

Теорія спонтанного поділу

В.Ю. Денисов

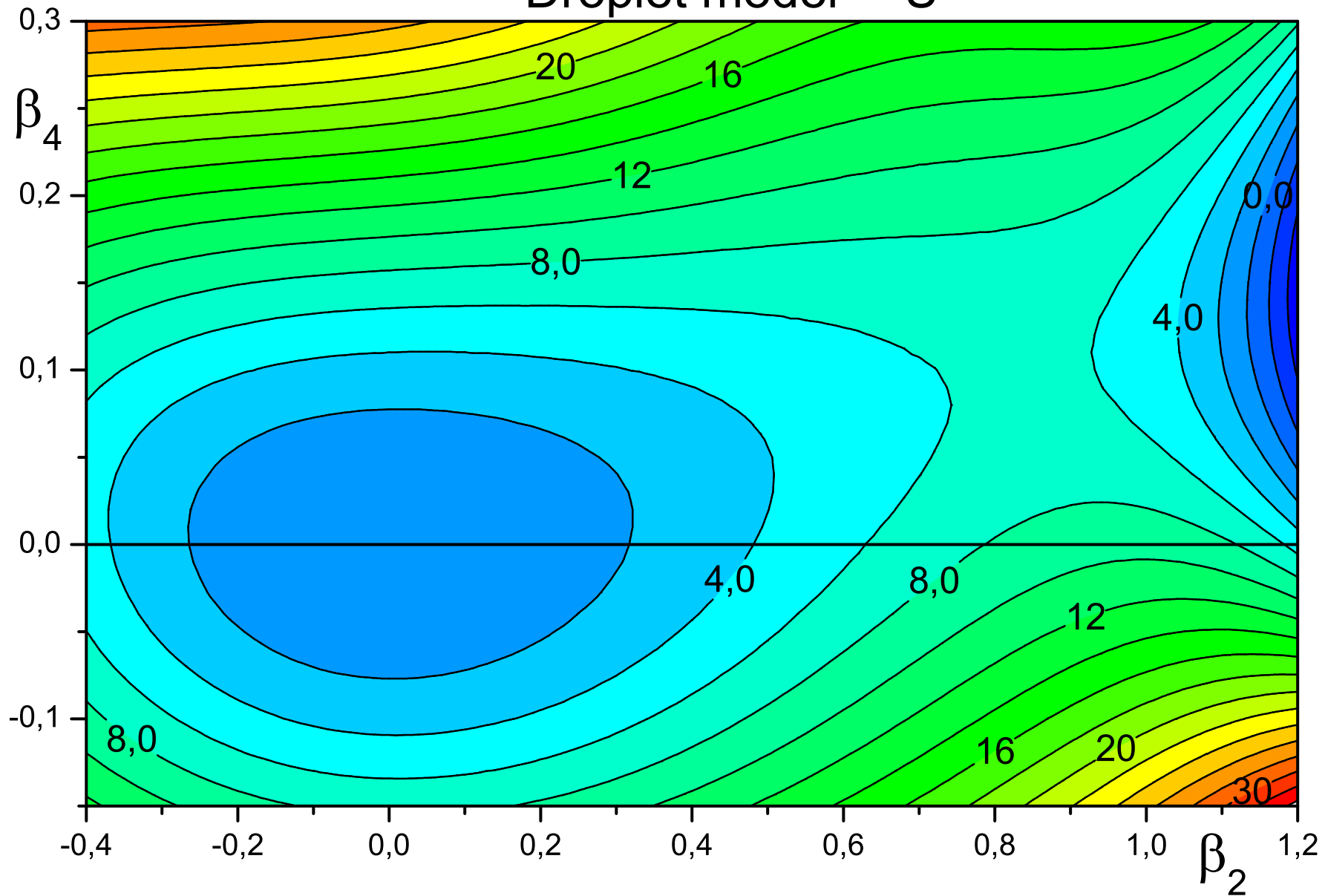
Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Інститут ядерних досліджень, Київ, Україна

Краплина модель

Залежність поверхневої та кулонівської від параметрів деформації

Droplet model ^{238}U



2. Потенціал Вудса-Саксона

Розглянемо для простоти рівняння Шредінгера для протона в ядрі з Z протонами

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \Psi = E \Psi$$

де

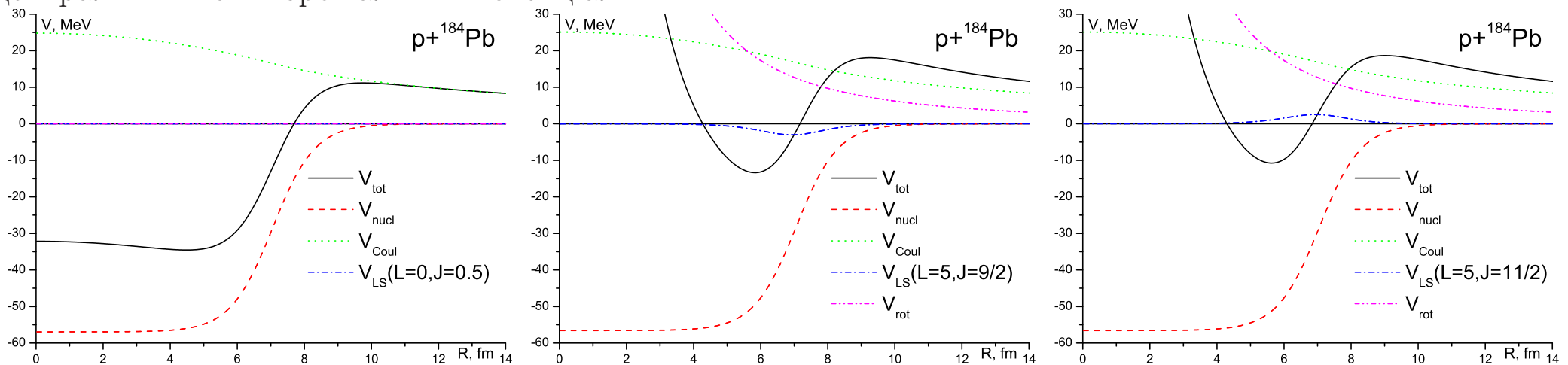
$$V = V_{\text{Coul}}(r) + V_{\text{CR}}(r) + V_{\text{SR}}(r) \hbar^2 (\vec{S} \vec{L}),$$

$$V_{\text{Coul}}(r) = \begin{cases} \frac{(Z-1)e^2}{r}, & r \geq R_{\text{Coul}}, \\ \frac{(Z-1)e^2}{R_{\text{Coul}}} \left[\frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R_{\text{Coul}}^2} \right], & r \leq R_{\text{Coul}}, \end{cases}$$

є кулонівська енергія,

$$V_{\text{CR}}(r) = \frac{V_0}{1 + \exp((r - R_C)/d_C)}, \quad V_{\text{LS}}(r) = \frac{d}{dr} \frac{V_{\text{SR}}}{1 + \exp((r - R_{\text{SR}})/d_{\text{SR}})}.$$

є центральний і спин-орбітальний потенціали.



Schrödinger equation:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \Psi = E\Psi$$

Повна хвильова функція є

$$\Psi = \frac{\psi_{j\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\Omega) \xi_s.$$

Поділ змінних, що з'являються у повному рівнянні Шредінгера, призводить до звичайного радіального рівняння для кожного значення орбітального та сумарного кутових моментів ℓ та j

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{k^2}{E} [E - (V_{\text{Coul}}(r) + V_{\text{CR}}(r) + iW_{\text{CI}}(r)) - (V_{\text{SR}}(r) + iW_{\text{SR}}(r)) \hbar^2 (j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1))/2] \right\} \psi_{j\ell} = 0$$

де $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$.

Якщо оцінити повну енергію та підсумувати усі одночастинкові енергії E_i , то енергія

$$E_{\text{tot}} = \sum_i^{i_F} E_i.$$

не дорівнює енергії зв'язку ядер, тому що потенціал не є самоузгодженим.

Зауважимо, що енергію зв'язування можна з високою точністю оцінити в рамках наближення Хартрі-Фока . Однак наближення Хартрі-Фока є досить складним.

Однак багато різноманітних величин:

- одночастинкові рівні,
- бар'єри ділення, період напіврозпаду,
- енергії зв'язку (використовуючи підхід до оболонкових поправок)
- різні динамічні параметри ,
- енергії одночастинкових і збуджених станів
- можна з високою точністю оцінити в простому наближенні Вудса-Саксона.

Отже, наближення Вудса-Саксона є досить простим і корисним!

3. Теорія оболонкових поправок Струтинського.

Вілен Митрофанович Струтинський запровадив підхід до врахування оболонкової структури ядер у 1965-1968 рр.

(16 жовтня 1929 р., Данилова Балка, Кіровоградський район, Україна - 28 червня 1993 р., Рома, Італія)

Член-кореспондент НАНУ, завідувач відділу теоретичної ядерної фізики КІЯД

Головна думка: Як ми це вказували

$$E_{\text{tot}} = \sum_i^{i_F} E_i.$$

не дорівнюється до енергії зв'язку ядер, тому що потенціал не є самоузгодженим,

але ми вважаємо

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= \sum_i^{i_F} \tilde{E}_i + \left[\sum_i^{i_F} E_i - \sum_i^{i_F} \tilde{E}_i \right] \\ &\quad \Downarrow \text{substitution} \Downarrow \\ &= \text{Macro Mass Formula} + \left[\sum_i^{i_F} E_i - \sum_i^{\tilde{i}_F} \tilde{E}_i \right] \\ &= \text{Macro Mass Formula} + \delta E_{\text{shell}}. \end{aligned}$$

Відмітимо, що в цілому досить точна.

$\sum \tilde{E}_i$ - енергія, яка оцінюється за допомогою плавних (усереднених) одночастинкових енергій, усереднених за енергією.

Густина одночастинкових рівнів оболонкової моделі є

$$g(E) = \sum_i \delta(E - E_i)$$

де E_i одночастинковий рівень оболонкової моделі. У цьому випадку

$$\sum_i E_i = \int dE g(E) E.$$

Плавна одночастинкова енергія \tilde{E} задається усередненою густиною одночастинкових рівнів, $\tilde{g}(\epsilon)$, яка отримана за допомогою згортки $g(E)$ з допоміжною функцією $f(x)$:

$$\tilde{g}(E) = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' g(E') f\left(\frac{E - E'}{\gamma}\right) = \frac{1}{\gamma} \sum_i f\left(\frac{E - E_i}{\gamma}\right),$$

де $\gamma \sim (1 \div 2)\hbar\Omega = (1 \div 2)E_F A^{1/3}$ є параметром усереднення, який має значення близьке до відстані між оболонками у ядрі 8÷10 МеВ. Отже, усереднення відбувається як через зв'язані та незв'язані одночастинкові рівні. Тому

$$\delta E_{\text{shell}} = \sum_i^{i_F} E_i - \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE \tilde{g}(E) E,$$

де $\tilde{\lambda}$ є рівень Фермі для усереднених одночастинкових рівнів, та який пов'язаний зі збереженням кількості нуклонів у ядрі:

$$N = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE \tilde{g}(E).$$

Допоміжна функція $f(x)$ рівна

$$f(x) = \omega(x)P_p(x),$$

де

$$\omega(x) = \pi^{-1/2} \exp(-x^2)$$

та

$$P_m(x) = \sum_{k=0,2,\dots}^m \frac{(-1)^{k/2}}{2^k (k/2)!} H_k(x)$$

є так званий коригуючий поліном порядку m (типovими значеннями поліноміального порядку є: $m = 6, 8$).

Усереднена одночастинкова енергія рівна:

$$\tilde{E} = \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} E \tilde{g}(E) dE = \sum_i E_i \tilde{n}_i + \gamma \frac{d\tilde{E}}{d\gamma},$$

де усереднені функція \tilde{n}_i має вигляд

$$\tilde{n}_i = \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE f\left(\frac{E - E_i}{\gamma}\right).$$

Так як \tilde{E} не повинна залежати від діапазону згладжування γ (а також і від m), тому другий доданок повинен дорівнювати нулю, тобто

$$\frac{d\tilde{E}}{d\gamma} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{d\tilde{E}}{dm} = 0.$$

Якщо **умова плато** не виконується, метод усереднення Струтинського не дає однозначного результату.

Як правило, метод оболонкової поправки Струтинського (або точність плато) становить близько $\sim 0,5$ MeV у дуже важких ядрах і $\sim 1,5$ MeV у легких та середніх ядрах. Однак часто такої точності достатньо. Вибір γ та m на практиці визначає як відповідні значення, де функції $\tilde{E}(\gamma) \simeq const$ та $\tilde{E}(m) \simeq const$.

Оболонкова поправка Струтинського рівна

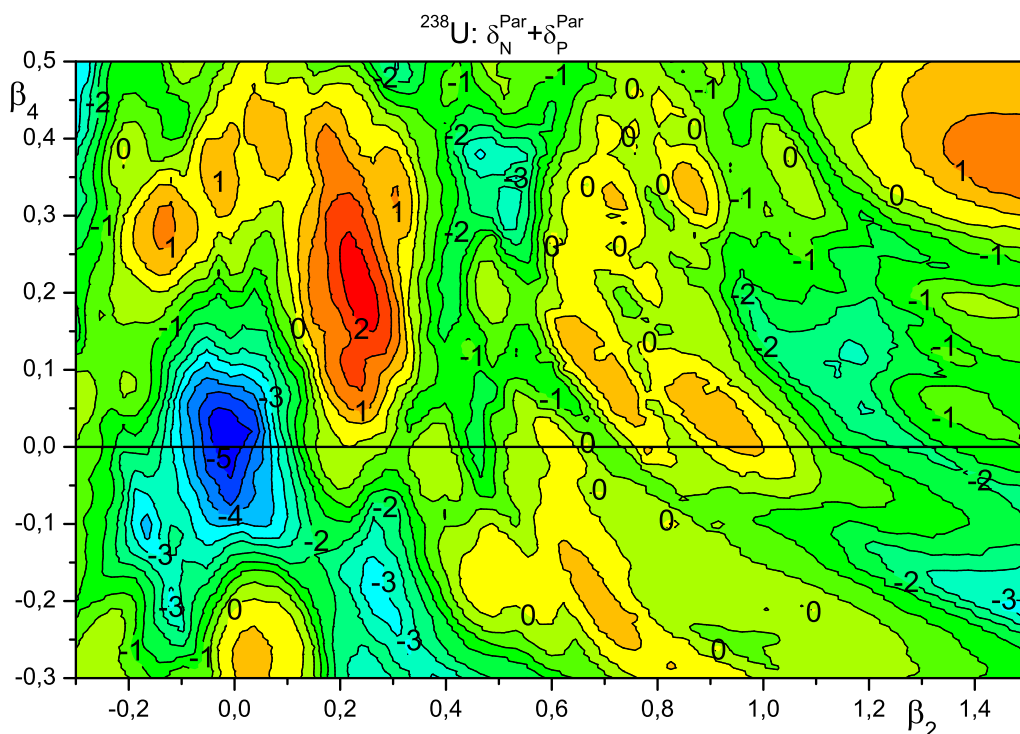
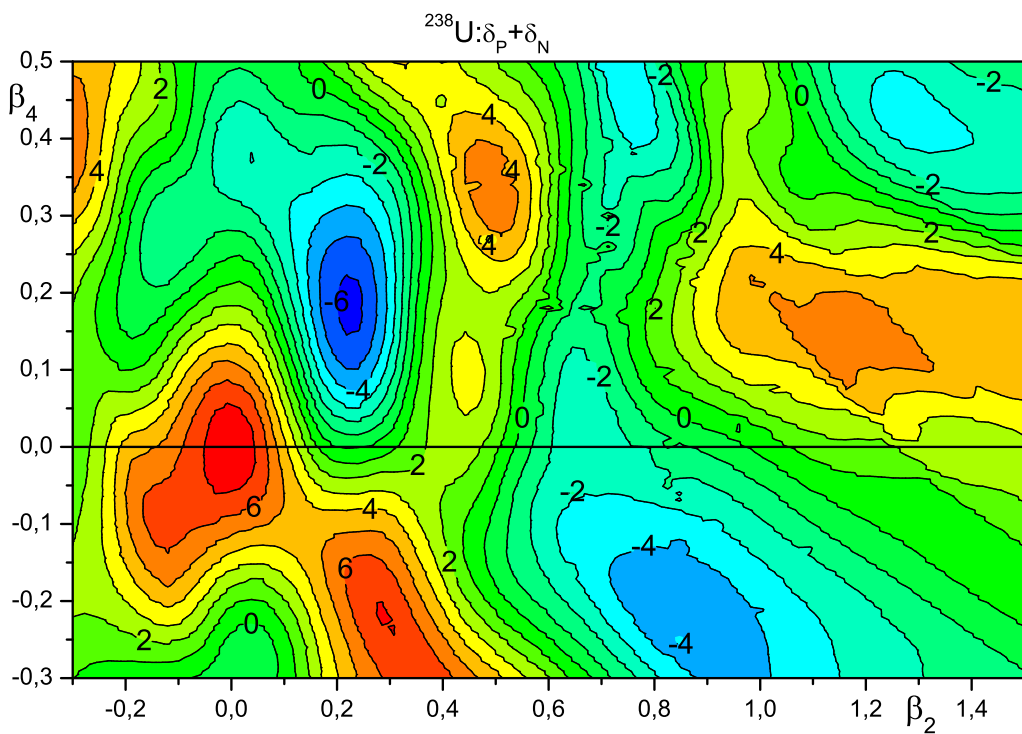
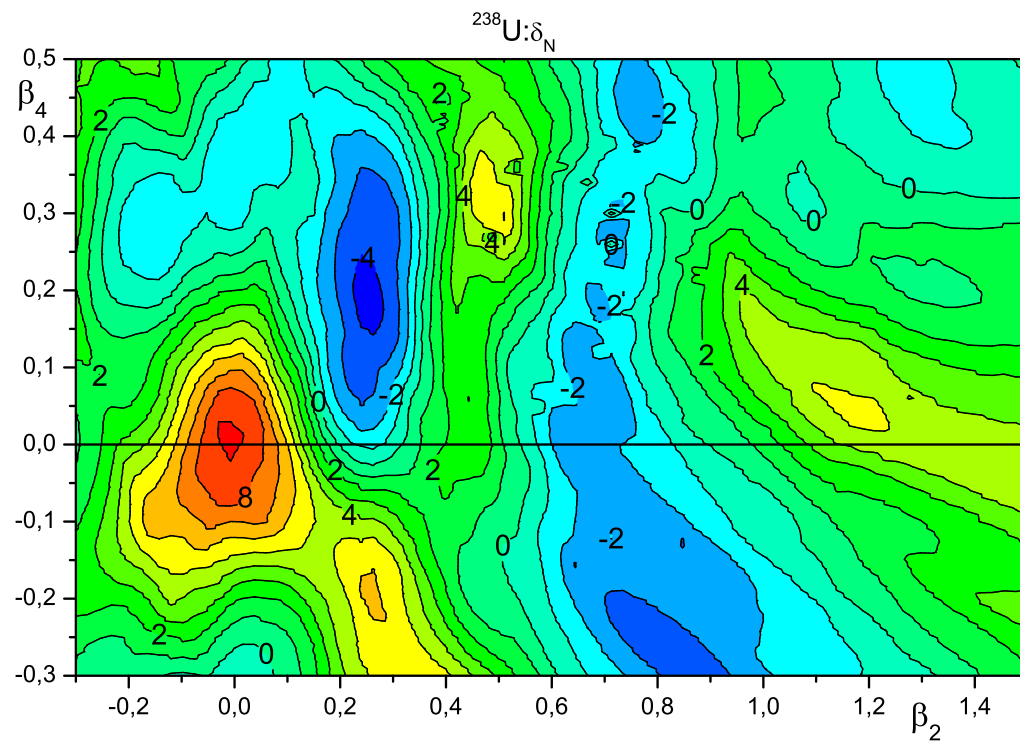
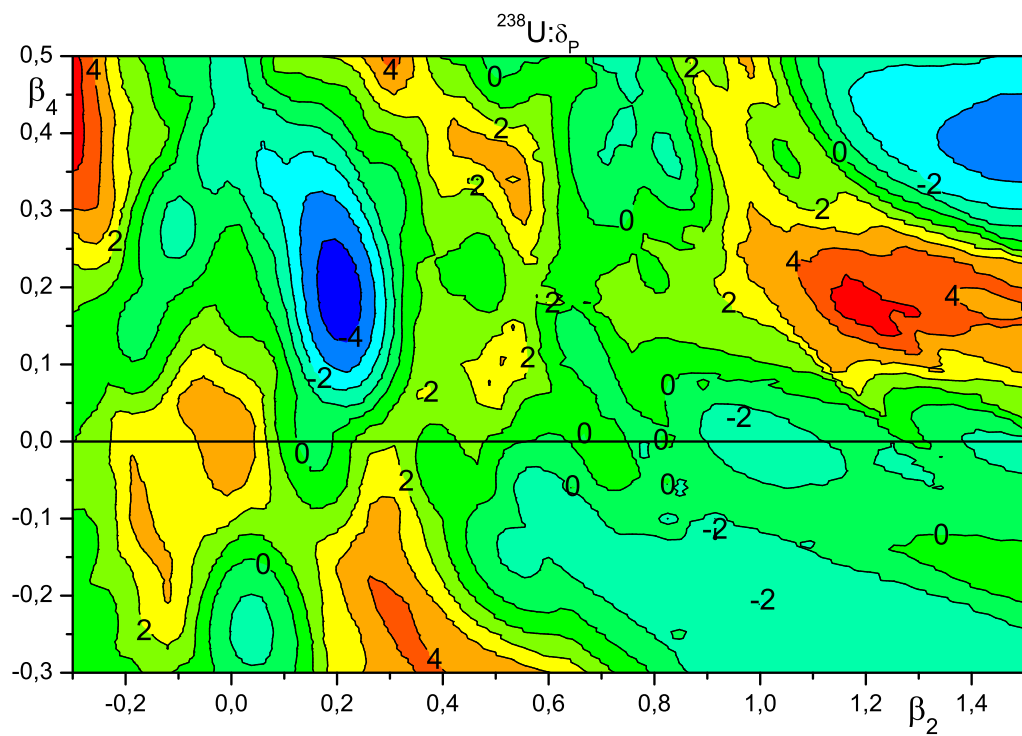
$$\delta E_{\text{shell}} = \sum_i^{i_F} E_i - \int_{-\infty}^{\tilde{\lambda}} dE \tilde{g}(E) E.$$

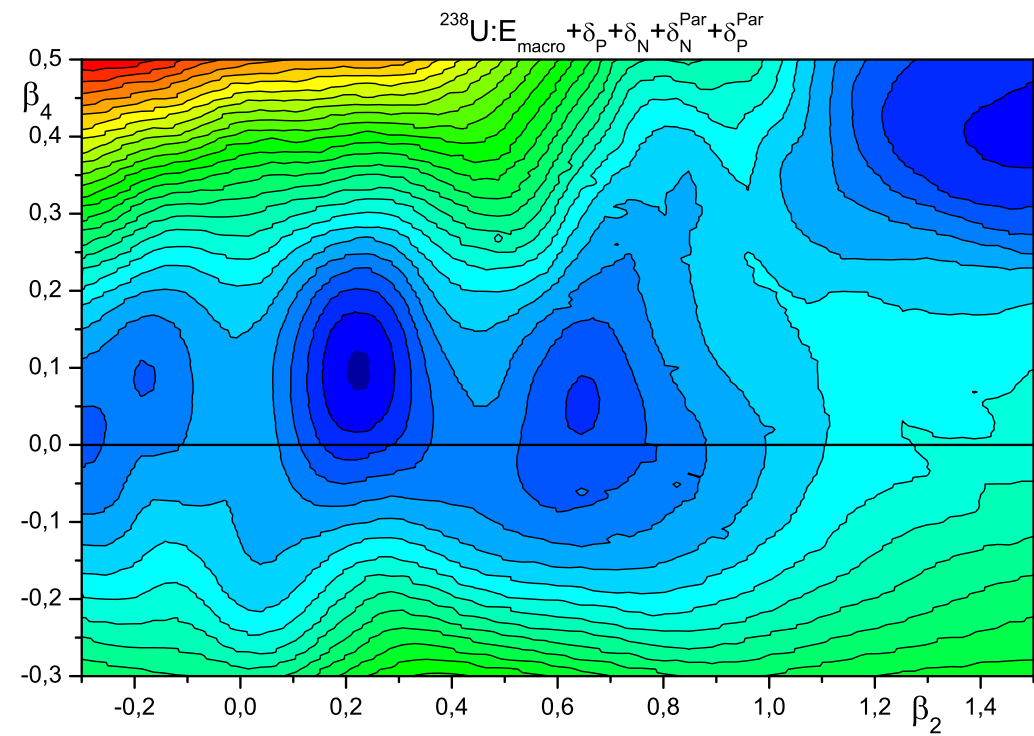
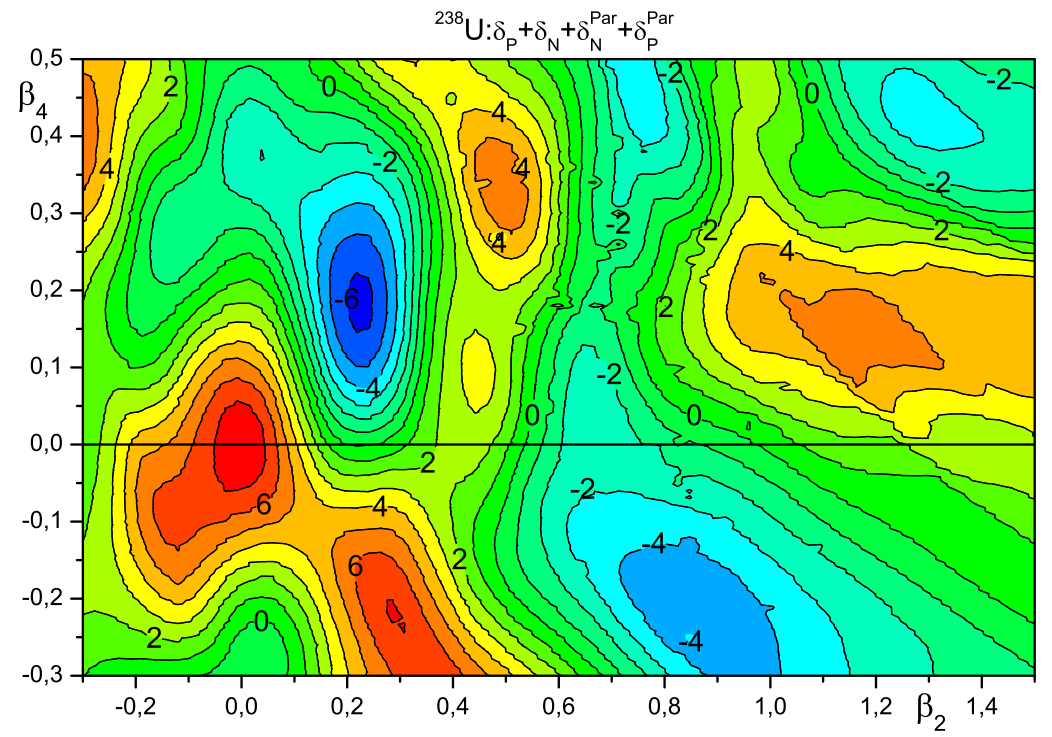
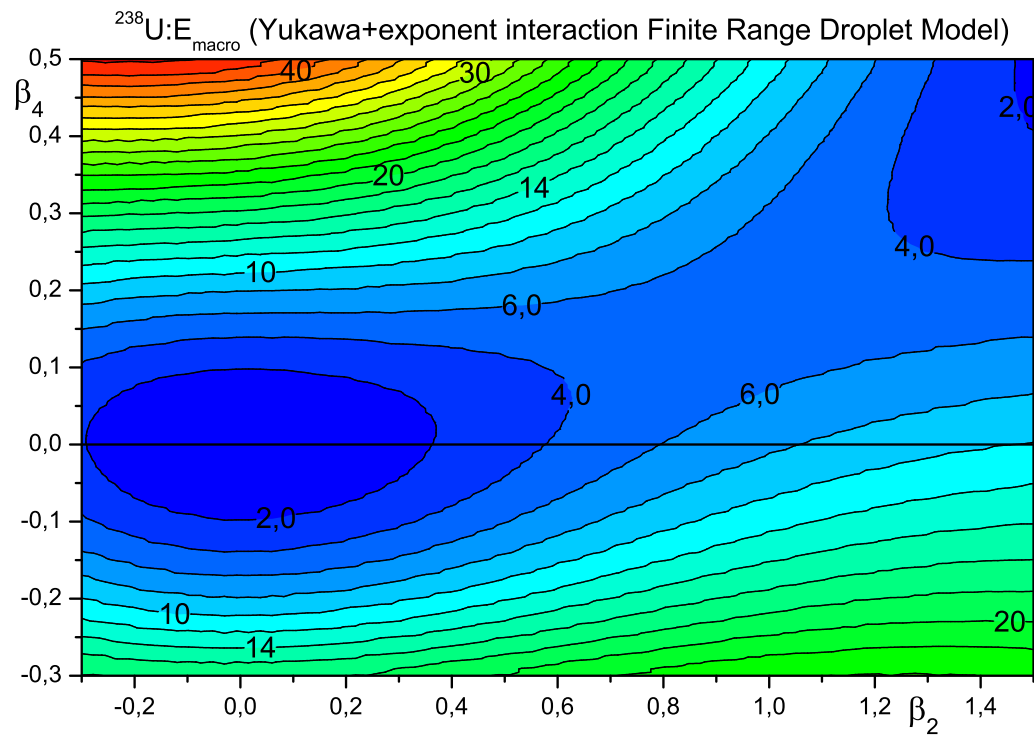
Найвище значення оболонкової поправки - $\delta E_{\text{shell}} = -13 \div -14$ МеВ, оцінене для основного стану ^{208}Pb .
Для порівняння, енергія зв'язку ^{208}Pb дорівнює -1636 МеВ.

Метод оболонкової поправки був надзвичайно корисним.

За допомогою цього методу було

- побудовано масові формули з надзвичайно високою точністю $\sim 0,5$ МеВ
- оцінено параметри рівноважної деформації ядер;
- отримані бар'єри поділу ядер;
- тощо.





Аксіальні деформації:

$$R(\theta) = R_0[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_4 Y_{20}(\theta)].$$

Неаксіальні деформації:

$$R(\theta, \varphi) = R_0[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_{22}(Y_{22}(\theta, \varphi)Y_{2-2}(\theta, \varphi)) + \beta_4 Y_{20}(\theta)].$$

Сферичні гармоніки:

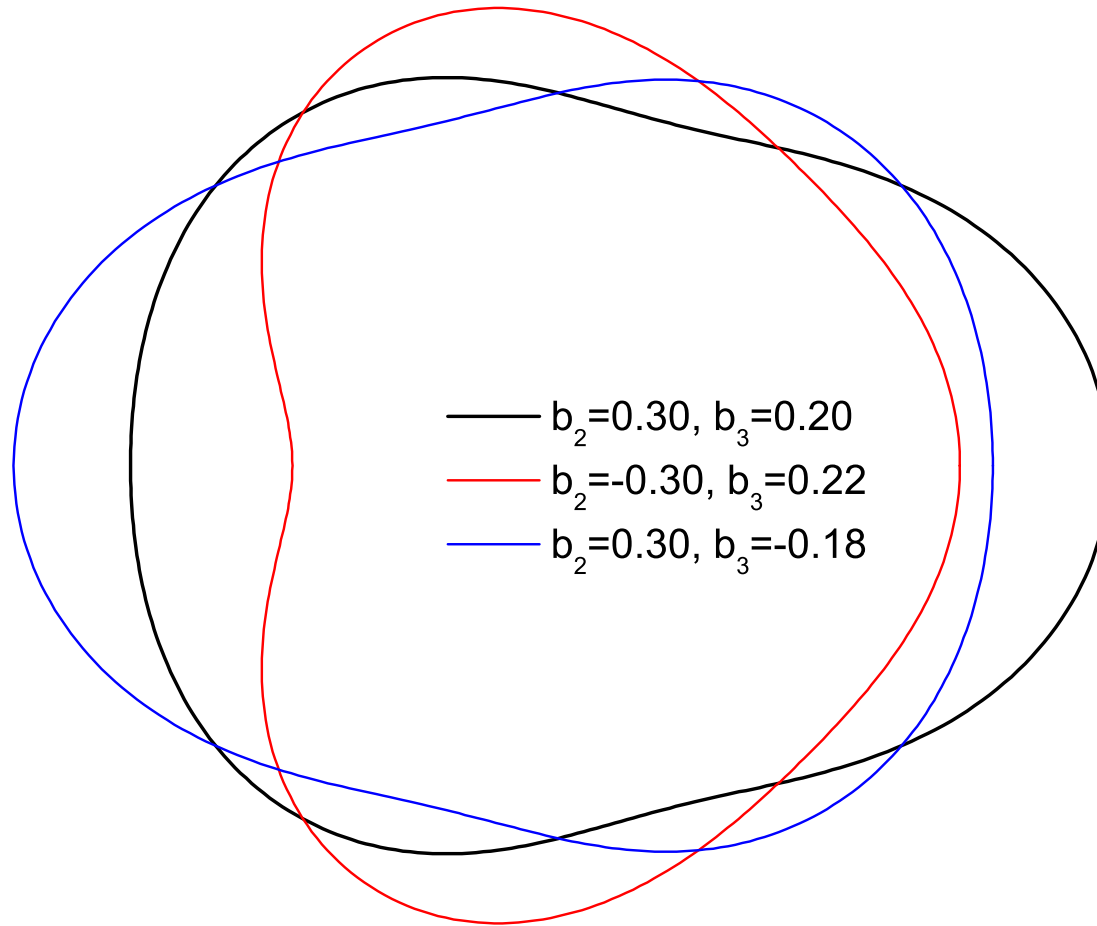
$$Y_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3 \cos^2 \theta - 1),$$

$$Y_{2\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{35}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{40}(\theta) = \frac{9}{256\sqrt{\pi}}(35 \cos^4 \theta - 30 \cos^2 \theta + 3).$$

Аксіальні дзеркально-асиметричні деформації (грушева форма)

$$R(\theta) = R_0[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_3 Y_{30}(\theta)],$$
$$Y_{30}(\theta) = \sqrt{\frac{7}{64\pi}}(5 \cos^2 \theta - 3) \cos \theta.$$



Неаксіальні дзеркально-асиметричні деформації (бананова форма)

$$\begin{aligned}R(\theta) &= R_0[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta) + \beta_3 Y_{30}(\theta) + \beta_{31}(Y_{31}(\theta, \varphi) - Y_{3-1}(\theta, \varphi))], \\Y_{31}(\theta) &= -\sqrt{\frac{3 \cdot 7}{16\pi}}(5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{i\phi}, \\Y_{3-1}(\theta) &= \sqrt{\frac{3 \cdot 7}{16\pi}}(5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{-i\phi}.\end{aligned}$$

R. R. Chasman, Physics Letters B, Volume 266, Issues 3-4, 29 August 1991, Pages 243-248.

Вивчено вплив деформацій $Y_{3\pm 1}(\theta, \varphi)$ на енергетичну поверхню нуклідів в області $A = 190$. Знайдено багато нуклідів із супердеформованими та гіпердеформованими мінімумами. Стани, які пов'язані з цими мінімумами, виявляються поблизу іраст-лінії при $I = 40$.

Поділ ядер.

Енергетичні умови для поділу ядра на 2 уламка:

$$Q = E(Z, N) - E(Z_1, N_1) - E(Z_2, N_2) > 0.$$

Дія:

$$\mathcal{A}(E) = (2/\hbar) \int_a^b \sqrt{2\mu(s)(\mathcal{V}(s) - E)} ds,$$

де s є траєкторія поділу у деформаційному просторі $\beta_2, \beta_3, \dots, \beta_\ell$, $\mu = \sum_{\ell, \ell'} B_{\ell, \ell'} \frac{d\beta_\ell}{ds} \frac{d\beta_{\ell'}}{ds}$. Коефіцієнт передачі:

$$T(E) = 1 / \{1 + \exp[\mathcal{A}(E)]\}$$

Кількість зіткнень ядра з бар'єром ділення за одиницю часу $\omega_0 / (2\pi)$:

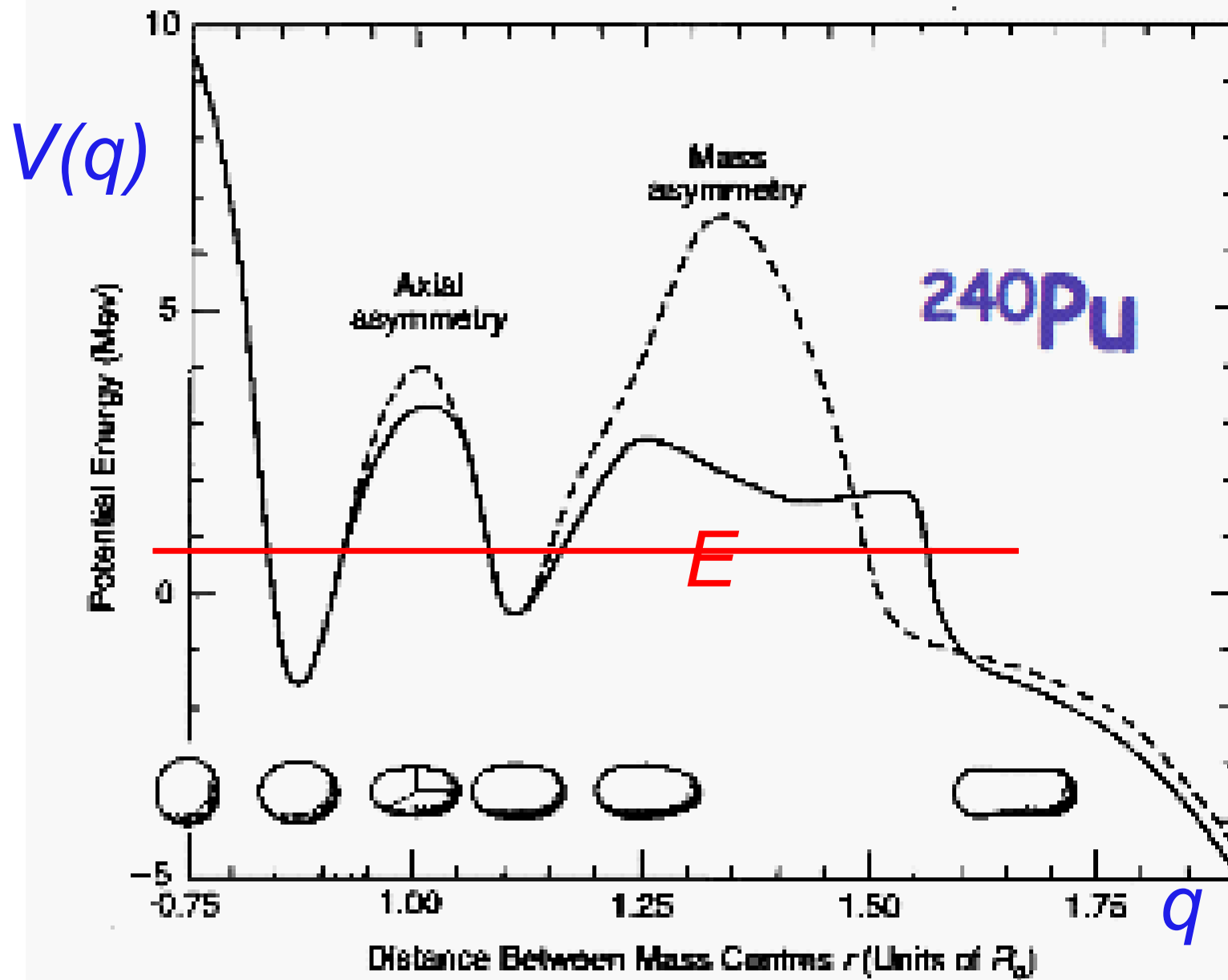
$$\nu_{sf} = \frac{2\pi \ln 2}{\omega_0},$$

де $E_{zp} = 0.5\hbar\omega_0 \approx 0.7 \text{ MeV}$.

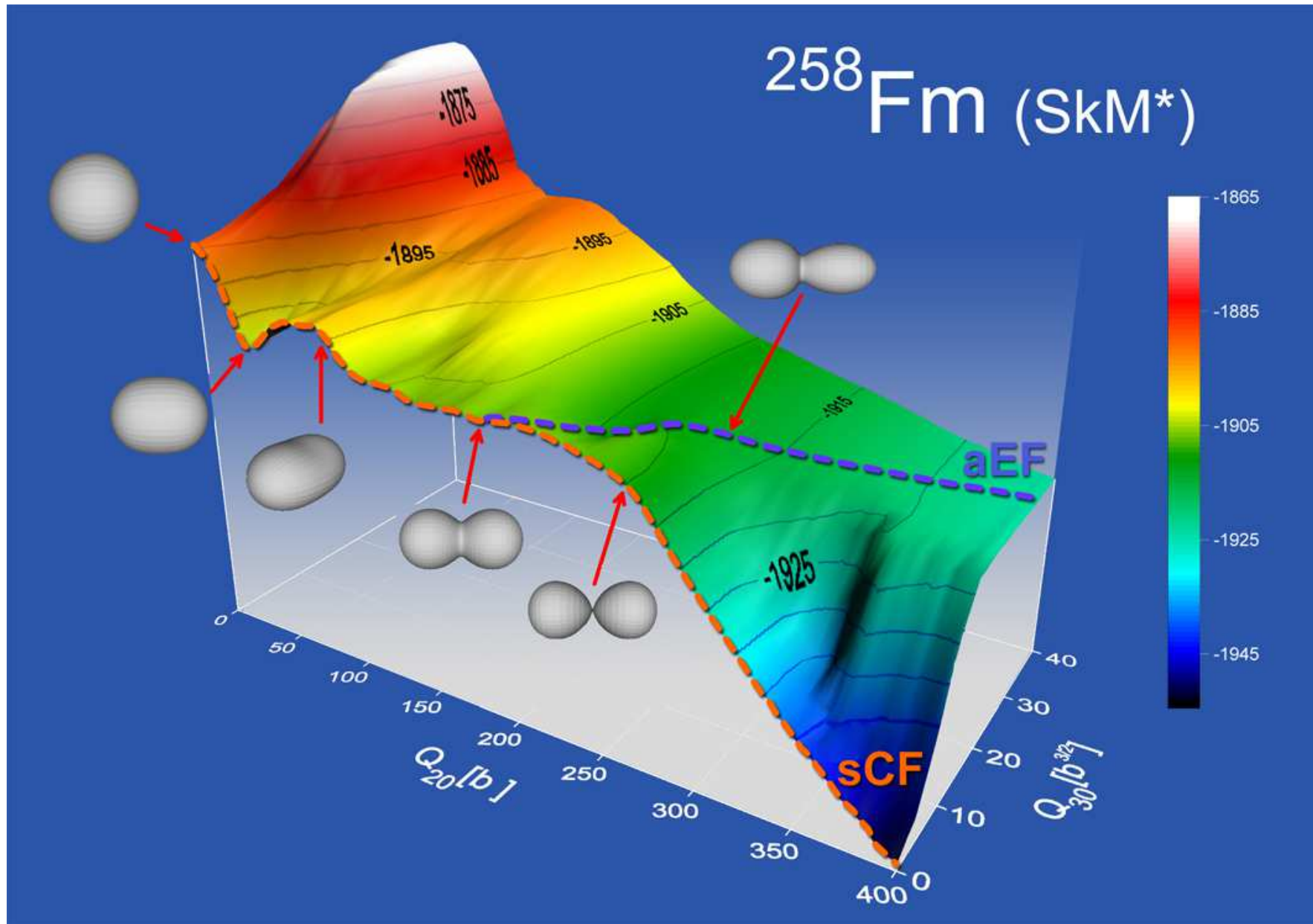
Період напіврозпаду по відношенню до поділу ядра є:

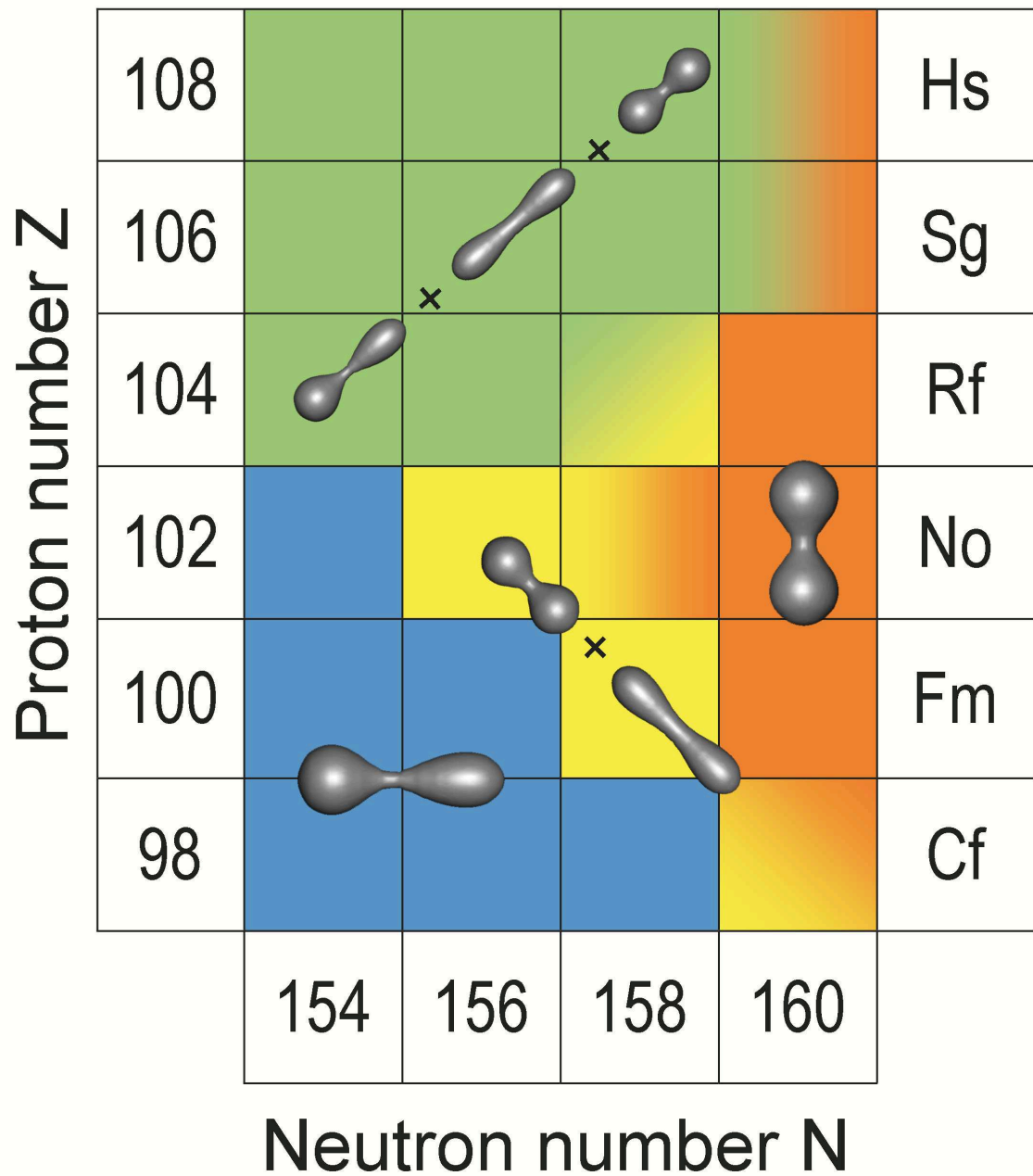
$$t_{sf}(E) = \nu_{sf} / T(E)$$

Fission Barrier: importance of dimensionality and symmetries

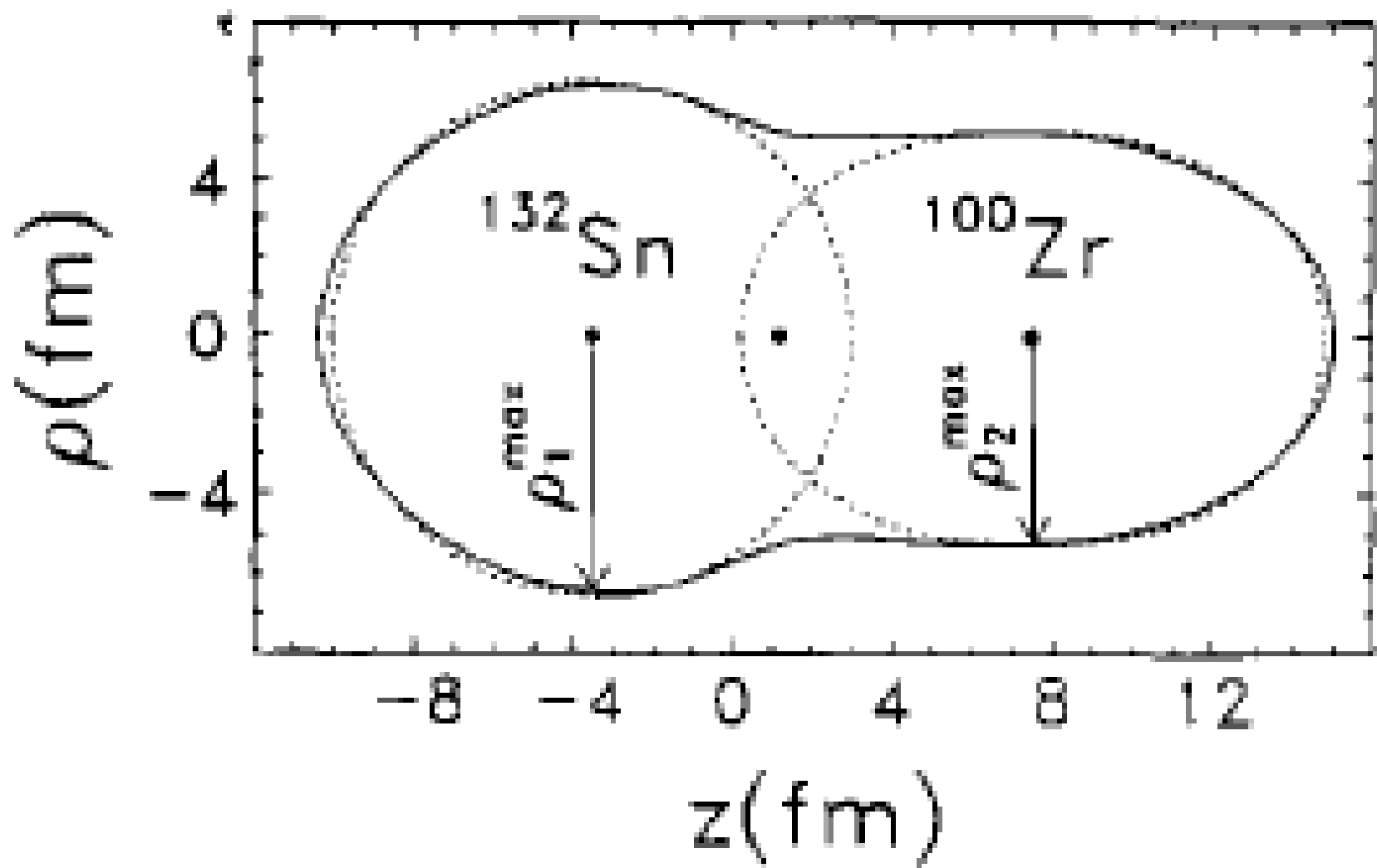


Bimodal fission





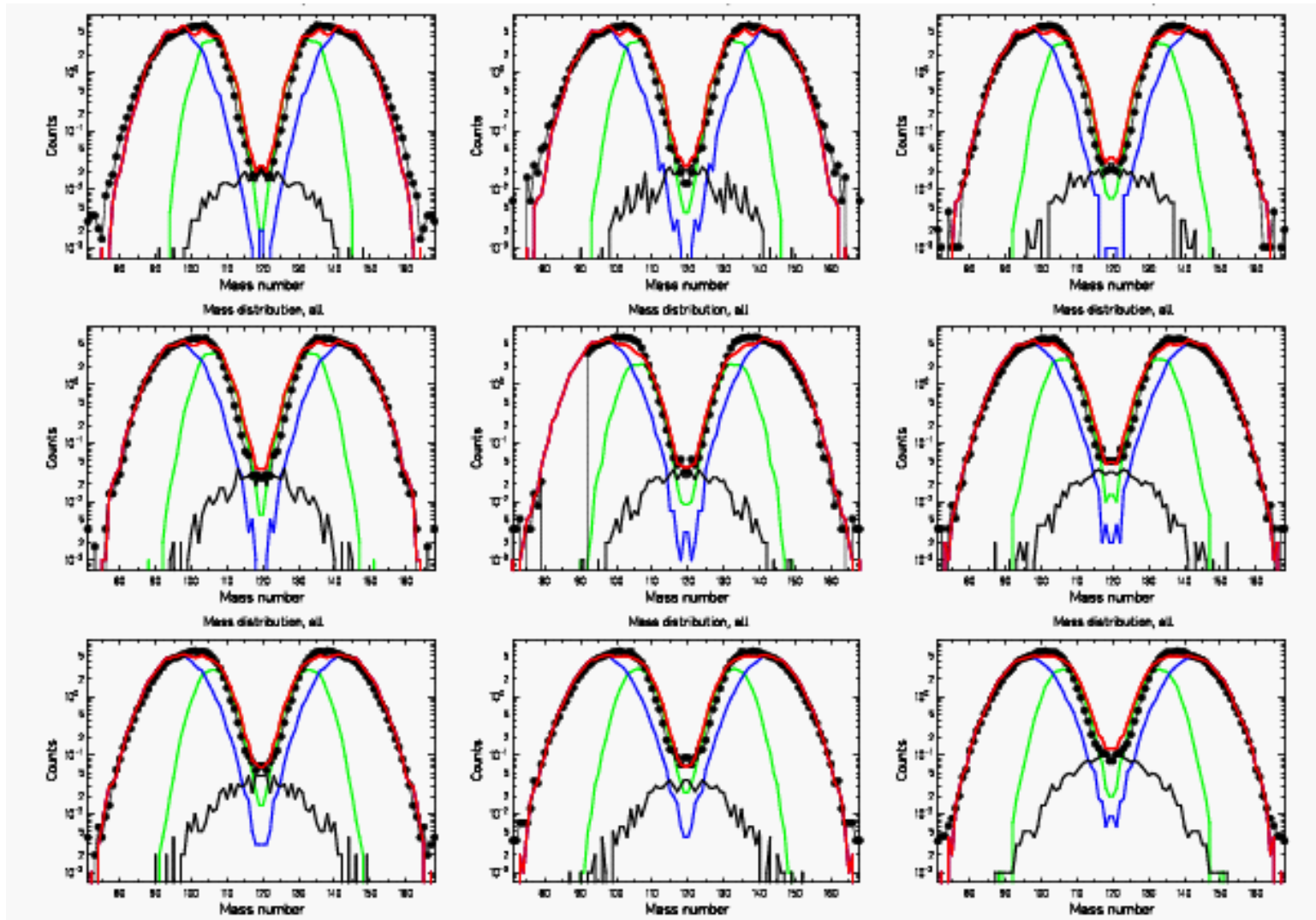
^{232}Th



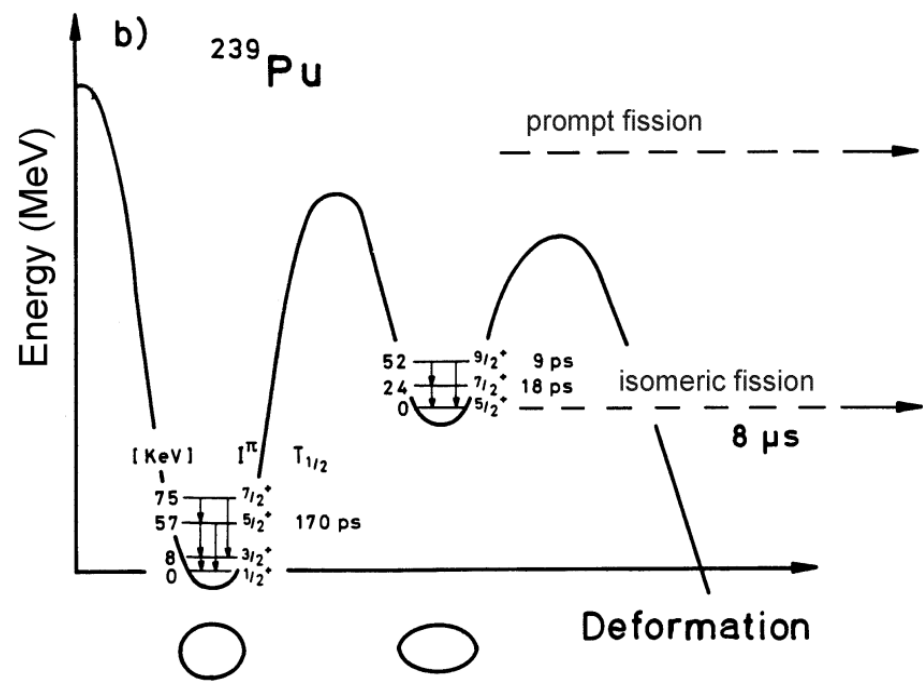
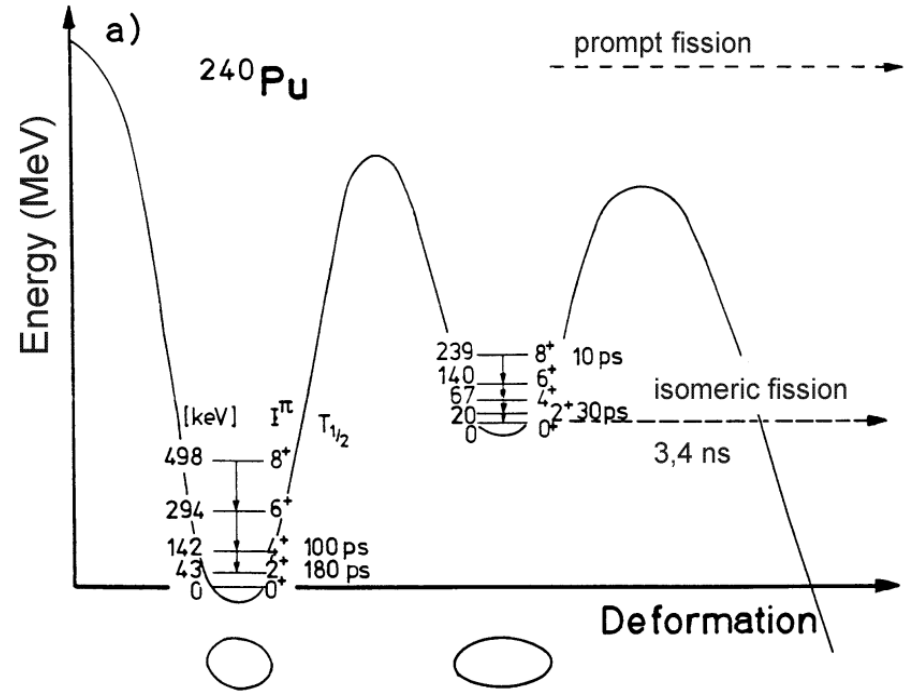
Fission fragment modes

Data - F. Vives et al, Nucl. Phys. A662 (2000) 63;

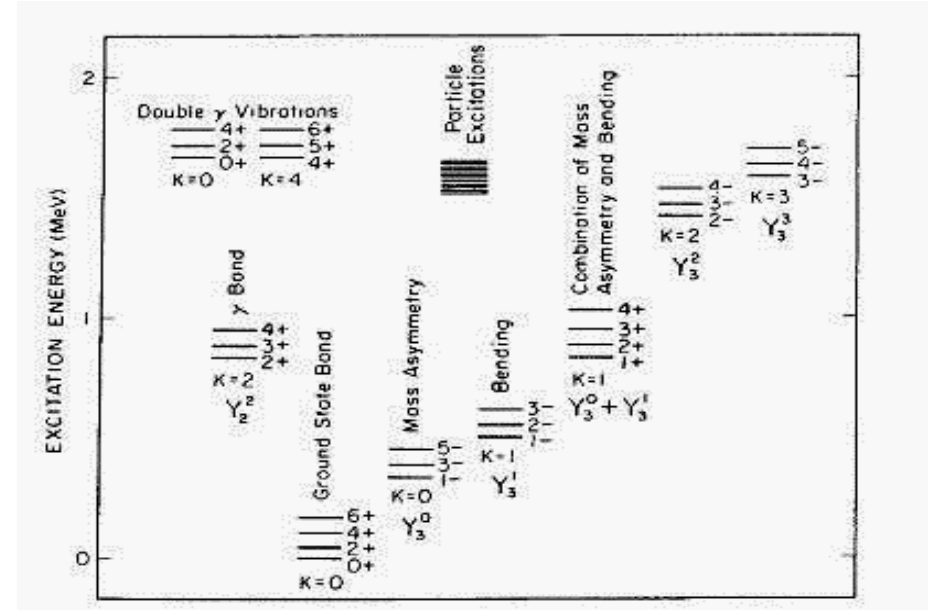
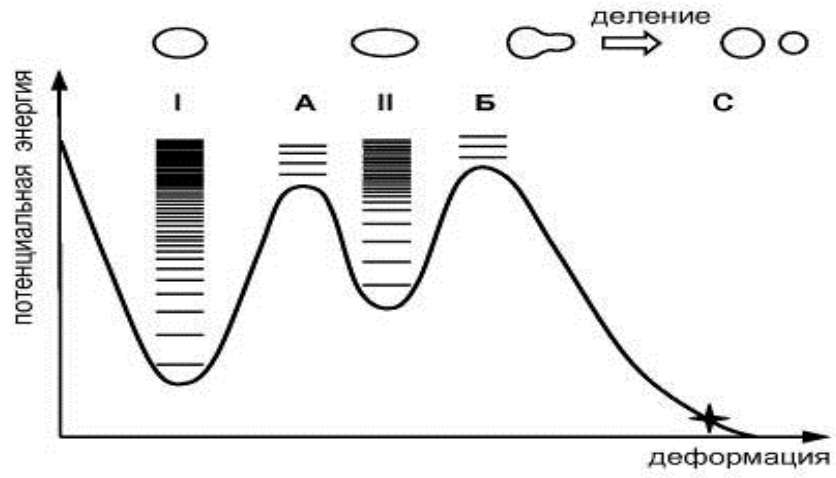
Lines - Model calculations



$$Y_{sym}(A) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \exp\left[-\left(\frac{A-A_0/2}{\sigma}\right)^2\right]; \quad Y_{asym}(A) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \exp\left[-\left(\frac{A-A_a}{\sigma}\right)^2\right] + \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \exp\left[-\left(\frac{A-(A_0-A_a)}{\sigma}\right)^2\right]$$



Fission isomers



Існують різні більш точні підходи до опису процесу поділу

- Thomas-Fermi + Strutinsky Shell Corrections
- Extended Thomas-Fermi + Strutinsky Shell Corrections
- Hartree-Fock and Hartree-Fock-Bogoliubov
- Relativistic Mean Field Theory

Thomas-Fermi approach

Thomas, L. H. (1927). "The calculation of atomic fields". Proc. Cambridge Phil. Soc. 23 (5): 542-548.

Fermi, Enrico (1927). "Un Metodo Statistico per la Determinazione di alcune Proprieta dell'Atomo". Rend. Accad. Naz. Lincei 6: 602-607.

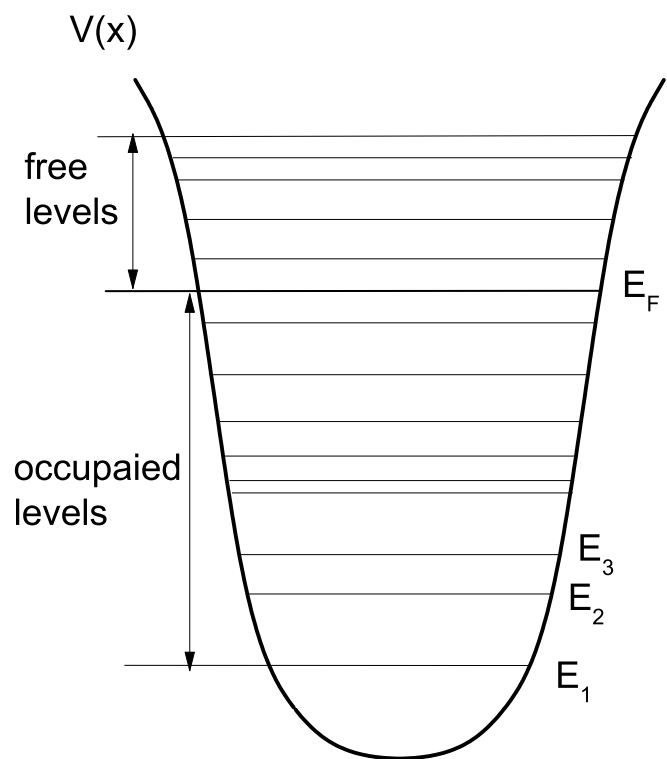
Томас-Фермівській підхід - статистичний підхід для ферміонів на основі наступних припущень:

⇒ Усі найнижчі рівні до рівня Фермі та включаючи рівень Фермі, займають частинки.

⇒ Дві частинки зі спіновим $1/2$ займають кожен рівень.

⇒ Відповідна функція розділу - $\Theta(E_F - E_i)$, де E_i - енергія одночастинкового рівня в системі, E_F - рівень Фермі,

$$\Theta(E_F - E_i) = \begin{cases} 1 & \text{if } E_F \geq E_i, \\ 0 & \text{if } E_F < E_i. \end{cases}$$



Енергія ферміонної системи є

$$E = \sum_i E_i \Theta(E_F - E_i) = \sum_i E_i n(E_i),$$

де $n(E_i) = \Theta(E_F - E_i)$ є функцією розподілу частинок за енергією.

Кожен квантовий стан заповнює комірку фазового простору

$$\delta x \delta p = 2\pi\hbar.$$

Тому число станів, яке пов'язане з коміркою фазового простору, є

$$\frac{\delta x \delta p}{2\pi\hbar}.$$

Якщо взяти до уваги спин ферміона $1/2$ і тому два ферміони можуть займати один і той же рівень, то

$$2 \frac{\delta x \delta p}{2\pi\hbar}.$$

Густина частинок у об'ємі є

$$\rho = \frac{\text{number of states}}{\delta x \delta y \delta z} = 2 \times \text{the sum on all momentums} \frac{\delta p_x \delta p_y \delta p_z}{(2\pi\hbar)^3}$$

або у інтегральній формі

$$\rho = 2 \times \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} n(p).$$

Тут $n(p) = \Theta(p_F - p)$ - функція розподілу, $E_F = \frac{p_F^2}{2m}$ - імпульс Фермі, $E = \frac{p^2}{2m}$ і m - ферміонна маса. Ми отримуємо

$$\rho = 2 \times \int d\Omega \int dp \frac{p^2}{(2\pi\hbar)^3} \Theta(p_F - p) = 2 \times \int d\Omega \frac{p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} = 2 \times 4\pi \frac{p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Густина енергії ферміонної системи становить

$$\mathcal{E} = 2 \times \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} n(p) \frac{p^2}{2m} = 2 \times \int d\Omega \frac{p_F^5}{10m(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^5}{10\pi^2 \hbar^3 m}.$$

Використав $p_F = (3\pi^2\hbar^3\rho)^{1/3}$ ми можемо легко знайти співвідношення між густиною енергії та густиною частинок

$$\mathcal{E} = \frac{(3\pi^2\hbar^3\rho)^{5/3}}{10\pi^2\hbar^3} = \frac{3^{5/3}\pi^{4/3}}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{5/3}.$$

Це добре відоме співвідношення Томаса-Фермі між густиною енергії та густиною частинок. Цей вираз застосовується в різних галузях фізики як твердому тілі, атомної та ядерної фізиці.

Функціонал густини енергії

$$\mathcal{E}[\rho_p(\vec{r}), \rho_n(\vec{r})] = \frac{\hbar^2}{2m} [\tau_p(\vec{r}) + \tau_n(\vec{r})] + \mathcal{V}(\vec{r}),$$

де m - маса нуклона. Вирази для протонних τ_p та нейтронів τ_n функцій густини кінетичної енергії враховують корекції порядку \hbar^2 . Функціонал густини потенціальної енергії розпадається на частини Скірмовську та кулонівську (прямі та обмінні)

$$\mathcal{V}(\vec{r}) = \mathcal{V}_{\text{Skyrme}}(\vec{r}) + \mathcal{V}_{\text{Coul}}(\vec{r}).$$

Вирази для протонної τ_p та нейтронної густин кінетичної енергії, які враховують члени з \hbar^2 , (розширене Томас-Фермієвське наближення) є

$$\begin{aligned} \tau_{p(n)}(\vec{r}) = & \frac{3}{5}(3\pi^2)^{2/3} \rho_{p(n)}^{5/3} + \frac{1}{36} \frac{(\nabla \rho_{p(n)})^2}{\rho_{p(n)}} + \frac{1}{3} \Delta \rho_{p(n)} - \frac{1}{12} \rho_{p(n)} \left(\frac{\nabla f_{p(n)}}{f_{p(n)}} \right)^2 \\ & + \frac{1}{6} \frac{\nabla \rho_{p(n)} \nabla f_{p(n)} + \rho_{p(n)} \Delta f_{p(n)}}{f_{p(n)}} + \frac{\rho_{p(n)}}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{W_0}{2} \frac{2\nabla \rho_{p(n)} + \nabla \rho_{n(p)}}{f_{p(n)}} \right)^2, \end{aligned}$$

де

$$f_{p(n)}(\vec{r}) = 1 + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{3t_1 + 5t_2}{16} + \frac{t_2 x_2}{4} \right) \rho_{p(n)}(\vec{r}).$$

Функціонал густини енергії Скірма

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\text{Skyrme}} \vec{r} = & \frac{t_0}{2} \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_0\right) \rho^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) (\rho_p^2 + \rho_n^2) \right] + \frac{1}{12} t_3 \rho^\alpha \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_3\right) \rho^2 - \left(x_3 + \frac{1}{2}\right) (\rho_p^2 + \rho_n^2) \right] \\ & + \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) + t_2 \left(1 + \frac{1}{2}x_2\right) \right] \tau \rho + \frac{1}{4} \left[t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2}\right) - t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2}\right) \right] (\tau_p \rho_p + \tau_n \rho_n) \\ & + \frac{1}{16} \left[3t_1 \left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) - t_2 \left(1 + \frac{1}{2}x_2\right) \right] (\nabla \rho)^2 - \frac{1}{16} \left[3t_1 \left(x_1 + \frac{1}{2}\right) + t_2 \left(x_2 + \frac{1}{2}\right) \right] (\nabla \rho_n)^2 + (\nabla \rho_p)^2 \\ & - \frac{W_0^2}{4} \frac{2m}{\hbar^2} \left[\frac{\rho_p}{f_p} (2\nabla \rho_p + \nabla \rho_n)^2 + \frac{\rho_n}{f_n} (2\nabla \rho_n + \nabla \rho_p)^2 \right]. \end{aligned}$$

$t_0, t_1, t_2, x_0, x_1, x_2, \alpha$ and W_0 - параметри сил Скірмовських сил, останній доданок - це спіно-орбітальна взаємодія, яке отримано у наближенні \hbar^2 .

Густина функціонала кулонівської енергії є сума прямих та обмінних доданків

$$\mathcal{V}_{\text{Coul}}(\vec{r}) = \frac{e^2}{2} \rho_p(\vec{r}) \int \frac{\rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' - \frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} (\rho_p(\mathbf{r}))^{4/3}.$$

Розглянемо систему частинок N , які взаємодіють двочастковою взаємодією $v_{i,j}$. Гамільтоніан системи має форму

$$H = T + V = \sum_{i=1}^N t_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^N v_{ij} = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^N v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j).$$

Цей Гамільтоніан описує систему багатьох тіл. Відповідне рівняння Шредінгера - це система сильно зв'язаних рівнянь N .

Розгляд багатьох нуклонів у ядрах позначається на труднощах:

- Застосувати динамічні рівняння для кожного нуклона в ядрах важко, тому що кількість нуклонів у ядрах занадто велика.
- Застосувати статистичні рівняння для ядер важко, тому що кількість нуклонів у ядрах занадто мала для статистичного підходу.
- Взаємодія між нуклоном є сильною, складною і коротко-діюча.

Тому необхідно застосувати приблизну теорію.

Наближення Хартрі

Наближення Хартрі (1927): Стан будь-якої окремої частинки складної системи багатьох тіл визначається самоузгодженим потенціалом, сформованим взаємодією цієї частинки з усіма іншими частинками.

Давайте запропонуємо це

1) Одночастинкове рівняння Шредінгера для кожної частинки має вигляд

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) \psi_i(\vec{r}_i) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_i),$$

де ψ_i та V_i - хвильова функція та власний самоузгоджений потенціал для частинок i відповідно і хвильові функції підпорядковуються умові нормалізації $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$;

2) хвильова функція загальної системи частинок N визначається як

$$\Psi = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \psi_3(\vec{r}_3) \dots \psi_N(\vec{r}_N).$$

Тоді повна енергія системи

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{d\vec{r}_i} \right)^2 | \psi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^N \langle \psi_i \psi_j | v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) | \psi_i \psi_j \rangle.$$

Хвильову функцію можна визначити, використовуючи варіаційний принцип

$$\delta \left(\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle \right) = 0,$$

де ε_i - коефіцієнти Лагранжа, пов'язані з умовою нормалізації $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$. Варіації виконуються на функціях ψ_i . Зауважте, що

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \delta \Psi | H | \Psi \rangle + \langle \Psi | H | \delta \Psi \rangle .$$

Ψ є складною функцією, тому ми можемо змінювати реальну та уявну частину незалежно, що еквівалентно виконувати варіації на $|\psi\rangle$ та $\langle\psi|$ незалежно.

Беручи варіацію, ми отримуємо рівняння Шредингера

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{d\vec{r}_i} \right)^2 \psi_i + \sum_{j=1, i \neq j}^N \langle \psi_j | v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) | \psi_j \rangle \psi_i - \varepsilon_i \psi_i = 0.$$

Самоузгоджений потенціал для частинок i є

$$V_i(\vec{r}_i) = \sum_{j=1, i \neq j}^N \langle \psi_j | v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) | \psi_j \rangle .$$

Наближення Хартри-Фока

У 1930 р. В. А. Фок незалежно вказав, що метод Хартрі не дотримується принципу антисиметрії хвильової функції.

Було показано, що детермінант Слейтера (детермінант одночастинкових хвильових функцій, який вперше було використано Гейзенбергом та Діраком у 1926 році) задовольняє антисиметричну умову.

Правильна хвильова функція всієї системи N ферміонів є

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \psi_1(\vec{r}_3) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \psi_2(\vec{r}_3) & \dots & \psi_2(\vec{r}_N) \\ \psi_3(\vec{r}_1) & \psi_3(\vec{r}_2) & \psi_3(\vec{r}_3) & \dots & \psi_3(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \psi_N(\vec{r}_2) & \psi_N(\vec{r}_3) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}.$$

Тут хвильова функція $\psi_i(\vec{r}_i) = \varphi_i(\vec{r}_i) \chi_i$ містить просторову $\varphi_i(\vec{r}_i)$ та спинову χ_i частки.

Наприклад, для системи двох частинок

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_2(\vec{r}_1)\psi_1(\vec{r}_2)].$$

Антисиметрична умова виконується $\Psi(\psi_1(\vec{r}_1), \psi_2(\vec{r}_2)) = -\Psi(\psi_2(\vec{r}_2), \psi_1(\vec{r}_1))$ завдяки антикомутаційному відношенню до фермі-частинок $\psi_i(\vec{r}_i)\psi_j(\vec{r}_j) + \psi_j(\vec{r}_j)\psi_i(\vec{r}_i) = \delta_{ij} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$

Рівняння Шредінгера для визначення хвильових функцій та власних значень енергії частинок ε_i дорівнює

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{d\vec{r}_i} \right)^2 \psi_i(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left[\left(\int d^3r_j \psi_j^*(\vec{r}_j) v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi_j(\vec{r}_j) \right) \psi_i(\vec{r}_i) - \int d^3r_j \psi_j^*(\vec{r}_j) v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi_j(\vec{r}_i) \psi_i(\vec{r}_j) \right] - \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_i) = 0.$$

Зверніть увагу, що індекс I описує квантове число стану та спіновий стан.

Ми можемо переписати це рівняння у вигляді

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{d\vec{r}_i} \right)^2 \psi_i(\vec{r}_i) + V_d(\vec{r}_i) \psi_i(\vec{r}_i) + \int d^3r_j V_{ex}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi_i(\vec{r}_j) - \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_i) = 0,$$

де

$$V_d(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^N \int d^3r_j \psi_j^*(\vec{r}_j) v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi_j(\vec{r}_j)$$

є прямий самоузгоджений потенціал,

$$V_{ex}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = - \sum_{j=1}^N \psi_j^*(\vec{r}_j) v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi_j(\vec{r}_i)$$

є обмінний самоузгоджений потенціал.

У випадку взаємодії з кінцевим радіусом дії прямий потенціал $V_d(\vec{r}_i)$ є локальним, тоді як обмінний потенціал $V_{ex}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ є нелокальним.

Якщо обмінна нуклон-нуклонна взаємодія має нульовий радіус дії, то $v_{i,j}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = v_0 \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ та обмінний

потенціал, і рівняння Шредінгера є локальними

$$V_{ex}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = -v_0 \sum_{j=1}^N \psi_j^*(\vec{r}_i) \psi_j(\vec{r}_i)$$

та рівняння Шредінгера є локальним

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{d\vec{r}_i} \right)^2 \psi_i(\vec{r}_i) + V_d(\vec{r}_i) \psi_i(\vec{r}_i) - v_0 \left(\sum_{j=1}^N \psi_j^*(\vec{r}_i) \psi_j(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) - \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_i) = 0,$$

Висновок: Наближення Хартрі-Фока - це мікроскопічний підхід до розгляду багатферміонних систем, заснований на хвильових функціях та ферміон-ферміонному потенціалі.

Сили Скірма.

Нуклон-нуклоні сили Скірма

$$\begin{aligned} v_{\text{Skyrme}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) && \text{central term} \\ & + \frac{1}{2} t_1 (1 + x_1 P_\sigma) [\vec{\mathbf{P}}^{\leftarrow 2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\mathbf{P}}^{\rightarrow 2}] \\ & + t_2 (1 + x_2 P_\sigma) \vec{\mathbf{P}}^{\leftarrow} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\mathbf{P}}^{\rightarrow} && \text{non - local term} \\ & + \frac{1}{6} t_3 \rho^\alpha \left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) (1 + x_3 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) && \text{density - dependent term} \\ & + i W_0 \left[\vec{\mathbf{P}}^{\leftarrow} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\mathbf{P}}^{\rightarrow} \right] (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) && \text{spin - orbit term} \end{aligned}$$

де $P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) = \frac{1}{2} \left(1 + 2(\vec{S}^2 - \vec{s}_1^2 - \vec{s}_2^2) \right) = S(S - 1) - 1 = \begin{cases} 1, & \text{for } S = 1 \\ -1, & \text{for } S = 0 \end{cases}$, $\mathbf{P} = \frac{1}{2i}[\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2]$,

$t_0, t_1, t_2, x_0, x_1, x_2, \alpha$ та W_0 є параметрами сил Скірма.

Взаємодія Скірма має нульовий радіус дії!

Функціонал густини енергії

$$\mathcal{E}[\rho_p(\vec{r}), \rho_n(\vec{r})] = \frac{\hbar^2}{2m}[\tau_p(\vec{r}) + \tau_n(\vec{r})] + \mathcal{V}(\vec{r}),$$

where m is the nucleon mass, $\tau_p = \sum_{i=1}^Z |\vec{\nabla}\psi_\alpha|^2$ and $\tau_n = \sum_{i=1}^N |\vec{\nabla}\psi_\alpha|^2$ є протонні та нейтронні кінетичні енергії.

Функціонал густини енергії розпадається на два доданка потенціальної енергії (Скирмовську та кулонівську частини)

$$\mathcal{V}(\vec{r}) = \mathcal{V}_{\text{Skyrme}}(\vec{r}) + \mathcal{V}_{\text{Coul}}(\vec{r}).$$

Скирмовська частина функціоналу густини енергії

$$\mathcal{V}_{\text{Skyrme}}(\vec{r}) = \mathcal{V}_0 + \mathcal{V}_3 + \mathcal{V}_{eff} + \mathcal{V}_{fin} + \mathcal{V}_{so} + \mathcal{V}_{sg},$$

де

$$\mathcal{V}_0 = \frac{t_0}{2}[(1 + \frac{1}{2}x_0)\rho^2 - (x_0 + \frac{1}{2})(\rho_p^2 + \rho_n^2)]$$

є доданок нульового радіусу дії,

$$\mathcal{V}_3 = \frac{1}{12}t_3\rho^\alpha[(1 + \frac{1}{2}x_3)\rho^2 - (x_3 + \frac{1}{2})(\rho_p^2 + \rho_n^2)]$$

є залежний від густини внесок (сучасні значення $\alpha = 1$, or $\frac{1}{3}$ or $\frac{1}{6}$),

$$\mathcal{V}_{eff} = \frac{1}{4}[t_1(1 + \frac{1}{2}x_1) + t_2(1 + \frac{1}{2}x_2)]\tau\rho + \frac{1}{4}[t_2(x_2 + \frac{1}{2}) - t_1(x_1 + \frac{1}{2})](\tau_p\rho_p + \tau_n\rho_n)$$

є доданок з ефективної маси,

$$\mathcal{V}_{fin} = \frac{1}{16} [3t_1(1 + \frac{1}{2}x_1) - t_2(1 + \frac{1}{2}x_2)] (\nabla \rho)^2 - \frac{1}{16} [3t_1(x_1 + \frac{1}{2}) + t_2(x_2 + \frac{1}{2})] (\nabla \rho_n)^2 + (\nabla \rho_p)^2$$

є доданок залежний від скінченності системи,

$$\mathcal{V}_{so} = \frac{1}{2} W_0 (\vec{J} \vec{\nabla} \rho + \vec{J}_p \vec{\nabla} \rho_p + \vec{J}_n \vec{\nabla} \rho_n)$$

є спин-обертальний внесок та

$$\mathcal{V}_{sg} = -\frac{1}{16} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \vec{J}^2 + \frac{1}{16} (t_1 - t_2) (\vec{J}_p^2 + \vec{J}_n^2)$$

є доданок, пов'язаний з тензорною зв'язкою між спином і градієнтом.

Функціонал використовує звичайну густину частинок $\rho_q = \sum_i n_i |\psi_i|^2$, $\rho = \rho_p + \rho_n$, та спин-обертальну густину $\vec{J}_q = \sum_i \psi_i^+ \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} \psi_i$, де ψ_i - одночастинкові хвильові функції, а q означає протони або нейтрони.

Кулонівський функціонал густини енергії має прямий та обмінний доданки

$$\mathcal{V}_{Coul}(\vec{r}) = \frac{e^2}{2} \rho_p(\vec{r}) \int \frac{\rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' - \frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} (\rho_p(\vec{r}))^{4/3}.$$

Параметризація сил Скірма

Параметри сил Скірма.

Force	t_0	t_1	t_2	t_3	x_0	x_1	x_2	x_3
SkM*	-2645.0	410.0	-135.0	15595.0	0.090	0.0	0.0	0.0
skT6	-1794.2	294.0	-294.0	12817.0	0.392	-0.5	-0.5	0.5
sLy4	-2488.913	486.818	-546.395	13777.0	0.8340	-0.3438	-1.0	1.3540
skI1	-1913.619	439.809	2697.594	10592.267	-0.954536	-5.782388	-1.287379	-1.561421
skI3	-1762.88	561.608	-227.090	8106.2	0.3083	-1.1722	-1.0907	1.2926
skI4	-1855.827	473.829	1006.855	9703.607	0.405082	-2.889148	-1.325150	1.145203
skP	-2931.70	320.618	-337.409	18708.96	0.29215	0.65318	-0.53732	0.18103
skO	-2103.653	303.352	791.674	13553.252	-0.210701	-2.810752	-1.461595	-0.429881
skO'	-2099.419	301.531	154.781	13526.464	-0.029503	-1.325732	-2.323439	-0.147404

5. Сили Гони.

Сили Гони є сили кінцевого радіусу дії.

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{i=1}^2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / \mu_i^2} [W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau] \\ + iW_0(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)\vec{k} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\vec{k} + t_3(1 + P_\sigma)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\rho^{1/3}\left(\frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)\right) \\ p_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2) = \frac{1}{2}\left(1 + 2(\vec{S}^2 - \vec{s}_1^2 - \vec{s}_2^2)\right) = S(S - 1) - 1 = \begin{cases} 1, & \text{for } S = 1 \\ -1, & \text{for } S = 0 \end{cases}$$

де

i	μ_i fm	W_i	B_i	H_i	M_i MeV	W_0 MeV fm ⁵	t_0 MeV fm ⁴
1	0.7	-402.4	-100	-496.2	-23.56	115	1350
2	1.2	-21.30	-11.77	37.27	-68.81		

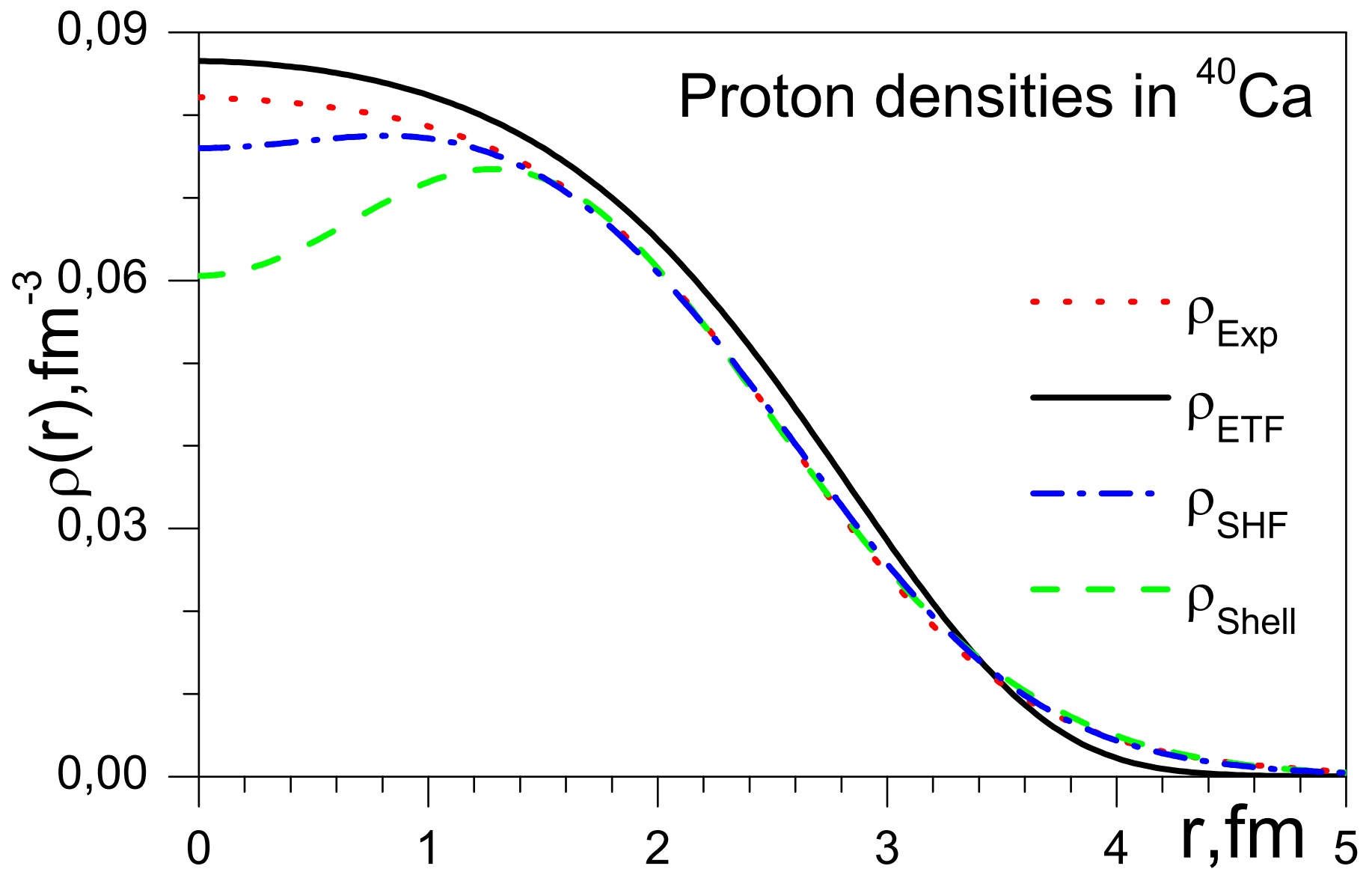
Рівняння Шредингера для моделі HF+Skyrme.

У наближенні Хартрі-Фока одночастинкові хвильові функції та відповідні їм енергії отримують із самоузгодженого рівняння:

$$\left\{ -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m_q^*(r)} \vec{\nabla} + U_q(\vec{r}) + \delta_{q,prot} U_{Coul}(\vec{r}) - i\vec{W}_q(\vec{r})(\vec{\nabla} \times \sigma) - e_i \right\} \phi_i^q(\vec{r}, s) = 0$$

де $q = \text{protons, neutrons}$,

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m_q^*(r)} &= \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{4}[t_1(1 + x_1/2) + t_2(1 + x_2/2)]\rho(\vec{r}) - \frac{1}{4}[t_1(1/2 + x_1) + t_2(1/2 + x_2)]\rho_q(\vec{r}), \\ U_q(\vec{r}) &= t_0[(1 + x_0/2)\rho(\vec{r}) - (1/2 + x_0)\rho_q(\vec{r})] \\ &+ \frac{1}{12}t_3 \left\{ (1 + x_3/2)(2 + \alpha)\rho^{\alpha+1}(\vec{r}) - (x_3 + 1/2) [2\rho^\alpha(\vec{r})\rho_q(\vec{r}) + \alpha\rho^{\alpha-1}(\vec{r})(\rho_p^2(\vec{r}) + \rho_n^2(\vec{r}))] \right\} \\ &+ \frac{1}{4}[t_1(1 + x_1/2) + t_2(1 + x_2/2)]\tau + \frac{1}{4}[t_2(x_2 + 1/2) - t_1(x_1 + 1/2)]\tau_q \\ &+ \frac{1}{8}[t_2(1 + x_2/2) - 3t_1(1 + x_1/2)]\nabla^2\rho(\vec{r}) + \frac{1}{8}[3t_1(x_1 + 1/2) + t_2(x_2 + 1/2)]\nabla^2\rho_q(\vec{r}) \\ &+ \frac{1}{8}(t_1 - t_2)\vec{J}_q - \frac{1}{8}(t_1x_1 + t_2x_2)\vec{J}, \\ \vec{W}_q(\vec{r}) &= \frac{1}{2}W_0(\vec{\nabla}\rho(\vec{r}) + \vec{\nabla}\rho_q(\vec{r})), \quad U_{Coul}(\vec{r}) = \frac{e^2}{2}\rho_p(\vec{r}) \int \frac{\rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' - \frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} (\rho_p(\vec{r}))^{4/3}, \\ \tau_q(\vec{r}) &= \sum_{i=1,s}^{N_q} \left| \vec{\nabla} \psi_i^q(\vec{r}, s) \right|^2, \quad \vec{J}_q(\vec{r}) = \sum_{i=1,s,s'}^{N_q} \psi_i^{q*}(\vec{r}, s') \vec{\nabla} \psi_i^q(\vec{r}, s) \times \langle s' | \vec{\sigma} | s \rangle. \end{aligned}$$



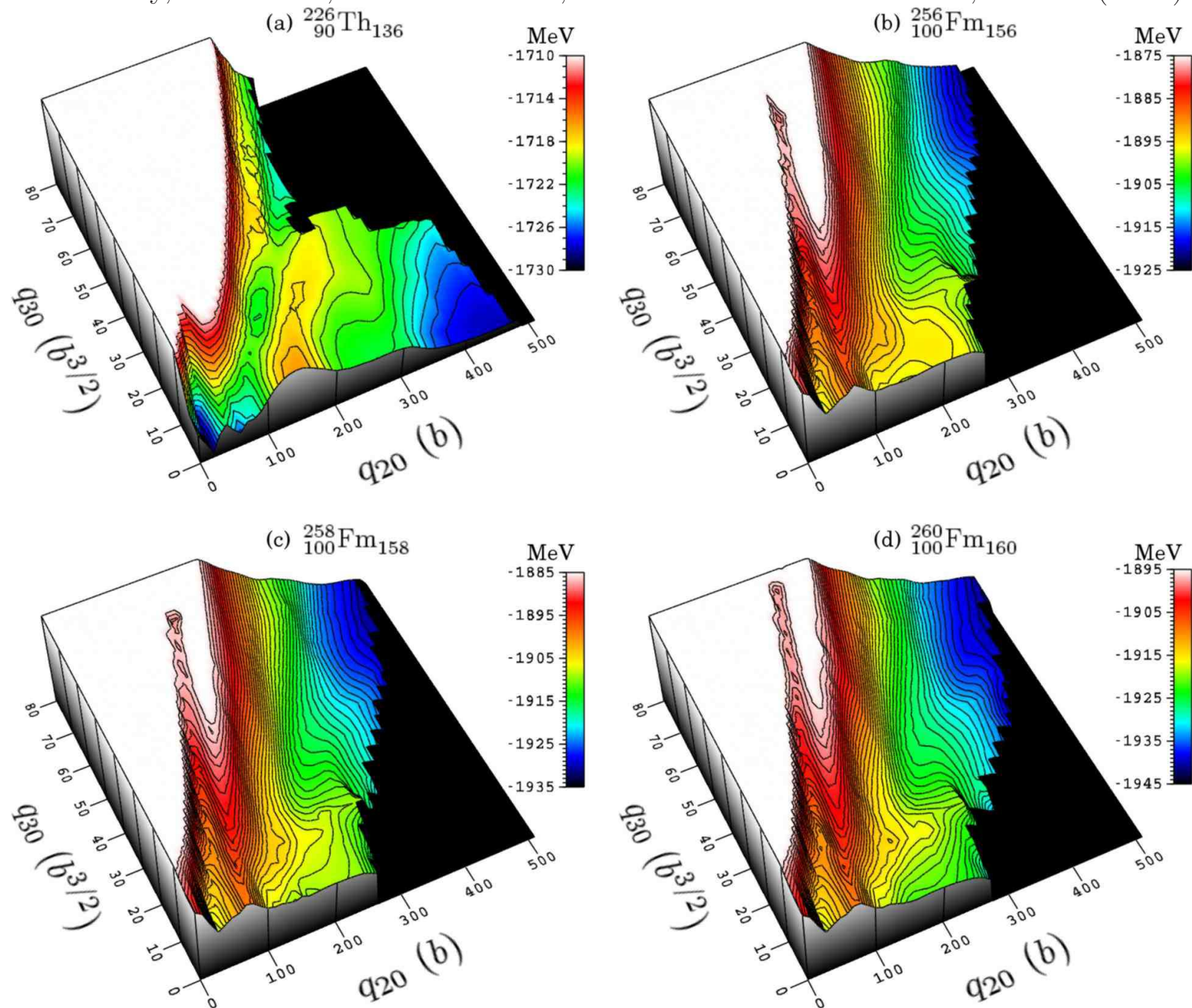
Розподіл густини, енергія зв'язку, зарядові середньо-квадратичного радіуси, структура одночастинних рівнів поблизу енергії Фермі добре описані в рамках ХФ.

Енергія зв'язку та зарядові середньо-квадратичного радіуси.

Nucleus	Binding energy, MeV		RMS charge radii, fm	
	SkM*	exp	SkM*	exp
^{16}O	131.5	127.6	2.79	2.73
^{40}Ca	347.9	342.1	3.50	3.49
^{48}Ca	428.1	416.0	3.52	3.48
^{56}Ni	495.1	484.0	3.75	3.75
^{90}Zr	796.6	783.9	4.28	4.37
^{140}Ce	1188.0	1172.7	4.88	4.88
^{208}Pb	1652.7	1636.5	5.49	5.50

The constrained Hartree-Fock-Bogoliubov method is used with the Gogny interaction D1S

N. Dubray, H. Goutte, J.-P. Delaroche, PHYSICAL REVIEW C 77, 014310 (2008)



Рівняння для релятивістського середнього поля

Рівняння для релятивістського середнього поля пов'язано з рівнянням Дірака, яке описує взаємодіючі ферміони та мезони. Густина Лагранжіану має наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi}(i\partial - M)\psi + \frac{1}{2}\partial_\mu\sigma\partial^\mu\sigma - U(\sigma) - \frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \\ & \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_\mu\omega^\mu - \frac{1}{4}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}_\mu\vec{\rho}^\mu - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\ & g_\sigma\bar{\psi}\sigma\psi - g_\omega\bar{\psi}\psi\psi - g_\rho\bar{\psi}\vec{\rho}\vec{T}\psi - e\bar{\psi}A\psi \end{aligned} \quad (1)$$

Мезонні поля:

σ - ізоскалярного мезон,

ω - ізоскалярний векторний мезон,

ρ - ізовекторний векторний мезон.

Лагранжіан містить також нелінійне скалярне мезонне поле σ .

$$U(\sigma) = \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + \frac{1}{3}g_2\sigma^3 + \frac{1}{4}g_3\sigma^4 \quad (2)$$

Цей термін важливий для відповідного опису властивостей поверхні. Тензори поля векторних мезонів і електромагнітні поля приймають таку форму:

$$\Omega^{\mu\nu} = \partial^\mu\omega^\nu - \partial^\nu\omega^\mu \quad (3)$$

$$\vec{R}^{\mu\nu} = \partial^\mu\vec{\rho}^\nu - \partial^\nu\vec{\rho}^\mu \quad (4)$$

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \quad (5)$$

Рівняння Дірака для нуклона:

$$\{-i\alpha\nabla + V(\mathbf{r}) + \beta[M + S(\mathbf{r})]\}\psi_i = \varepsilon_i\psi_i, \quad (6)$$

де $V(\mathbf{r})$ є *vector* потенціал:

$$V(\mathbf{r}) = g_\omega\omega_0(\mathbf{r}) + g_\rho\tau_3\rho_0(\mathbf{r}) + e\frac{1 + \tau_3}{2}A_0(\mathbf{r}), \quad (7)$$

та $S(\mathbf{r})$ є *scalar* потенціал:

$$S(\mathbf{r}) = g_\sigma\sigma(\mathbf{r}) \quad (8)$$

та внесок з ефективною масою:

$$M^*(\mathbf{r}) = M + S(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Рівняння Клейна-Гордона для мезонних та електромагнітних полів є:

$$\{-\Delta + m_\sigma^2\}\sigma(\mathbf{r}) = -g_\sigma\rho_s(\mathbf{r}) - g_2\sigma^2(\mathbf{r}) - g_3\sigma^3(\mathbf{r}) \quad (10)$$

$$\{-\Delta + m_\omega^2\}\omega_0(\mathbf{r}) = g_\omega\rho_v(\mathbf{r}) \quad (11)$$

$$\{-\Delta + m_\rho^2\}\rho_0(\mathbf{r}) = g_\rho\rho_3(\mathbf{r}) \quad (12)$$

$$-\Delta A_0(\mathbf{r}) = e\rho_c(\mathbf{r}) \quad (13)$$

Відповідні густини ϵ :

$$\begin{aligned}\rho_s &= \sum_{i=1}^A n_i \bar{\psi}_i \psi_i. \\ \rho_v &= \sum_{i=1}^A n_i \psi_i^+ \psi_i. \\ \rho_3 &= \sum_{p=1}^Z n_i \psi_p^+ \psi_p - \sum_{n=1}^N n_i \psi_n^+ \psi_n. \\ \rho_c &= \sum_{p=1}^Z n_i \psi_p^+ \psi_p.\end{aligned}\tag{14}$$

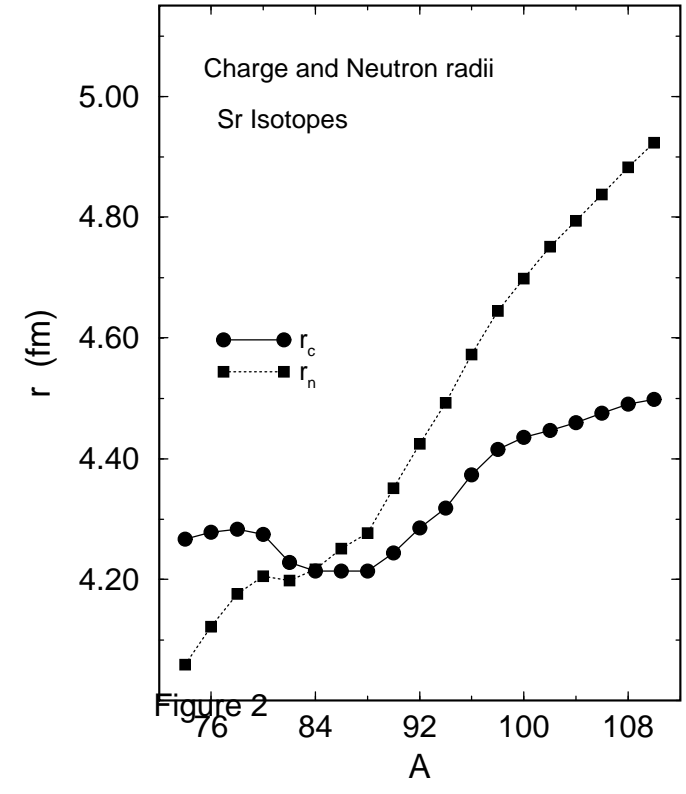
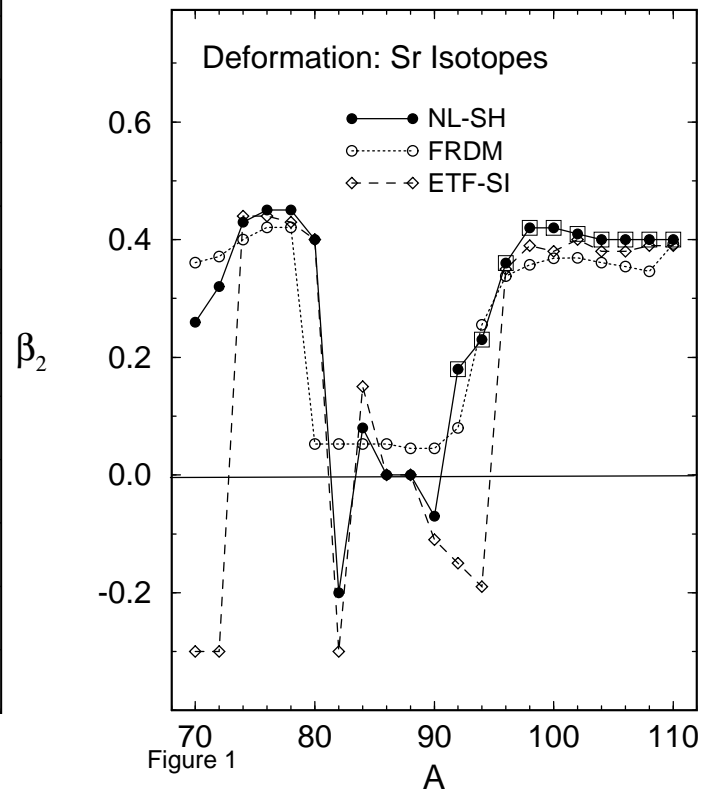
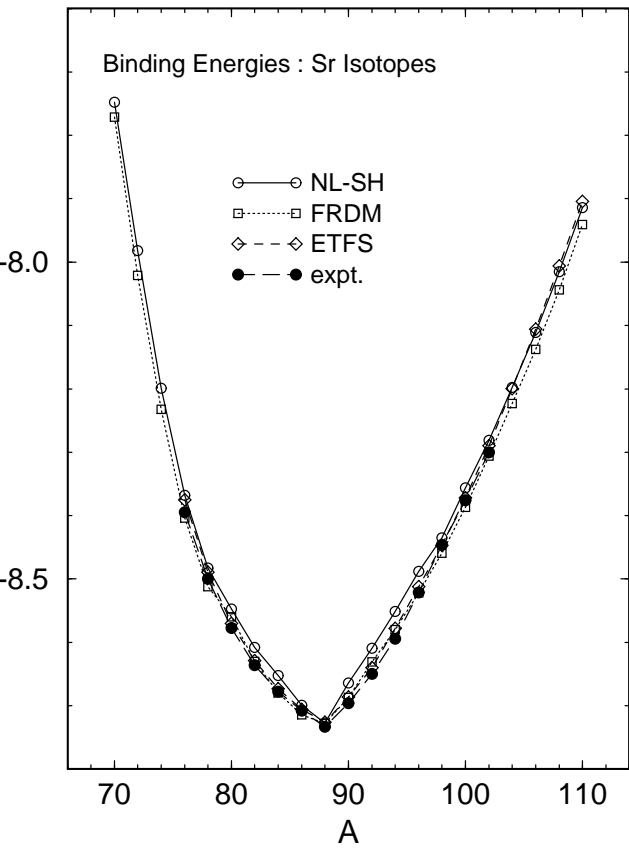
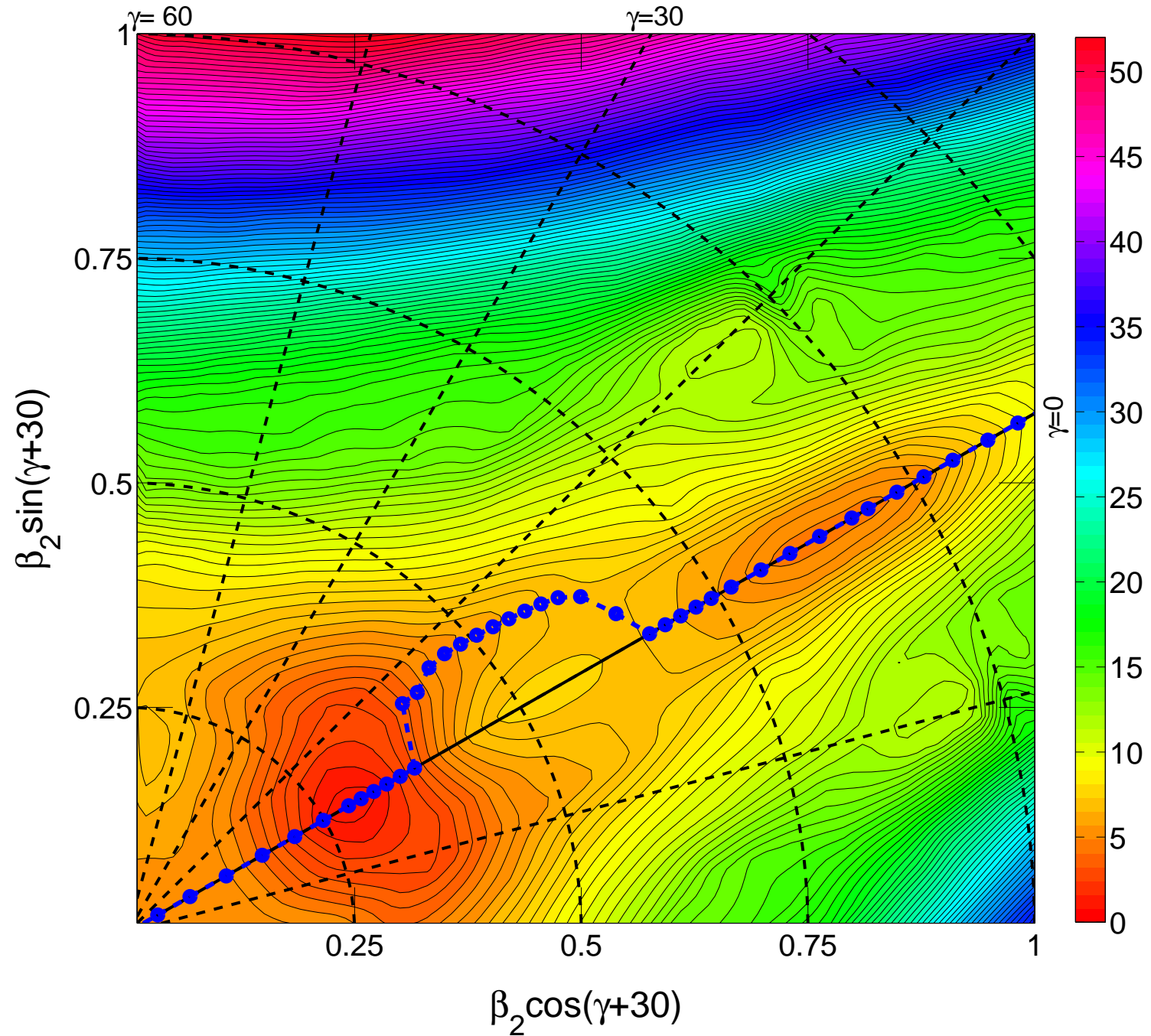
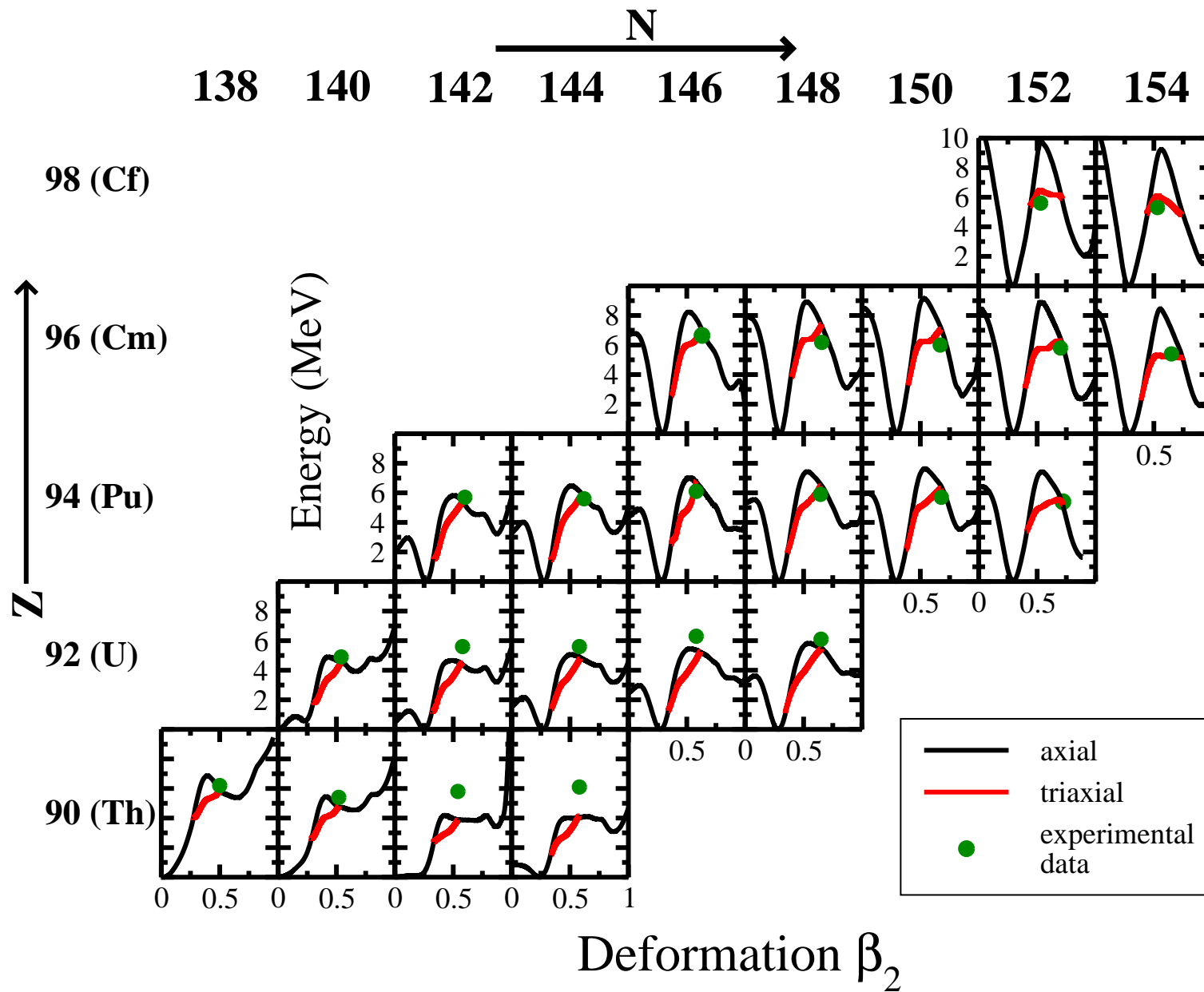


Figure 2

Fig





Дякую за увагу!