0} :

$$\omega = \frac{1}{(2\pi)^4} \cdot e^{S_0} \cdot (2\pi)^{4/2} \cdot D^{-1/2}. \quad (1.4.10)$$

Напомним, что $\ln Q = \frac{\overline{g_Z} \alpha_Z^2}{2\beta} + \frac{\overline{g_N} \alpha_N^2}{2\beta} + \frac{a}{\beta} + \frac{k^2 \cdot \overline{g \cdot m^2}}{2\beta}$. Опустим знак среднего в плотностях. Вычислим вторые производные для определителя D .

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta^2} &= \frac{g_Z \alpha_Z^2}{\beta^3} + \frac{g_N \alpha_N^2}{\beta^3} + \frac{k^2 \overline{g m^2}}{\beta^3} + \frac{2a}{\beta^3}; \\ \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_Z^2} &= \frac{g_Z}{\beta}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_N^2} = \frac{g_N}{\beta}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial k^2} = \frac{g \cdot \overline{m^2}}{\beta}; \\ \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_Z} &= -\frac{g_Z \alpha_Z}{\beta^2}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial \alpha_N} = -\frac{g_N \alpha_N}{\beta^2}; \\ \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \beta \partial k} &= -\frac{k \overline{g m^2}}{\beta^2}; \quad \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_Z \partial \alpha_N} = \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_Z \partial k} = \frac{\partial^2 \ln Q}{\partial \alpha_N \partial k} = 0. \end{aligned} \quad (1.4.11)$$

Определитель равен $D = 2gg_Zg_N\overline{a}m^2/\beta^6$. Теперь осталось найти e^{S_0} . Для этого нужно преобразовать полученные ранее выражения к хорошему виду. Далее нулевой индекс опускается.

Выразим E через S с помощью (1.4.2). В окрестности седловой точки $\frac{\partial S}{\partial \beta} = 0$. Тогда

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} = E + \frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} = 0 \implies E = -\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} = \frac{g_Z\alpha_Z^2}{2\beta^2} + \frac{g_N\alpha_N^2}{2\beta^2} + \frac{a}{\beta^2} + \frac{k^2g \cdot \overline{m}^2}{2\beta^2}. \quad (1.4.12)$$

Аналогичным образом находим:

$$\begin{aligned} Z &= \frac{\partial \ln Q}{\partial \alpha_Z} = g_Z \frac{\alpha_Z}{\beta}; \\ N &= \frac{\partial \ln Q}{\partial \alpha_N} = g_N \frac{\alpha_N}{\beta}; \\ M &= \frac{\partial \ln Q}{\partial k} = \frac{kg\overline{m}^2}{\beta} \implies k = \frac{M\beta}{g \cdot \overline{m}^2}. \end{aligned} \quad (1.4.13)$$

Используем соотношения для основного состояния, приняв во внимание, что $g(E > E_F) = 0$:

$$\begin{aligned} Z &= \int g_Z dE_Z = g_Z E_{ZF}; \\ N &= \int g_N dE_N = g_N E_{NF}; \\ E_0 &= \int g_Z E_Z dE_Z + \int g_N E_N dE_N = \frac{g_Z E_{ZF}^2}{2} + \frac{g_N E_{NF}^2}{2}. \end{aligned} \quad (1.4.14)$$

Тогда из уравнений (1.4.12), (1.4.13) и (1.4.14) находим:

$$\alpha_Z = \frac{Z\beta}{g_Z} = \frac{g_Z E_{ZF}\beta}{g_Z} = \beta E_{ZF}, \quad \alpha_N = \beta E_{NF}; \quad (1.4.15)$$

$$\begin{aligned} U = E - E_0 &= \frac{g_Z \alpha_Z^2}{2\beta^2} + \frac{g_N \alpha_N^2}{2\beta^2} + \frac{a}{\beta^2} + \frac{k^2 g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} - \frac{g_Z E_{ZF}^2}{2} - \frac{g_N E_{NF}^2}{2} = \\ &= \frac{a}{\beta^2} + k^2 \cdot \frac{g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} = \frac{a}{\beta^2} + \left(\frac{M\beta}{g \cdot \overline{m^2}} \right)^2 \cdot \frac{g \cdot \overline{m^2}}{2\beta^2} = \frac{a}{\beta^2} + \frac{M^2}{2g\overline{m^2}}; \end{aligned} \quad (1.4.16)$$

$$\frac{a}{\beta^2} = U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}}; \quad (1.4.17)$$

$$D = 2gg_Z g_N a \overline{m^2} / \beta^6 \xrightarrow{g_Z \approx g_N \approx g/2} \frac{g^3 a \overline{m^2}}{2\beta^6} = \frac{g\overline{m^2} \cdot (6/\pi^2)^2 a^3}{2\beta^6} = \frac{g\overline{m^2}}{2} \left(\frac{6}{\pi^2} \right)^2 \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)^3; \quad (1.4.18)$$

$$S = \beta E - \alpha_Z Z - \alpha_N - kM + \ln Q = \dots = \frac{2a}{\beta} = 2\sqrt{a \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)}. \quad (1.4.19)$$

Тогда, подставляя S и D в (1.4.10), получим:

$$\omega = \frac{1}{(2\pi)^2} D^{-1/2} e^S = \frac{1}{(2\pi)^2} \sqrt{\frac{2}{g\overline{m^2}}} \frac{\pi^2}{6} \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)^{-3/2} e^{2\sqrt{a \left(U - \frac{M^2}{2g\overline{m^2}} \right)}}. \quad (1.4.20)$$

Окончательно находим плотность многочастичных состояний в модели независимых частиц:

$$\omega(U, M) = \frac{dN(U, M)}{dU} = \frac{1}{12\sqrt{2g\langle m^2 \rangle}} \frac{e^{2\sqrt{a \left(U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle} \right)}}}{\left(U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle} \right)^{3/2}}, \quad (1.4.21)$$

Здесь используются параметры g , $\langle m^2 \rangle$ и a :

- g — сумма плотностей одночастичных состояний $g_Z + g_N$ вблизи энергии Ферми.
- $\langle m^2 \rangle = \frac{1}{g}(m_Z^2 g_Z + m_N^2 g_N)$ — средний квадрат проекции углового момента нуклона на ось z в состояниях вблизи энергии Ферми.

- $a = \frac{\pi^2}{6}g$ — параметр плотности уровней.

В сферически симметричном потенциале

$$\langle l_x^2 \rangle = \langle l_y^2 \rangle = \langle l_z^2 \rangle, \quad \langle l_x^2 \rangle + \langle l_y^2 \rangle + \langle l_z^2 \rangle = \langle l^2 \rangle. \quad (1.4.22)$$

Следовательно, если $\langle l_i^2 \rangle = \langle m^2 \rangle$, $i = x, y, z$, то $\langle m^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle l^2 \rangle$. В первом приближении воспользуемся классическими соображениями и скажем, что ядро — твёрдое тело, момент инерции которого $J = \overline{m^2} \hbar^2 g$. Для сферически симметричного ядра $J = \frac{2}{5}mR^2$. Тогда

$$\frac{1}{2g\langle m^2 \rangle} = \frac{\hbar^2}{2J} = \frac{\hbar^2}{\frac{4}{5}mR^2} = \frac{\hbar^2 c^2}{\frac{4}{5}mc^2 R^2}, \quad R = r_0 \cdot A^{1/3}. \quad (1.4.23)$$

1.5 ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

В ходе получения формулы (1.4.21) было сделано довольно много допущений. Далее рассказывается про использованные приближения при выводе формулы.

1.5.1 ЗАМЕНА ФУНКЦИИ g НА СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ

При вычислении интегралов (1.1.12) плотность одночастичных состояний g была вынесена из-под интеграла как среднее $\bar{g}$ — плотность вблизи энергии Ферми.

1.5.2 НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В преобразовании Лапласа в показателе экспоненты находится $-\beta E_i$, $1/\beta = T$ имеет смысл температуры. Было использовано низкотемпературное приближение $\alpha + km^+ \gg 1$:

$$\alpha_Z + km_Z^+ = \beta E_{ZF} + \frac{M\beta}{g \cdot m^2} \gg 1. \quad (1.5.1)$$

Это приближение применялось для вычисления интегралов (1.1.12): интегрирование проводилось не до $\frac{\alpha + km^+}{\beta}$, а до ∞ , и использовался табличный

интеграл.

1.5.3 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ПЕРЕВАЛА

Интеграл набирается в окрестности пика функции S (1.4.2), то есть около седловой точки. Там выполняется разложение в ряд до слагаемых второго порядка (1.4.3). Мы пренебрегаем слагаемыми более высокого порядка.

1.5.4 РАВЕНСТВО ПЛОТНОСТЕЙ ОДНОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ПРОТОНОВ И НЕЙТРОНОВ

При вычислении определителя D в формуле (1.4.18) было сделано приближение для плотностей одночастичных состояний $g_Z = g_N = g/2$.

1.6 ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЭНЕРГИИ

Для получения $\omega(U)$ — плотности многочастичных состояний, зависящей только от энергии U , нужно проинтегрировать выражение (1.4.21) по проекции углового момента M . Воспользуемся приближением малых угловых моментов: $\frac{M^2}{2J} \ll U$. Разложение показателя экспоненты имеет вид:

$$\begin{aligned} 2\sqrt{a\left(U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle}\right)} &= 2\sqrt{aU}\sqrt{1 - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle U}} \approx \\ &\approx 2\sqrt{aU}\left(1 - \frac{M^2}{2 \cdot 2g\langle m^2 \rangle U}\right) = 2\sqrt{aU} - \frac{M^2}{2\sigma^2}, \end{aligned} \quad (1.6.1)$$

где $\sigma^2 = \langle m^2 \rangle g \sqrt{\frac{U}{a}} = \langle m^2 \rangle g t$ — параметр спиновой зависимости, а $t = \sqrt{\frac{U}{a}}$ — температура ядра. Зависимостью знаменателя выражения (1.4.21) от M пренебрегаем:

$$12\sqrt{2g\langle m^2 \rangle} \left(U - \frac{M^2 \hbar^2}{2J} \right)^{3/2} \approx 12\sqrt{2\frac{\sigma^2}{\sqrt{U}}} \sqrt{a} \cdot U^{3/2} = 12\sqrt{2}\sigma U^{5/4} a^{1/4}. \quad (1.6.2)$$

Искомая плотность многочастичных состояний вычисляется следующим образом:

$$\omega(U) = \sum_M \omega(U, M) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(U, M) dM = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{2\sqrt{a}U} \cdot e^{-\frac{M^2}{2\sigma^2}}}{12\sqrt{2}\sigma a^{1/4} U^{5/4}} dM. \quad (1.6.3)$$

Результат имеет вид:

$$\omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \cdot \frac{e^{2\sqrt{a}U}}{a^{1/4} U^{5/4}}. \quad (1.6.4)$$

1.7 ПЛОТНОСТЬ УРОВНЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЭНЕРГИИ И СПИНА

В модели независимых частиц плотность уровней ядра со спином I и энергией возбуждения U определяется формулой

$$\rho(U, I) = \omega(U, M = I) - \omega(U, M = I + 1) \approx -\frac{\partial \omega}{\partial M} \Big|_{M=I+1/2}. \quad (1.7.1)$$

Дифференцируя выражение (1.4.21) и сохраняя лишь то слагаемое, которое доминирует при условии $\sqrt{a \left(U - \frac{M^2 \hbar^2}{2J} \right)} \gg 1$, получаем:

$$\rho(U, I) = \frac{dN(U, I)}{dU} = \frac{2I + 1}{12} \sqrt{a} \left(\frac{\hbar^2}{2J} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{e^{2\sqrt{a \left(U - \frac{I(I+1)\hbar^2}{2J} \right)}}}{\left(U - \frac{I(I+1)\hbar^2}{2J} \right)^2}. \quad (1.7.2)$$

Здесь также принято, что $M^2 = I(I + 1)$.

1.8 ПЛОТНОСТЬ УРОВНЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЭНЕРГИИ

Получим $\rho(U)$ из $\rho(U, I)$ (1.7.2). Разложим показатель экспоненты:

$$2\sqrt{a\left(U - \frac{I(I+1)\hbar^2}{2J}\right)} \approx 2\sqrt{aU} - \frac{I(I+1)}{2\sigma^2}. \quad (1.8.1)$$

Здесь введены обозначения

$$\sigma^2 = \frac{J}{\hbar^2} \sqrt{\frac{U}{a}}, \quad \sigma = \sqrt{\frac{J}{\hbar^2} \left(\frac{U}{a}\right)^{1/4}}. \quad (1.8.2)$$

В знаменателе пренебрежём зависимостью от I :

$$\left(\frac{2J}{\hbar^2}\right)^{3/2} \left(U - \frac{I(I+1)\hbar^2}{2J}\right)^2 \approx 2^{3/2} \left(\sigma^2 \sqrt{\frac{a}{U}}\right)^{3/2} \cdot U^2 = 2\sqrt{2}\sigma^3 a^{3/4} U^{5/4}. \quad (1.8.3)$$

$$\begin{aligned} \rho(U) &= \int_0^\infty \rho(U, I) dI = \int_0^\infty \frac{2I}{12} \sqrt{a} \frac{e^{2\sqrt{aU} - \frac{I(I+1)}{2\sigma^2}}}{2\sqrt{2}\sigma^3 a^{3/4} U^{5/4}} dI = \\ &= \frac{e^{2\sqrt{aU}}}{12\sqrt{2}a^{1/4} U^{5/4} \sigma^3} \int_0^\infty I \cdot e^{-\frac{I(I+1)}{2\sigma^2}} dI. \end{aligned} \quad (1.8.4)$$

Сделаем приближение $I(I+1) \approx I^2$:

$$\int_0^\infty I \cdot e^{-\frac{I^2}{2\sigma^2}} dI = \sigma^2. \quad (1.8.5)$$

Подставляя (1.8.5) в (1.8.4), получаем

$$\rho(U) = \frac{e^{2\sqrt{aU}}}{12\sqrt{2}a^{1/4} U^{5/4} \sigma}, \quad (1.8.6)$$

что можно переписать в виде

$$\rho(U) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2J}} \cdot \frac{e^{2\sqrt{aU}}}{12 U^{3/2}}. \quad (1.8.7)$$

2 КОМБИНАТОРНЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ И УРОВНЕЙ

Многочастичные состояния атомных ядер складываются из одночастичных состояний, характеризуемых энергией и определёнными квантовыми числами. Нуклоны могут занимать или не занимать эти состояния. Условимся, что наличие частицы обозначается «1», отсутствие — «0». Тогда многочастичное состояние может быть задано как последовательность нулей и единиц. Основное состояние ядра задаётся числами заполнения $\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, \dots\}$. Число нуклонов, их полная энергия и полная проекция углового момента на ось z вычисляются по формулам, аналогичным (1.1.1), (1.1.2), (1.1.3).

2.1 АЛГОРИТМ ПЕРЕБОРА МНОГОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ПОДСИСТЕМЫ НЕЙТРОНОВ ИЛИ ПРОТОНОВ

Перебирая все возможные комбинации чисел заполнения, можно перебрать все возможные многочастичные состояния и, следовательно, найти их плотность. Этот метод называется комбинаторным. В этом разделе описывается алгоритм, применимый к любому одночастичному спектру. Для всех моделей результаты комбинаторных расчётов сравниваются с расчётами, выполненными по аналитическим формулам в модели независимых частиц.

Пусть имеется N частиц (протонов или нейтронов). Алгоритм работы следующий: сначала перемещаем частицу из N -го одночастичного состояния в $(N+1)$. Затем $(N-1) \rightarrow N$, на следующем шаге $(N-2) \rightarrow (N-1)$ и

т.д. до тех пор, пока не дойдём до конца и частицы не кончатся. Получаем многочастичное состояние $\{0, \dots, 1, \underbrace{1}_{N+1}, 0, \dots\}$. Затем сдвигаем всю систему в исходное положение, кроме самой последней частицы — мы перемещаем её из $(N + 1)$ в $(N + 2)$, а с отстатком проводим ту же самую операцию до тех пор, пока не окажемся в состоянии $\{0, 1, \dots, \underbrace{1}_N, 0, 1, 0, \dots\}$. Потом сдвигаем остаток системы влево кроме N -й частицы, которая идёт в $(N + 1)$ состояние, и получается $\{1, 1, \dots, 0, \underbrace{0}_N, 1, 1, 0, \dots\}$.

Продолжая действовать подобным образом, можно построить итерационный алгоритм, который перебирает абсолютно все многочастичные состояния, которых оказывается ровно C_n^k , n — общее количество свободных и занятых ячеек, k — количество занятых частицами ячеек. Это схематично изображено на рисунке 6.12.

Остаётся учесть ограничения на энергии. Поскольку одночастичные состояния выстроены в порядке возрастания энергии, то чем правее находится частица, тем большее её энергия. На основании этого можно на много порядков сократить время расчёта. Для более подробного объяснения нужно смотреть код программы.

Отметим, что в программе удобно перейти к целым числам, то есть использовать $2J_z$ вместо J_z . Пусть в результате работы алгоритма мы получили ω_n и ω_p — количество многочастичных состояний для нейтронной и протонной подсистем соответственно для энергии возбуждения в интервале $[U; U + \Delta U)$, удвоенной проекции углового момента на ось z и чётности. Далее надо получить все интересующие нас распределения.

Основное состояние	
$\{1, 1, \dots, 1, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 1, 0, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 1, 0, 1, 1, 0, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 0, 1, 1, 1, 0, 0, \dots\}$	
$\vdots$	
$\{1, 0, \dots, 1, 1, 1, 1, 0, 0, \dots\}$	
$\{0, 1, \dots, 1, 1, 1, 1, 0, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 0, 1, 0, \dots\}$	
$\vdots$	
$\{0, 1, \dots, 1, 1, 1, 0, 1, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, 1, 1, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 0, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\}$	
$\vdots$	
$\{1, 0, \dots, 1, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\}$	
$\{0, 1, \dots, 1, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 0, 0, 1, 1, 1, 0, \dots\}$	
$\vdots$	
$\{0, 0, \dots, 1, 1, 1, 1, 1, 0, \dots\}$	
$\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 0, 0, 1, \dots\}$	
$\vdots$	
$\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, 0, 1, 1, \dots\}$	
$\vdots$	

Рисунок 2.1 — Алгоритм перебора многочастичных состояний

2.2 ПОЛУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Для получения $\omega(U) = \frac{\Delta N}{\Delta U}$ в интервале $[U, U + \Delta U)$ нужно из $\omega_n(U_n, 2J_{nz}, P_n)$ для нейтронов и $\omega_p(U_p, 2J_{pz}, P_p)$ для протонов извлечь $\omega_n(U_n)$ и $\omega_p(U_p)$ соответственно, то есть просуммировать по всем $2J_{nz}$ и $2J_{pz}$, а также по чётностям. Затем — при определённой энергии возбуждения U перебрать все возможные случаи, когда эта энергия идёт в разных пропорциях в протонную и нейтронную подсистемы, то есть

$$\omega(U) = \sum_{i=0}^U \omega_n(i) \omega_p(U - i) \quad (2.2.1)$$

с шагом $\Delta U = 1$ МэВ. Энергия возбуждения U полагается целым числом (в МэВ). Таким образом, получаем:

$$\omega(U) = \sum_{i=0}^U \omega_n(i) \omega_p(U - i) = \sum_{i=0}^U \left[\sum_{P_n} \sum_{2J_{nz}} \omega_n(i, 2J_{nz}, P_n) \right] \cdot \left[\sum_{P_p} \sum_{2J_{pz}} \omega_p(U - i, 2J_{pz}, P_p) \right]. \quad (2.2.2)$$

2.3 ПОЛУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРОЕКЦИИ УГЛОВОГО МОМЕНТА

Сейчас мы хотим получить $\omega(U, 2J_z, P)$ и построить распределение по $2J_z$, но нужно проделать ряд нетривиальных манипуляций с $\omega_n(U_n, 2J_{nz}, P_n)$

и $\omega_p(U_p, 2J_{pz}, P_p)$.

Предположим, мы хотим получить количество состояний с проекцией $J_z = 0$ с некоторой чётностью P . Границы распределения по $2J_{nz}$ и $2J_{pz}$ были выбраны с запасом от -50 до 50 включительно. Тогда надо взять сумму элементов из протонного и нейтронного массива так, чтобы в каждом слагаемом выполнялось условие $J_{nz} + J_{pz} = J_z = 0$. То есть берём $\omega_n(u_n, -50, P_n)$ и умножаем на $\omega_p(u_p, 50, P_p)$, затем $\omega_n(u_n, -49, P_n) \cdot \omega_p(u_p, 49, P_p)$ и так далее до $\omega_n(u_n, 50, P_n) \cdot \omega_p(u_p, -50, P_p)$. Теперь нужно учесть, что в протонную и нейтронную подсистему может пойти разное количество энергии, лишь бы выполнялось равенство $U_n + U_p = U$. Также надо учесть, что произведение чётной (Ч) и нечётной (Н) подсистем даёт (Н), также как и (Н) $\times$ (Ч). Для (Ч) также два варианта: (Ч) $\times$ (Ч) и (Н) $\times$ (Н). Тогда получим

$$\omega(U, 0, P) = \sum_{i=0}^u \sum_{k=-50}^{50} \left[\omega_n(i, k, P_n) \cdot \omega_p(U - i, -k, P_p) + \right. \\ \left. + \omega_n(i, k, -P_n) \cdot \omega_p(U - i, -k, -P_p) \right]. \quad (2.3.1)$$

Здесь $P = P_n \cdot P_p = (-P_n) \cdot (-P_p)$. Чтобы теперь получить значения для $2J_z \neq 0$, нужно сделать некоторую «сдвигку», поскольку мы не сможем получить $2J_z = 1$, складывая $2J_{nz} = -50$ с $2J_{pz} = 51$, так как пределы установлены равными с обеих сторон ($J_Z^{max} = 50$). Нужно складывать, начиная с $2J_{nz} = -49$, $2J_{pz} = 50$ и заканчивая $2J_{nz} = 50$, $2J_{pz} = -49$.

В массивах $\omega_n(U_n, 2J_{nz}, P_n)$ и $\omega_p(U_p, 2J_{pz}, P_p)$ половина значений нулевые (если, например, N_p нечётно, то $2J_{pz}$ будет нечётно). Тогда можно оптимизировать алгоритм и перемножать только ненулевые элементы. Если в подсистеме нечётное количество нуклонов, то нули для удвоенной проекции углового момента будут стоят при чётных $2J_{pz}$ или $2J_{nz}$, если чётное — то при нечётных.

Ожидается некоторое распределение, напоминающее кривую Гаусса. Теоретически оно описывается формулой (1.4.21) при фиксированной энергии и имеет максимум в нуле и фиксированные границы распределения, т.к. слагаемое $\frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle}$ не может быть больше U .

2.4 ПОЛУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ УРОВНЕЙ

Чтобы получить плотность уровней $\rho(U, 2J, P)$ из плотности состояний $\omega(U, 2J, P)$, нужно взять только те состояния, у которых проекция углового момента равна J . Тогда можно записать:

$$\rho(U, 2J, P) = \omega(U, 2J_z, P) - \omega(U, 2J_z + 2, P), \quad 2J = 2J_z \geq 0. \quad (2.4.1)$$

$$\rho(U, I, P) = \omega(U, M, P) - \omega(U, M + 1, P), \quad 2J = 2J_z \geq 0. \quad (2.4.2)$$

Также можно получить зависимость от энергии возбуждения:

$$\rho(U) = \sum_{2J} \sum_P \rho(U, 2J, P). \quad (2.4.3)$$

3 МОДЕЛЬ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ЯМЫ С НЕПРОНИЦАЕМЫМИ СТЕНКАМИ

3.1 ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

На начальной стадии для моделирования использовалась модель прямоугольной ямы. Считалось, что количество протонов и нейтронов в ядре одинаково. Рассматривались достаточно лёгкие ядра. Анализ такой простой модели был первым шагом в разработке алгоритма и последующей сверкой с аналитической формулой (1.6.4). Для ядерного потенциала было принято:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} -U_0, & \text{если } 0 < x < b, 0 < y < b, 0 < z < b, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases} \quad (3.1.1)$$

Если глубина потенциальной ямы велика, то энергии низших состояний приблизительно равны энергиям состояний в потенциале с бесконечно высокими стенками. Тогда энергии таких состояний относительно дна потенциальной ямы определяются формулой

$$E_{ijk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} (i^2 + j^2 + k^2). \quad (3.1.2)$$

Считалось, что энергии всех рассматриваемых нами состояний описываются этой формулой. Таким образом, фактически, рассматривается потенциальная яма с непроницаемыми стенками.

Для моделирования использовалась безразмерная энергия

$$\varepsilon = i^2 + j^2 + k^2. \quad (3.1.3)$$

Здесь мы ограничили максимальную энергию: $\varepsilon_{\max} = 38$. Квантовыми чис-

лами, характеризующими одночастичные состояния, являются (i, j, k, σ) , где $\sigma = 2s_z = \pm 1$, s_z — проекция спина нуклона на ось z .

Одночастичные состояния нумеруются в следующем порядке:

- 1) По энергии.
- 2) При равной энергии первым идёт состояние (ijk) , у которого «сумма» чисел (конкатенация) $\overline{ijk}$ наименьшая.
- 3) Учёт проекции спина. Сначала идёт «+», затем «-».

В таблице 3.1 отражена вся нужная информация по одночастичным состояниям в данной модели.

Таблица 3.1 — Энергетическое распределение основных состояний

Номер уровня n	ijk	Энергия уровня $\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_n$	Кратность вырождения уровня d_n	Суммарная энергия $\sum \varepsilon_n$
1	111	3	2	6
2	112, 121, 211	6	6	42
3	122, 212, 221	9	6	96
4	113, 131, 311	11	6	162
5	222	12	2	186
6	123, 132, 213, 231, 312, 321	14	12	354
7	223, 232, 322	17	6	456
8	114, 141, 411	18	6	564
9	133, 313, 331	19	6	678
10	124, 142, 214, 241, 412, 421	21	12	930
11	223, 232, 322	22	6	1062
12	224, 242, 422	24	6	1206
13	134, 143, 314, 341, 413, 431	26	12	1518
14	115, 151, 511, 333	27	8	1734
15	234, 243, 324, 342, 423, 432	29	12	2082
16	125, 152, 215, 251, 512, 521	30	12	2442
17	225, 252, 522, 144, 414, 441	33	12	2838
18	334, 343, 433	34	6	3042
19	135, 153, 315, 351, 513, 531	35	12	3462
20	244, 424, 442	36	6	3678
21	235, 253, 325, 352, 523, 532, 116, 161, 661	38	18	4362

Тогда энергетический спектр выглядит следующим образом:

$$\left\{ \underbrace{\bullet, \bullet}_{\varepsilon_1=3}, \underbrace{\bullet, \bullet, \dots}_{N_2=6, \varepsilon_2=6}, \underbrace{\bullet, \dots}_{N_3=6, \varepsilon_3=9}, \underbrace{\bullet, \dots}_{N_4=6, \varepsilon_4=11}, \underbrace{\bullet, \bullet}_{\varepsilon_5=12}, \underbrace{\bullet, \dots, \bullet, \circ}_{N_6=12, \varepsilon_6=14}, \underbrace{\circ, \dots}_{N_7=6, \varepsilon_7=17}, \dots \right\}$$

Особенности модели:

- Используется приближение: $N_n = N_p$.
- Ширина потенциальной ямы b : $b^3 = \frac{4}{3}\pi R^3$, $R \approx r_0 \cdot A^{1/3}$. Тогда ширину можно явно выразить: $b = r_0 \sqrt[3]{\frac{4}{3}\pi A}$, $r_0 \approx 1.6$ фм.
- Характерная энергия: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2 c^2}{2(mc^2)} \cdot \frac{1}{b^2}$

3.2 МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ

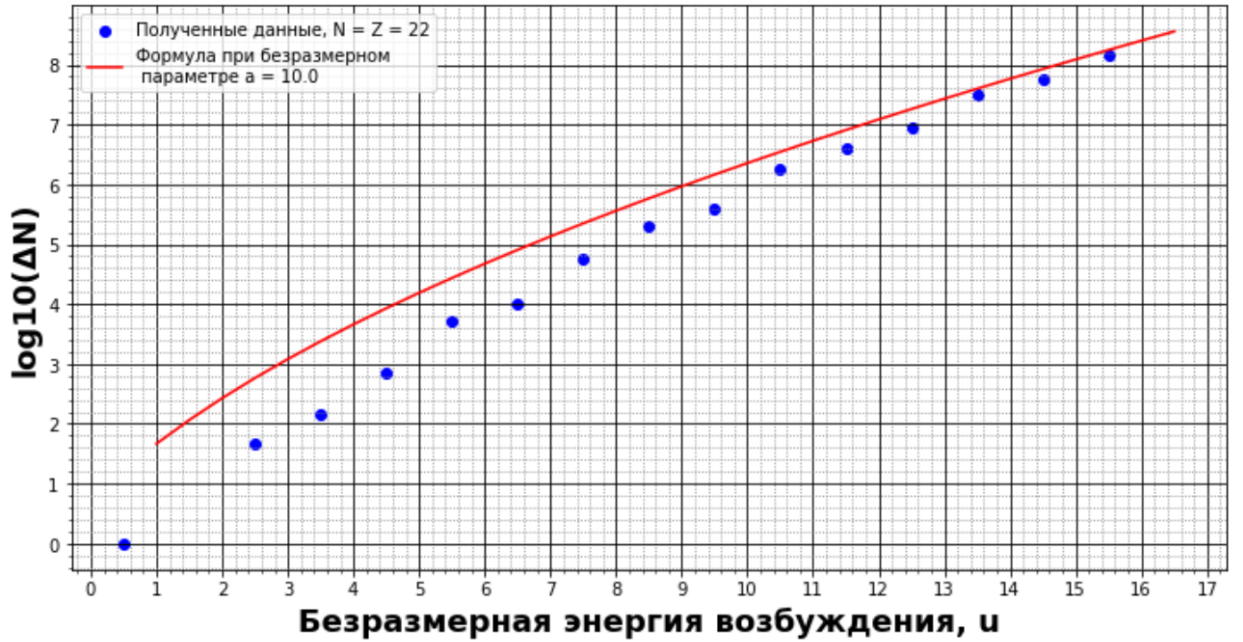


Рисунок 3.1 — Зависимость плотности многочастичных состояний от безразмерной энергии возбуждения u для $N = Z = 22$. Синие точки — количество многочастичных состояний в интервале энергий $[u, u + \Delta u)$. Точка ставится посередине интервала. Красная линия — аналитическая кривая (1.6.4), полученная для безразмерного параметра $a = 10.0$

Рассмотрим данную модель применительно к, например, ядру ^{44}Ti . На рисунке 3.1 изображена плотность многочастичных состояний. Однако

видно, что точка, отвечающая диапазону энергий $[1, 2)$, отсутствует. Так получилось потому, что в данном интервале энергий количество возможных многочастичных состояний оказалось равно нулю. При использовании логарифмического масштаба такие точки не отображаются.

Единицей энергии выступает та же величина $\Delta U = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$, что и в случае одночастичных состояний. Поскольку здесь $A = 44$, то характерная энергия $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$ равна 2.475 МэВ. Подбором параметра плотности уровней a находим вид аналитической кривой, наилучшим образом согласующийся с полученными данными. Отсюда получаем безразмерный параметр плотности уровней $a = 10.0$. Тогда размерный параметр $a = \frac{10.0}{2.475 \text{ МэВ}} = 4.04 \text{ МэВ}^{-1}$.

В книге [8] в *Приложении табл. П2* есть таблица данных, где указаны значения $a[\text{МэВ}^{-1}]$. Так, для ядра $^{44}_{20}\text{Ca}$ параметр $a = 6.34 \text{ МэВ}^{-1}$. Получается различие примерно в ~ 1.5 раза. То же самое можно проделать для других N и Z :

- 20+20 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.637 \text{ МэВ} \implies a = \frac{10.5}{2.637} = 3.982 \text{ МэВ}^{-1}$. Табличное: $a(^{41}\text{Ca}) = 5.44 \text{ МэВ}^{-1}$.
- 22+22 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.475 \text{ МэВ} \implies a = \frac{10}{2.475} = 4.041 \text{ МэВ}^{-1}$. Табличное: $a(^{45}\text{Ti}) = 6.84 \text{ МэВ}^{-1}$.
- 24+24 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.335 \text{ МэВ} \implies a = \frac{15}{2.335} = 6.423 \text{ МэВ}^{-1}$. Табличное: $a(^{50}\text{Cr}) = 6.54 \text{ МэВ}^{-1}$.
- 26+26 частиц: $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = 2.214 \text{ МэВ} \implies a = \frac{19}{2.214} = 8.582 \text{ МэВ}^{-1}$. Табличное: $a(^{54}\text{Fe}) = 6.13 \text{ МэВ}^{-1}$.

При этом стоит принять во внимание то, что моделирование проводилось для $N = Z = \frac{A}{2}$; в таблице даны значения для $N \neq Z$. К тому же, значение размерного параметра a сильно зависит от $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2}$, от выбора r_0 , которое было принято равным 1.6 фм вместо привычных 1.2 фм, чтобы увеличить значения параметра a . $a_{\text{таб}}(^{45}\text{Ti}) = 6.84 \text{ МэВ}^{-1}$.

4 МОДЕЛЬ МОДИФИЦИРОВАННОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

В этом разделе рассматриваются одночастичные состояния в модифицированном трёхмерном осцилляторе (значения энергий взяты из статьи Нильсона [12]). На рисунке 4.1 представлены одночастичные состояния в зависимости от энергии и параметра деформации, который у нас полагается равным нулю.

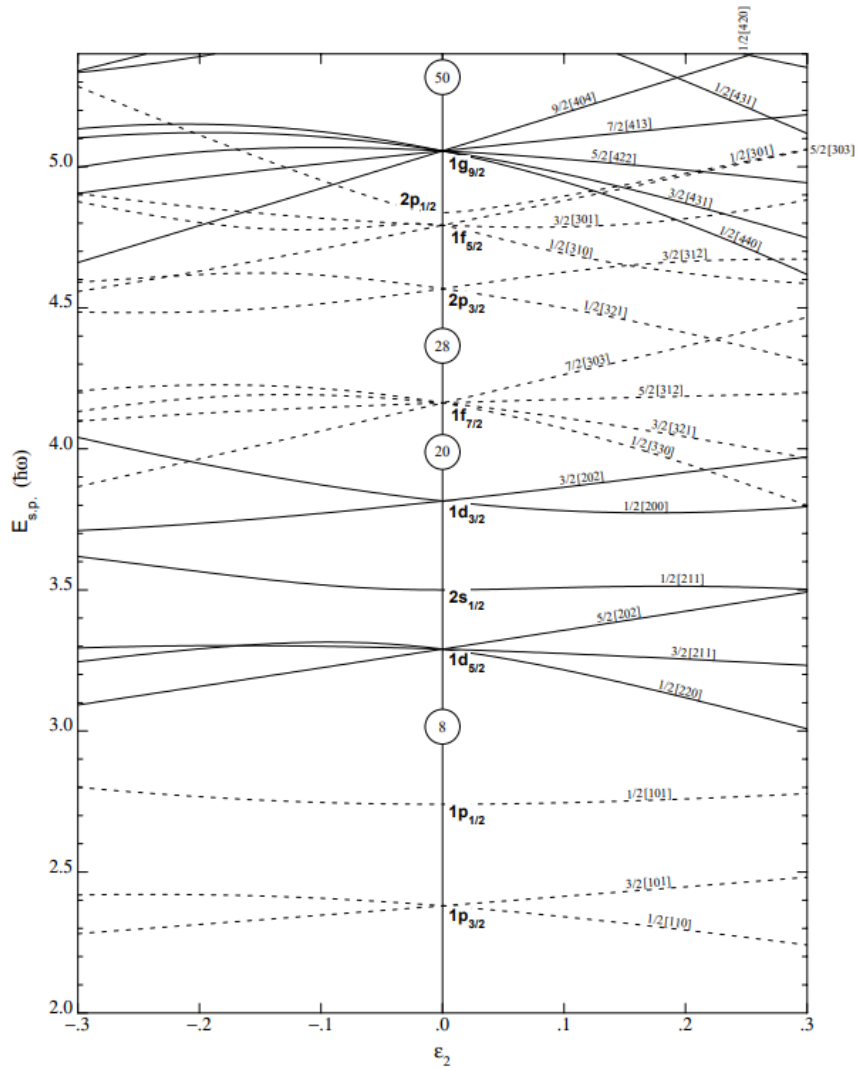


Figure 4. Nilsson diagram for protons or neutrons, $Z, N \leq 50$ ($\epsilon_4 = 0$).

Рисунок 4.1 — Схема Нильсона для $N, Z < 50$

Из этой диаграммы взяты энергии и квантовые числа. Так, на уровне $1P_{3/2}$ расположены 4 одночастичных состояния, выстроенных в порядке убывания проекции углового момента. Посмотрим на некоторые результаты для данной модели одночастичных состояний.

4.1 ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Рассмотрим, к примеру, ядро $40K$ с энергией возбуждения $U_{\max}$ до 20 МэВ. На рисунке 4.2 изображены синие точки, посчитанные методом (2.2.2), а также чёрная линия, которая отвечает аналитической формуле (1.6.4) с параметром плотности уровней $a = 5.34 \text{ МэВ}^{-1}$, взятом из [8]. Шаг размерной энергии был выбран $\Delta U = \frac{1}{10} \cdot \hbar\omega = \frac{11.696 \text{ МэВ}}{10} = 1.1696 \text{ МэВ}$. Характерная энергия $\hbar\omega$ была приблизительно вычислена как $40A^{-1/3} \text{ МэВ}$. Максимальная безразмерная энергия $u_{\max} = [U_{\max}/\Delta U] = [17.09] = 17$. Таким образом, будет получено 18 точек, считая от нуля.

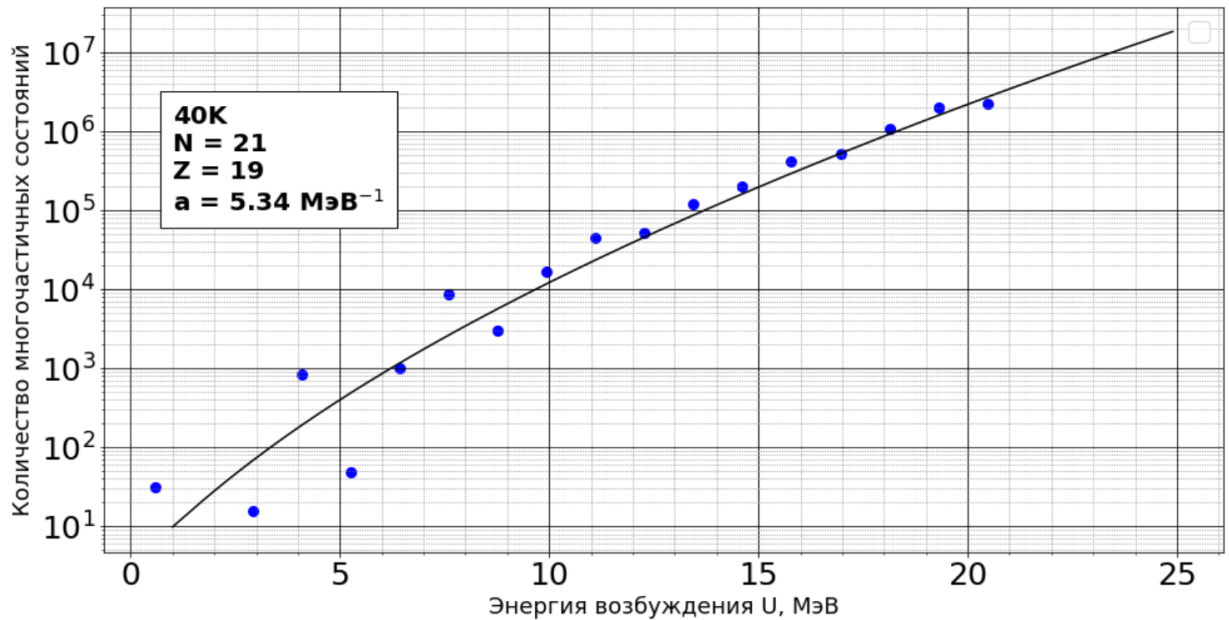


Рисунок 4.2 — Зависимость плотности многочастичных состояний от энергии возбуждения. Синие точки — смоделированные данные. Чёрная линия соответствует аналитической формуле (1.6.4)

Видно, что при малых энергиях (до 10 МэВ) довольно сильно сказываются дискретные уровни; при больших энергиях наблюдается согласие

смоделированных данных в модели трёхмерного осциллятора и аналитической формулы.

4.2 ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРОЕКЦИИ УГЛОВОГО МОМЕНТА

На рисунке 4.3 изображены точки, отвечающие количеству многочастичных состояний в диапазоне энергии возбуждения $[11.7, 12.9)$ МэВ в зависимости от проекции углового момента J_z . Красные точки соответствуют состояниям с положительной чётностью, синие — с отрицательной. Видно, что есть многочастичные состояния только при целых J_z , поскольку

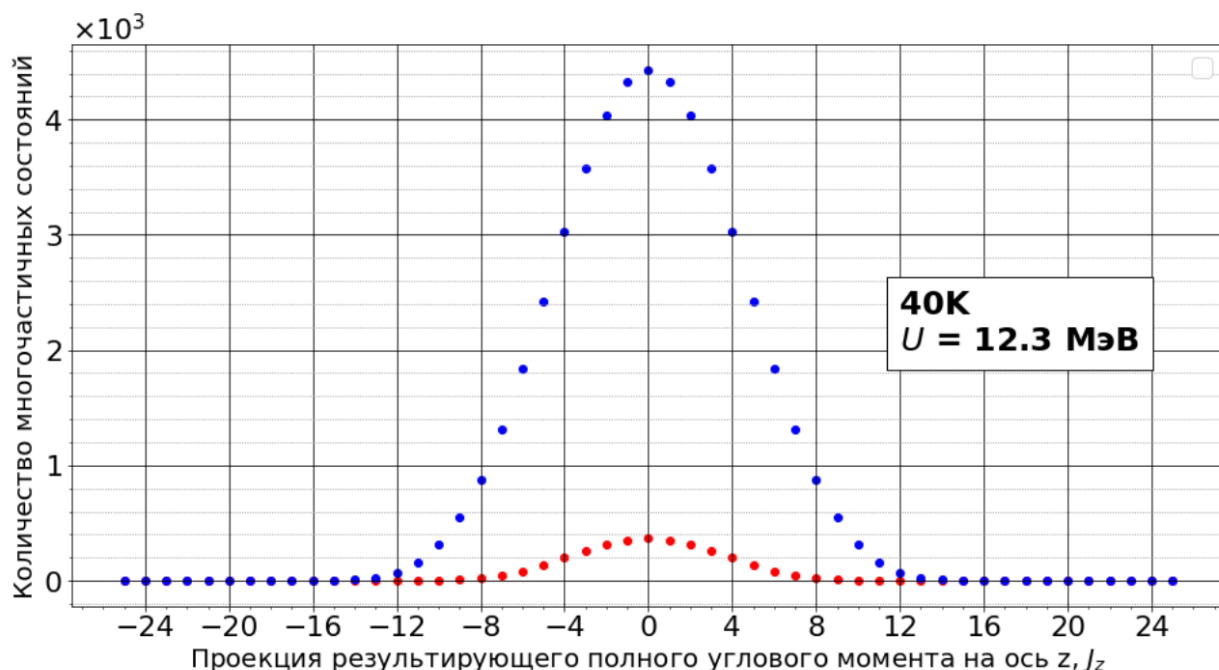


Рисунок 4.3 — Зависимость плотности многочастичных состояний, находящихся в диапазоне энергий $[11.7, 12.9)$ МэВ, от проекции углового момента на ось z .

ку массовое число A чётное для 40K. Также распределение симметрично относительно J_z . Это означает, что выполняется закон сохранения углового момента.

Аналогичная зависимость изображена на рисунке 4.4, но при энергии $U = 0$. В основном состоянии ядро 40K нечётно, т.к. 21-й нейтрон находится на $1f_{7/2}$, $P = -1$, 19-й протон — на $1d_{3/2}$, $P = +1$. Тогда максимально воз-

можная проекция углового момента j_z будет равна $7/2 + 3/2 = 10/2 = 5$, что и наблюдается на рисунке 4.4.

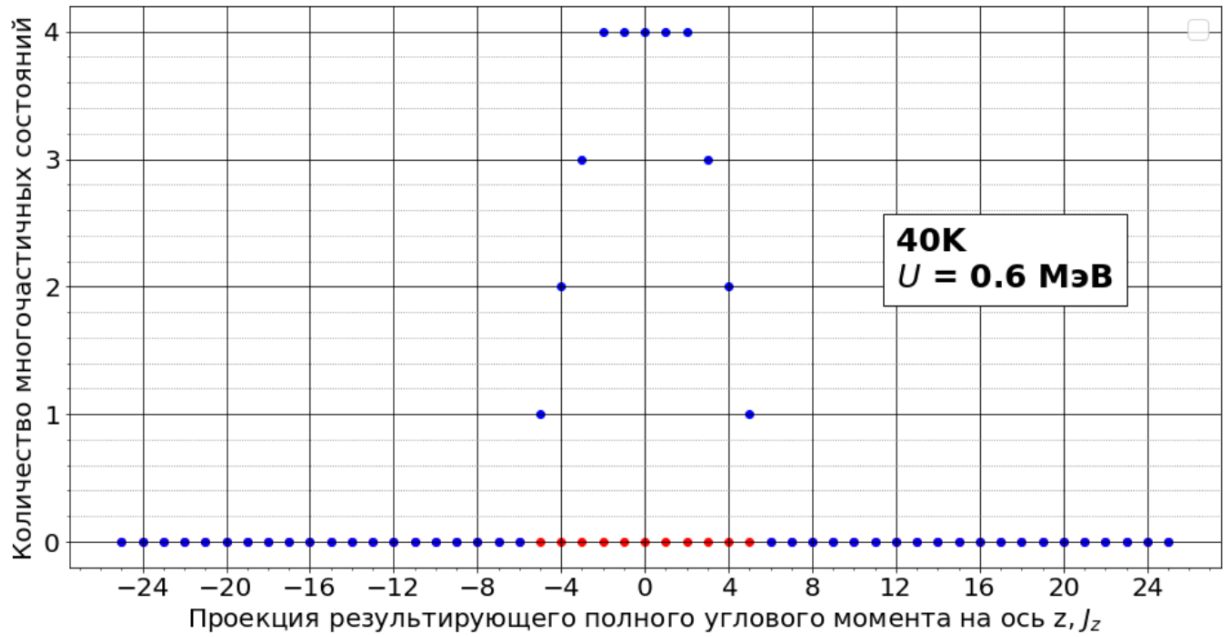


Рисунок 4.4 — Зависимость плотности многочастичных состояний, находящихся в диапазоне энергий $[0.0, 1.2)$ МэВ, от проекции углового момента на ось z .

Чтобы свериться с аналитической формулой (1.4.21), нужно просуммировать по чётностям, так как при теоретическом выводе они полагаются равными. Видно, что полное число многочастичных состояний, предсказываемое аналитической формулой, меньше суммарного количества состояний, полученных в данной модели. Также это согласуется с рисунком 4.2.

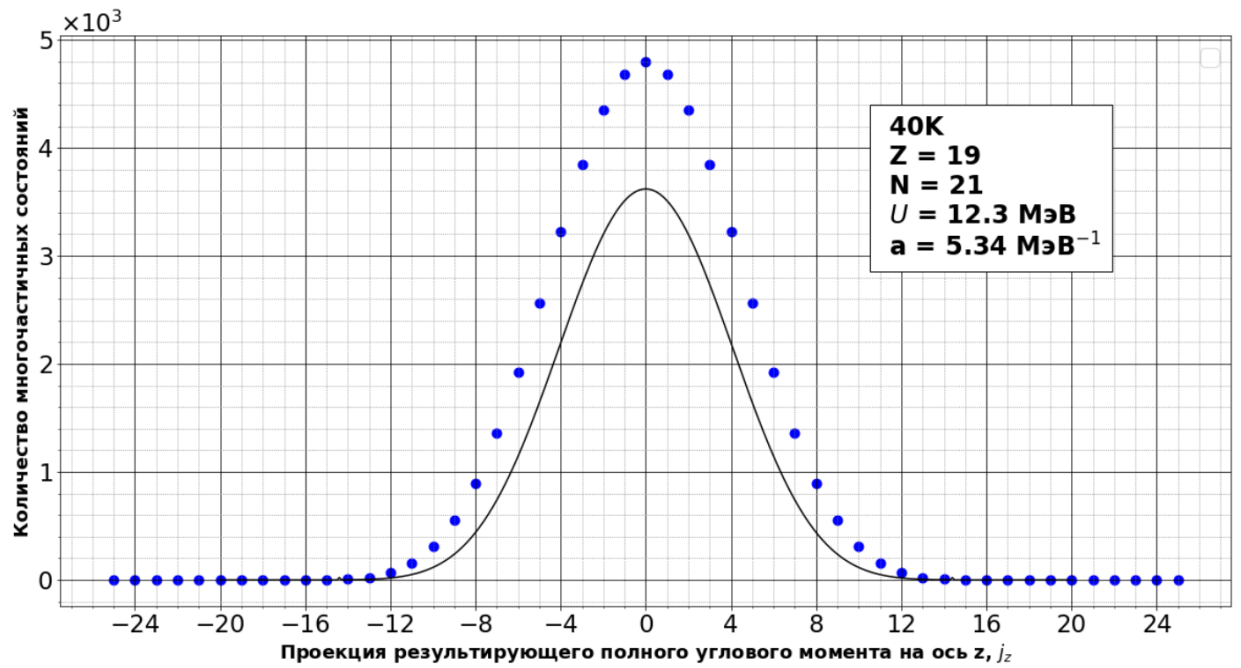


Рисунок 4.5 — Зависимость плотности многочастичных состояний, находящихся в диапазоне энергий [11.7, 12.9) МэВ, от проекции углового момента на ось z . Синие точки отвечают сумме по чётностям. Чёрная кривая соответствует аналитической формуле (1.4.21) при фиксированной энергии $U = 12.3$ МэВ

4.3 ТРЁХМЕРНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Покажем трёхмерные картины плотности многочастичных состояний. Рассмотрим рисунок 4.6. Здесь красные и синие точки отвечают логарифму количества многочастичных состояний с положительной и отрицательной чётностями соответственно в диапазоне энергий $[U, U + \Delta U)$. Если просуммировать по J_z и чётностям, то получится зависимость, изображённая на рисунке 4.2. По рисунку видно, что при малых энергиях доминирует отрицательная чётность, но начиная примерно с 3.5 МэВ довольно сильно сказывается положительная чётность. Причём чем больше энергия, тем в большей степени чётности сравниваются, переходя в «классический» случай.

Чтобы сравниться с аналитической формулой (1.4.21), нужно произвести суммирование по чётностям. На рисунке 4.7 красные точки отвечают плотности многочастичных состояний $\omega(U, J_z) = \omega(U, J_z, P^+) + \omega(U, J_z, P^-)$,

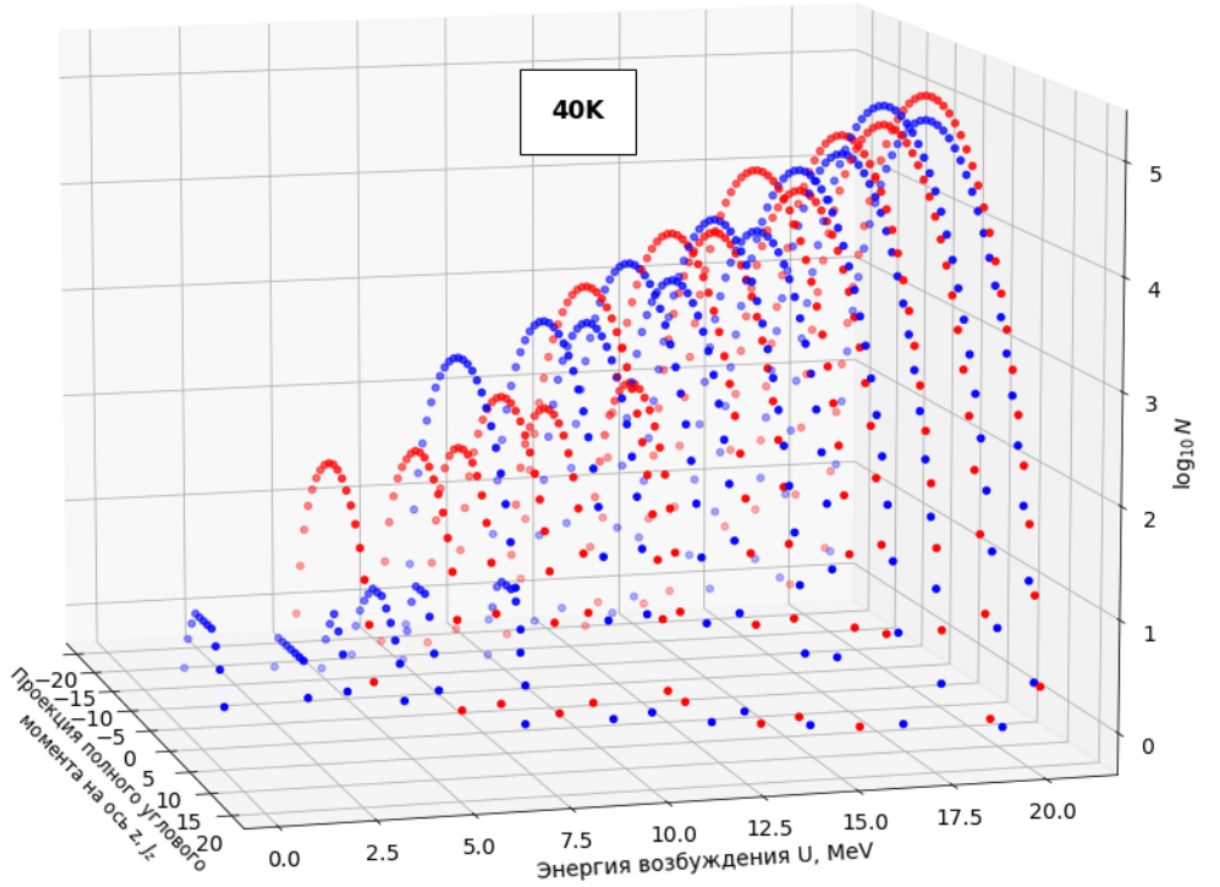


Рисунок 4.6 — Плотность многочастичных состояний $\omega(U, J_z)$ в зависимости от энергии возбуждения и проекции полного углового момента на ось z .

а чёрная сетка соответствует формуле (1.4.21).

Здесь видно, что при больших энергиях наблюдается сходство, а при малых — явное различие то в большую, то в меньшую сторону. Также стоит отметить особенность аналитической формулы: в знаменателе стоит выражение вида $U - \frac{M^2}{2g\langle m^2 \rangle}$, которое либо при больших угловых моментах, либо при малых энергиях может становиться неограниченно большим.

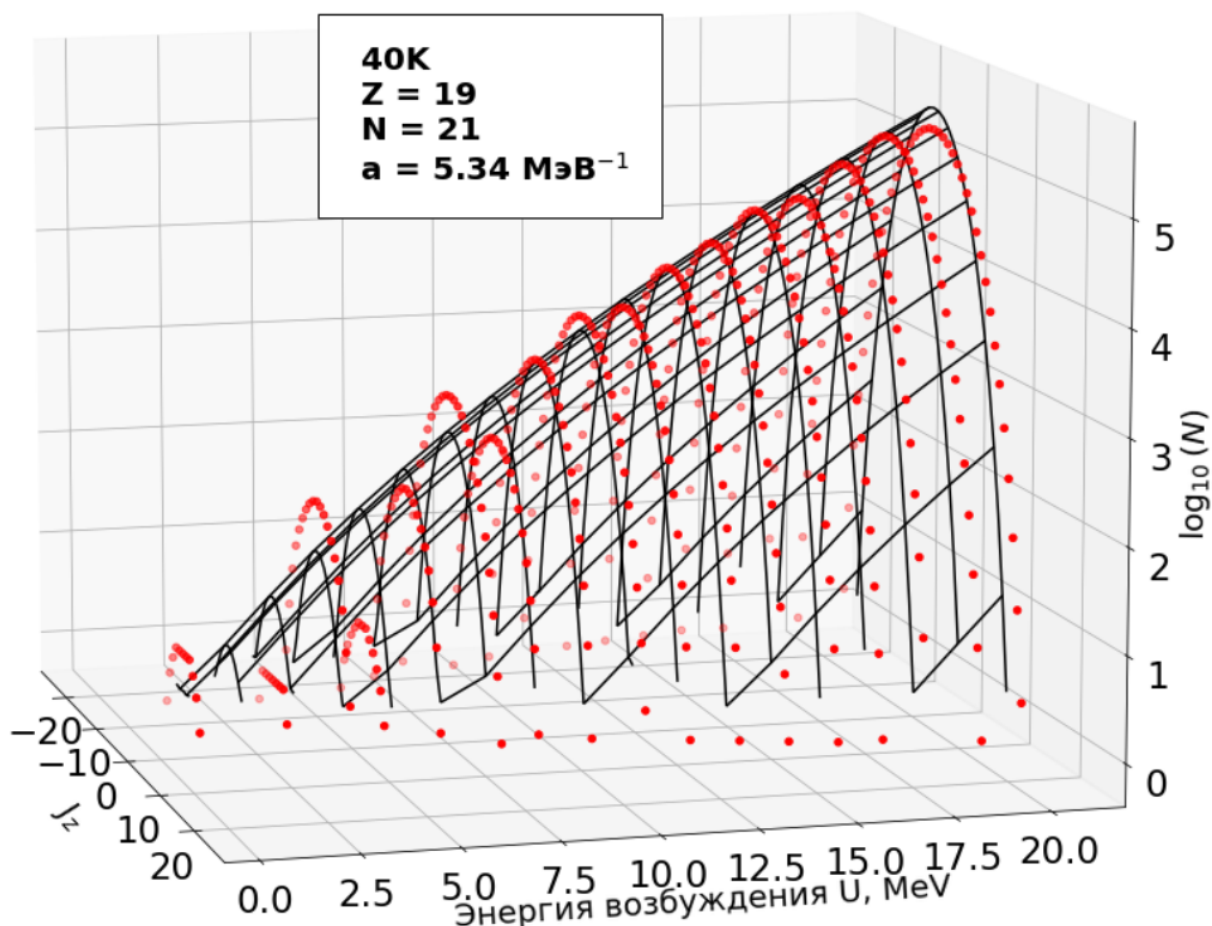


Рисунок 4.7 — Сравнение полученного распределения плотности многочастичных состояний $\omega(U, J_z)$ с аналитической формулой (1.4.21)

4.4 РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ УРОВНЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПОЛНОГО УГЛОВОГО МОМЕНТА

На рисунке 4.8 проводится сравнение распределений плотности уровней в зависимости от полного углового момента в диапазоне энергий от 11.7 МэВ до 12.9 МэВ. Чёрная линия — аналитическая формула (1.7.2) при энергии $U = 12.3$ МэВ. Красные точки соответствуют количеству уровней в данном диапазоне энергий при определённом полном угловом моменте I с положительной чётностью. Синие — с отрицательной чётностью. Чёрные точки — их сумма. Значения были рассчитаны с помощью (2.4.2).

Видно, что в целом наблюдается согласие формулы (1.7.2) с полученными данными. Также можно заметить, что уровней с отрицательной

чётностью больше, чем с положительной, что согласуется с рисунком 4.3.

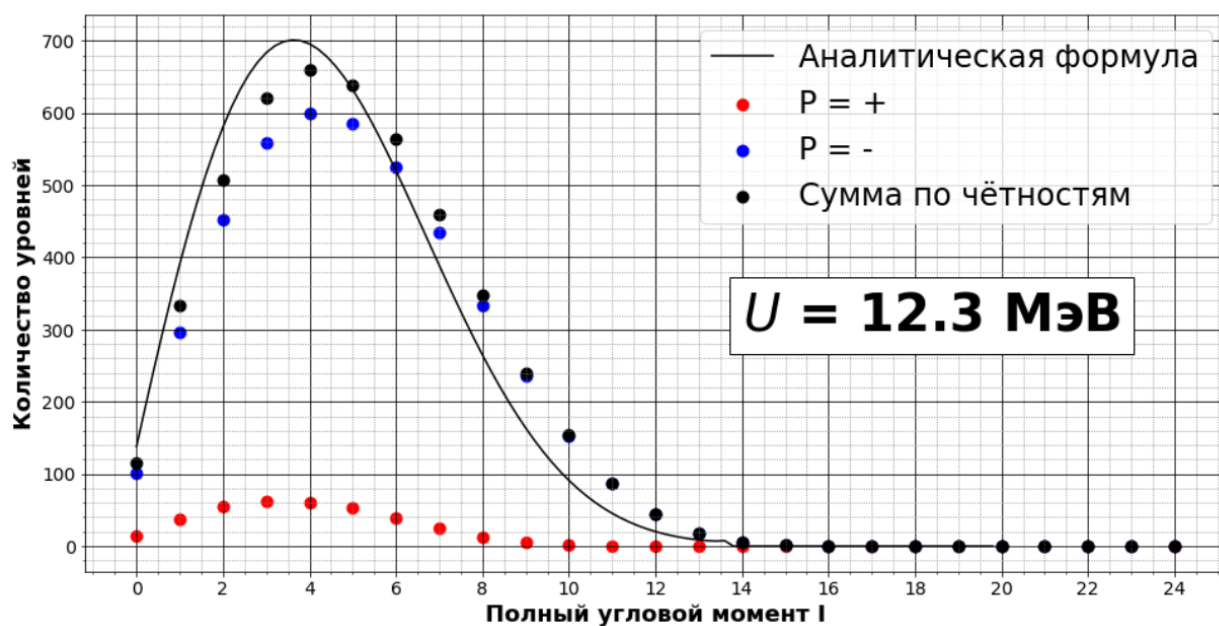


Рисунок 4.8 — Распределение плотности уровней в зависимости от углового момента I для ядра ^{40}K .

4.5 РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ УРОВНЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЭНЕРГИИ

Суммируя $\rho(U, I, P)$ по чётностям и полному угловому моменту, можно получить зависимость плотности уровней от энергии возбуждения (см. рис. 4.9). Чёрная кривая соответствует аналитической формуле (1.8.7).

При энергиях от 10 МэВ наблюдается согласие смоделированных данных и аналитической формулы. Также видно, что количество уровней в диапазоне энергий [11.7, 12.9) МэВ хоть и близко к аналитической кривой, но лежит немного ниже формулы (1.8.7), что согласуется с рисунком 4.8.

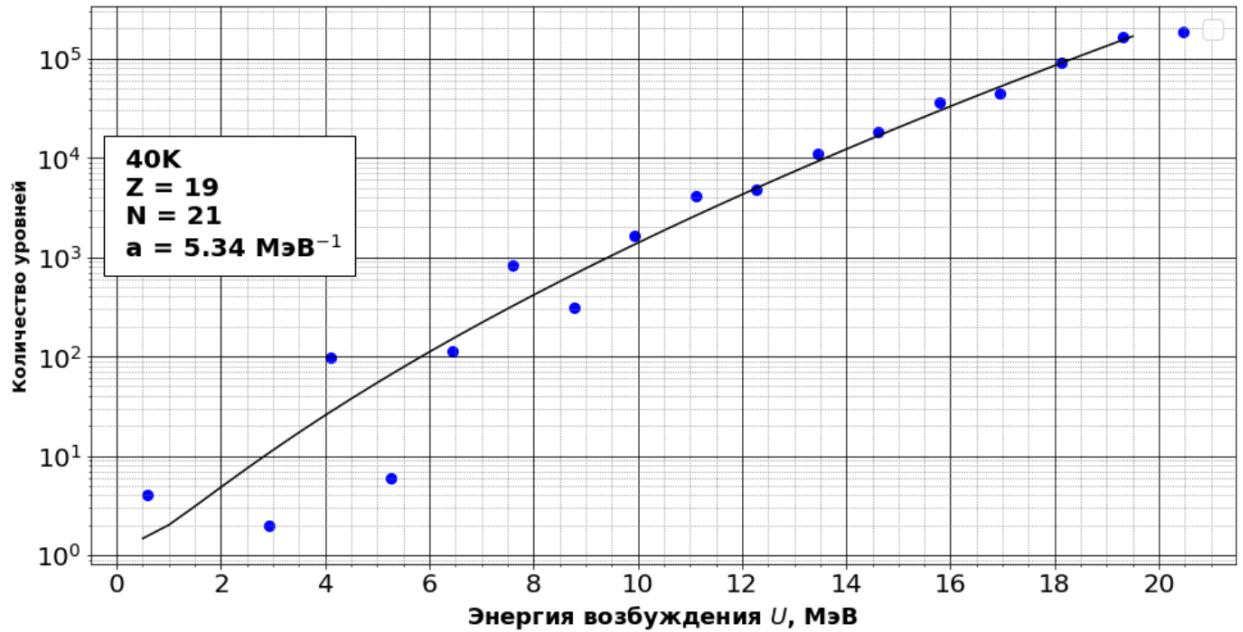


Рисунок 4.9 — Распределение плотности уровней в зависимости от энергии возбуждения. Синие точки отвечают количеству уровней в диапазоне энергий $[U, U + \Delta U)$. Точка ставится посередине диапазона. Чёрная кривая — аналитическая формула (1.8.7)

4.6 СВЕРКА С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

Помимо сравнения полученных плотностей многочастичных состояний и уровней с аналитическими формулами нужно также свериться с некоторыми экспериментальными данными.

4.6.1 ПРОВЕРКА ДЛЯ ЯДЕР NI

В работе [13] представлены экспериментальные данные для изотопов Ni. Там же представлен рисунок 4.10, с которым проводится сравнение плотностей уровней в зависимости от энергии возбуждения. Изображённые синие точки — данные, полученные в модели трёхмерного осциллятора. Чёрные точки соответствуют экспериментальной плотности уровней, полученной из спектра испускания протонов, синие кривые соответствуют нейтронным резонансам, а красные линии — плотностям дискретных уровней. Стрелки указывают на энергию связи нейтронов.

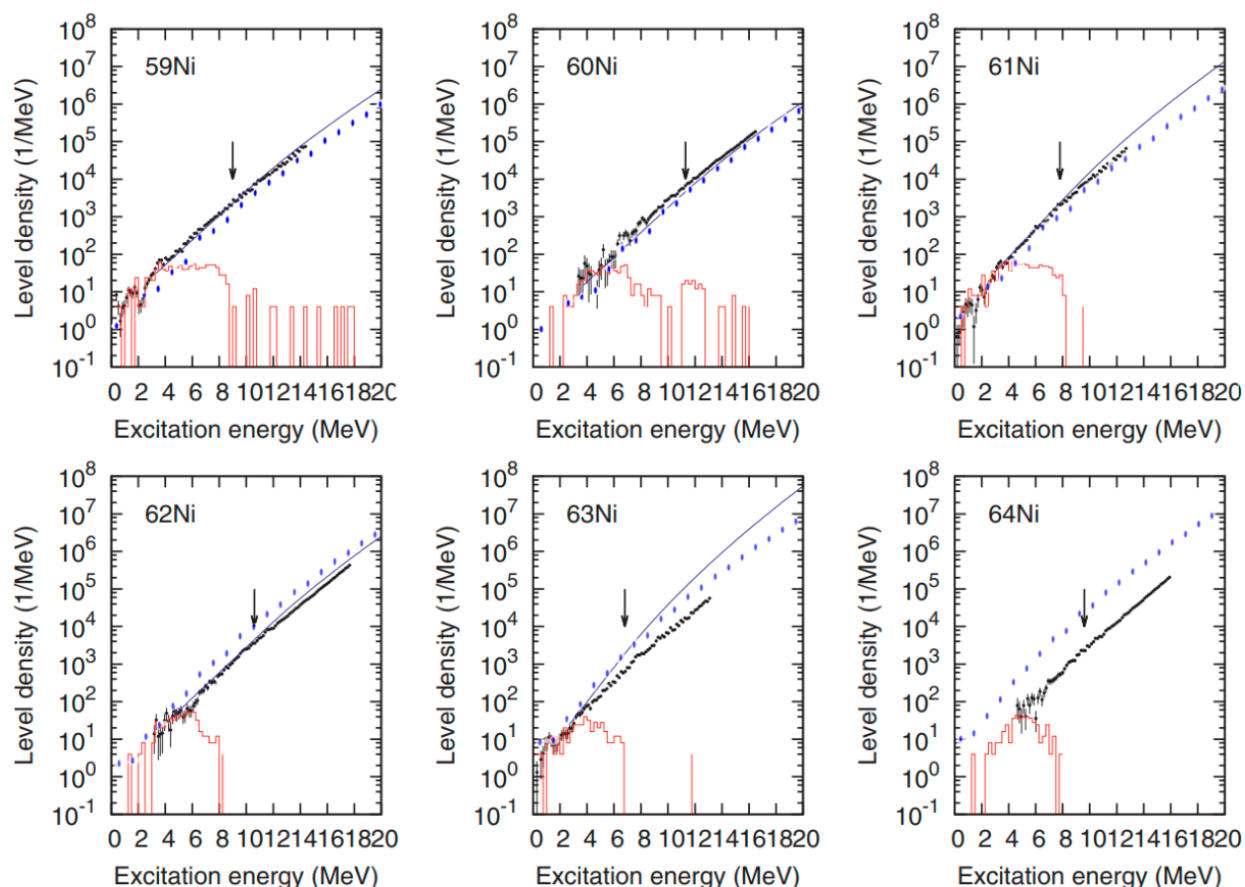


Рисунок 4.10 — Сравнение экспериментальных плотностей уровней [13] и смоделированных данных (синих точек) в зависимости от энергии возбуждения.

Видно, что в целом наблюдается согласие, но для ^{64}Ni полученные данные на порядок выше экспериментальных. Далее на рисунке 4.11 проводится сравнение полученных плотностей уровней и показывается, что результаты для ^{63}Ni и ^{64}Ni почти идентичны. Но поскольку для ^{64}Ni различие на рисунке 4.10 довольно велико, то это означает, что экспериментальные данные говорят об уменьшении плотности уровней при переходе от ^{63}Ni к ^{64}Ni .

При рассмотрении ^{63}Ni ($N_n = 35$, $N_p = 28$) в оболочечной модели можно увидеть, что последний уровень $1f_{5/2}$ занят тремя нейтронами, а у ^{64}Ni — четырьмя. Основное состояние ^{63}Ni 60-кратно вырождено (число сочетаний $C_6^3 = 20$), а ^{64}Ni — 15-кратно ($C_6^4 = 15$). И там, и там по 3 уровня с различным J . Но далее при ненулевой энергии возбуждения количество многочастичных состояний и, соответственно, количество уровней ^{64}Ni начинают расти быстрее, чем ^{63}Ni . Почему результаты для ^{64}Ni в статье [13] так сильно расходятся, остаётся открытым вопросом.

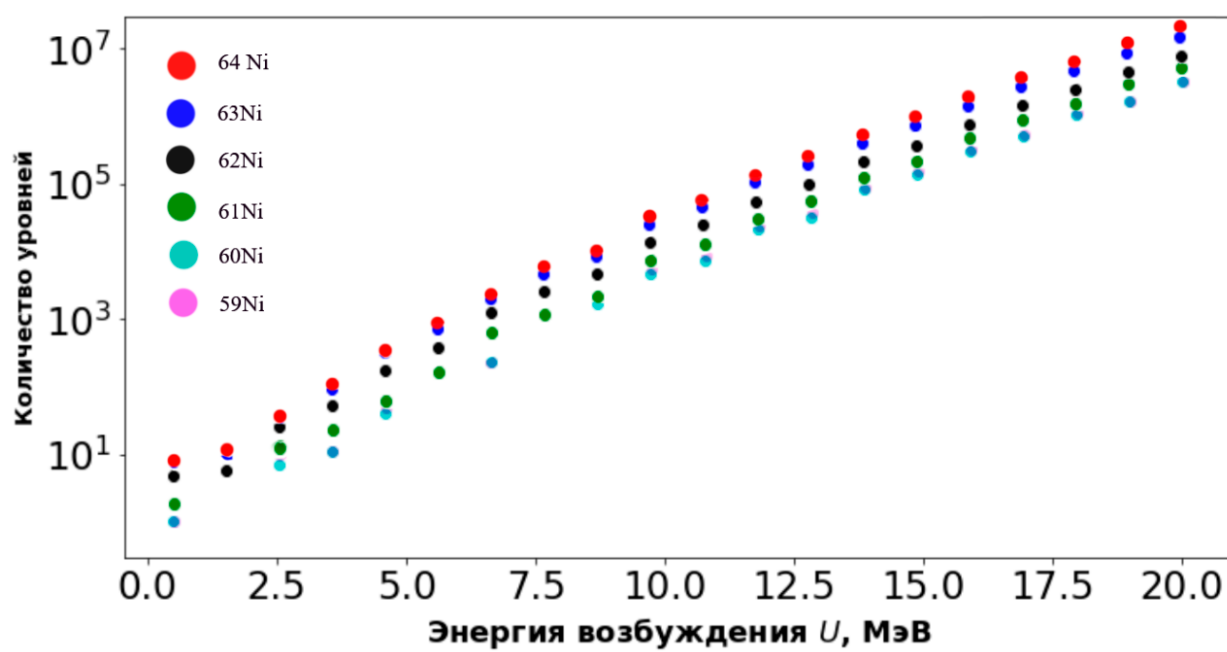


Рисунок 4.11 — Сравнение плотности уровней для изотопов никеля

5 МОДЕЛЬ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОТЕНЦИАЛА С УЧЁТОМ ЭФФЕКТА СПАРИВАНИЯ НУКЛОНОВ

5.1 МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

Метод Хартри-Фока представляет из себя алгоритм последовательного итерационного нахождения самосогласованного поля. Эффективные силы могут быть параметризованы в двух различных подходах: плотностно-независимые и плотностно-зависимые. Последние лучше описывают полные энергии связи и радиусы ядер.

5.1.1 ПЛОТНОСТНО-НЕЗАВИСИМЫЕ СИЛЫ

Гамильтониан многочастичной системы записывается в виде

$$H = \sum_i v_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij}, \quad (5.1.1)$$

где v_i — оператор кинетической энергии для одной частицы, v_{ij} — оператор взаимодействия двух частиц [2]. Волновая функция системы изначально записывается в виде Слэтеровского детерминанта

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \dots & \psi_1(x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(x_1) & \dots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}, \quad (5.1.2)$$

где $\psi_i(x_j) = \langle x_j | \psi_i \rangle$ — одночастичные волновые функции, удовлетворяющие условию ортогональности. Обычно изначально выбирается базис 3-мерного осциллятора. Основная идея в методе Хартри-Фока состоит в минимизации энергии путём варьирования одночастичных волновых функ-

ций и энергий:

$$\begin{aligned}\langle \Psi | H | \Psi \rangle &= \sum_i \langle \psi_i | v_i | \psi_i \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \psi_i \psi_j | v_{ij} | \psi_j \psi_i \rangle - \sum_{i \neq j} \langle \psi_i \psi_j | v_{ij} | \psi_i \psi_j \rangle = \\ &= \sum_i \langle \psi_i | v_i | \psi_i \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \psi_i \psi_j | \bar{v}_{ij} | \psi_j \psi_i \rangle \rightarrow \min. \quad (5.1.3)\end{aligned}$$

Решение задачи (5.1.3) будет эквивалентно решению уравнения Шрёдингера с неизвестными функциями ψ_i и энергиями ε_i^{min} :

$$v_i \psi_i(x_i) + \sum_{i \neq j} \langle \psi_j | v_{ij} | \psi_j \rangle \psi_i(x_i) - \sum_{i \neq j} \langle \psi_j | v_{ij} | \psi_i \rangle \psi_j(x_i) = \varepsilon_i^{min} \psi_i(x_i). \quad (5.1.4)$$

5.1.2 ПЛОТНОСТНО-ЗАВИСИМЫЕ СИЛЫ СКИРМА

Взаимодействие Скирма включает в себя также трёхчастичный потенциал v_{ijk} :

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} + \sum_{i < j < k} v_{ijk}. \quad (5.1.5)$$

Потенциал v_{ijk} записывается в виде [14]

$$v_{ijk} = t_3 \delta^{(3)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \delta^{(3)}(\vec{r}_j - \vec{r}_k), \quad (5.1.6)$$

что равносильно двухчастичному плотностно-зависимому взаимодействию

$$v_{ij} = \frac{1}{6} t_3 (1 + P_\sigma) \delta^{(3)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \rho \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right), \quad (5.1.7)$$

где t_3 — некоторый свободный параметр, $P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$. Тогда задача сводится к минимизации энергии

$$E = \sum_i \left\langle \psi_i \left| \frac{\vec{p}^2}{2m} \right| \psi_i \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle \psi_i \psi_j | \bar{v}_{12} | \psi_i \psi_j \rangle + \frac{1}{6} \sum_{i \neq j \neq k} \langle \psi_i \psi_j \psi_k | \bar{v}_{123} | \psi_i \psi_j \psi_k \rangle \rightarrow \min. \quad (5.1.8)$$

5.2 УЧЁТ ЭФФЕКТА СПАРИВАНИЯ НУКЛОНОВ. ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ БАРДИНА-КУПЕРА-ШРИФФЕРА К ЯДЕРНОЙ МАТЕРИИ

В общепринятом формализме теории сверхпроводимости [3], разработанном в 1957 году Бардином, Купером и Шриффером, описывается система с числом частиц $N \gg 10^{23}$, где вводится понятие квазичастиц, куперовских пар.

Аналогично оригинальной статье [3] в работах [2; 4; 5] вводится волновая функция возбуждённого многочастичного состояния как

$$|\Psi\rangle = \prod_{\nu'' \in \tau_2} (-V_{\nu''} + U_{\nu''} a_{\nu''}^\dagger a_{\bar{\nu}''}^\dagger) \prod_{\nu' \in \tau_1} a_{\nu'}^\dagger \prod_{\nu \in \tau_0} (U_\nu + V_\nu a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger) |0\rangle, \quad (5.2.1)$$

где $|0\rangle$ — вакуумное состояние без частиц, $a^\dagger$ — оператор рождения частицы; третье произведение по множеству одночастичных состояний τ_0 отвечает за образование связанных пар нуклонов, где ν — одночастичное состояние с проекцией углового момента j_Z , а $\bar{\nu}$ — сопряжённое состояние с проекцией $-j_Z$. V_ν — амплитуда вероятности наличия связанной пары при данном ν , а U_ν — отсутствия. При этом $V_\nu^2 + U_\nu^2 = 1$. Второе произведение по множеству τ_1 отвечает неспаренным нуклонам, а первое — возбуждённым парам нуклонов с энергией, превышающей энергию Ферми.

Гамильтониан с учётом парного взаимодействия записывается в виде [2]

$$H = \sum_{k>0} \varepsilon_k (a_k^\dagger a_k + a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}}) - G \sum_{k,k'>0} a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}'} a_{k'}, \quad (5.2.2)$$

где первая сумма является кинетическим слагаемым, а вторая сумма описывает парное взаимодействие с характерной силой G . Можно получить систему нелинейных уравнений [2; 4; 5] на энергию спаривания Δ , энергию Ферми λ , вероятность «заселённости» v_k^2 и «незаселённости» u_k^2 парных

состояний:

$$\begin{cases} v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right), \\ u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right), \\ 2u_k v_k = \frac{\Delta}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}}, \\ u_k^2 - v_k^2 = \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}}. \end{cases} \quad (5.2.3)$$

где выражение

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2} \quad (5.2.4)$$

соответствует энергии возбуждения квазичастицы; при этом для разрыва пары требуется приложить энергию Δ . Для параметра Δ существует также другой способ определения — использовать разницу масс соседних ядер:

$$\Delta = \frac{M(^{A-1}X) + M(^{A+1}X)}{2} - M(^AX), \quad (5.2.5)$$

что позволяет проверить валидность решения системы (5.2.3).

5.3 ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ХАРТРИ-ФОКА С УЧЁТОМ ЭФФЕКТА СПАРИВАНИЯ НУКЛОНОВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ В ПРИБЛИЖЕНИИ ЗАМОРОЖЕННОГО ОСТОВА

Одночастичный базис, рассчитанный методом Хартри-Фока с учётом эффекта спаривания нуклонов БКШ, был получен с помощью программы коллег из МГУ, исследовавших влияние тензорных сил на ядра с избыточным количеством нейтронов [15]. Также существует ряд работ [16—20], дающих некоторое описание влияния эффекта спаривания нуклонов на плотность уровней.

Расчёт производился на одночастичном базисе для основных состо-

яний атомных ядер, то есть в приближении «замороженного остова». В действительности при возбуждении ядра формируется новое самосогласованное поле, которое, вообще говоря, имеет другие энергетические уровни. Учёт этого эффекта производится в следующем параграфе.

С использованием нового одночастичного базиса были рассчитаны распределения для цепочки изотопов никеля (^{58}Ni , ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni). На данный момент имеется возможность расчёта базиса только для чётно-чётных ядер. Так, для ^{58}Ni плотность многочастичных состояний (см. рис. 5.1) оказывается систематически ниже аналитической кривой, как и для остальных изотопов. Мы полагаем, что это может быть связано с ограниченным числом уровней в одночастичном базисе (в модели трёхмерного осциллятора базис был неограниченным).

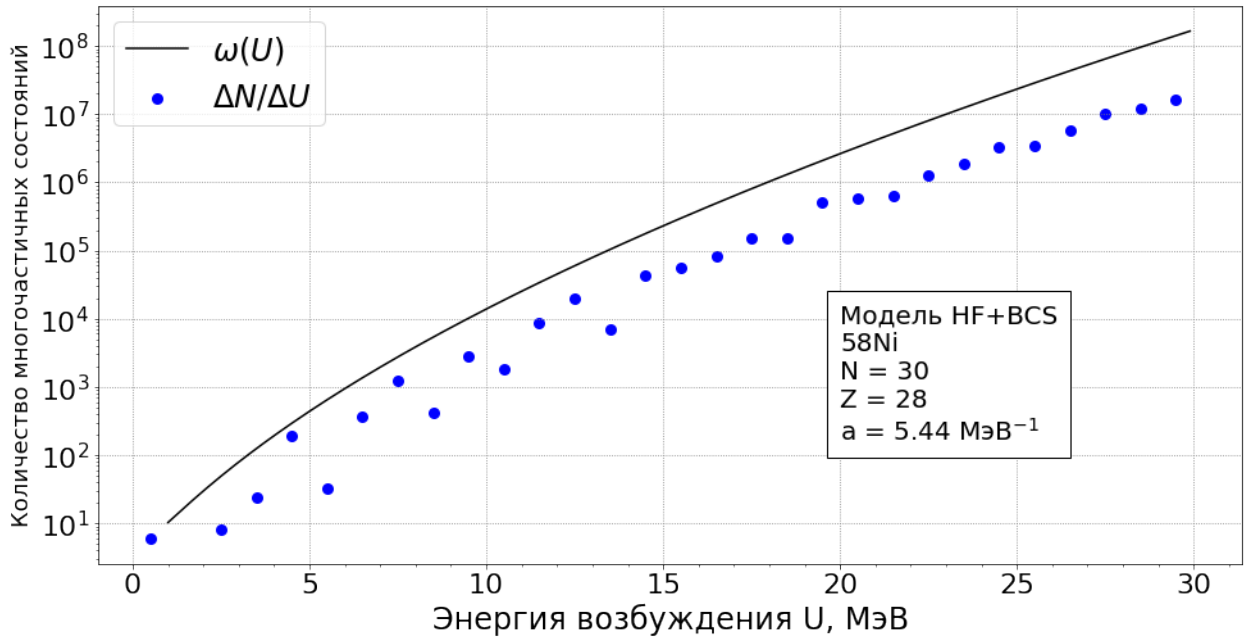


Рисунок 5.1 — Распределение плотности многочастичных состояний в зависимости от энергии возбуждения в модели Хартри-Фока с учётом теории БКШ для ядра ^{58}Ni .

5.3.1 ЭФФЕКТИВНЫЙ УЧЁТ ОСТАТОЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

При комбинаторном переборе возникают уровни с большой вырожденностью, в результате чего появляются оболочечные эффекты и осцилляции плотности в зависимости от энергии возбуждения. Однако это вырож-

дение снимается остаточным взаимодействием, перераспределяя нуклоны с одного энергетического уровня по некоторому интервалу. Учёт этого эффекта был сделан путём линейного усреднения $\omega(J_Z, U)$ по некоторому узкому интервалу энергий, в котором применимо линейное приближение экспоненциальной зависимости. Усреднение производилось по трём точкам:

$$\omega_{aver}(J_Z, U) = \frac{\omega(J_Z, U - \Delta U) + \omega(J_Z, U) + \omega(J_Z, U + \Delta U)}{3}. \quad (5.3.1)$$

Здесь ΔU полагается равным 1 МэВ. Первая и последняя точки остаются на своих местах. Тогда, например, для ^{58}Ni зависимость будет сглажена (см. рис. 5.2).

Стоит отметить, что есть эффект нелинейности на малом интервале, в результате чего может не сохраняться полное количество многочастичных состояний. Слагаемое $\omega(J_Z, U + \Delta U)$ обычно имеет больший вес:

$$\omega(J_Z, U + \Delta U) + \omega(J_Z, U - \Delta U) > 2 \cdot \omega(J_Z, U). \quad (5.3.2)$$

Поэтому после усреднения нужно сделать нормировку для всех значений $\omega_{aver}(J_Z, U)$:

$$K = \frac{\sum_U \omega_{aver}}{\sum_U \omega} > 1; \quad \omega_{aver} \rightarrow \frac{\omega_{aver}}{K}. \quad (5.3.3)$$

Для цепочки изотопов никеля K равен ≈ 1.02 , что практически не сказывается на виде ω_{aver} .

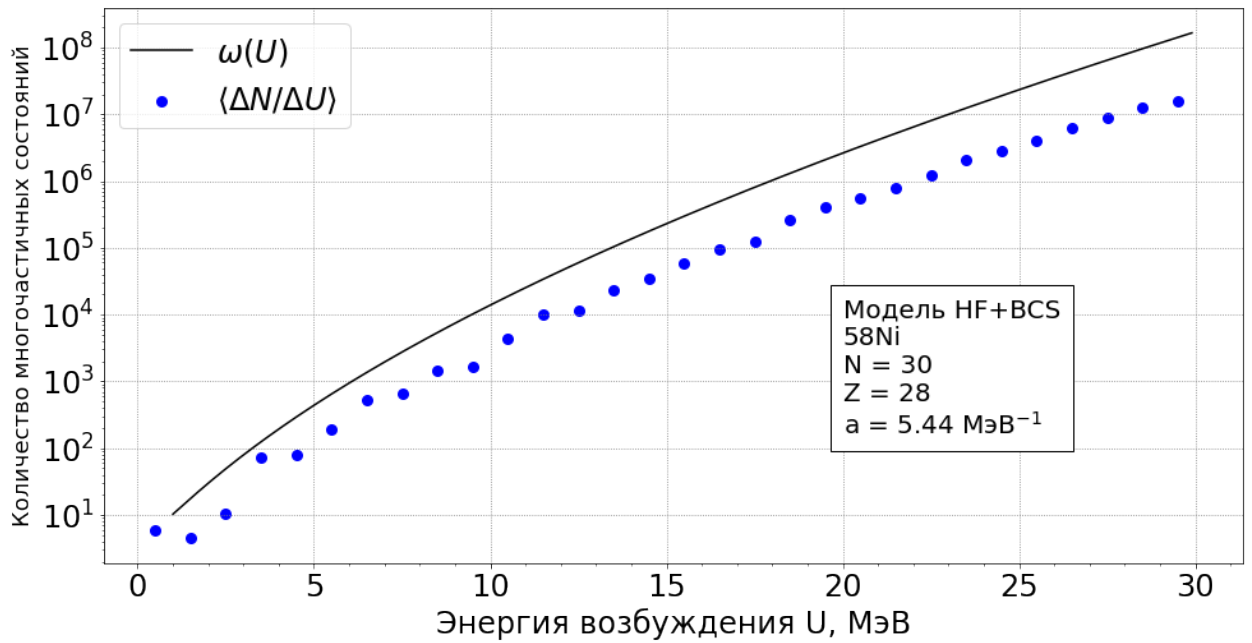


Рисунок 5.2 — Распределение плотности многочастичных состояний в зависимости от энергии возбуждения в модели Хартри-Фока с учётом теории БКШ для ядра ^{58}Ni . Сглаживание по трём точкам.

На рисунке 5.3 изображены результаты моделирования. Синие точки — расчёт по методу Хартри-Фока с учётом эффекта спаривания нуклонов. Чёрные точки соответствуют экспериментальной плотности уровней, полученной из спектра испускания протонов, синяя кривая для ^{62}Ni получена из расстояний между нейтронными резонансами, а красные линии — плотности дискретных уровней. Стрелки указывают на энергию связи нейтронов. Видно, что при энергиях около 15 МэВ плотность уровней заметно снижается из-за ограниченности одночастичного базиса, в результате чего наблюдается расхождение с экспериментом.

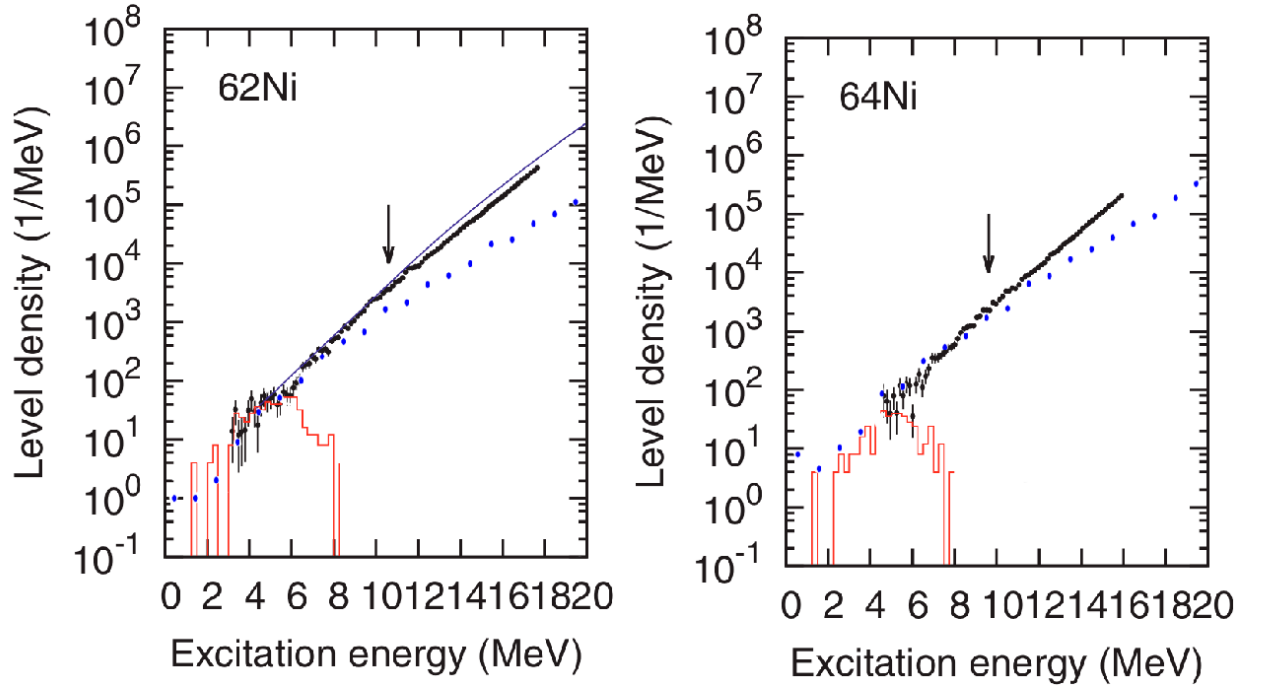


Рисунок 5.3 — Распределение плотности многочастичных состояний в зависимости от энергии возбуждения в модели Хартри-Фока с учётом теории БКШ для ^{62}Ni и ^{64}Ni .

5.3.2 АСИММЕТРИЯ ЧЁТНОСТИ В НОВОМ ОДНОЧАСТИЧНОМ БАЗИСЕ

В комбинаторном подходе можно различить чётности многочастичных состояний (см. рис. 5.4) и уровней. Здесь также применено усреднение. Для более наглядной интерпретации асимметрии чётности можно ввести величину аналогично работам [13; 21]:

$$A = \frac{\rho_+ - \rho_-}{\rho_+ + \rho_-}. \quad (5.3.4)$$

Тогда результаты для цепочки изотопов никеля (см. рис. 5.5) будут иметь некоторую особенность. Чем дальше ядро от заполненной оболочки (дважды магического ядра), тем быстрее восстанавливается симметрия в чётности. Здесь была использована интерполяция В3-сплайнами. Так, для ^{64}Ni симметрия наступает примерно с 10 МэВ, ^{62}Ni — с 17 МэВ, в то время как для ядер, близких к дважды магическим — только после 25 МэВ.

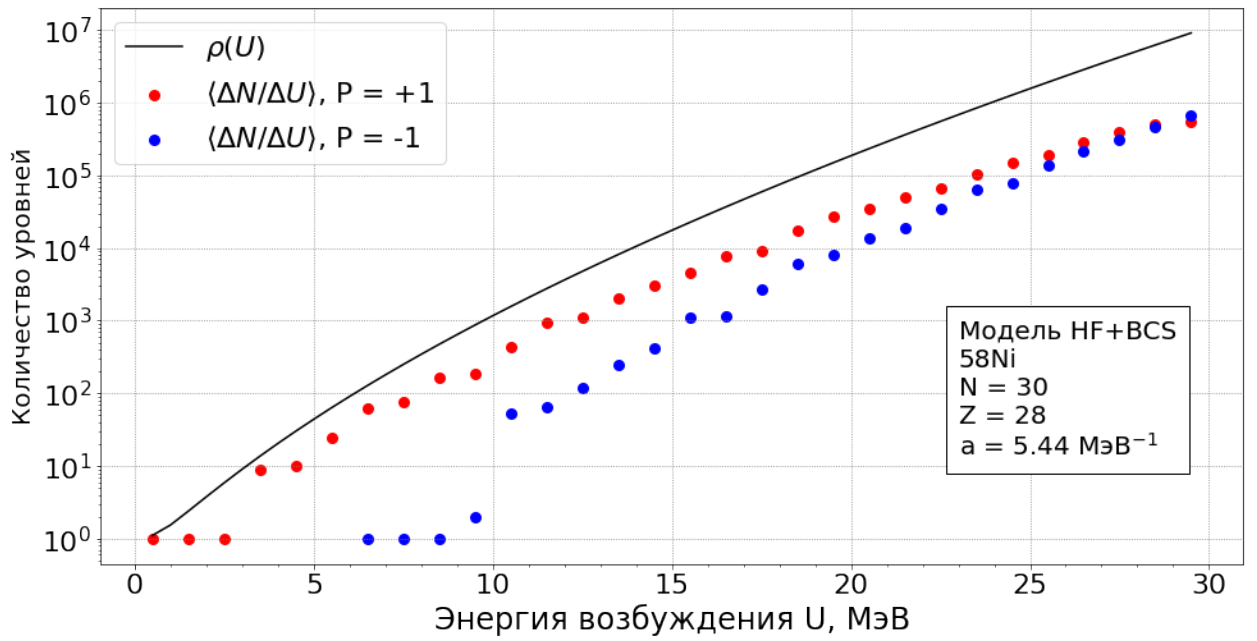


Рисунок 5.4 — Распределение плотности уровней в зависимости от энергии возбуждения в модели Хартри-Фока с учётом теории БКШ для ядра ^{64}Ni . Красные точки соответствуют положительной чётности, синие — отрицательной. Сглаживание по трём точкам.

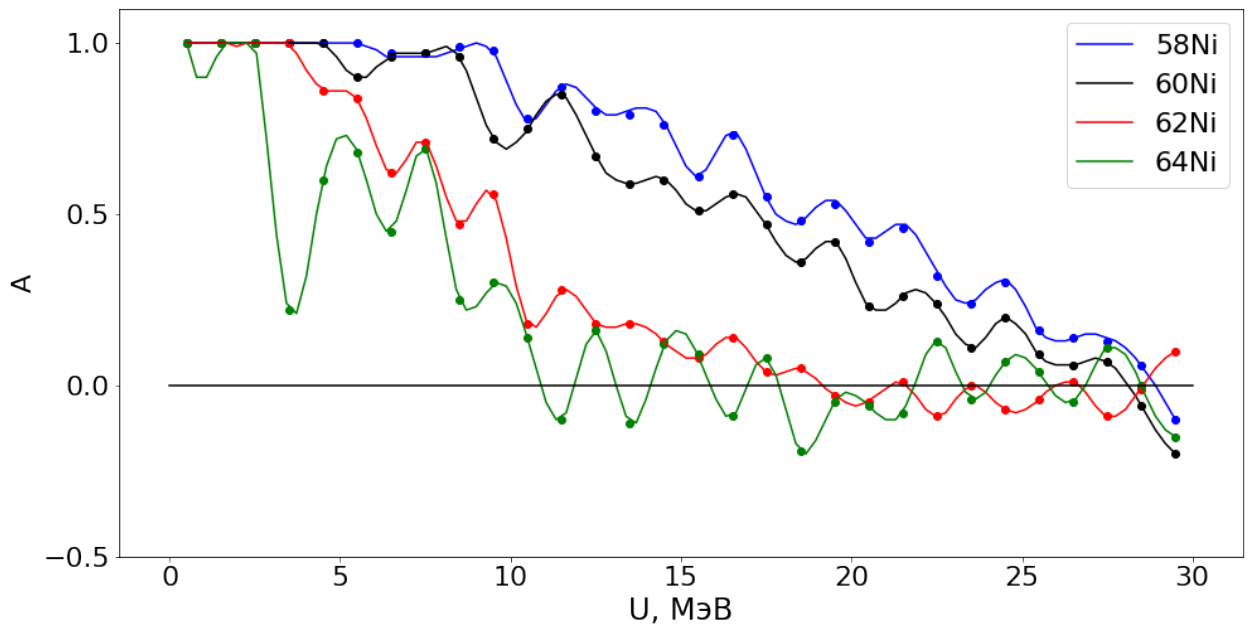


Рисунок 5.5 — Асимметрия чётности (5.3.4) для цепочки изотопов никеля. Сглаживание по трём точкам с использованием В3-сплайна.

В некоторых работах [20] асимметрия для чётно-чётных ядер вводится как

$$A = \frac{\rho_-}{\rho_+}. \quad (5.3.5)$$

Условие того, что в основном состоянии ядро имеет положительную чётность, ограничивает значение величины (5.3.5). Тогда результаты 5.5 можно представить в виде 5.6. В случае равенства чётностей формула 5.3.5 даёт значение 1, что соответствует переходу в модель ферми-газа.

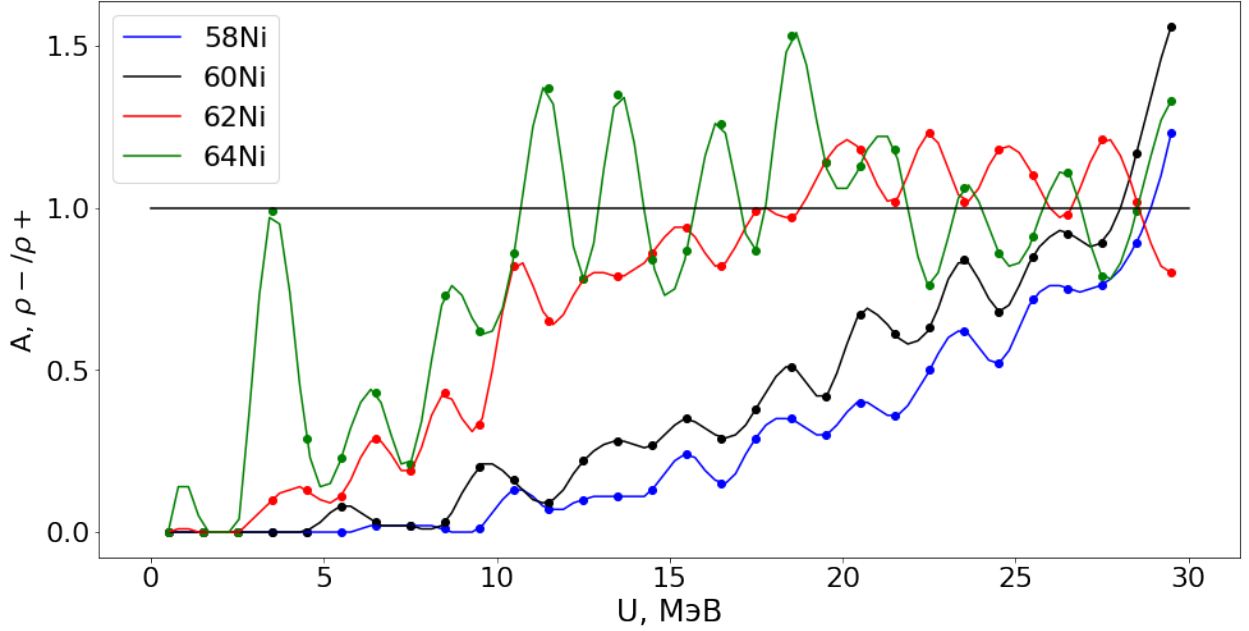


Рисунок 5.6 — Асимметрия чётности (5.3.4) для цепочки изотопов никеля. Сглаживание по трём точкам с использованием В3-сплайна.

Также на рисунке 5.7 представлено сравнение с работой [22] на изотопах железа (^{56}Fe , ^{58}Fe , ^{60}Fe). Чётности рассчитываются по формуле (5.3.5). Чёрная кривая — смоделированные данные из работы [22], синяя линия — данные, полученные в текущей модели.

В целом заметно, что равенство чётностей при синей кривой наступает при больших энергиях: для ^{56}Fe и ^{58}Fe — при ~ 30 МэВ, для ^{60}Fe — при ~ 15 МэВ.

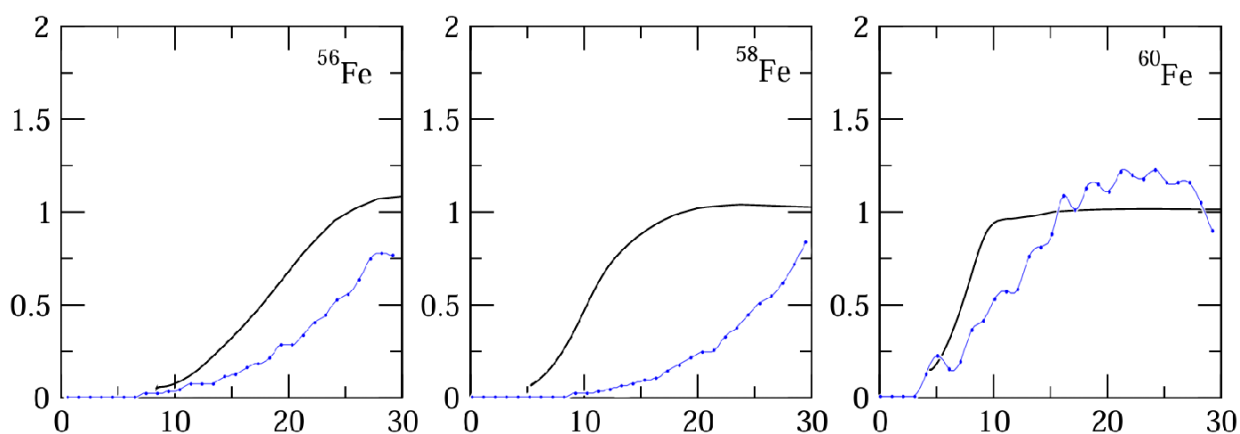


Рисунок 5.7 — Асимметрия чётности (5.3.5) для цепочки изотопов железа. Сравнение с работой [22].

5.4 УЧЁТ ИЗМЕНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ ЯДРА

Как упоминалось ранее, при возбуждении ядра нуклоны могут характеризоваться квантовыми числами, отличными от основного состояния, в результате чего формируется новое самосогласованное поле, имеющее, вообще говоря, другой одночастичный базис (сдвинутые энергетические уровни). Тогда энергия возбуждения в этом случае будет отличаться от рассчитанной в приближении «замороженного остова».

В программном комплексе наших коллег из МГУ имеется возможность рассчитать самосогласованное поле для возбуждённых ядер методом Хартри-Фока, но без учёта эффекта спаривания нуклонов.

На рисунках 5.8 и 5.9 изображены плотности многочастичных состояний в зависимости от энергии возбуждения. Синие точки отвечают расчёту в методе Хартри-Фока в приближении замороженного остова, а чёрные — в новом подходе.

Увеличение плотности состояний соответствует тому, что энергетические уровни становятся ближе, как на первой картинке 5.8. Однако на второй 5.9 плотность в новом подходе (чёрные точки) ниже. С чем может быть связано такое различие пока не известно. Это предмет дальнейших исследований.

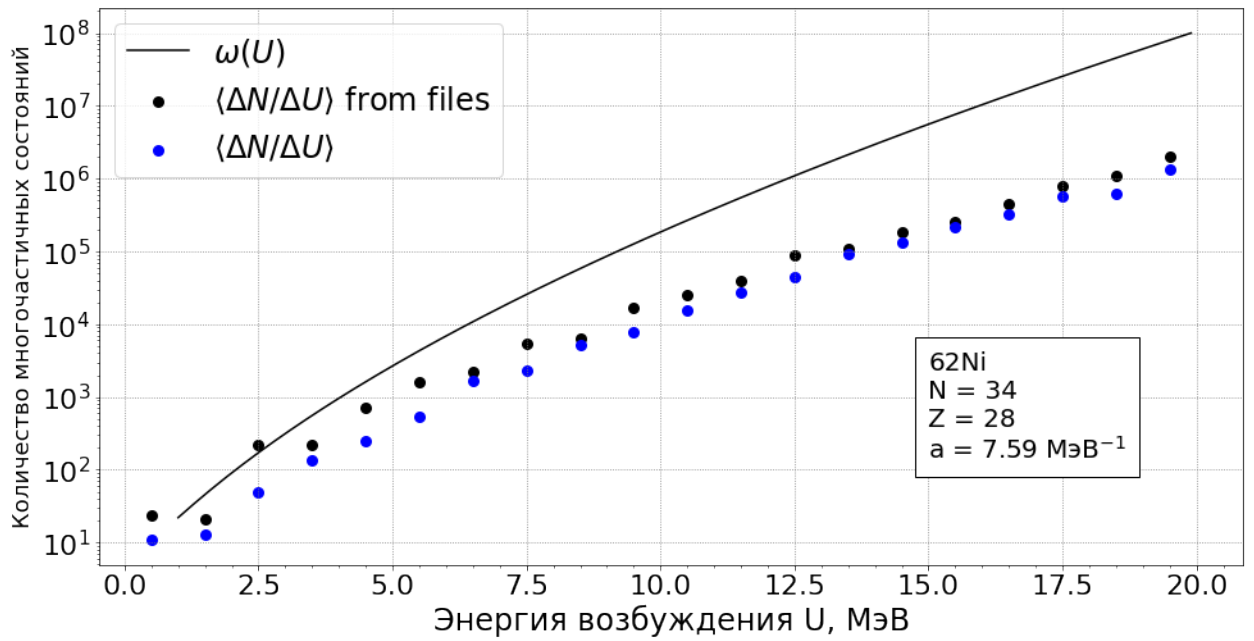


Рисунок 5.8 — Распределение плотности многочастичных состояний в зависимости от энергии возбуждения в модели Хартри-Фока без учёта теории БКШ для ядра ^{62}Ni . Сглаживание по трём точкам.

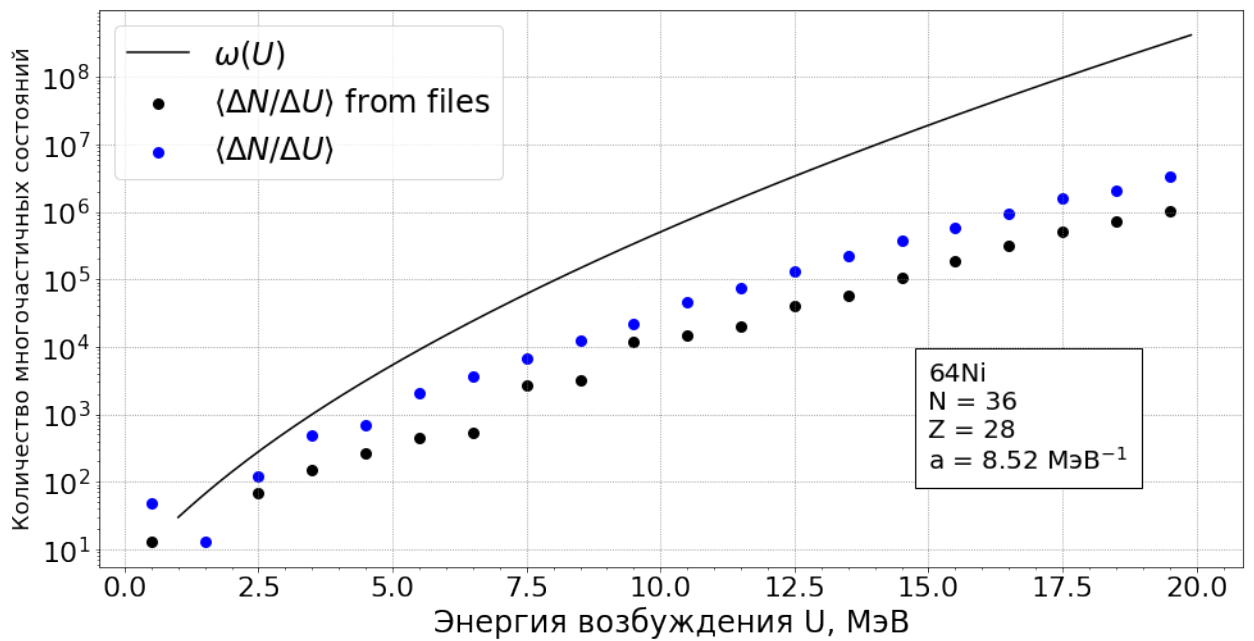


Рисунок 5.9 — Распределение плотности многочастичных состояний в зависимости от энергии возбуждения в модели Хартри-Фока без учёта теории БКШ для ядра ^{64}Ni . Сглаживание по трём точкам.

6 МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИЙ В ПРОГРАММЕ TALYS

Talys — программный комплекс с открытым кодом, который позволяет моделировать столкновения ядер с лёгкими частицами, в том числе нейтронами, с энергиями до 200 МэВ. В целях унификации создан набор входных параметров для ядерных моделей — Reference Input Parameter Library (RIPL-3) [9], который Talys использует по-умолчанию. Было проведено моделирование четырёх реакций в разных версиях Talys: 1.9 и 1.95.

$${}^{58}\text{Ni}(n,p){}^{58}\text{Co}, \quad {}^{59}\text{Co}(n,2n){}^{58}\text{Co}, \quad {}^{112}\text{Cd}(n,2n){}^{111}\text{Cd}, \quad {}^{113}\text{In}(n,n'){}^{113}\text{In},$$

(6.0.1)

Ядра, образующиеся в этих реакциях, обладают низколежащими долгоживущими изомерными состояниями. Все 4 указанные реакции изучались в недавних экспериментах [23], выполненных в НИЦ “Курчатовский институт” при энергии падающих нейтронов, близкой к 14 МэВ. Интерес к этим реакциям обусловлен тем, что они протекают в конструкционных материалах установок, в которых в процессе $d + t \rightarrow \alpha + n$ рождаются термоядерные нейтроны.

В статье [23], в частности, было отмечено, что существует значительный разброс экспериментальных данных по сечениям образования ядер в изомерных состояниях в указанных реакциях. При этом для части этих реакций отсутствуют надёжные оценки этих сечений. В связи с этим возник вопрос о возможности использования программы Talys для предсказания соответствующих сечений.

Указанные реакции идут с образованием возбуждённых компаунд-ядер, поэтому плотности уровней этих ядер существенно влияют на сечения. Talys позволяет использовать 6 моделей плотности уровней, пер-

вые 3 обсуждались во второй части этой работы: модель Гильберта-Камерона (модель 1), модель ферми-газа с обратным смещением (модель 2) и сверхтекучая модель, основанная на представлении о сверхтекучем ядре при малых энергиях возбуждения (модель 3). В моделях 4–6 Talys используются числовые файлы, полученные в различных комбинаторных расчётах, однако надёжность этих моделей не выше, чем моделей 1–3.

В данной работе получены сечения образования изомерных и основных состояний ядер в указанных реакциях. Выполнено сравнение этих результатов с оценками из библиотек TENDL-2021, IRDFF-II, а также EXFOR, т.е. с экспериментальными данными.

6.1 МЕТОД ОЦЕНКИ НАДЁЖНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

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

$$\Delta\sigma(E) = \max(|\sigma_1(E) - \sigma_2(E)|, |\sigma_1(E) - \sigma_3(E)|, |\sigma_2(E) - \sigma_3(E)|), \quad (6.1.1)$$

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

$$\sigma_{\text{av}}(E) = \frac{\sigma_1(E) + \sigma_2(E) + \sigma_3(E)}{3} \quad (6.1.2)$$

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

$$\sigma_{\text{max}}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) + \Delta\sigma(E), \quad \sigma_{\text{min}}(E) = \sigma_{\text{av}}(E) - \Delta\sigma(E), \quad (6.1.3)$$

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

6.2 РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ^{58}Ni

На рисунках 6.1, 6.2, 6.3 и 6.4 представлены сечения образования ядра ^{58}Co в реакции $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$ в основном и изомерном состояниях для разных версий Talys. Видно, что для основного состояния наблюдаются расхождения между данными из EXFOR и модельными данными (TENDL-2021, IRDFF-II, наши данные).

Для изомерного состояния ^{58}Co наблюдается разумное согласие данных из библиотек и смоделированных данных. Различия между сечениями в версиях Talys минимально, поэтому для следующих реакций показана информация только по Talys 1.95.

На картинках для изомеров видно, что кривые слегка осциллируют. Это не наблюдалось при большем шаге по энергиям — при 1 МэВ. Здесь для моделирования был выбран шаг 0.05 МэВ. Почему так происходит, на данный момент не ясно. Для выяснения причины, возможно, придётся анализировать исходный код программы и выяснять, как считались сечения реакций.

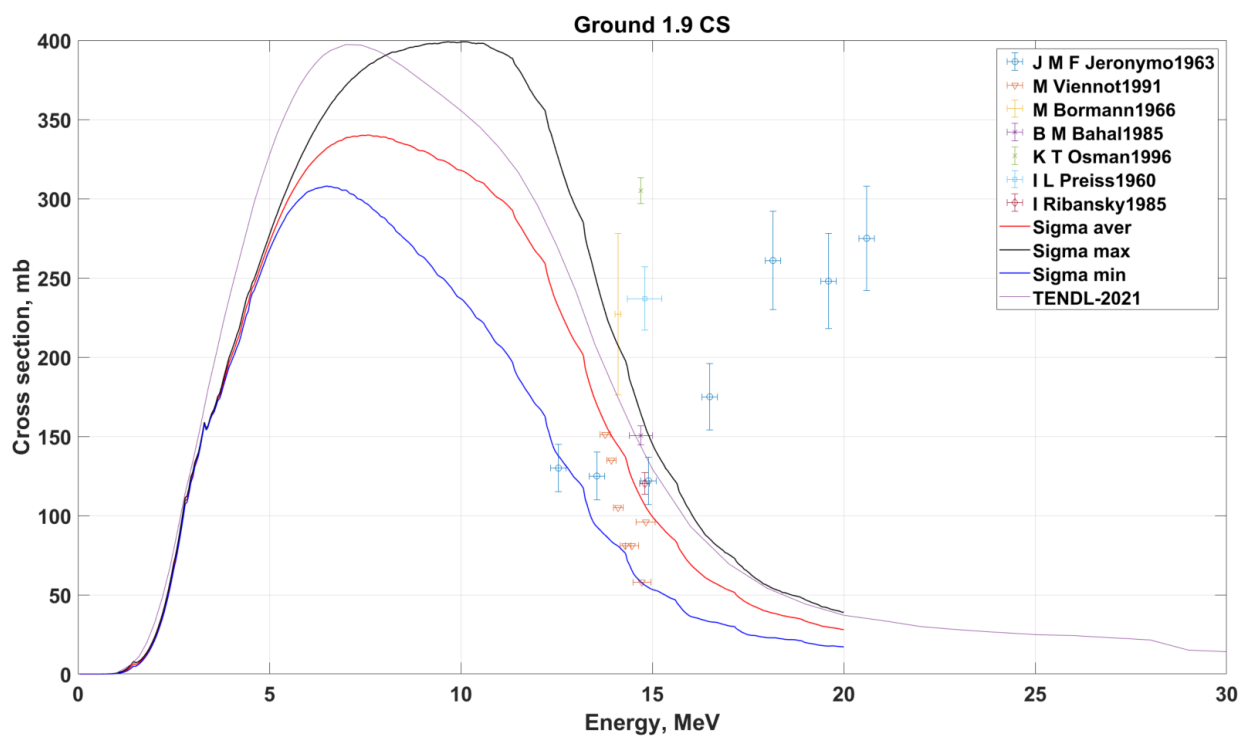


Рисунок 6.1 — Зависимость сечения образования основного состояния ядра ^{58}Co в реакции $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$ в зависимости от энергии. Talys 1.9

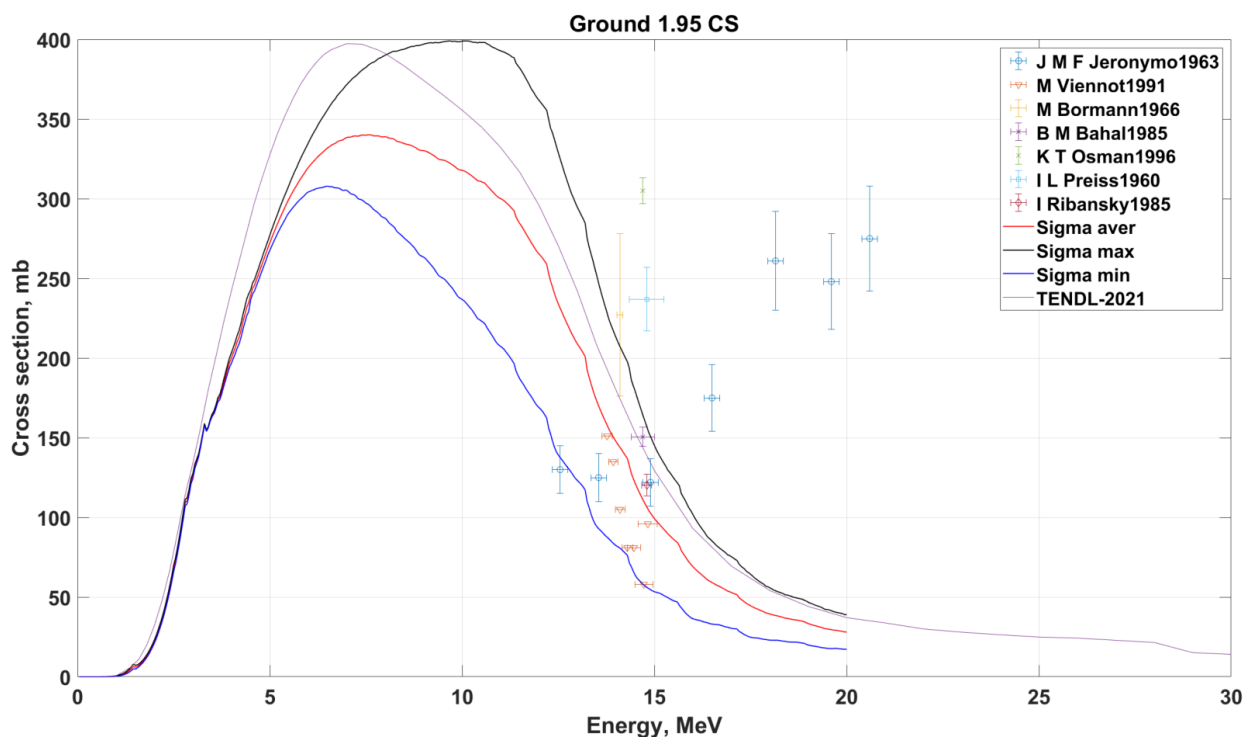


Рисунок 6.2 — Зависимость сечения образования основного состояния ядра ^{58}Co в реакции $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

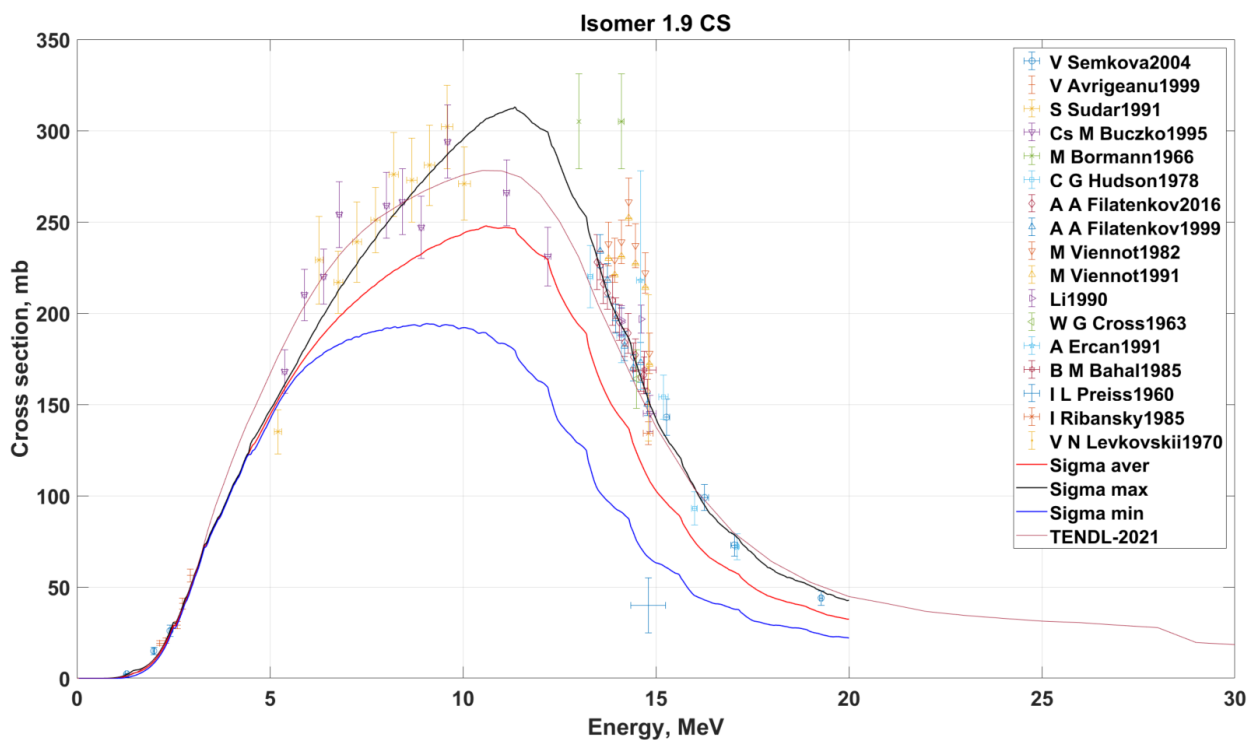


Рисунок 6.3 — Зависимость сечения образования изомерного состояния ядра ^{58}Co в реакции $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$ в зависимости от энергии. Talys 1.9

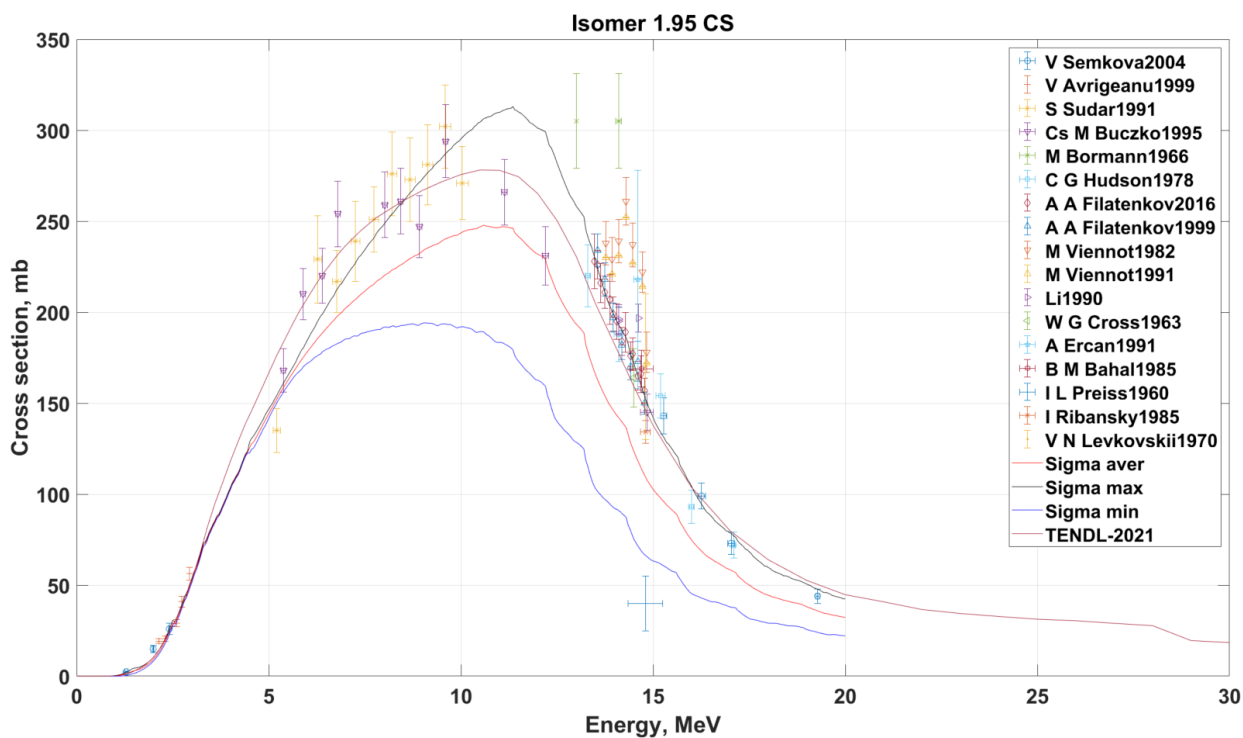


Рисунок 6.4 — Зависимость сечения образования изомерного состояния ядра ^{58}Co в реакции $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

6.3 РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ^{59}Co

На рисунках 6.5 и 6.6 представлены сечения образования ядра ^{58}Co в реакции $^{59}\text{Co}(n,2n)^{58}\text{Co}$ в основном и изомерном состояниях в зависимости от энергии падающих нейтронов.

Для данной реакции, как и для предыдущей (с никелем), наблюдаются осцилляции, наиболее заметные для изомерного состояния. В целом наблюдается согласие с экспериментальными данными; многие данные попадают в коридор ожидаемых значений.

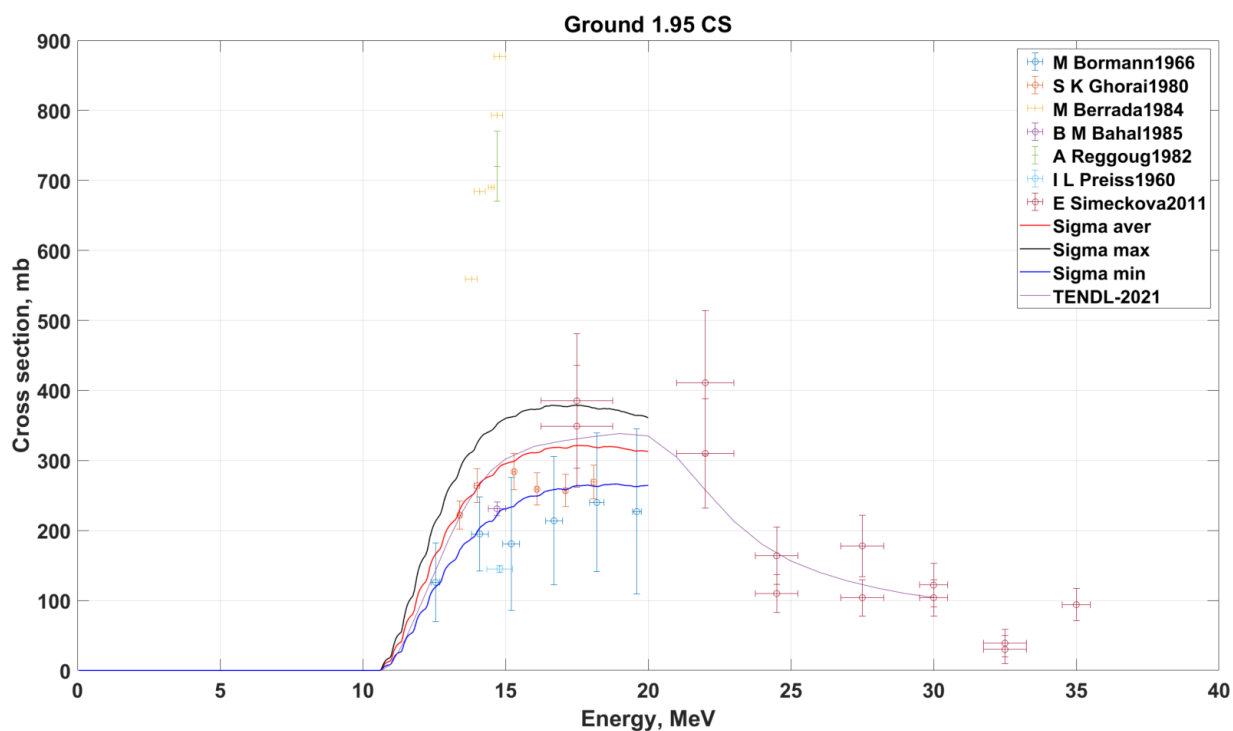


Рисунок 6.5 — Зависимость сечения образования основного состояния ядра ^{58}Co в реакции $^{59}\text{Co}(n,2n)^{58}\text{Co}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

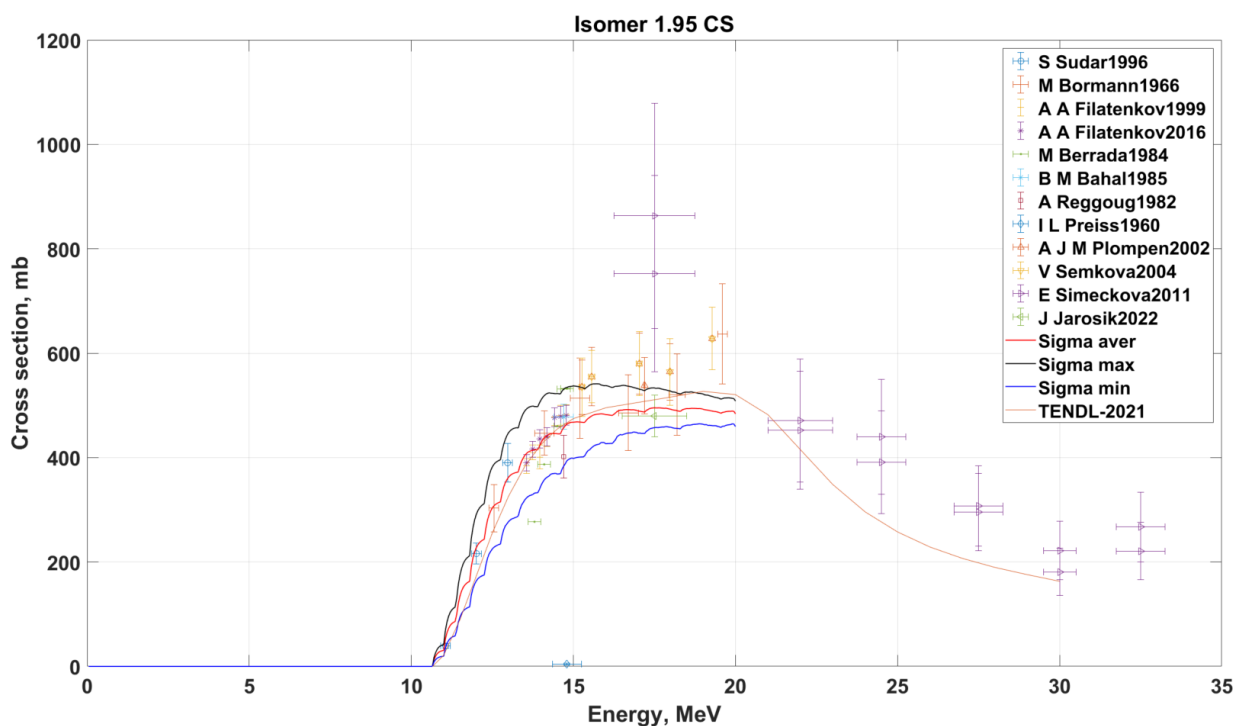


Рисунок 6.6 — Зависимость сечения образования изомерного состояния ядра ^{58}Co в реакции $^{59}\text{Co}(n,2n)^{58}\text{Co}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

6.4 РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ^{112}Cd

В библиотеке экспериментальных данных EXFOR не было данных по образованию основного состояния ^{111}Cd . Также можно заметить, что здесь осцилляции кривых Talys пропали.

Можно видеть, что экспериментальные данные, полученные из EXFOR, находятся в разумных пределах относительно полученных $\sigma_{\max}$ и $\sigma_{\min}$.

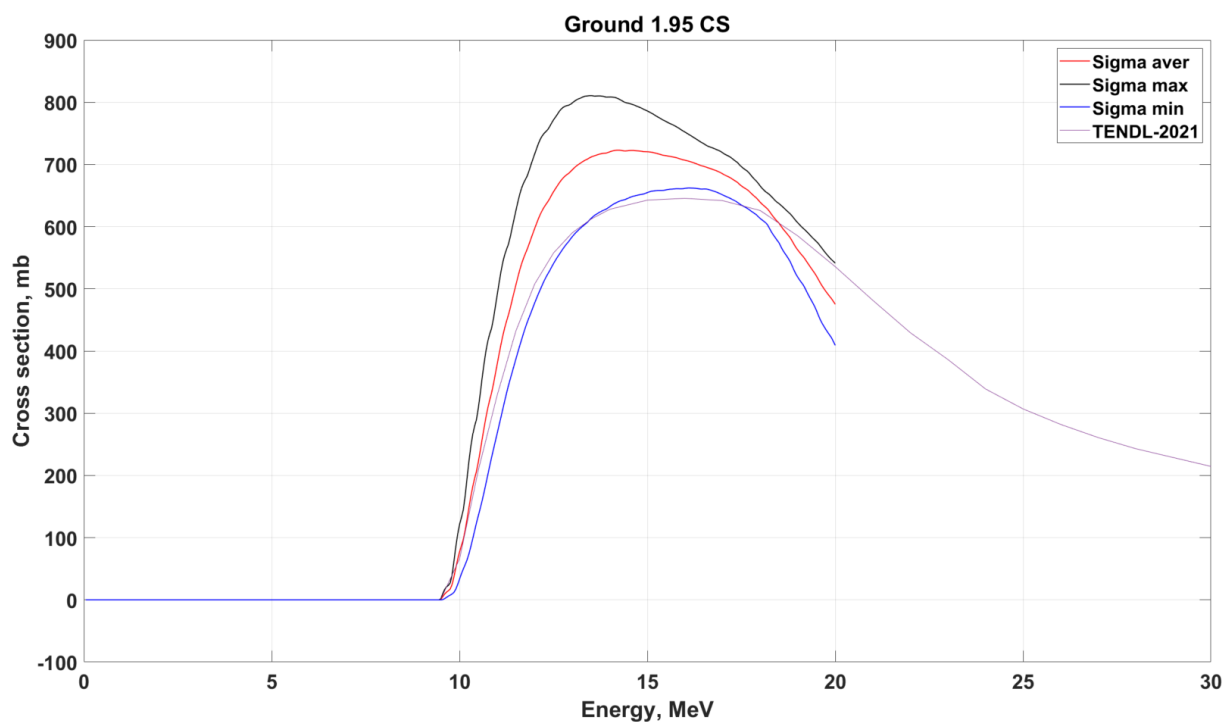


Рисунок 6.7 — Зависимость сечения образования основного состояния ядра ^{111}Cd в реакции $^{112}\text{Cd}(n,2n)^{111}\text{Cd}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

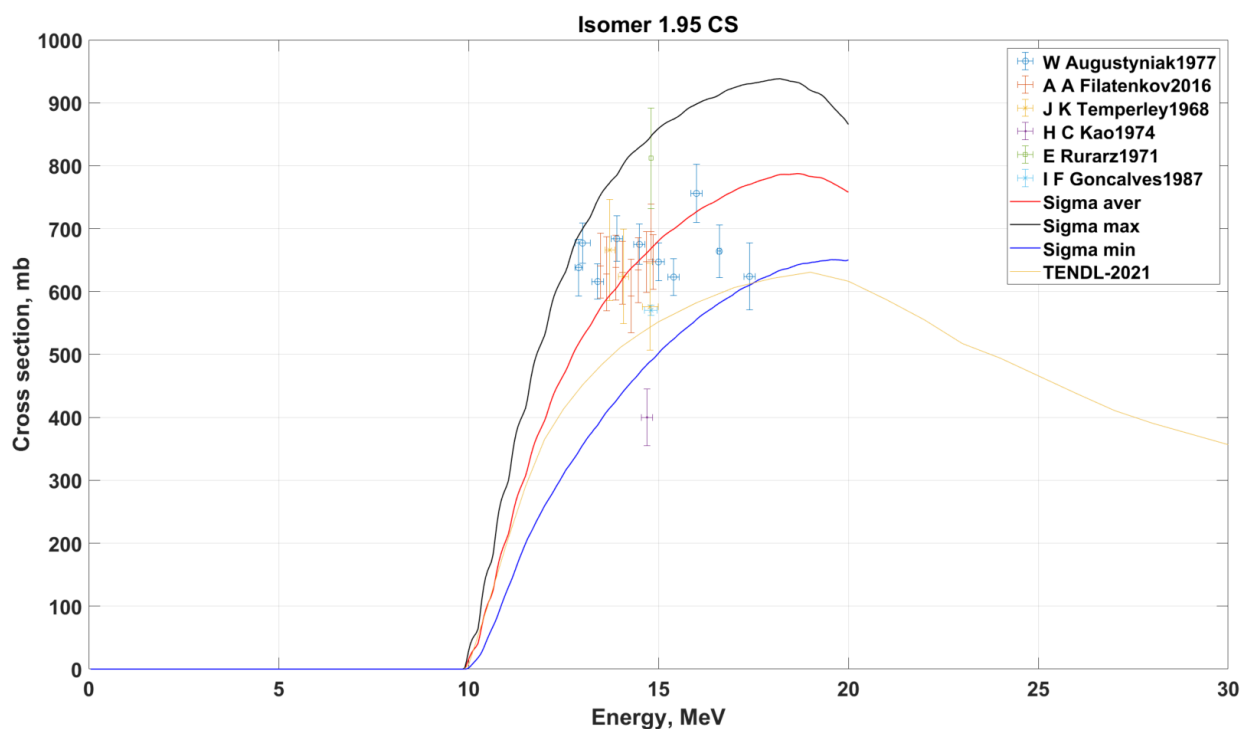


Рисунок 6.8 — Зависимость сечения образования изомерного состояния ядра ^{111}Cd в реакции $^{112}\text{Cd}(n,2n)^{111}\text{Cd}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

6.5 РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ^{113}In

Здесь также не было данных в EXFOR для основного состояния. Можно видеть одну особенность: согласно библиотекам ядерных данных, ядро ^{113}In имеет некоторую «двугорбость» при малых энергиях. Эту особенность не удалось воспроизвести ни в одной из моделей плотности уровней. Почему так происходит, пока не ясно. Это требует дальнейшего анализа того, что заложено в коде Talys.

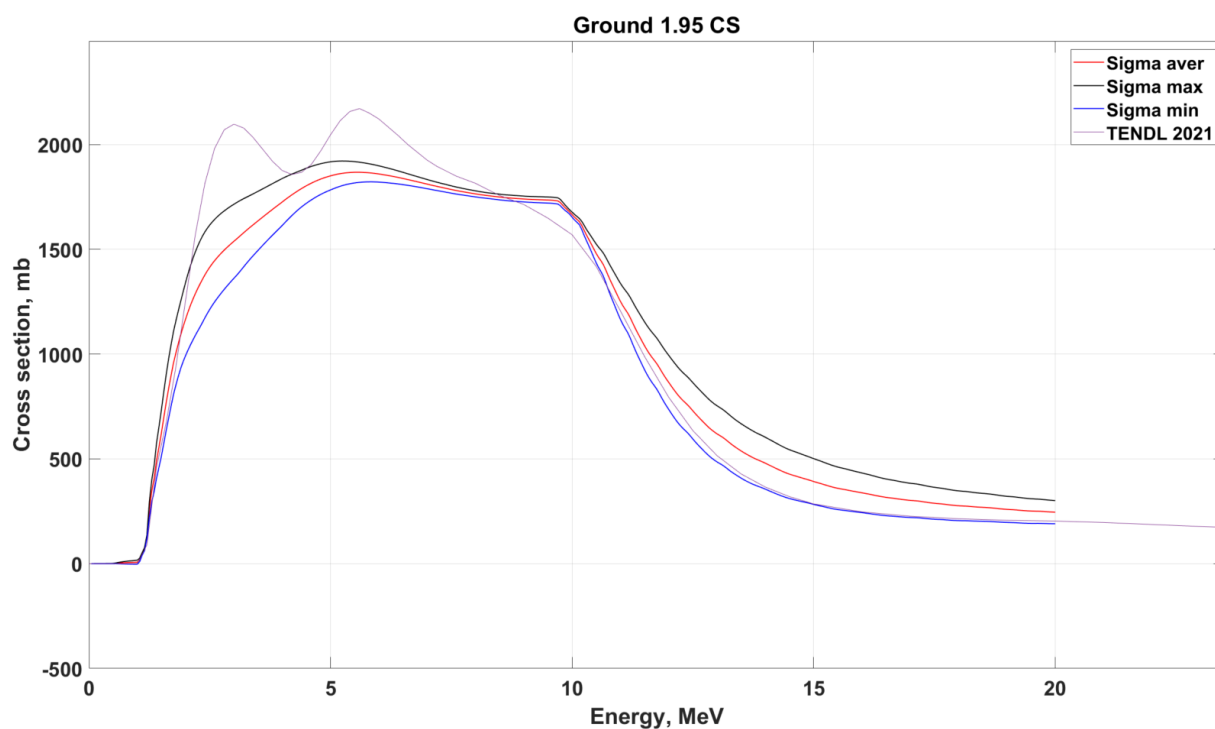


Рисунок 6.9 — Зависимость сечения образования основного состояния ядра ^{113}In в реакции $^{113}\text{In}(n,n')^{113}\text{In}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

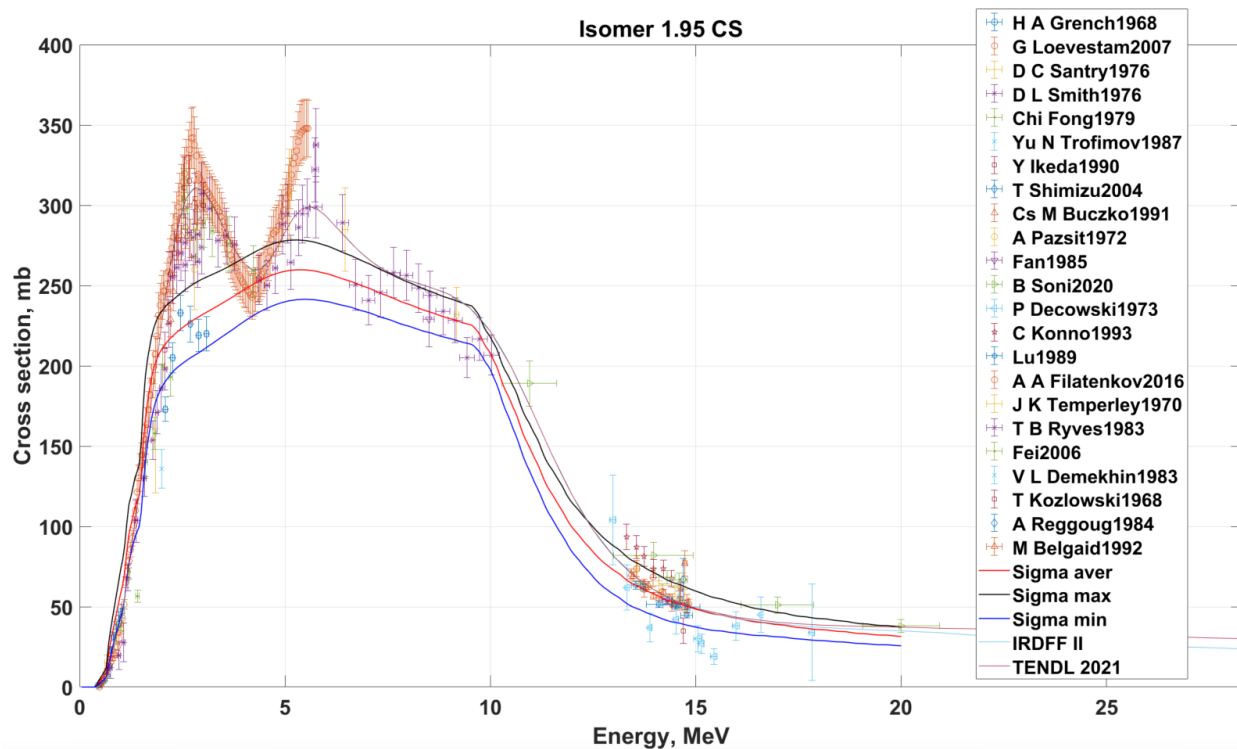


Рисунок 6.10 — Зависимость сечения образования изомерного состояния ядра ^{113}In в реакции $^{113}\text{In}(n,n')^{113}\text{In}$ в зависимости от энергии. Talys 1.95

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данную работу можно условно разделить на три большие части, которые, конечно, связаны между собой. Во-первых, это получение аналитических формул для плотности состояний и уровней ядер, изложенное в первом разделе.

Во-вторых, построение алгоритма перебора многочастичных состояний и дальнейшее получение различных распределений плотности как состояний, так и уровней. Здесь же производится сравнение полученных моделированием результатов с аналитическими формулами, описанными ранее. Для больших энергий наблюдается переход в ферми-газовый случай.

Также показано, что при малых энергиях есть асимметрия в чётности, что может повлиять на вероятность протекания реакции.

Было проведено сравнение с некоторыми экспериментальными результатами. В целом наблюдается разумное согласие, однако требуется дальнейшая работа по учёту остаточных взаимодействий и деформаций.

Третья часть работы — моделирование ядерных реакций в программном комплексе Talys. Полученные результаты находятся в разумном согласии с библиотеками ядерных данных. В будущем планируется усовершенствовать собственный алгоритм перебора многочастичных состояний и попробовать использовать его для расчётов в программе Talys.

ПРИЛОЖЕНИЯ

А ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА ПЕРЕБОРА МНОГОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ

Целью программы является получение распределений плотности многочастичных состояний $\omega(U, J_Z, P) = \frac{dN(P)}{dU dJ_Z}$, $\omega(J_Z, P) = \frac{dN(P)}{dJ_Z}$ и плотности уровней $\rho(U, I) = \omega(U, J_Z = J) - \omega(U, J_Z = J + 1)$ в зависимости от энергии возбуждения U , проекции углового момента J_Z на ось Z , углового момента J , а также чётности P .

А.1 ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

- **nucleus** — определённое ядро, для которого нужно вычислить плотность уровней. Записывается в строковом формате: 39K, 40Ca, 58Ni и т.п. Регистр не важен.
- **U** — энергия, вплоть до которой нужно вычислить плотность уровней. Формат: целое число в МэВ.
- **file** — название файла, из которого извлекается информация об одночастичных состояниях ядра.

А.2 НЕКОТОРЫЕ ВНУТРЕННИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ

- **A** — массовое число, определяемое из **nucleus**
- **N_p** — число протонов, определяемое из **nucleus**
- **N_n** — аналогично.
- **p_levels** — количество энергетических уровней для протонов
- **n_levels** — аналогично.
- **DP** — энергия спаривания для протонов

- `DN` — аналогично.
- `GP` — параметр силы парного взаимодействия для протонов.
- `GN` — аналогично.
- `E_0_proton` — энергия основного состояния для протонов.
- `E_0_neutron` — аналогично.
- `E_F_proton` — энергия Ферми для протонов.
- `E_F_neutron` — аналогично.
- `energy_step` — шаг в распределении по энергии в МэВ. Обычно это целое число.
- `j2z_limit` — максимальное значение удвоенной проекции углового момента. Если у некоторого многочастичного состояния будет рассчитано `j2z > j2z_limit` или `-j2z < -j2z_limit`, то возникнет ошибка. Значение `j2z_limit` выбирается с запасом; обычно оно равно 50.
- `dN[n]_over_dU_over_d2jz_parity[P]` — словарь (dictionary) для нейтронов `[n]`, в котором ключами являются энергии возбуждения с шагом `energy_step`, а значениями — массивы, каждый индекс которого соответствует определённой проекции углового момента `j2z`. Указывая энергию и проекцию углового момента, можно получить количество многочастичных состояний с положительной чётностью `[P]` с заданными параметрами. Так, например, команда `dNn_over_dU_over_d2jz_parityP[7][56]` выдаст количество многочастичных состояний в интервале энергий `[7, 8) МэВ`, с удвоенной проекцией углового момента `j2z - j2z_limit = 6` и с положительной чётностью `P = 1`.
- `dNn_over_dU_over_d2jz_parityN` — аналогично.
- `dNp_over_dU_over_d2jz_parityP` — аналогично.
- `dNp_over_dU_over_d2jz_parityN` — аналогично.
- `dNp_over_dU` — словарь (dictionary) для протонов, в котором ключами являются энергии возбуждения с шагом `energy_step`, а значениями — числа, количества многочастичных состояний в определённых интервалах энергий. Например, `dNp_over_dU[7]` выдаст количество многочастичных состояний в интервале энергий `[7, 8) МэВ`.
- `dNn_over_dU` — аналогично.
- `N_states` — в расчёте для протонов принимает значение `proton_nstates`,

для нейтронов — `neutron_nstates`.

- `E_F` — в расчёте для протонов принимает значение `E_F_proton`, для нейтронов — `E_F_neutron`.
- `nucl_type` — в расчёте для протонов принимает строковое значение “p”, для нейтронов — “n”.
- `E_0` — в расчёте для протонов принимает значение `E_0_proton`, для нейтронов — `E_0_neutron`.
- `N` — в расчёте для протонов принимает значение `N_p`, для нейтронов — `N_n`.
- `parity` — в расчёте для протонов принимает значение `proton_parity`, для нейтронов — `neutron_parity`.
- `j2z` — в расчёте для протонов принимает значение `proton_j2z`, для нейтронов — `neutron_j2z`.
- `D` — в расчёте для протонов принимает значение `DP`, для нейтронов — `DN`.
- `E` — в расчёте для протонов принимает значение `proton_energies`, для нейтронов — `neutron_energies`.
- `array` — массив чисел заполнения одночастичных состояний, состоящий из нулей (состояние не занято) и единиц (состояние занято). Когда производится расчёт для протонов, длина массива равна `proton_nstates` в случае нейтронов — `neutron_nstates`.
- `iteration_array` — массив длины `N_states - N`, в котором изначально каждый элемент равен `N`.
- `array_energy()` — функция, которая рассчитывает энергию возбуждения многочастичного состояния. Возвращает число типа `float`.
- `array_parity()` — функция, которая рассчитывает чётность многочастичного состояния. Возвращает `1`, если чётность положительна, и `-1`, если отрицательна. Использует в расчёте `parity`.
- `array_j2z()` — функция, которая рассчитывает удвоенную проекцию полного углового момента многочастичного состояния. Использует в расчёте `j2z`.

А.3 ОПИСАНИЕ РАБОТЫ АЛГОРИТМА

Основная идея алгоритма изображена на рисунке 6.12.

А.3.1 Подготовка переменных

```
1 ##### PROTON #####
2
3 nucl_type = "p"
4 N_states = proton_nstates
5 N = N_p
6 E = proton_energies
7 E_F = E_F_proton
8 E_0 = E_0_proton
9 parity = proton_parity
10 j2z = proton_j2z
11 D = DP
12 G = GP
13 allocation = proton_allocation
14
15 iteration_array = []
16 for i in range(N_states - N):
17     iteration_array.append(N)
18
19 array = [0 for i in range(N_states)]
20 for i in range(N):
21     array[i] = 1
22
23 print('proton started')
24
25 ALGORITHM_CORE(N_states - N)
```

Рисунок 6.11 — Инициализация переменных для протонной подсистемы.

Из файла `file` берётся информация об одночастичном базисе. Этот файл должен быть подготовлен заранее. Процедура расчёта происходит сначала для протонной подсистемы, а затем для нейтронной. Перед вычислением для протонов создаются переменные `dNp_over_dU_over_d2jz_parityP` и `dNp_over_dU_over_d2jz_parityN`, которые будут являться результатом работы, а также присваиваются значения переменным `nucl_type`, `N_states`, `N`, `E`, `E_F`, `E_0`, `parity`, `j2z`, `D`, `G`, `allocation`, `iteration_array` и `array` (см. рис. 6.11).

`iteration_array` — массив длины `N_states - N`, в котором изначально каждый элемент равен `N`.

А.3.2 Функция «ALGORITHM_CORE»

Изначально функция (см. рис. 6.13) запускается командой `ALGORITHM_CORE(N_states - N)`, где аргумент `N_states - N` соответствует количеству незанятых одночастичных состояний, то есть «глубине итерации». Здесь `n = 1` соответствует максимальной глубине, `n = N_states - N` — минимальной. Есть три основные логические части функции: первая — с 3 по 20 строки, вторая — с 23 по 27 и третья — с 29 по 37.

Ключевое слово `global` нужно для того, чтобы `array` во вложенной функции был тем же, что и в родительской.

А.3.3 Случай `n = 1`

Рассмотрим первую часть функции (3-20 строки). Если так получилось, что, например, `N_states = 20`, а `N = 19`, то исполнится условие `n == 1`. `iteration_array` имеет длину 1 и равен [19]. Функция `array_energy()` рассчитывает энергию возбуждения многочастичного состояния; если она меньше (или равна) заданной энергии `U`, то происходит запись информации в функции `add_count()`. Так, основное состояние

`array = [1,1,...,1,0]`

будет учтено; его энергия возбуждения равна 0. В 8 строке `array` записывается во вспомогательную переменную, чтобы потом восстановить исходный вид `array` в 18 строчке. Далее в 9–16 строках происходит `iteration_array[0] = 19` итераций начиная с

Основное состояние

$$\begin{aligned} &\{1, 1, \dots, 1, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\} \\ &\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 1, 0, 0, \dots\} \\ &\vdots \\ &\{1, 0, \dots, 1, 1, 1, 1, 0, 0, \dots\} \\ &\{0, 1, \dots, 1, 1, 1, 1, 0, 0, \dots\} \\ &\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 0, 1, 0, \dots\} \\ &\vdots \\ &\{0, 1, \dots, 1, 1, 1, 0, 1, 0, \dots\} \\ &\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, 1, 1, 0, \dots\} \\ &\vdots \\ &\{1, 0, \dots, 1, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\} \\ &\{0, 1, \dots, 1, 1, 0, 1, 1, 0, \dots\} \\ &\{1, 1, \dots, 0, 0, 1, 1, 1, 0, \dots\} \\ &\vdots \\ &\{0, 0, \dots, 1, 1, 1, 1, 1, 0, \dots\} \\ &\{1, 1, \dots, 1, 1, 0, 0, 0, 1, \dots\} \\ &\vdots \\ &\{1, 1, \dots, 1, 0, 0, 0, 1, 1, \dots\} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Рисунок 6.12 — Алгоритм перебора многочастичных состояний без ограничений на энергию

$$\begin{aligned}
&[1, 1, \dots, 1, 1, 1, 0] \\
&[1, 1, \dots, 1, 1, 0, 1] \\
&\vdots
\end{aligned}$$

и заканчивая

$$[0, 1, \dots, 1, 1, 1, 1].$$

Поскольку одночастичные состояния выстроены в порядке возрастания энергии (при одинаковой энергии — по возрастанию j_Z), то если для определённого многочастичного состояния энергия возбуждения больше U , не имеет смысла дальше делать перебор; происходит выход из цикла (15-16 строки). После цикла массив принимает исходное значение $[1, 1, \dots, 1, 0]$ в 18 строке.

А.3.4 Случай $n = 2$

При $n = 2$ (например, $N_states = 20$, $N = 18$) изначальный массив `array` равен $[1, 1, \dots, 1, 0, 0]$, а `iteration_array` равен $[18, 18]$. Алгоритм переходит сразу на 22 строку. При $n = 2$ на 23 строке ничего не происходит.

Далее на 25 строке запускается `ALGORITHM_CORE(1)`, производится код для $n = 1$. 18 строка: `array = [1, 1, \dots, 1, 0, 0]`. 19 строка: `array = [1, 1, \dots, 1, 0, 0, 1]` (переложили последний нуклон на 2 места вперёд). 20 строка: `iteration_array = [17, 18]`. После выполнения функции `ALGORITHM_CORE(1)` на 26-27 строках производится проверка на ограничение по энергии.

Далее процедура повторяется (цикл на 24 строке). Дело в том, что теперь `iteration_array[0] = 17`; тогда будут перебраны многочастичные состояния

```

1 ▾ def ALGORITHM_CORE(n):
2   global array
3   ▾ if n == 1:
4     calculated = array_energy()
5     ▾ if calculated <= U:
6       add_count(calculated)
7
8     remember_array = array.copy()
9     ▾ for i in range(iteration_array[0]):
10      array[iteration_array[0]-i], array[iteration_array[0]-i-1] = 1, 0
11      calculated = array_energy()
12     ▾ if calculated <= U:
13       add_count(calculated)
14
15     else:
16       break
17
18   array = remember_array.copy()
19   array[iteration_array[0] + 1], array[iteration_array[0] - 1] = 1, 0
20   iteration_array[0] -= 1
21
22 ▾ else:
23   iteration_array[n - 2] = iteration_array[n - 1]
24   ▾ for i in range(iteration_array[n - 1]):
25     ALGORITHM_CORE(n - 1)
26   ▾ if array_energy() > U:
27     break
28
29   ▾ if n != N_states - N:
30     array[iteration_array[n - 1] + n] = 1
31   ▾ for i in range(n + 1):
32     array[iteration_array[n - 1] - 1 + i] = 0
33
34   ▾ for i in range(iteration_array[n - 1] - 1):
35     array[i] = 1
36
37   iteration_array[n - 1] -= 1

```

Рисунок 6.13 — Функция `ALGORITHM_CORE`.

$$\begin{array}{c}
 \text{array[iteration_array[0]]} \\
 [1, 1, \dots, 1, 1, \overbrace{}^0, 0, 1] \\
 [1, 1, \dots, 1, 0, 1, 0, 1] \\
 [1, 1, \dots, 0, 1, 1, 0, 1] \\
 \vdots \\
 [0, 1, \dots, 1, 1, 1, 0, 1],
 \end{array}$$

после чего `array` вернётся на 18 строке в исходное состояние $[1, 1, \dots, 1, 0, 0, 1]$. 19 строка: $[1, 1, \dots, 0, 0, 1, 1]$. 20 строка: `iteration_array=[16, 18]`.

И так далее, пока в последнем 18-м цикле (`iteration_array[n-1]`) не будет произведён перебор в 9-16 строках

[1,0,0, ..., 1,1]

[0,1,0, ..., 1,1]

Далее в 19 строке будет получено [0,0,1, ..., 1,1] (энергия этого состояния будет записана позже, при $n=3$), в 20 — `iteration_array=[0, 18]`. Код после 29 строчки не исполняется по условию.

А.3.5 Случай $n = 3$

Этот случай отличается от предыдущих двух и требует отдельного рассмотрения. Исходно `array = [1, ..., 1, 0, 0, 0]` и `iteration_array = [17, 17, 17]` (если $N_states = 20$, $N = 17$). На 25 строке будет запущена первая итерация `ALGORITHM_CORE(2)`, после чего `array = [0, 0, 1, ..., 1, 1, 0]`, а `iteration_array = [0, 17, 17]`; внутри этой функции $n = 2 \neq N_states - N$, в результате чего исполняется код после 29 строчки.

А.3.6 Третий сегмент алгоритма

Разберём, что происходит при $N_states - N = 3$ после 29 строчки подробно. $n = 2$; тогда на следующей строке индекс `iteration_array[n-1] + n = 17 + 2 = 19`. `array[19] = 1`; массив `array` изменяется как [0, 0, 1, ..., 1, 1, 1, 1, 1]. Это соответствует переключиванию нуклона для следующей итерации.

На 31-32 строках происходит зануление $n + 1$ количества одночастичных состояний с индексами от `iteration_array[n-1] - 1` до `iteration_array[n-1] - 1 + n` включительно, то есть от $17 - 1 = 16$ до $17 - 1 + 2 = 18$. Тогда `array = [0, 0, 1, ..., 1, 0, 0, 0, 1]`.

Теперь следует заселить все низшие `iteration_array[n-1]-1` состояний (34-35 строчки). На последней итерации индекс равен `iteration_array[n-1] - 2 = 17 - 2 = 15`. Тогда низшие 15 состояний будут заселены: `array = [1, 1, 1, ..., 1, 0, 0, 0, 1]`. Таким образом,

$$[0,0,1,\dots,1,1,1,1,0] \longrightarrow [1,1,1,\dots,1,0,0,0,1].$$

На 37 строке `iteration_array` принимает вид `[0,16,17]`. Затем происходит возврат на предыдущий уровень вложенности (25 строка), проверяется условие по энергии, и наступает следующая итерация `ALGORITHM_CORE(2)`; на 23 строке `iteration_array = [16, 16, 17]`. По сути `iteration_array` представляет массив элементов, каждый из которых показывает количество единиц слева от нуля (за исключением последнего элемента, который не изменяется из-за того, что `n = N_states - N`). По окончании второй итерации `ALGORITHM_CORE(2)` на 26-27 также происходит проверка на энергию; `array = [0,0,1,\dots,1,1,1,0,1]`. В третьем сегменте подготавливается `array` для следующих итераций:

$$[0,0,1,\dots,1,1,1,1,0,1] \longrightarrow [1,1,1,\dots,1,0,0,0,1,1].$$

После 37 строчки `iteration_array` становится равным `[0,15,17]`. И так далее до `iteration_array = [0,0,17]` и `array = [0, 0, 0, 1, \dots, 1]`.

В таблице 6.1 приведён пример комбинаторного перебора для `N_states = 20`, `N = 15`, где указаны основные моменты работы алгоритма. Когда `iteration_array` становится равным `[0,0,0,0,15]`, выполнение прекращается, так как на внешнем уровне вложенности выполняется условие `n == N_states - N`.

А.3.7 Условие ограничения по энергии возбуждения

Также важно понять, почему выходы из циклов на 16 и 27 строках не уменьшают количество подходящих многочастичных состояний, почему не отбрасываются ещё и другие нужные нам состояния. Ключевой момент состоит в том, что одночастичные состояния в `array` выстроены в порядке возрастания энергии (при одинаковой энергии — по возрастанию j_Z).

В случае с 16 строкой прерывание цикла не сказывается на общем

array	iteration_array	Номер строки	Число n
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0	15,15,15,15,15	4	1
0,1,1,1,1,...,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0	15,15,15,15,15	17	1
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,1,0,0,0	14,15,15,15,15	20	1
1,1,1,1,1,...,1,1,1,0,0,1,1,0,0,0	13,15,15,15,15	20	1
1,1,1,1,1,...,1,1,0,0,1,1,1,0,0,0	12,15,15,15,15	20	1
1,0,0,1,1,...,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0	1,15,15,15,15	20	1
0,1,0,1,1,...,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0	1,15,15,15,15	17	1
0,0,1,1,1,...,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0	0,15,15,15,15	20	1
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,0,1,0,0	0,14,15,15,15	37	2
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,0,1,0,0	14,14,15,15,15	23	3
1,1,1,1,1,...,1,1,1,0,0,0,1,1,0,0	0,13,15,15,15	37	2
1,1,1,1,1,...,1,1,1,0,0,0,1,1,0,0	13,13,15,15,15	23	3
1,0,0,0,1,...,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0	1,1,15,15,15	23	2
0,0,1,0,1,...,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0	0,1,15,15,15	20	1
0,0,0,1,1,...,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0	0,0,15,15,15	37	2
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,0,0,1,0	0,0,14,15,15	37	3
1,1,1,1,1,...,1,1,1,0,0,0,0,1,1,0	0,0,13,15,15	37	3
0,0,0,0,1,...,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0	0,0,0,15,15	37	3
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,0,0,0,1	0,0,0,14,15	37	4
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,0,0,0,1	0,0,14,14,15	23	4
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,0,0,0,1	0,14,14,14,15	23	3
1,1,1,1,1,...,1,1,1,1,0,0,0,0,0,1	14,14,14,14,15	23	2
1,1,1,1,1,...,1,1,1,0,0,0,0,0,1,1	0,0,0,13,15	37	4
0,0,0,0,0,...,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1	0,0,0,0,15	37	4

Таблица 6.1 — Пример комбинаторного перебора для $N_states = 20$, $N = 15$.

процессе перебора потому, что на 18 строке восстанавливается исходный вид array.

Случай на 27 строке менее тривиальный. Предположим, имеется $array = [0,0,...,1,1,0,...]$, и в третьей части алгоритма (строки 29-37) array становится равным $[1,1,...,0,0,1,...]$. Далее происходит выход на внешний уровень вложенности (отработала строка 25). Если условие по энергии не выполняется ($array_energy() > U$), то и весь следующий перебор многочастичных состояний вплоть до $[0,0,...,1,1,1,...]$ не имеет смысла, т.к. энергия каждого такого состояния будет больше, чем у $[1,1,...,0,0,1,...]$. Цикл 24-27 завершается. Алгоритм продолжается; рассмотрим две ситуации:

- 1) $\text{array} = [1, 1, \dots, 0, 0, 1, 0, \dots]$. Тогда в третьей части алгоритма array станет равен $[1, 1, \dots, 0, 0, 0, 1, \dots]$, и это многочастичное состояния будет отвергнуто.
- 2) $\text{array} = [1, 1, \dots, 0, 0, 1, 1, 0, \dots]$. Затем $\text{array} = [1, 1, \dots, 0, 0, 0, 0, 1, \dots]$, где энергия возбуждения уже может быть ниже заданной U , после чего продолжается работа алгоритма.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Бор О., Моттelson Б.* Структура атомного ядра. Одночастичное движение. Т. 1. — Москва : Мир, 1971. — 456 с.
2. *Ring P., Shuck P.* The Nuclear Many-Body Problem. — New York : Springer-Varlag, 1980. — 717 с.
3. *Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R.* Microscopic Theory of Superconductivity // Phys. Rev. — 1957. — Апр. — Т. 106, вып. 1. — С. 162—164.
4. *Bohr A., Mottelson B. R., Pines D.* Possible Analogy between the Excitation Spectra of Nuclei and Those of the Superconducting Metallic State // Phys. Rev. — 1958. — Май. — Т. 110, вып. 4. — С. 936—938.
5. *Belyaev S. T.* Effect of pairing force correlations on nuclear properties // Selskab Mat. Fys. Medd. — 1959. — Т. 31, вып. 11.
6. *Koning A., Hilaire S., Goriely S.* TALYS-1.9. A nuclear reaction program. User Manual. — 2017.
7. *Bethe H.* An Attempt to Calculate the Number of Energy Levels of a Heavy Nucleus // Physical Review. — 1936. — Vol. 50. — P. 332—341.
8. *Соколов Ю. В.* Плотность уровней атомных ядер. — Москва : Энергоатомиздат, 1990. — 165 с.
9. RIPL - Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations / R. Capote [et al.] // Nuclear Data Sheets. — 2009. — Vol. 110, no. 12. — P. 3107—3214.
10. *Dilg W., Schantl W., Vonach H.* Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range $40 < A < 250$ // Nuclear Physics A. — 1973. — Vol. 217. — P. 269—298.

11. *Gilbert A., Cameron A.* A composite nuclear-level density formula with shell corrections // Canadian Journal of Physics. — 1965. — Vol. 43. — P. 1446–1496.
12. *Nilsson S. G.* Binding states of individual nucleons in strongly deformed nuclei // 29(CERN-55-30). — 1955. — P. 1–69.
13. *Voinov A., Grimes S., Brune C.* Recent experimental results on level densities for compound reaction calculations // EPJ Web of Conferences. — 2012. — Vol. 21. — P. 05001.
14. *Vautherin D., Brink D. M.* Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei // Phys. Rev. C. — 1972. — Март. — Т. 5, вып. 3. — C. 626–647.
15. *Sidorov S., Kornilova A., Tretyakova T.* Tensor force impact on shell evolution in neutron-rich Si and Ni isotopes* // Chinese Physics C. — 2024. — Апр. — Т. 48, № 4. — C. 044101.
16. *Kluge G.* Influence of pairing correlations on nuclear level densities // Nuclear Physics. — 1964. — Т. 51. — C. 41–49. — ISSN 0029-5582.
17. *Grover J. R.* Shell-Model Calculations of the Lowest-Energy Nuclear Excited States of Very High Angular Momentum // Phys. Rev. — 1967. — Май. — Т. 157, вып. 4. — C. 832–847.
18. *Hillman M., Grover J. R.* Shell-Model Combinatorial Calculations of Nuclear Level Densities // Phys. Rev. — 1969. — Сент. — Т. 185, вып. 4. — C. 1303–1319.
19. *Hillman M.* Combinatorial calculations of nuclear level densities, spin projections, and nuclear deformation // Phys. Rev. C. — 1974. — Июнь. — Т. 9, вып. 6. — C. 2289–2296.
20. Combinatorial nuclear level-density model / H. Uhrenholt [и др.] // Nuclear Physics A. — 2013. — Июнь. — Т. 913. — C. 127.
21. *Bonett-Matiz M., Mukherjee A., Alhassid Y.* Level densities of nickel isotopes: Microscopic theory versus experiment // Physical Review C—Nuclear Physics. — 2013. — Т. 88, № 1. — C. 011302.

22. Large-scale prediction of the parity distribution in the nuclear level density and application to astrophysical reaction rates / D. Mochel [и др.] // Phys. Rev. C. — 2007. — Апр. — Т. 75, вып. 4. — С. 045805.
23. *Titarenko Y. E., Pavlov K. V., Titarenko A. Y.* Benchmark Experiments for Verification of Nuclear Data Libraries for Designing Fusion Blankets // Fusion Science and Technology. — 2022. — Vol. 78, no. 7. — P. 549–572.