

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

На правах рукописи

СИТЬКОВ ДМИТРИЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ

**ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ И МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЯДЕР**

Направление подготовки 14.04.02 «Ядерная физика и технологии»
Диссертация на соискание степени магистра

Научный руководитель,
д.ф.-м.н., доц.

_____ А. Л. Барабанов

Москва 2025

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРА

**ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ И МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЯДЕР**

Студент	_____ Д. А. Ситьков
Научный руководитель, д.ф.-м.н., доц.	_____ А. Л. Барабанов
Рецензент, к.ф.-м.н.	_____ С. С. Панкратов
Секретарь ГЭК, к.ф.-м.н.	_____ А. А. Кириллов
Зав. каф. №40, д.ф.-м.н., проф.	_____ М. Д. Скорохватов
Рук. учеб. прог., к.ф.-м.н.	_____ А. А. Кириллов

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
1 Ядерные реакции	8
1.1 Реакции с образованием ядер-изомеров	8
1.1.1 Оценка надёжности вычислений	9
1.1.2 Образование иттрия-91	10
1.1.3 Образование стронция-87	11
1.1.4 Образование индия-114	12
1.1.5 Образование индия-115	13
1.2 Деление ядер	14
2 Метод Хартри-Фока	16
2.1 Уравнения Хартри-Фока	16
2.2 Силы Скирма	17
3 Парные корреляции: схема Бардина-Купера-Шриффера	22
3.1 Представление чисел заполнения	22
3.2 Волновая функция	24
3.3 Короткодействующий парный потенциал	26
3.3.1 Уравнение для $\Delta = \Delta_0$ в основном состоянии системы . . .	31
4 Численные расчёты	33
4.1 Энергии связи цепочки изотопов кислорода	34
4.2 Энергии связи цепочки изотопов никеля	35
4.3 Энергии связи цепочки изотопов железа	36
4.4 Одночастичные уровни	37
4.4.1 Основное состояние железа-60	37
4.4.2 Основное и возбуждённое состояние никеля-62	38

Заключение	41
Список литературы	44

ВВЕДЕНИЕ

На данный момент есть понимание относительно общего способа описания ядерных реакций — этому посвящена обзорная статья [1]. В данной статье описано, что во входном канале и выходных каналах взаимодействия частицы с ядром используются оптические потенциалы; распад компаунд-ядра описывается методом Хаузера-Фешбаха [2], в котором частицы испускаются с вероятностью, пропорциональной плотности уровней в остаточных ядрах. В настоящее время достигнут значительный прогресс в области численного моделирования ядерных реакций. Подходящим примером может служить программный комплекс TALYS-1.9 [3] с открытым исходным кодом. Этот комплекс позволяет моделировать столкновения ядер с лёгкими частицами, в том числе нейтронами, с энергиями до 200 МэВ. В первой части главы 1 (раздел 1.1) представлены результаты исследования вопроса о возможности использования программного комплекса TALYS-1.9 для предсказания сечений реакций, по результатам которого была опубликована наша статья [4]. Комплекс TALYS-1.9 интересен тем, что в него можно внедрять собственные модели, о чём будет сказано далее.

Деление ядра можно рассматривать как ядерную реакцию, если деление происходит не спонтанно, а будучи инициированным налетающей частицей (нейтроном, протоном, ...). Основные идеи теории ядерного деления опираются, главным образом, на капельную модель ядра [5; 6]. Согласно данной модели соотношение между поверхностным натяжением капли ядерной материи и кулоновским отталкиванием внутри ядра ведёт к формированию барьера, который препятствует спонтанному делению ядра.

Во второй части главы 1 (раздел 1.2) обсуждается процесс прохождения ядра над барьером деления в результате возбуждения налетающей частицей. Для описания деления необходимы сведения о низколежащих дискретных состояниях ядра над барьером и сведения о плотности состояний (уровней) высоко над барьером. Данная работа посвящена микроскопическому описанию состояний недеформированных ядер. А конкретно — описанию одночастичных

(протонных и нейтронных) энергетических уровней в ядрах, которые можно использовать в комбинаторных расчётах плотности уровней. Такие расчётные плотности уровней можно внедрить в TALYS-1.9 и использовать их при вычислении сечений ядерных реакций с помощью комплекса.

К недостаткам капельной модели ядра можно отнести, например, невозможность описания асимметричного распределения масс осколков [7]. Важным шагом в развитии модели являлась предложенная модель оболочечных поправок [8]. В рамках этой модели считается, что нуклоны, находящиеся в ядре, распределены по энергетическим оболочкам. Успех [9–11] феноменологической оболочечной модели обосновывает предположение о том, что нуклоны в атомных ядрах находятся в среднем потенциале, который создаётся общим взаимодействием нуклонов.

Существуют разные аппроксимации нуклон-нуклонного взаимодействия, которые включают в себя довольно сложные и долгие расчёты. Другой подход включает в себя расчёты с помощью метода Хартри-Фока [12; 13], основывающегося на идее о среднем поле, в котором находятся нуклоны в ядре. Данный подход, хотя и не является фундаментальным, позволяет производить вычисления там, где более реалистичные вычисления не представляются возможными: такое рассмотрение даёт возможность производить исследования с наименьшими трудозатратами. Подобно [14], в главе 2 данной работы рассматривается метод Хартри-Фока с параметризацией эффективных сил, действующих на нуклоны, находящиеся в среднем поле. Такие силы могут быть: 1) независимыми от нуклонных плотностей [15–17], расчёты с которыми обычно испытывают трудности при описании радиусов ядер или же полных энергий связи; 2) плотностно-зависимыми, которые в наименьшей степени испытывают перечисленные выше трудности. Ко взаимодействиям последнего типа относятся рассматриваемые в этой работе точечные силы Скирма [18].

Однако в ядрах наблюдается ряд важных свойств, которые нельзя описать исключительно в рамках метода Хартри-Фока [19]. Например, наблюдается *чётно-нечётный эффект*. Он заключается в том, что энергия связи чётно-нечётного ядра оказывается меньше, чем среднее арифметическое энергий связи двух соседних чётно-чётных ядер. Отсюда вытекает соотношение для масс соседних ядер: $M_{A_{\text{неч}}} > (M_{A-1} + M_{A+1})/2$. Для понимания этого и других феноменов необходимо учитывать корреляции, вызванные остаточной частью

нуклон-нуклонного взаимодействия. Наблюдения о том, что чётно-чётные ядра в основном состоянии имеют спин $I_0 = 0$, а спин чётно-нечётных ядер определяется угловым моментом нечётного нуклона, привели М. Гёпперт-Майер [20] к предположению, что для *короткодействующих, притягивающих* нуклон-нуклонных сил приведение двух нуклонов на оболочке данного момента j к паре с общим моментом $I = 0$ является более энергетически выгодным среди всех других возможных конфигураций. Для ядер с незаполненной последней оболочкой наиболее энергетически выгодна будет конфигурация, в которой все нуклоны (кроме последнего в случае чётно-нечётного ядра) парно скоррелированы. Таким образом, для возбуждения чётно-чётного ядра нужно будет разорвать хотя бы одну пару, а для чётно-нечётного ядра будет достаточно возбудить неспаренный нуклон. Такое парное взаимодействие не может рассматриваться как некоторый вклад в статический средний потенциал типа потенциала Хартри-Фока. Это эффект другой природы, который даёт начало идее о парном потенциале. Данный эффект аналогичен эффекту сверхпроводимости в металлах, теория которого была разработана Бардином, Купером и Шриффером (БКШ) [21], методы которой можно применить и при исследовании ядер [22].

В **главе 3** описывается метод учёта парных корреляций нуклонов в ядре путём наложения схемы БКШ на метод Хартри-Фока. Мы рассматриваем чётно-чётные ядра в приближении сферической симметрии в случае короткодействующего (точечного) парного потенциала при независимом рассмотрении протонных и нейтронных парных корреляций. В **главе 4** представлены результаты численных расчётов удельных энергий связи и одночастичных (нуклонных) энергетических уровней для цепочек изотопов: кислорода ($A = 16; 18; 20$), железа ($A = 56; 58; 60$) и никеля ($A = 60; 62; 64$) в рассматриваемом формализме. В настоящее время расширение используемого в данной работе метода Хартри-Фока под названием метода функционала плотности (Density Functional Theory, DFT) активно используется при описании процессов деления [23; 24].

1 ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ

1.1 РЕАКЦИИ С ОБРАЗОВАНИЕМ ЯДЕР-ИЗОМЕРОВ

Для проектирования установок, в которых предполагается осуществить управляемую реакцию термоядерного синтеза $d + t \rightarrow {}^4\text{He} + n$ с образованием нейтронов с энергией 14,1 МэВ (в системе центра масс), необходимы данные о реакциях, инициируемых этими нейтронами. В частности, во взаимодействии нейтронов с ядрами атомов конструкционных материалов и других элементов, использующихся в данных установках могут образовываться ядра в относительно долгоживущих изомерных состояниях, которые распадаются посредством испускания довольно жёстких гамма-квантов. Учёт этих гамма-квантов важен для оценки радиационной стойкости материалов.

В последней версии библиотеки IRDFF-II (International Reactor Dosimetry and Fusion File) [25] (база данных ENDF) представлены данные только для 4-х реакций с образованием ядер-изомеров:

1. ${}^{93}\text{Nb}(n, 2n){}^{92m}\text{Nb}$;
2. ${}^{113}\text{In}(n, n'){}^{113m}\text{In}$;
3. ${}^{115}\text{In}(n, n'){}^{115m}\text{In}$;
4. ${}^{115}\text{In}(n, 2n){}^{114m}\text{In}$.

На самом деле таких реакций намного больше. Так, недавно в НИЦ «Курчатовский институт» были измерены [26] сечения следующих реакций:

1. ${}^{91}\text{Zr}(n, p){}^{91m}\text{Y}$;
2. ${}^{91}\text{Zr}(n, n\alpha){}^{87m}\text{Sr}$;
3. ${}^{115}\text{In}(n, 2n){}^{114m}\text{In}$;
4. ${}^{115}\text{In}(n, n'){}^{115m}\text{In}$

при энергии падающих нейтронов близкой к 14 МэВ. О надёжности этих данных можно судить, сравнивая их с ранее полученными аналогичными результатами. Однако не для всех подобных реакций такие результаты имеются в доста-

точном количестве. Поэтому представляют интерес численные оценки сечений. Мы предприняли вычисления сечений последних указанных четырёх реакций в диапазоне энергий падающих нейтронов до 20 МэВ. Эти реакции идут с образованием возбуждённых компаунд-ядер, поэтому плотности энергетических уровней этих ядер существенно влияют на значения сечений. В комплекс TALYS-1.9 включены шесть моделей плотности уровней: модель Гильберта-Камерона [27], модель ферми-газа с обратным смещением [28] и сверхтекучая модель, основанная на представлении о сверхтекучем ядре при малых энергиях возбуждения [1]. Следующие три модели основываются на числовых файлах, полученных в различных комбинаторных расчётах, однако надёжность этих моделей не выше, чем у предыдущих трёх. Каждой из этих моделей поставлено в соответствие некоторое значение параметра `ldmodel` комплекса TALYS-1.9. Таким образом, для каждой реакции было вычислено сечение выхода изомерного (*m*) состояния конечного ядра с помощью программы TALYS-1.9 с параметрами `ldmodel` 1, 2 и 3 (первые 3 модели плотности уровней) в зависимости от энергии падающего нейтрона от порога реакции до 20 МэВ: $S_1(E)$, $S_2(E)$ и $S_3(E)$ соответственно. К анализу были также привлечены:

- 1) оценённые зависимости сечений от энергии нейтронов (до 20 МэВ) из библиотеки IRDFF-II;
- 2) экспериментальные данные по интересующим нас сечениям, относящиеся к энергии нейтронов до 20 МэВ, из базы данных EXFOR.

1.1.1 ОЦЕНКА НАДЁЖНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

При сравнении результатов вычислений с оценками и экспериментальными данными выяснилось, что ни одна модель плотности уровней не обладает существенными преимуществами над другими. Поэтому мы предположили, что максимальное расхождение вычисленных сечений

$$\Delta S(E) = \max \{ |S_1(E) - S_2(E)|, |S_1(E) - S_3(E)|, |S_2(E) - S_3(E)| \} \quad (1.1)$$

при любой фиксированной энергии E налетающего нейтрона представляет собой неопределённость теоретического предсказания истинного сечения для этой

энергии E . В то же время среднее значение сечения

$$S_{\text{avg}}(E) = \frac{S_1(E) + S_2(E) + S_3(E)}{3} \quad (1.2)$$

можно взять в качестве наиболее вероятного прогноза. Тогда коридор значений $S_{\text{avg}}(\text{max}) = S_{\text{avg}} + \Delta S$, $S_{\text{avg}}(\text{min}) = S_{\text{avg}} - \Delta S$ определяет область, в которой, согласно расчётным значениям, с высокой степенью вероятности находится истинное значение сечения.

1.1.2 ОБРАЗОВАНИЕ ИТТРИЯ-91

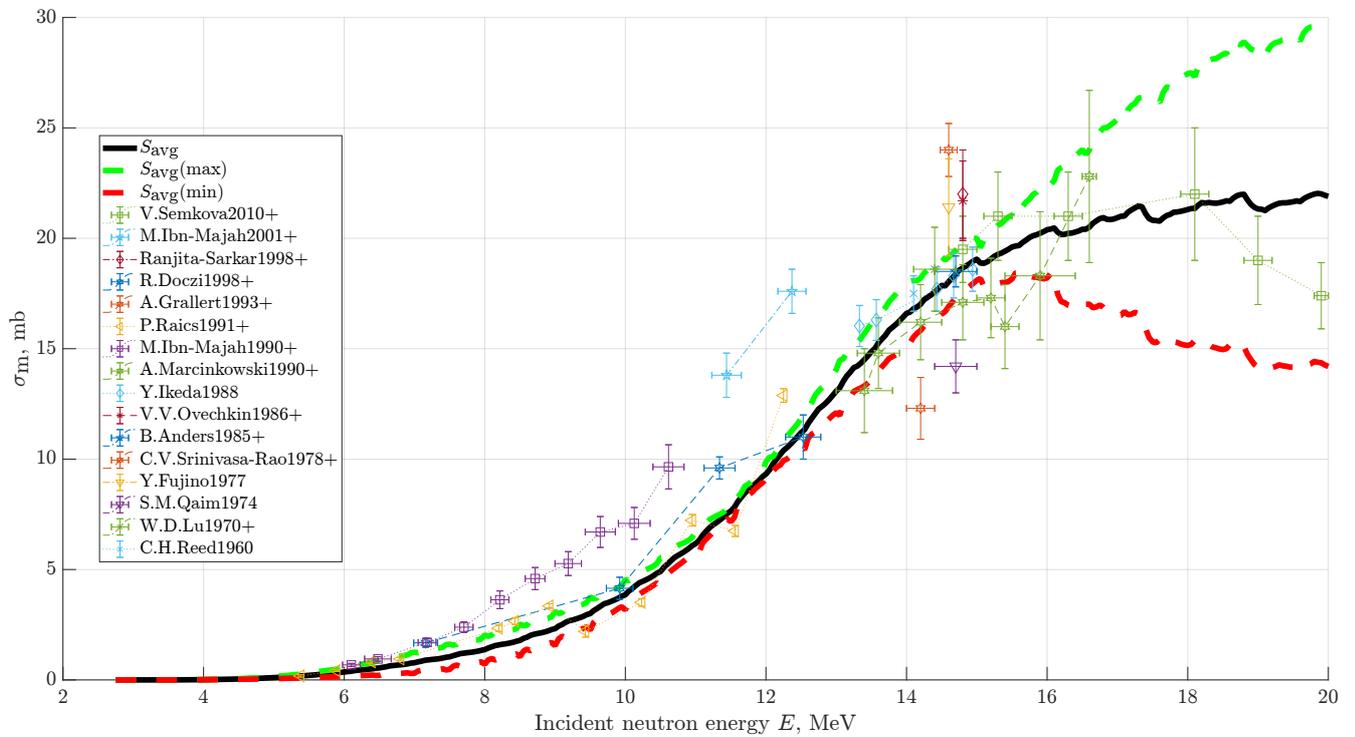


Рисунок 1.1 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{91}Y в реакции $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91}\text{Y}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На [рисунке 1.1](#) представлены сечения выхода изомерного (m) состояния ядра ^{91}Y в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из EXFOR.

В наиболее интересующей нас области 13–15 МэВ имеет место хорошее согласие рассчитанного по TALYS-1.9 «среднего» сечения выхода S_{avg} изомерного (m) состояния с экспериментальными данными из EXFOR.

1.1.3 ОБРАЗОВАНИЕ СТРОНЦИЯ-87

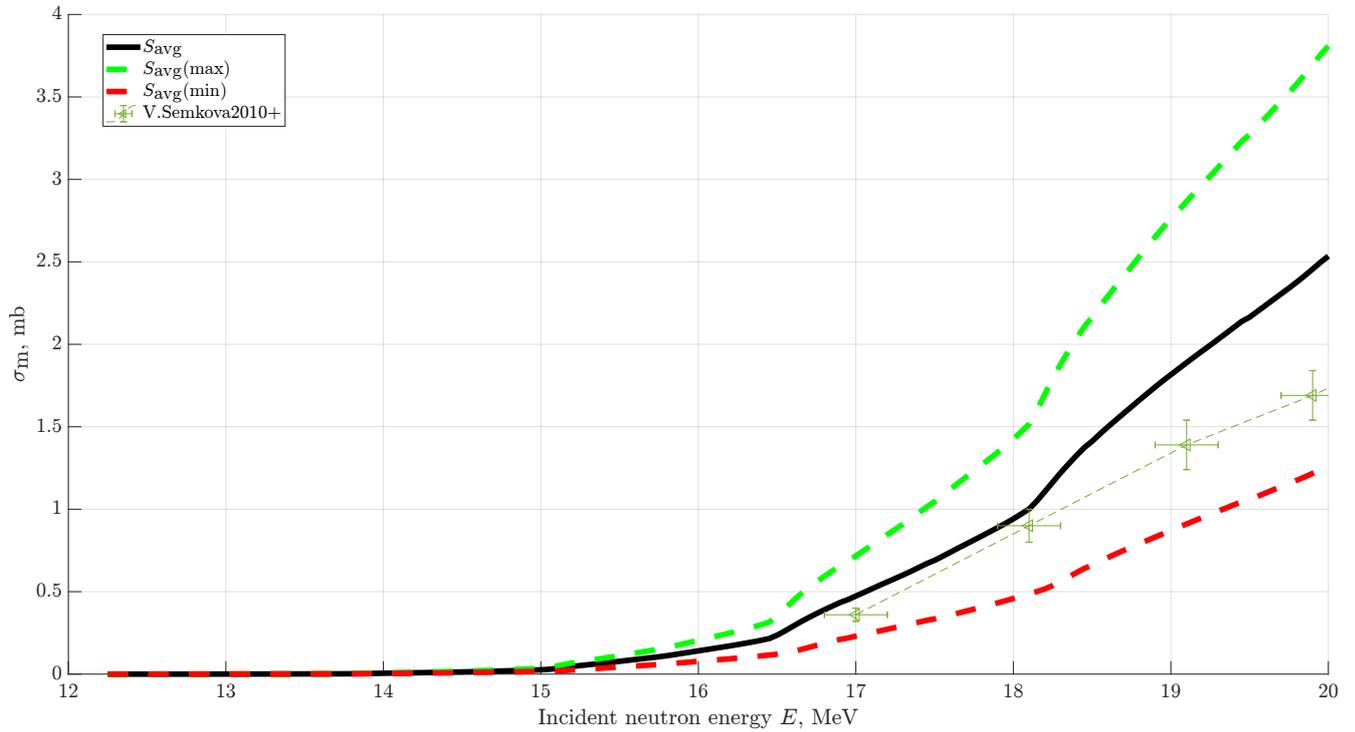


Рисунок 1.2 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{87}Sr в реакции $^{91}\text{Zr}(n, n\alpha)^{87}\text{Sr}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На [рисунке 1.2](#) представлены сечения выхода изомерного (m) состояний ядра ^{87}Sr в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из EXFOR.

Видно, что представленные единственные экспериментальные данные для данного сечения незначительно расходятся с полученной оценкой S_{avg} . Однако все значения попадают в коридор от $S_{\text{avg}}(\text{min})$ до $S_{\text{avg}}(\text{max})$.

1.1.4 ОБРАЗОВАНИЕ ИНДИЯ-114

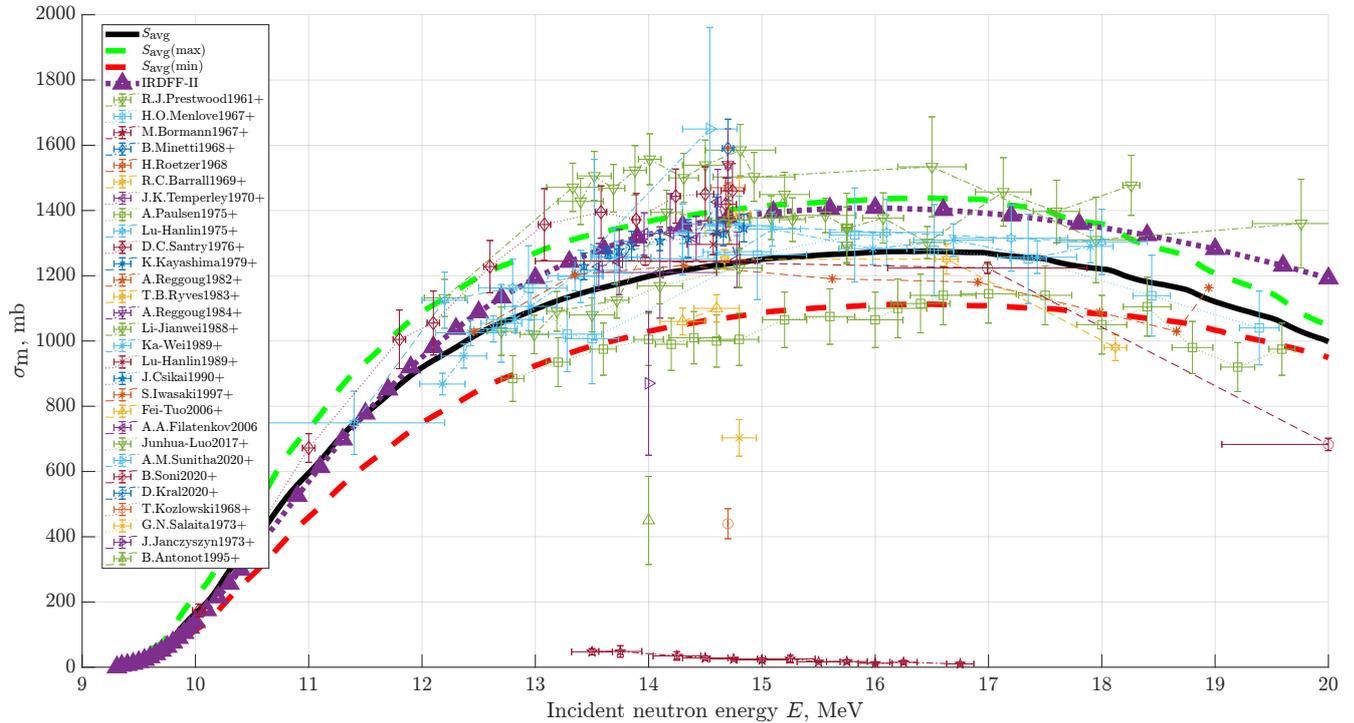


Рисунок 1.3 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{114}In в реакции $^{115}\text{In}(n, 2n)^{114}\text{In}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На рисунке 1.3 представлены сечения выхода изомерного (m) состояния ядра ^{114}In в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR.

На рисунке видно схожее поведение кривых, соответствующих сечению, рассчитанному по TALYS-1.9, и оценкой IRDEF-II. Основной массив экспериментальных данных подтверждает правильность наших оценок сечения.

1.1.5 ОБРАЗОВАНИЕ ИНДИЯ-115

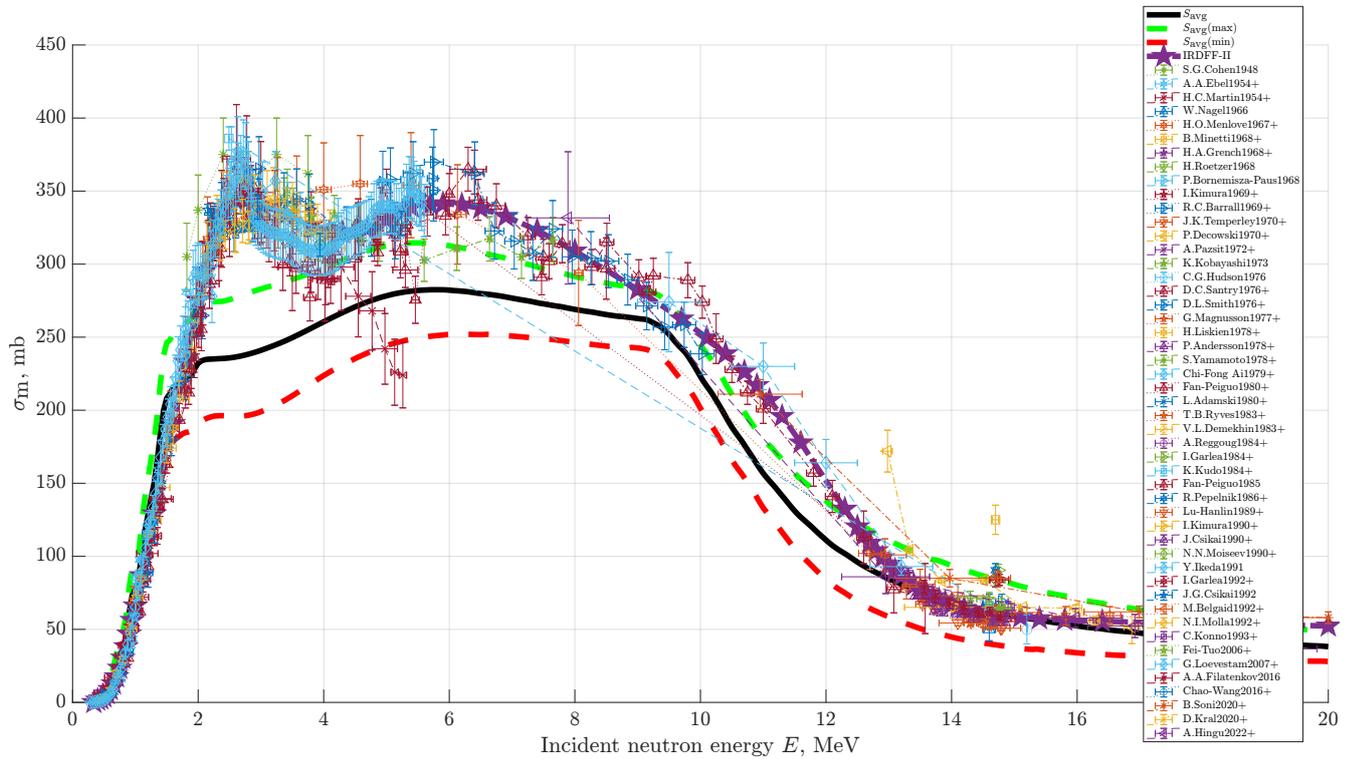


Рисунок 1.4 — Сечение выхода изомерного (m) состояния ядра ^{115}In в реакции $^{115}\text{In}(n, n')^{115}\text{In}$ в зависимости от энергии нейтрона.

На рисунке 1.4 представлены сечения выхода изомерного (m) состояний ядра ^{115}In в зависимости от энергии нейтрона: расчёт по TALYS-1.9, а также данные из ENDF и EXFOR.

Видно проблемное для комплекса TALYS-1.9 поведение кривых: ни при какой модели плотности уровней ядра двугорбую форму сечения получить не удалось. По всей видимости, для воспроизведения такого хода сечения необходимо точно¹⁾ изменять ряд параметров TALYS-1.9.

При низких энергиях экспериментальные данные не укладываются в коридор значений от $S_{\text{avg}}(\text{min})$ до $S_{\text{avg}}(\text{max})$, однако в интересующей нас области энергий 13–15 МэВ имеет место хорошее согласие «среднего» сечения S_{avg} с оценкой IRDFF-II и экспериментальными данными из EXFOR.

¹⁾В смысле того, что другие реакции таким изменениям подвергнуты не будут.

1.2 ДЕЛЕНИЕ ЯДЕР

Проницаемость барьера деления определяет время жизни ядра до его деления. Для тяжёлых ядер в капельной модели высота барьера деления резко уменьшается с увеличением отношения квадрата зарядового числа к массовому числу Z^2/A , и полностью исчезает при достижении $(Z^2/A)_{\text{cr}} \approx 46\text{--}48$. Уменьшение высоты барьера ведёт к экспоненциальному увеличению проницаемости барьера.

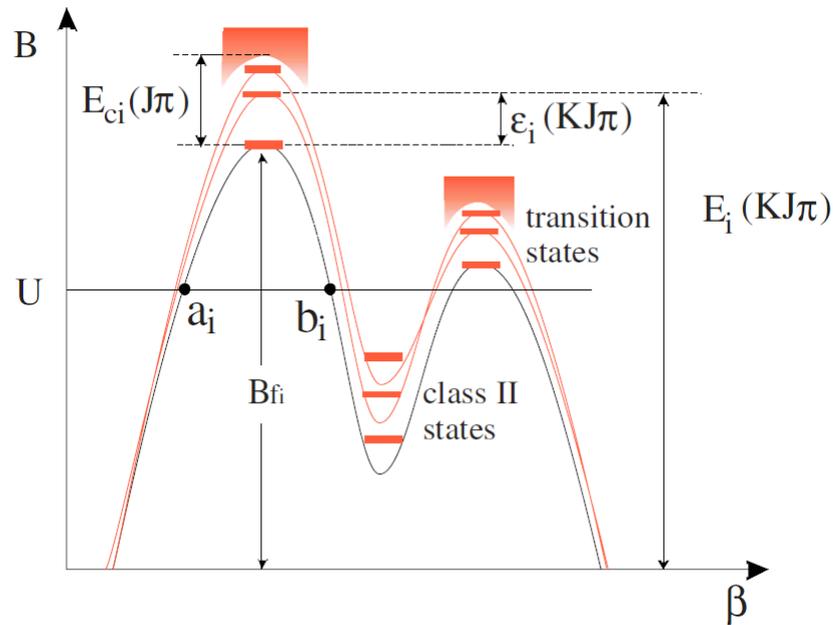


Рисунок 1.5 — Схематическое изображение двугорбого барьера деления [1], где его параметры: B_{fi} — минимальная (по J^π состояниям ядра) высота i -го барьера; $\varepsilon_i(KJ\pi)$ — i -тый барьер переходного уровня состояния J^π ядра с проекцией K спина на ось симметрии ядра; $E_{ci}(J\pi)$ — энергия, выше которой для барьера i переходные состояния вычисляются по функции плотности уровней; a_i и b_i — классические точки поворота.

У возбуждённого налетевшей частицей ядра есть дополнительные степени свободы — деформации. В простейшем случае это одна деформация — β , описывающая квадрупольную деформацию ядра. Если ядро начинает двигаться по этой деформационной степени свободы (то есть растягиваться), то с этой степенью свободы связывают кинетическую энергию T_β — энергию движения по коллективной степени свободы. Энергия нуклонной конфигурации $V_{\text{shell}}(\beta)$ зависит от деформации ядра и представляет собой потенциальную энергию деформации, которая увеличивается по мере увеличения деформации

ядра. Однако при дальнейшей деформации ядра нуклоны будут перестраиваться на другие оболочки. Энергию ядра E_{nucleus} тогда можно представить в виде $E_{\text{nucleus}} \sim \sum_{(\text{shells})} V_{\text{shell}}(\beta) + T_{\beta} \equiv B(\beta) + T_{\beta}$, где энергия деформации $B(\beta)$ (рисунок 1.5) будет являться огибающей кривой по минимумам каждой из оболочечной энергии деформации $V_{\text{shell}}(\beta)$.

Для того, чтобы ядро поделилось, ему необходимо иметь энергию, превышающую i -тый барьер: $E_{\text{nucleus}} > \max_i \{B(\beta)\}$. Разница $U = E_{\text{nucleus}} - \max_i \{B(\beta)\}$ есть энергия возбуждения ядра, которая и является энергией коллективного движения T_{β} . Потенциальная энергия $B(\beta)$ также зависит от спина J и чётности π ядра, поэтому для каждой конфигурации ядра J^{π} будут свои барьеры деления, называемые барьерами переходных состояний. Для удобства множество барьеров, отвечающих множеству состояний ядра в зависимости от степени деформации, разделяют на категории: *основной барьер*, который соответствует основному состоянию ядра при заданной деформации; несколько *дискретных барьеров*, соответствующих состояниям ядра с небольшой энергией возбуждения U ; барьеры, переходные состояния которых описываются функцией плотности возбуждённых уровней, соответствующие состояниям ядра с достаточно большой энергией возбуждения U . Так, при небольших энергиях возбуждения U ядра вероятность деления определяется характеристиками (энергией, спином, чётностью) низколежащих дискретных состояний над барьером, а в случае достаточно больших энергий возбуждений U ядра вероятность деления определяется плотностью уровней над барьером.

2 МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА

2.1 УРАВНЕНИЯ ХАРТРИ-ФОКА

Система из N частиц описывается гамильтонианом \hat{H} , включающим в себя потенциалы для одной частицы (например, оператор кинетической энергии) и взаимодействия двух частиц:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{v}_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \hat{v}_{ij}. \quad (2.1)$$

Многочастичная (фермионная) волновая функция представляется в виде определителя Слетера

$$\Psi_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \vdots & \psi_1(x_N) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \vdots & \psi_2(x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(x_1) & \psi_N(x_2) & \vdots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}, \quad (2.2)$$

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

в виде

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle &= \sum_k \langle \psi_k | \hat{v}_k | \psi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_l \psi_k | \hat{v}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_k \psi_l | \hat{v}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle \equiv \\
&\equiv \sum_k \langle \psi_k | \hat{v}_k | \psi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} \langle \psi_l \psi_k | \hat{\tilde{v}}_{kl} | \psi_k \psi_l \rangle,
\end{aligned} \tag{2.3}$$

где \tilde{v} обозначает антисимметризованный матричный элемент.

Пусть известны все одночастичные волновые функции, кроме $|\psi_i\rangle$. Тогда требование минимальности соотношения (2.3) определит эту функцию:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle &= \langle \psi_i | \hat{v}_i | \psi_i \rangle + \sum_{j \neq i} \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_j \psi_i \rangle - \\
&- \sum_{j \neq i} \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_i \psi_j \rangle + \text{const} \rightarrow \min_{|\psi_i\rangle}.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Согласно вариационному принципу задача (2.4) эквивалентна задаче Шрёдингера

$$\hat{v}_i \psi_i(x_i) + \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_j \rangle \psi_i(x_i) - \sum_{j \neq i} \langle \psi_j | \hat{v}_{ij} | \psi_i \rangle \psi_j(x_i) = \varepsilon_i^{\min} \psi_i(x_i), \tag{2.5}$$

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

2.2 СИЛЫ СКИРМА

Взаимодействие Скирма [29] имеет вид потенциала

$$V = \sum_{i < j} v_{ij} + \sum_{i < j < k} v_{ijk}, \tag{2.6}$$

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

Двухчастичный потенциал берётся в виде короткодействующего взаимо-

действия:

$$\begin{aligned}
v_{12} = & t_0(1 + x_0\hat{P}_\sigma)\delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \\
& + \frac{1}{2}t_1[\delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\mathbf{k}^2 + (\mathbf{k}')^2\delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] + t_2(\mathbf{k}', \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\mathbf{k}) + \\
& + iW_0(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2, (\mathbf{k}' \times \delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\mathbf{k})),
\end{aligned} \tag{2.7}$$

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

Трёхчастичный потенциал также представляется как короткодействующая сила:

$$v_{123} = t_3\delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta^{(3)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3). \tag{2.8}$$

Для вычислений в рамках уравнений Хартри-Фока для чётно-чётных ядер данный потенциал равносильен наличию двухчастичного плотностно-зависимого взаимодействия

$$v_{12} = \frac{1}{6}t_3(1 + \hat{P}_\sigma)\delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\rho\left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right). \tag{2.9}$$

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

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

$$\phi(x_1, x_2, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det\{\phi_i(x_j)\}, \quad \phi_i(x_j) \equiv \langle x_j | i \rangle, \tag{2.10}$$

где координата $x = \{\mathbf{r}, \sigma, q\}$ — набор пространственных, спиновых ($\sigma = \pm 1$) и изоспиновых ($q = +1/2$ для протонов, $q = -1/2$ для нейтронов) координат.

Энергия такого состояния

$$\begin{aligned}
E = \langle \phi | (T + V) \phi \rangle &= \sum_i \left\langle i \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right| i \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle ij | \tilde{v}_{12} | ij \rangle + \frac{1}{6} \sum_{i \neq j \neq k} \langle ijk | \tilde{v}_{123} | ijk \rangle = \\
&= \int \mathcal{H}(\mathbf{r}) d^3r.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

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

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2, \quad (2.12a)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla \phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)|^2, \quad (2.12б)$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -i \sum_{i,\sigma,\sigma'} \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma, q) (\nabla \phi_i(\mathbf{r}, \sigma', q) \times \langle \sigma | \boldsymbol{\sigma} | \sigma' \rangle), \quad (2.12в)$$

или в спинорной записи

$$\rho_q(\mathbf{r}) = \sum_i \phi_i^\dagger(\mathbf{r}, q) \phi_i(\mathbf{r}, q), \quad (2.13a)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_i (\nabla \phi_i^\dagger(\mathbf{r}, q), \nabla \phi_i(\mathbf{r}, q)) \quad (2.13б)$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -i \sum_i \phi_i^\dagger(\mathbf{r}, q) (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \phi_i(\mathbf{r}, q), \quad (2.13в)$$

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

Для чётно-чётных ядер плотность энергии принимает вид [14]

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}) = & \frac{\hbar^2}{2m} \tau(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} t_0 [(1 + x_0/2) \rho^2 - (x_0 + 1/2) (\rho_n^2 + \rho_p^2)] + \frac{1}{4} (t_1 + t_2) \rho \tau + \\ & + \frac{1}{8} (t_2 - t_1) (\rho_n \tau_n + \rho_p \tau_p) + \frac{1}{16} (t_2 - 3t_1) \rho \nabla^2 \rho + \frac{1}{32} (3t_1 + t_2) (\rho_n \nabla^2 \rho_n + \rho_p \nabla^2 \rho_p) + \\ & + \frac{1}{16} (t_1 - t_2) (\mathbf{J}_n^2 + \mathbf{J}_p^2) + \frac{1}{4} t_3 \rho_n \rho_p \rho + \mathcal{H}_C(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} W_0 (\rho \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho_n \nabla \cdot \mathbf{J}_n + \rho_p \nabla \cdot \mathbf{J}_p), \end{aligned} \quad (2.14)$$

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

$$V_C(\mathbf{r}) = \int \rho_p(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r'. \quad (2.15)$$

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

$$\frac{\delta}{\delta\phi_i} \left(E - \sum_j e_j \int |\phi_j(\mathbf{r})|^2 d^3r \right) = 0. \quad (2.16)$$

Пренебрегая слагаемым $\frac{1}{16}(t_1 - t_2)(\mathbf{J}_n^2 + \mathbf{J}_p^2)$ в (2.14), получим набор уравнений

$$\left[- \left(\nabla, \frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} \nabla \right) + U_q(\mathbf{r}) + (\mathbf{W}_q(\mathbf{r}), (-i)(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})) \right] \phi_i = e_i \phi_i, \quad (2.17)$$

где индекс q отвечает за заряд одночастичного состояния i . Уравнение (2.17) имеет вид локального уравнения Шрёдингера с эффективной массой $m_q^*(\mathbf{r})$, которая зависит от плотности:

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(\mathbf{r})} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\rho + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\rho_q. \quad (2.18)$$

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

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = & t_0 \left[(1 + x_0/2)\rho - (x_0 + 1/2)\rho_q \right] + \frac{1}{4}t_3(\rho^2 - \rho_q^2) - \frac{1}{8}(3t_1 - t_2)\nabla^2\rho + \\ & + \frac{1}{16}(3t_1 + t_2)\nabla^2\rho_q + \frac{1}{4}(t_1 + t_2)\tau + \frac{1}{8}(t_2 - t_1)\tau_q - \frac{1}{2}W_0(\nabla \cdot \mathbf{J} + \nabla \cdot \mathbf{J}_q) + \\ & + \delta_{q,+1/2}V_C(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.19)$$

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

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}W_0(\nabla\rho + \nabla\rho_q) + \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\mathbf{J}_q(\mathbf{r}). \quad (2.20)$$

Нелинейные дифференциальные уравнения (2.17) определяют одночастичные функции ϕ_i и энергии e_i этих состояний. В данной работе будет рассмат-

риваться приближение сферической симметрии, то есть

$$\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, \mathbf{t}) = \frac{R_{qnlj}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\mathbf{n}, \sigma) \chi_q(\mathbf{t}), \quad (2.21)$$

где

$$\mathcal{Y}_{\ell jm}(\mathbf{n}, \sigma) = \sum_{m_\ell m_s} \langle \ell \frac{1}{2} m_\ell m_s | jm \rangle Y_{\ell m_\ell}(\mathbf{n}) \chi_{m_s}(\sigma), \quad (2.22)$$

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

3 ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ: СХЕМА БАРДИНА-КУПЕРА-ШРИФФЕРА

3.1 ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

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

$$\psi_\nu(x_i) \equiv \langle x_i | \nu \rangle = \langle \mathbf{r}_i, \sigma_i | \nu \rangle = \psi_\nu(\mathbf{r}_i, \sigma_i). \quad (3.1)$$

На основе этих функций можно составить абсолютно антисимметричные нормированные N -частичные волновые функции

$$\Phi_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1}^N \cdots \sum_{i_N=1}^N \epsilon_{i_1 i_2 \dots i_N} \psi_{\nu_1}(x_{i_1}) \psi_{\nu_2}(x_{i_2}) \cdots \psi_{\nu_N}(x_{i_N}), \quad (3.2)$$

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

$$\Phi_{\{\nu_j\}_{j=1}^N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \{ \psi_{\nu_j}(x_i) \}_{i,j=1}^N. \quad (3.3)$$

Многочастичную волновую функцию (3.3) можно характеризовать набором чисел $\{n_{\nu_k}\}_{k=1}^N$ (числа заполнения), который показывает сколько раз определённое одночастичное состояние $|\nu_k\rangle$ встречается в этом многочастичном состоянии $\Phi_{\{\nu_j\}_{j=1}^N}$. Для фермионов произвольное число заполнения n_{ν_k} может принимать значение, равное 0 или 1 (иначе многочастичная волновая функция (3.3) тождественно обратится в нуль). Следовательно, $\sum_\nu n_\nu = N$.

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

далее:

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

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

$$\Phi_{\{n_\nu\}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \langle x_1, x_2, \dots, x_N | n_1, n_2, \dots \rangle. \quad (3.4)$$

Эти состояния ортонормированы:

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_\nu, \dots | n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \cdots \delta_{n_\nu n'_\nu} \cdots \quad (3.5)$$

Обыкновенным образом вводятся операторы уничтожения и рождения

$$\hat{a}_\nu |n_1, \dots, 1_\nu, \dots\rangle = |n_1, \dots, 0_\nu, \dots\rangle, \quad \hat{a}_\nu |n_1, \dots, 0_\nu, \dots\rangle = 0, \quad (3.6)$$

$$\hat{a}_\nu^\dagger |n_1, \dots, 0_\nu, \dots\rangle = |n_1, \dots, 1_\nu, \dots\rangle, \quad \hat{a}_\nu^\dagger |n_1, \dots, 1_\nu, \dots\rangle = 0, \quad (3.7)$$

которые подчиняются антикоммутиационным соотношениям

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu^\dagger\} = \delta_{\mu\nu}, \quad (3.8)$$

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu\} = 0, \quad \{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\nu^\dagger\} = 0. \quad (3.9)$$

Можно показать [19], что в представлении чисел заполнения любой аддитивный *одночастичный* оператор $\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}_i$ можно представить в виде

$$\hat{F} = \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'}, \quad (3.10)$$

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

Например, кинетическая энергия N -частичной системы

$$\hat{T} = \sum_i \hat{t}_i \equiv \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad (3.11)$$

представится в виде

$$\hat{T} = \sum_{\nu\nu'} \sum_x \psi_\nu^\dagger(x) \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi_{\nu'}(x) \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \equiv \sum_{\nu\nu'} e_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'}, \quad e_{\nu\nu'} = \sum_x \psi_\nu^\dagger(x) \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi_{\nu'}(x), \quad (3.12)$$

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

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

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} v_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'} = \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'}, \quad (3.13)$$

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

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

$$H = \hat{F} + \hat{V} = \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} + \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \tilde{v}_{\mu\nu\mu'\nu'} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_{\nu'} \hat{a}_{\mu'}. \quad (3.14)$$

3.2 ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

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

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle, \quad (3.15)$$

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

$$|k\rangle = |n\ell jm\rangle, \quad |\bar{k}\rangle = |n\ell j -m\rangle, \quad m > 0. \quad (3.16)$$

Рассмотрим анзац (3.15) для, например, четырёх доступных нуклонных состояниях: 2 состояния $|k\rangle$ и 2 состояния $|\bar{k}\rangle$. Тогда

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= \prod_{k=1}^2 (u_k + v_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger) |0\rangle = (u_1 + v_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger) (u_2 + v_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger) |0\rangle = \\ &= (u_1 u_2 + u_1 v_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger + u_2 v_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger + v_1 v_2 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2^\dagger) |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$

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

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

$$\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = \prod_{k>0} (u_k^2 + v_k^2) = 1. \quad (3.18)$$

Для коэффициентов u_k и v_k потребуем

$$u_k^2 + v_k^2 \equiv 1. \quad (3.19)$$

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

$$\hat{n}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad \hat{n}_{\bar{k}} \equiv \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}. \quad (3.20)$$

По определению они совпадают с операторами количества частиц в состояниях $|k\rangle$ и $|\bar{k}\rangle$, присутствующих в произвольном состоянии $|\Psi\rangle$. Так, для анзаца $|\Psi_0\rangle$ получим

$$n_k \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}_k | \Psi_0 \rangle = v_k^2, \quad (3.21a)$$

$$n_{\bar{k}} \equiv \langle \Psi_0 | \hat{n}_{\bar{k}} | \Psi_0 \rangle = v_{\bar{k}}^2. \quad (3.21b)$$

Отсюда, вместе с условием (3.19), можно установить смысл коэффициентов u_k и v_k : величины v_k^2 и u_k^2 являются вероятностями того, что определённое парное состояние (k, \bar{k}) занято или нет.

3.3 КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИЙ ПАРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

В случае короткодействующего парного потенциала гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_{k>0} \epsilon_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}) - G \sum_{k,k'>0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'}, \quad (3.22)$$

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

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

$$\rho_q(\mathbf{r}) = 2 \sum_{k>0} v_k^2 \phi_k^\dagger(\mathbf{r}, q) \phi_k(\mathbf{r}, q), \quad (3.23a)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = 2 \sum_{k>0} v_k^2 (\nabla \phi_k^\dagger(\mathbf{r}, q), \nabla \phi_k(\mathbf{r}, q)) \quad (3.23б)$$

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = -2i \sum_{k>0} v_k^2 \phi_k^\dagger(\mathbf{r}, q) (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \phi_k(\mathbf{r}, q). \quad (3.23в)$$

Параметры u_k и v_k волновой функции (3.15) определяются минимизацией энергии данного состояния, то есть вариационной задачей. Из (3.21a) и (3.21б) следует, что число частиц в состоянии $|\Psi_0\rangle$ не является фиксированным. Можно потребовать, чтобы среднее количество частиц в состоянии $|\Psi_0\rangle$ было равно заданному количеству N нуклонов, то есть

$$\langle \Psi_0 | \hat{N} | \Psi_0 \rangle \equiv \langle \Psi_0 | \sum_{k>0} (\hat{n}_k + \hat{n}_{\bar{k}}) | \Psi_0 \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = N. \quad (3.24)$$

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

$$H' = H - \lambda \hat{N}, \quad (3.25)$$

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

$$\lambda = \frac{dE}{dN}. \quad (3.26)$$

Можно установить [30], что

$$(u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_k^\dagger) | \Psi_0 \rangle = 0, \quad (3.27a)$$

$$(u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger) | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (3.27b)$$

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

$$b_k^\dagger = u_k \hat{a}_k^\dagger - v_k \hat{a}_{\bar{k}}, \quad b_{\bar{k}}^\dagger = u_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger + v_k \hat{a}_k, \quad (3.28a)$$

$$b_k = u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger, \quad b_{\bar{k}} = u_k \hat{a}_{\bar{k}} + v_k \hat{a}_k^\dagger. \quad (3.28b)$$

В силу (3.19) соблюдается верное антикоммутиационное соотношение

$$\{b_k, b_{k'}^\dagger\} = (u_k^2 + v_k^2) \delta_{kk'} = \delta_{kk'}. \quad (3.29)$$

Можно показать [30; 31], что вариационная задача $\delta \langle \Psi_0 | H' | \Psi_0 \rangle = 0$ равносильна условию упрощённого вида гамильтониана

$$H' = \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}) - G \sum_{k, k'>0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\bar{k}}^\dagger \hat{a}_{\bar{k}'} \hat{a}_{k'}, \quad \tilde{\epsilon}_k \equiv \epsilon_k - \lambda, \quad (3.30)$$

в квазичастичных операторах b и b^\dagger :

$$H' \equiv H'_0 + \sum_{k>0} E_k (b_k^\dagger b_k + b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}). \quad (3.31)$$

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

Прямыми вычислениями, получим

$$\begin{aligned}
H' = & \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b) + \\
& + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k (b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k) - G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right), \tag{3.32}
\end{aligned}$$

где введены обозначения

$$\hat{n}_k^b \equiv b_k^\dagger b_k, \quad \hat{n}_{\bar{k}}^b \equiv b_{\bar{k}}^\dagger b_{\bar{k}}, \tag{3.33a}$$

$$\hat{\Delta} \equiv G \sum_{k>0} u_k v_k (1 - \hat{n}_k^b - \hat{n}_{\bar{k}}^b), \tag{3.33б}$$

$$\hat{F} \equiv \sum_{k>0} (u_k^2 b_{\bar{k}} b_k - v_k^2 b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger). \tag{3.33в}$$

Вторая строка в (3.32) содержит «лишние» слагаемые. Рассмотрим последнее слагаемое этой строчки, пренебрегая произведением \hat{F} и \hat{F}^\dagger .

$$-G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right) \approx -\frac{\hat{\Delta}^2}{G} - \hat{\Delta} \hat{F} - \hat{F}^\dagger \hat{\Delta}. \tag{3.34}$$

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

$$-G \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F}^\dagger \right) \left(\frac{\hat{\Delta}}{G} + \hat{F} \right) \approx -\frac{\Delta^2}{G} - \Delta \sum_{k>0} (u_k^2 - v_k^2) (b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k). \tag{3.35}$$

Итого,

$$\begin{aligned}
H' \approx & \sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta^2}{G} + \sum_{k>0} \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b) + \\
& + \sum_{k>0} (\tilde{\epsilon}_k \cdot 2u_k v_k - \Delta (u_k^2 - v_k^2)) (b_k^\dagger b_{\bar{k}}^\dagger + b_{\bar{k}} b_k). \tag{3.36}
\end{aligned}$$

Отсюда, условие уничтожения «лишних» членов имеет вид

$$\tilde{\epsilon}_k(2u_kv_k) - \Delta(u_k^2 - v_k^2) \equiv 0. \quad (3.37)$$

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

$$(u_k^2 - v_k^2)^2 + (2u_kv_k)^2 = 1 \iff u_k^2 - v_k^2 = \cos \chi, \quad 2u_kv_k = \sin \chi \geq 0. \quad (3.38)$$

Тогда

$$\tilde{\epsilon}_k \sin \chi - \Delta \cos \chi = 0 \quad \Big| : \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}, \quad (3.39)$$

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

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

$$\chi = \varphi + \pi n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (3.40)$$

Отсюда,

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

$$\sin \chi = \sin \varphi = \frac{\Delta}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}, \quad (3.41)$$

$$\cos \chi = \cos \varphi = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}. \quad (3.42)$$

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

$$2u_kv_k = \frac{\Delta}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}, \quad (3.43a)$$

$$u_k^2 - v_k^2 = \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}}. \quad (3.43b)$$

При отсутствии парных сил $\Delta = 0$ и $v_k^2 = 1, u_k^2 = 0$ для занятых состояний

($\tilde{\epsilon} < 0$). Тогда, единственное решение на коэффициенты u_k и v_k имеет вид

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right), \quad (3.44a)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right), \quad (3.44b)$$

Представим Δ в виде

$$\Delta = \Delta_0 + \tilde{\Delta}, \quad \Delta_0 \equiv \langle \Psi_0 | \hat{\Delta} | \Psi_0 \rangle. \quad (3.45)$$

Отсюда,

$$\tilde{\Delta} = -G \sum_{k>0} u_k v_k (n_k^b + n_{\bar{k}}^b). \quad (3.46)$$

Так,

$$\Delta^2 = (\Delta_0 + \tilde{\Delta})^2 = \Delta_0^2 \left(1 + \frac{\tilde{\Delta}}{\Delta_0} \right)^2 \approx \Delta_0^2 (1 + 2\tilde{\Delta}/\Delta_0) = \Delta_0^2 + 2\Delta_0 \tilde{\Delta}, \quad (3.47)$$

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

$$-\frac{\Delta^2}{G} \approx -\frac{\Delta_0^2}{G} - \frac{2}{G} \Delta_0 \tilde{\Delta}. \quad (3.48)$$

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

$$H' \approx \underbrace{\sum_{k>0} 2\tilde{\epsilon}_k v_k^2 - \frac{\Delta_0^2}{G}}_{H'_0} + \underbrace{\sum_{k>0} (\tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0 (2u_k v_k)) (\hat{n}_k^b + \hat{n}_{\bar{k}}^b)}_{E_k}. \quad (3.49)$$

Отсюда, энергия квазичастиц b даётся выражением

$$E_k = \tilde{\epsilon}_k (u_k^2 - v_k^2) + \Delta_0 (2u_k v_k) \approx \frac{\tilde{\epsilon}_k^2}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} + \frac{\Delta_0^2}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}. \quad (3.50)$$

Величина Δ_0 называется энергетической щелью БКШ.

Физический смысл данной энергии заключается в следующем. Основное состояние ядра можно считать вакуумом по отношению к квазичастицам b .

Пусть в основном состоянии ядра все состояния $k < k_F$ заполнены, а $k' > k_F$ — свободны. Тогда возбуждённое состояние ядра задаётся как $|\Psi\rangle = \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k |\Psi_0\rangle$ — нуклон-дырочное возбуждение. Так,

$$\begin{aligned} H' |\Psi\rangle &= H' \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k |\Psi_0\rangle = u_{k'} v_k H' b_{k'}^\dagger b_k^\dagger |\Psi_0\rangle = (H'_0 + E_{k'} + E_k) u_{k'} v_k |\Psi_0\rangle = \\ &= (H'_0 + E_{k'} + E_k) |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Энергия данного состояния будет равна¹⁾

$$E_\Psi = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = H'_0 + E_{k'} + E_k + \lambda \langle N \rangle_\Psi, \quad (3.52)$$

где

$$\langle N \rangle_\Psi = \frac{\langle \Psi | \hat{N} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = N + \left(\frac{\tilde{\epsilon}_{k'}}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_{k'}^2 + \Delta_0^2}} - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} \right). \quad (3.53)$$

То есть, при возбуждении ядра его энергия повышается на

$$E_\Psi - E_{\Psi_0} \approx E_{k'} + E_k, \quad (3.54)$$

пренебрегая нарушающими среднее число нуклонов слагаемыми в (3.53). Это можно интерпретировать как то, что при возбуждении ядра рождаются пары частиц b с энергиями (3.50).

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

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

$$\Delta_0 = G \sum_{k>0} u_k v_k, \quad 2u_k v_k = \frac{\Delta_0}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}}, \quad (3.55a)$$

$$\frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta_0}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta_0^2}} = \Delta_0. \quad (3.55b)$$

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

Решение $\Delta_0 = 0$ всегда присутствует в (3.556). При численном расчёте сумма в (3.556) будет кончатся некоторой оболочкой Λ . Для достаточно больших G и/или дальней (в смысле отсчёта от уровня Ферми) оболочке Λ будет присутствовать решение $\Delta_0 \neq 0$.

4 ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЁТЫ

Авторы статьи [32], С. В. Сидоров, А. В. Корнилова и Т. Ю. Третьякова, исследовавшие в этой публикации влияние тензорных сил на ядра с избыточным количеством нейтронов, любезно предоставили нам свою программу, по которой вели расчёты. С помощью этой программы мы произвели решение уравнений Хартри-Фока с последующим наложением схемы БКШ.

В нашей работе мы не затрагивали тензорные силы, поэтому все расчёты велись с использованием наборов значений параметров для скирмовских сил под названиями SG II [33] и SLy4 [34], которые соответствуют уравнениям, представленным в разделе 2.2.

В последующих разделах будут представлены результаты расчётов энергий связи и одночастичных уровней с учётом парных корреляций для цепочек изотопов кислорода ($A = 16; 18; 20$), никеля ($A = 60; 62; 64$) и железа ($A = 56; 58; 60$) в основном состоянии. Величина парных сил G_q для каждого изотопа была подобрана так, чтобы получающаяся в результате процедуры БКШ энергетическая щель для каждого изотопа была равна

$$\Delta_q = -\frac{1}{4}(S_q(A - 1_q) + S_q(A + 1_q) - 2S_q(A)), \quad (4.1)$$

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

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

4.1 ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ЦЕПОЧКИ ИЗОТОПОВ КИСЛОРОДА

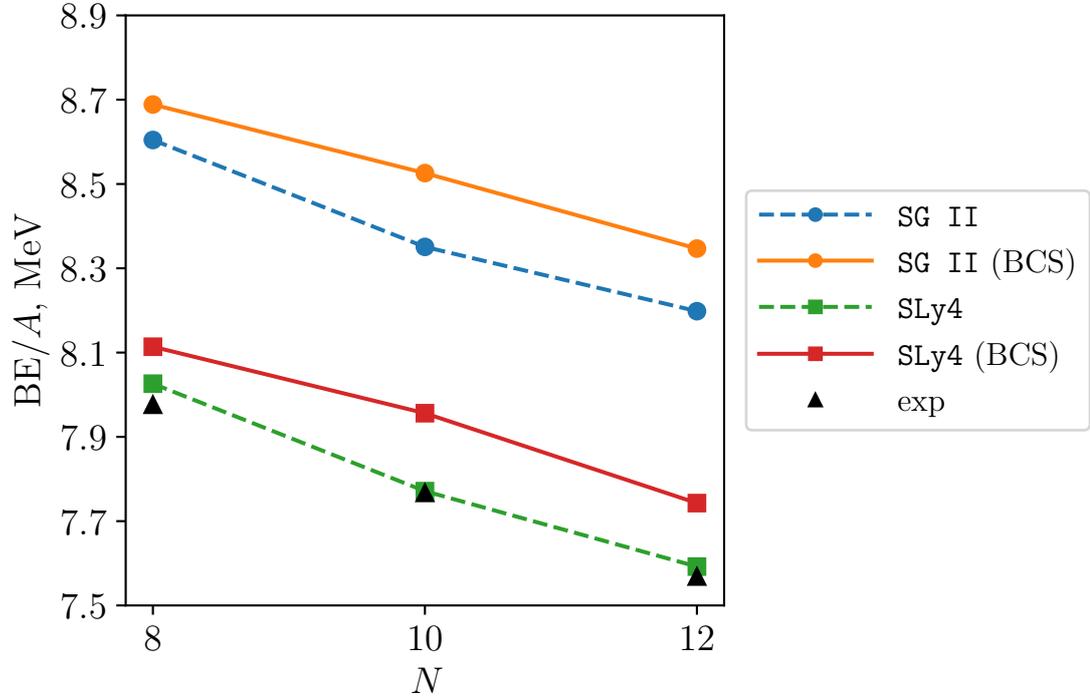


Рисунок 4.1 — Удельные энергии связи изотопов кислорода ^{16}O , ^{18}O , ^{20}O в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта.

Экспериментальные точки «exp» — [35].

На [рисунке 4.1](#) изображены вычисленные энергии связи для изотопов кислорода ^{16}O , ^{18}O , ^{20}O . Видно, что наилучшим образом для данной цепочки себя показала параметризация SLy4 без учёта парных корреляций. Это может быть объяснено тем фактом, что учёт парных корреляций в рассматриваемой модели производится независимо для нейтронов и протонов, то есть протон-нейтронными парными корреляциями было пренебрежено. В ядре кислорода наблюдаются более сложные корреляции — кластеризация нуклонов. Приближение независимого рассмотрения протон-протонных и нейтрон-нейтронных парных корреляций привело к завышению оценок энергий связи.

4.2 ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ЦЕПОЧКИ ИЗОТОПОВ НИКЕЛЯ

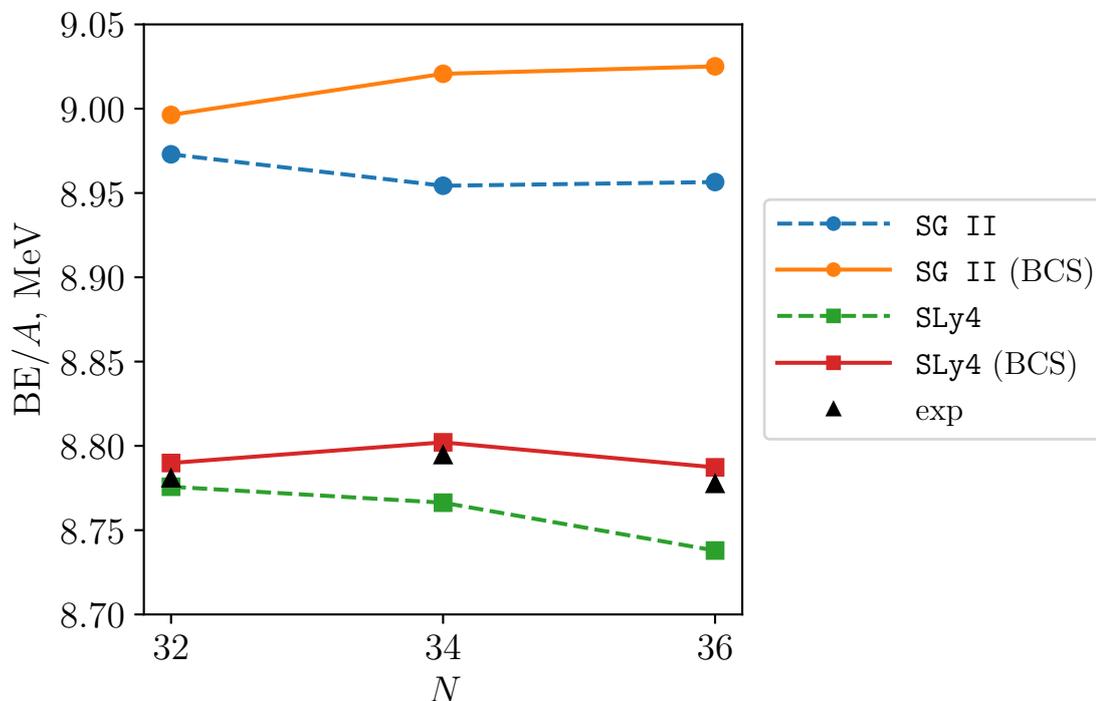


Рисунок 4.2 — Удельные энергии связи изотопов никеля ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта.

Экспериментальные точки «exp» — [35].

На [рисунке 4.2](#) изображены вычисленные энергии связи для изотопов никеля ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni . Для данной цепочки вновь ближе всего к экспериментальным данным легли точки, вычисленные в параметризации **SLy4**, но уже с учётом парных корреляций.

4.3 ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ЦЕПОЧКИ ИЗОТОПОВ ЖЕЛЕЗА

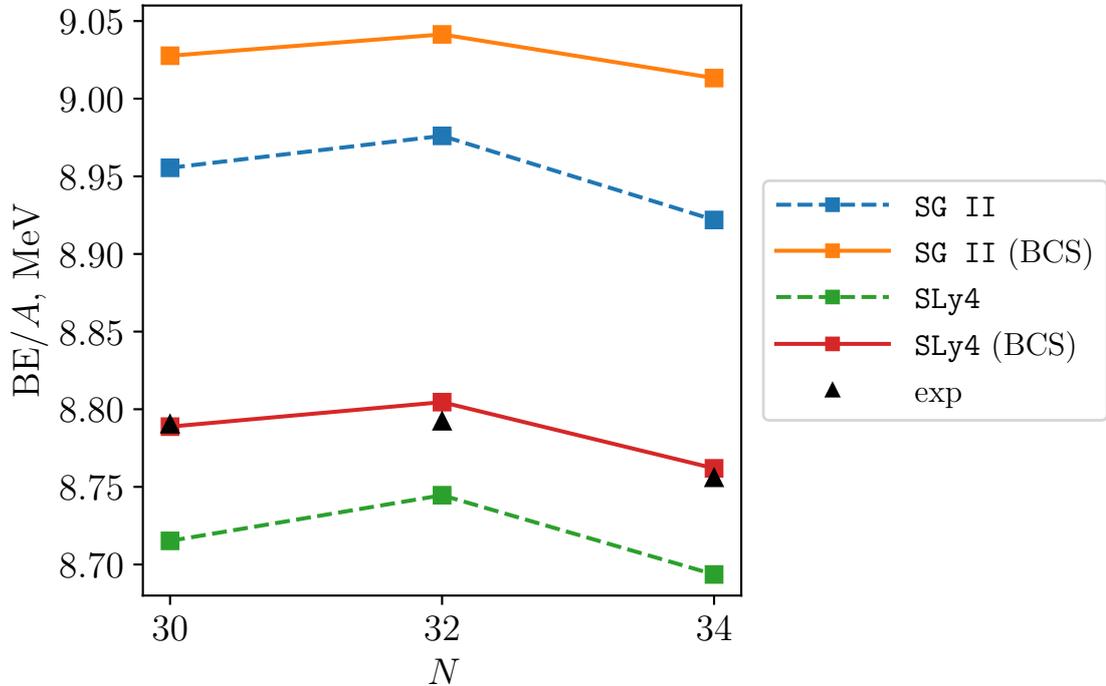


Рисунок 4.3 — Удельные энергии связи изотопов железа ^{56}Fe , ^{58}Fe , ^{60}Fe в зависимости от числа нейтронов N в ядре. Сплошными линиями обозначены расчёты с учётом парных корреляций, пунктирными — без их учёта. Экспериментальные точки «exp» — [35].

На [рисунке 4.3](#) изображены вычисленные энергии связи для изотопов железа ^{56}Fe , ^{58}Fe , ^{60}Fe . Для данной цепочки показаны удельные энергии связи, вычисленные в параметризациях SLy4 и SG II. Полученные значения в параметризации SLy4 с учётом парных корреляций разумным образом согласуются с экспериментальными данными.

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

4.4 ОДНОЧАСТИЧНЫЕ УРОВНИ

4.4.1 ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ЖЕЛЕЗА-60

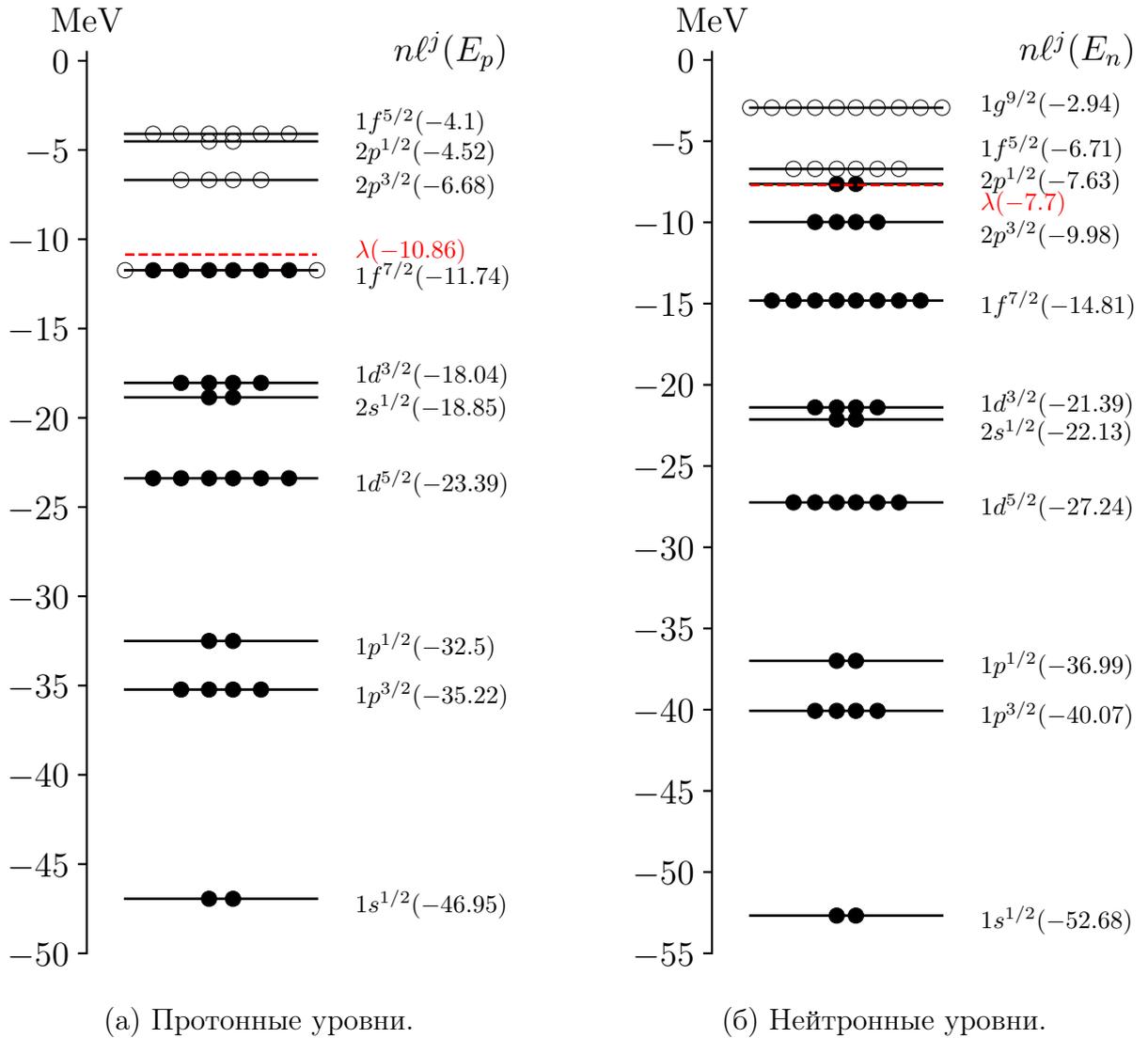


Рисунок 4.4 — Однуклонные уровни основного состояния ядра ^{60}Fe с учётом парных корреляций.

На рисунке 4.4 изображены вычисленные однуклонные ((а) — протонные, (б) — нейтронные) энергетические уровни основного состояния ядра ^{60}Fe с учётом парных корреляций и схематически¹⁾ показано расположение нуклонов по уровням.

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

4.4.2 ОСНОВНОЕ И ВОЗБУЖДЁННОЕ СОСТОЯНИЕ НИКЕЛЯ-62

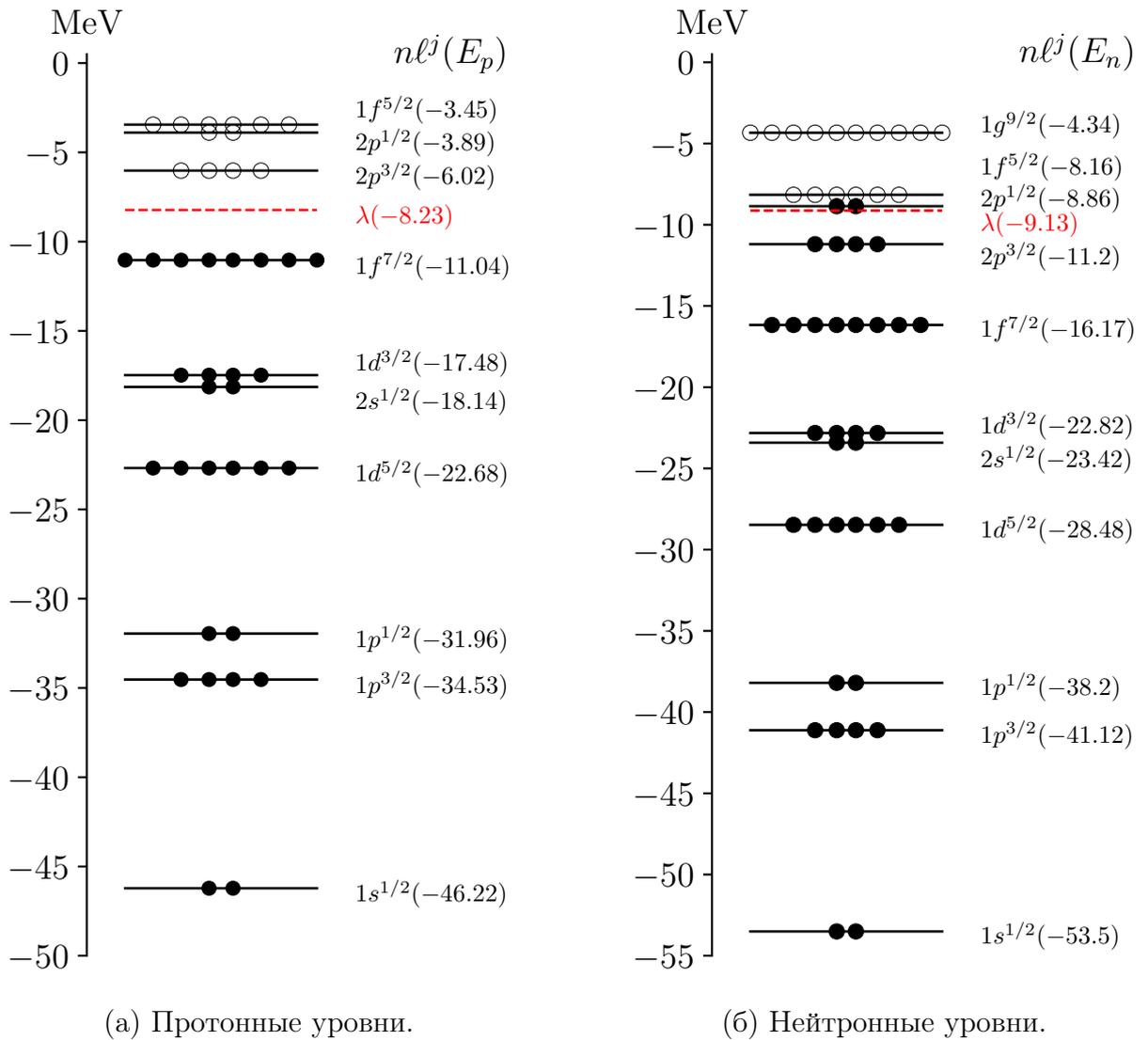
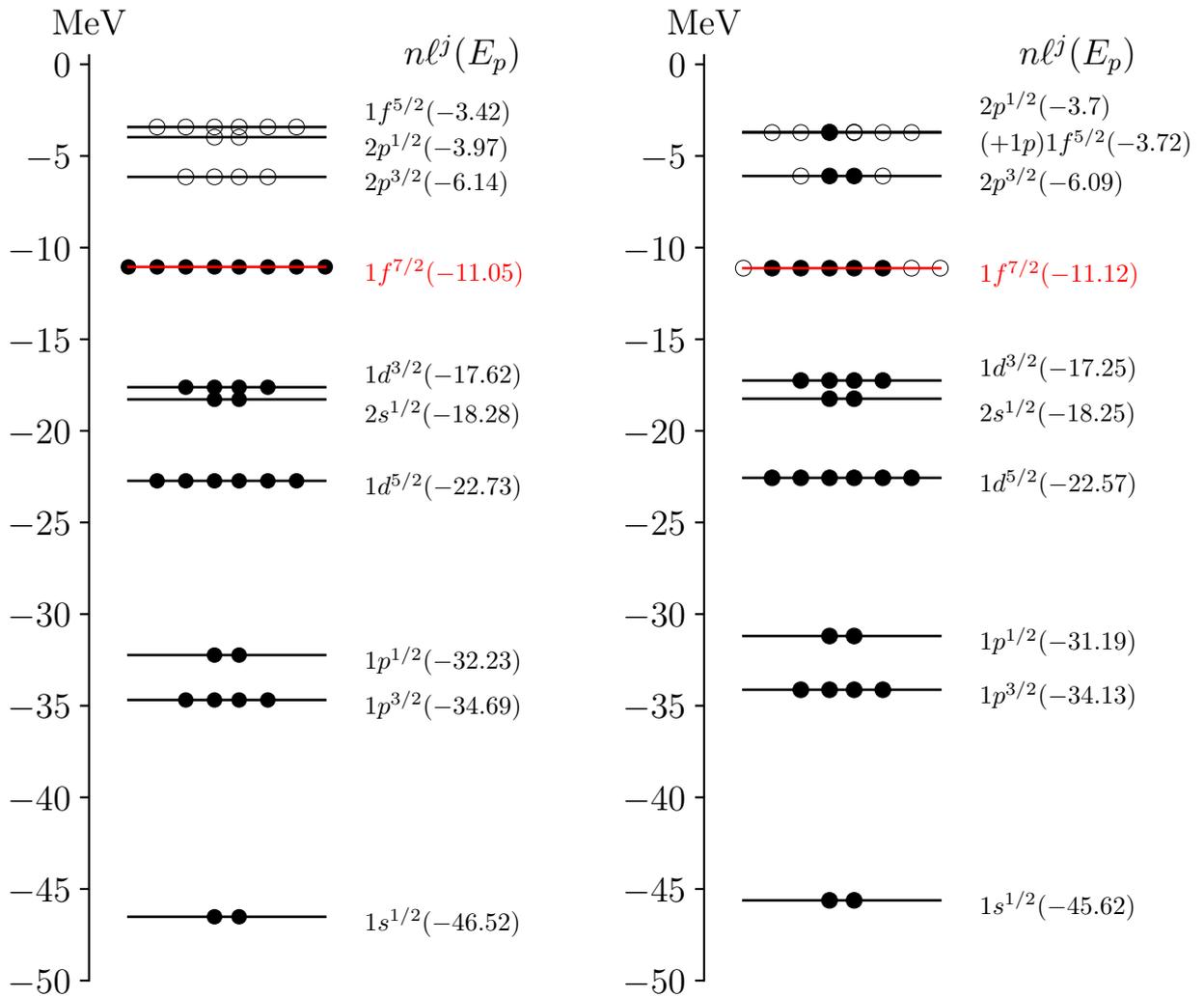


Рисунок 4.5 — Однуклонные уровни основного состояния ядра ^{62}Ni с учётом парных корреляций.

На рисунке 4.5 изображены вычисленные однуклонные ((а) — протонные, (б) — нейтронные) энергетические уровни основного состояния ядра ^{62}Ni с учётом парных корреляций и схематически показано расположение нуклонов по уровням.



(а) Протонные уровни основного состояния.

(б) Протонные уровни возбуждённого состояния.

Рисунок 4.6 — Протонные одночастичные уровни ядра ^{62}Ni без учёта парных корреляций.

На рисунке 4.6 изображены протонные энергетические уровни ядра ^{62}Ni без учёта парных корреляций и показано расположение протонов по уровням, где (а) — протонные уровни основного состояния ядра, (б) — протонные уровни возбуждённого состояния ядра. Для приведённой возбуждённой конфигурации ядра можно проследить характерное поведение уровней при возбуждении ядра: они могут сдвинуться и поменять порядок следования (здесь это будут уровни $2p^{1/2}$ и $1f^{5/2}$).

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

возбуждённых уровней, что важно знать при моделировании ядерных реакций.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В первой части работы нами были проанализированы четыре ядерные реакции, в результате которых образуются ядра в долгоживущих изомерных состояниях: $^{91}\text{Zr}(n, p)^{91\text{m}}\text{Y}$; $^{91}\text{Zr}(n, n\alpha)^{87\text{m}}\text{Sr}$; $^{115}\text{In}(n, 2n)^{114\text{m}}\text{In}$; $^{115}\text{In}(n, n')^{115\text{m}}\text{In}$. С помощью программного комплекса TALYS-1.9 мы вычислили сечения указанных реакций в зависимости от энергии падающих нейтронов в диапазоне от порога реакции до 20 МэВ. Нашей целью являлось исследование вопроса о возможности использования комплекса TALYS-1.9 для предсказания соответствующих сечений. Выполненный анализ показал, что с разумной точностью как экспериментальные данные (из библиотеки EXFOR), так и оценки (из библиотеки IRDFF-II) по сечениям выхода воспроизводятся расчётами по TALYS-1.9. В качестве количественной оценки «разумной точности» полученных величин сечений может выступать характерный разброс расчётных значений сечений для разных моделей плотности уровней ядер. Данная характеристика сравнима как с разбросом экспериментальных точек, так и с отличием оценки IRDFF-II от этих точек, а также с отличием «среднего» (по трём исследованным моделям плотности уровней) сечения от экспериментальных точек и оценочной кривой. Таким образом, нами было показано, что в ряде случаев, используя заложенные в программный комплекс TALYS-1.9 модели плотности уровней ядер, а также ряд других параметров, имеется возможность получать адекватные оценки сечений, то есть использовать TALYS-1.9 в качестве предсказательного инструмента. Часть результатов, полученных в ходе данного анализа, была опубликована в нашей статье [4]. Работу по дальнейшему освоению программного комплекса TALYS-1.9 планируется продолжить в рамках будущего изучения способа микроскопического описания нуклонных состояний в сильнодеформированных ядрах, в частности — делящихся.

Во второй части работы представлен изученный нами способ микроскопического описания нуклонов в ядре, основывающийся на идее самосогласованного потенциала, в котором находятся нуклоны — метод Хартри-Фока с силами

Скирма, зависящими от нуклонных плотностей. Затем рассмотрен формализм Бардина-Купера-Шриффера (БКШ), позволяющий описать учёт парных корреляций нуклонов в ядре, вызванных наличием остаточного взаимодействия нуклонов. Для чётно-чётных недеформированных сферически-симметричных ядер были получены уравнения для определения энергетической щели БКШ — величины, объясняющей чётно-нечётный и другие эффекты, связанные с присутствием парных корреляций в ядрах. Наша задача заключалась в получении в рамках описанного подхода однонуклонных энергетических уровней, на которых располагаются нейтроны и протоны в ядре. Это было достигнуто численным решением соответствующих уравнений Хартри-Фока (с последующим наложением схемы БКШ) при помощи предоставленной нам авторами статьи [32] программы. При решении уравнений были задействованы два набора значений скирмовских параметров под названиями **SG II** и **SLy4**.

В качестве проверки выбранных наборов скирмовских параметров нами были рассмотрены получающиеся в результате расчётов по программе удельные энергии связи для цепочек изотопов: кислорода ($A = 16; 18; 20$), железа ($A = 56; 58; 60$) и никеля ($A = 60; 62; 64$). Для цепочки изотопов кислорода наилучшим образом себя показала параметризация **SLy4** без учёта парных корреляций: в ядре кислорода наблюдаются более сложные корреляции — кластеризация нуклонов. Для цепочек изотопов никеля и железа также ближе всего к экспериментальным данным оказались значения энергий связи, вычисленные в параметризации **SLy4**, но с учётом парных корреляций. Можно предположить, что для ядер с $A \gtrsim 56$ приближение независимого рассмотрения нейтронов и протонов при учёте парных корреляций является обоснованным.

Далее, в параметризации **SLy4** были вычислены одночастичные уровни нейтронов и протонов для всех указанных цепочек изотопов в их основном состоянии. Также были рассчитаны однонуклонные уровни изотопов ^{16}O и ^{60}Ni , ^{62}Ni , ^{64}Ni в их возбуждённых состояниях (с энергиями возбуждения до 30 МэВ) без учёта парных корреляций. Данные наборы уровней можно использовать при комбинаторных расчётах плотности возбуждённых уровней (в двух разных приближениях), что важно знать при моделировании ядерных реакций. Такие расчётные плотности уровней можно, в частности, внедрить в программный комплекс TALYS-1.9 и применять их при расчёте сечений ядерных реакций.

Рассмотренный формализм описания нуклонов в ядре может быть обоб-

щён на включение в рассмотрение нечётных ядер, а как следствие — на рассмотрение возбуждённых состояний чётных ядер с учётом парных корреляций. Для описания процесса деления необходимо знать низколежащие дискретные состояния над барьером деления, а также плотность уровней высоко над барьером для значительно деформированного ядра. Поэтому представляет особый интерес в дальнейшем распространить описанный в данной работе подход Хартри-Фока с учётом парных корреляций методом БКШ на ядра, подверженные деформации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Capote R., Herman M., Obložinský P., Young P., Goriely S., Belgia T., Ignatyuk A., Koning A., Hilaire S., Plujko V., Avrigeanu M., Bersillon O., Chadwick M., Fukahori T., Ge Z., Han Y., Kailas S., Kopecky J., Maslov V., Reffo G., Sin M., Soukhovitskii E., Talou P.* RIPL — Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations // Nuclear Data Sheets. — 2009. — v. 110, iss. 12. — p. 3107–3214.
2. *Hauser W., Feshbach H.* The Inelastic Scattering of Neutrons // Physical Review. — 1952. — v. 87, iss. 2. — p. 366–373.
3. *Koning A. J., Rochman D.* Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System // Nuclear Data Sheets. — 2012. — v. 113, iss. 12. — p. 2841–2934.
4. *Sitkov D. A., Trofimov L. E., Filonchik P. G., Titarenko Yu. E., Barabanov A. L.* Analysis of the Cross Sections of the Formation of Nuclei in Isomeric States in (n, p) Reactions // Physics of Particles and Nuclei Letters. — 2024. — v. 21, iss. 4. — p. 567–570.
5. *Bohr N., Wheeler J. A.* The Mechanism of Nuclear Fission // Phys. Rev. — 1939. — v. 56, iss. 5. — p. 426–450.
6. *Frenkel Ya. I.* On the Splitting of Heavy Nuclei by Slow Neutrons // Phys. Rev. — 1939. — v. 55, iss. 10. — p. 987.
7. *Vandenbosch R., Huizenga J. R.* Nuclear Fission. — Elsevier Science, 1973.
8. *Strutinsky V. M.* “Shells” in deformed nuclei // Nuclear Physics A. — 1968. — v. 122, iss. 1. — p. 1–33.

9. *Nilsson S. G., Tsang C. F., Sobiczewski A., Szymański Z., Wycech S., Gustafson C., Lamm I.-L., Möller P., Nilsson B.* On the nuclear structure and stability of heavy and superheavy elements // Nuclear Physics A. — 1969. — v. 131, iss. 1. — p. 1–66.
10. *Nix J. R.* Calculation of Fission Barriers for Heavy and Superheavy Nuclei // Annual Review of Nuclear Science. — 1972. — v. 22, iss. 1. — p. 65–120.
11. *Ragnarsson I., Nilsson S. G., Sheline R. K.* Shell structure in nuclei // Physics Reports. — 1978. — v. 45, iss. 1. — p. 1–87.
12. *Hartree D. R.* The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — 1928. — v. 24, iss. 1. — p. 89–110.
13. *Fock V.* Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems // Zeitschrift für Physik. — 1930. — Jg. 61, Ausg. 1/2. — S. 126–148.
14. *Vautherin D., Brink D. M.* Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei // Physical Review C. — 1972. — v. 5, iss. 3. — p. 626–647.
15. *Brink D. M., Boeker E.* Effective interactions for Hartree-Fock calculations // Nuclear Physics A. — 1967. — v. 91, iss. 1. — p. 1–26.
16. *Volkov A. B.* Equilibrium deformation calculations of the ground state energies of 1p shell nuclei // Nuclear Physics. — 1965. — v. 74, iss. 1. — p. 33–58.
17. *Nestor C. W., Davies K. T. R., Krieger S. J., Baranger M.* An effective nucleon-nucleon potential for use in nuclear Hartree-Fock calculations // Nuclear Physics A. — 1968. — v. 113, iss. 1. — p. 14–26.
18. *Skyrme T. H. R.* The effective nuclear potential // Nuclear Physics. — 1958. — v. 9, iss. 4. — p. 615–634.
19. *Ring P., Schuck P.* The Nuclear Many-Body Problem. — New York : Springer, 1980. — (Texts and Monographs in Physics).
20. *Mayer M. G.* Nuclear Configurations in the Spin-Orbit Coupling Model. II. Theoretical Considerations // Physical Review. — 1950. — v. 78, iss. 1. — p. 22–23.

21. *Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R.* Theory of Superconductivity // Physical Review. — 1957. — v. 108, iss. 5. — p. 1175–1204.
22. *Belyaev S. T.* Effect of Pairing Correlation on Nuclear Properties // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. — 1959. — v. 31, iss. 11. — p. 1–55.
23. *Erler J., Birge N., Kortelainen M., Nazarewicz W., Olsen E., Perhac A. M., Stoitsov M.* The limits of the nuclear landscape // Nature. — 2012. — v. 486, iss. 7404. — p. 509–512.
24. *Bender M., Bernard R., Bertsch G., Chiba S., Dobaczewski J., Dubray N., Giuliani S. A., Hagino K., Lacroix D., Li Z., Magierski P., Maruhn J., Nazarewicz W., Pei J., Péru S., Pillet N., Randrup J., Regnier D., Reinhard P.-G., Robledo L. M., Ryssens W., Sadhukhan J., Scamps G., Schunck N., Simenel C., Skalski J., Stetcu I., Stevenson P., Umar S., Verriere M., Vretenar D., Warda M., Åberg S.* Future of nuclear fission theory // Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics. — 2020. — v. 47, iss. 11, 113002.
25. *Trkov A., Griffin P., Simakov S., Greenwood L., Zolotarev K., Capote R., Aldama D., Chechev V., Destouches C., Kahler A. C. I., Konno C., Kostal M., Majerle M., Malambu E., Ohta M., Pronyaev V. G., Radulovic V., Sato S., Schulc M., Simeckova E., Vavtar I., Wagemans J., White M. C., Yashima H.* IRDFF-II: A New Neutron Metrology Library // Nuclear Data Sheets. — 2020. — v. 163. — p. 1–108.
26. *Titarenko Yu. E., Pavlov K. V., Titarenko A. Yu., Legostaev V. O., Zhigulina M. A., Khalikov R. S., Zhivun V. M., Kulevoy T. V., Kovalishin A. A., Dudnikov A. A., Blandinskiy V. Y., Davidenko V. D., Ioannisian M. V., I. B. V., Dyachkov I. I., Chernov K. G., Malkov M. R., Kuteev B. V., Kashchuk Y. A., Meshchaninov S. A., Obudovsky S. Y., Stankovskiy A. Y., Konobeyev A. Y.* Benchmark Experiments for Verification of Nuclear Data Libraries for Designing Fusion Blankets // Fusion Science and Technology. — 2022. — v. 78, iss. 7. — p. 549–572.
27. *Gilbert A., Cameron A. G. W.* A composite nuclear-level density formula with shell corrections // Can. J. Phys. — 1965. — v. 43. — p. 1446–1496.

28. *Dilg W., Schantl W., Vonach H., Uhl M.* Level density parameters for the back-shifted fermi gas model in the mass range $40 < A < 250$ // Nuclear Physics A. — 1973. — v. 217, iss. 2. — p. 269–298.
29. *Skyrme T. H. R.* CVII. The nuclear surface // Philosophical Magazine. — 1956. — v. 1, iss. 11. — p. 1043–1054.
30. *Беляев С. Т.* Квантовая механика систем многих тождественных частиц : Учебное пособие. — Москва : МФТИ, 2014.
31. *Suhonen J.* From Nucleons to Nucleus : Concepts of Microscopic Nuclear Theory. — Springer Berlin Heidelberg, 2007. — (Theoretical and Mathematical Physics).
32. *Sidorov S. V., Kornilova A. S., Tretyakova T. Yu.* Tensor force impact on shell evolution in neutron-rich Si and Ni isotopes // Chinese Physics C. — 2024. — v. 48, iss. 4, 044101.
33. *Van Giai N., Sagawa H.* Spin-isospin and pairing properties of modified Skyrme interactions // Physics Letters B. — 1981. — v. 106, iss. 5. — p. 379–382.
34. *Chabanat E., Bonche P., Haensel P., Meyer J., Schaeffer R.* A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities // Nuclear Physics A. — 1998. — v. 635, iss. 1/2. — p. 231–256.
35. *Wang M., Huang W., Kondev F., Audi G., Naimi S.* The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references // Chinese Physics C. — 2021. — v. 45, iss. 3, 030003.