

**Севдалина Стоянова Димитрова**

Проблеми на теорията на атомното ядро извън  
приближението на средното поле

Научна специалност  
Шифър 01.03.04 (Ядрена физика)

**ДИ С Е Р Т А Ц И Я**

за получаване на научната степен  
“ДОКТОР НА ФИЗИЧЕСКИТЕ НАУКИ”

София, 2006 г.

# Съдържание

|  |            |
|--|------------|
| <b>Въведение</b>   | <b>4</b>   |
| <b>Глава 1. Многочастична задача в теорията на атомното ядро</b>   | <b>6</b>   |
| <b>Глава 2. Модели на независимите частици</b>   | <b>13</b>  |
| 2.1 Слоест модел – I . . . . .   | 14         |
| 2.2 Метод на Хартри-Фок . . . . .  | 18         |
| 2.3 Приближение на средното поле и нуклон-нуклонните корелации . .   | 25         |
| <b>Глава 3. Нуклон–нуклонни корелации и методи за тяхното описание</b>   | <b>29</b>  |
| 3.1 Корелации на Паули . . . . .   | 30         |
| 3.2 Корелации на сдвояване . . . . .   | 32         |
| 3.2.1 Точно решавем модел на <i>Ричардсън</i> . . . . .  | 33         |
| 3.2.2 Изовекторно сдвояване в обобщения модел на <i>Ричардсън–Годан</i> . . . . .  | 36         |
| 3.2.3 Метод на <i>Хартри–Фок–Боголюбов</i> със сили, зависещи от плътността . . . . .  | 46         |
| 3.3 Дългодействащи корелации . . . . .   | 55         |
| 3.3.1 Метод на генераторната координата . . . . .  | 56         |
| 3.3.2 Слоест модел - II . . . . .  | 61         |
| 3.3.3 Метод на ренормализиращата група на матрицата на плътността . . . . .  | 66         |
| 3.4 Късдействащи корелации . . . . .   | 97         |
| 3.4.1 Метод на <i>Ястров</i> . . . . .   | 97         |
| 3.4.2 Вариационни пресмятания . . . . .  | 107        |
| 3.4.3 Кластерни разложения . . . . .   | 112        |
| <b>Глава 4. Късдействащи корелации в метода на <i>Ястров</i> и влиянието им върху характеристиките на ядрената структура</b> | <b>119</b> |
| 4.1 Аналитичен модел . . . . .   | 120        |

|       |   |     |
|-------|---|-----|
| 4.2   | Едночастична матрица на плътността и едночастични ядрени характеристики . . . . . | 122 |
| 4.2.1 | Дефиниции и свойства на основните едночастични характеристики . . . . .           | 122 |
| 4.2.2 | Представяне на естествените орбитали . . . . .                                    | 132 |
| 4.2.3 | $A$ -представимост на едночастичната матрица на плътността                        | 144 |
| 4.2.4 | Метод за конструиране на корелирана едночастична матрица на плътността . . . . .  | 149 |
| 4.2.5 | Отчитане на късодействащите корелации в модела на независимите частици . . . . .  | 157 |
| 4.3   | Двучастична матрица на плътността и двучастични ядрени характеристики . . . . .   | 160 |
| 4.3.1 | Дефиниции и свойства на основните двучастични характеристики . . . . .            | 162 |
| 4.3.2 | Двучастични ядрени характеристики в рамките на аналитичния модел . . . . .        | 165 |
| 4.3.3 | Резултати . . . . .   | 169 |

**Глава 5. Отчитане на късодействащите корелации при описание на преки реакции** **175**

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 5.1   | Спектрални функции . . . . .                                   | 175 |
| 5.2   | Едночастични функции на припокриване и спектроскопични фактори | 179 |
| 5.3   | Преки реакции с избиване на един нуклон . . . . .              | 186 |
| 5.3.1 | $(e, e'p)$ реакции . . . . .                                   | 186 |
| 5.3.2 | $y$ -скейлинг . . . . .  | 189 |
| 5.3.3 | $(p, d)$ реакции . . . . .                                     | 194 |
| 5.3.4 | $(n, d)$ реакции . . . . .                                     | 201 |
| 5.4   | Двучастични функции на припокриване и спектроскопични фактори  | 205 |

**Основни приноси на дисертацията** **210**

**Приложение 1: Матрични елементи на операторите в  $ph$ -DMRG метода** **214**

**Приложение 2: Полиноми, участващи в израза за едночастичната матрица на плътността** **217**

**Приложение 3: Полиноми, дефиниращи двучастичната матрица на плътността** **222**

|    |  |     |
|----|--|-----|
| .1 | Полиноми, дефиниращи двучастичната матрица на плътността . . . | 222 |
|----|--|-----|

|    |   |            |
|----|---|------------|
| .2 | Полиноми, дефиниращи локалните плътности и импулсни разпределения на двойка частици . . . . . | 223        |
|    | <b>Библиография</b>   | <b>227</b> |
|    | <b>Списък на публикациите, върху които е написана дисертацията</b>                            | <b>243</b> |

## Въведение

Основен проблем в много области на физиката - астрофизиката, физиката на твърдото тяло, ядрената физика, физиката на елементарните частици - е разбирането за природата на взаимодействие между обектите, които формират дадена система. Докато в повечето случаи наблюдаемите величини, характеризиращи глобалните свойства на системите, са добре изучени, то механизмът на взаимодействие между съставните им елементи и произтичащите оттам форми на кластеризация, са обект на засилен интерес сред физическата колегия.

В единия край на пространствената скала съвремените астрофизични изследвания показват например, че материята във Вселена е концентрирана в нишки, които като паяжина обхващат цялото наблюдаемо пространство.

Във физиката на твърдото тяло взаимодействието между частиците в различните системи са основен ключ за разбирането на свойствата на металните кластери, на ултразудените газове, на нискотемпературните свръхпроводници и други материали, върху които се гради технологичното бъдеще на човечеството.

В ядрената физика корелациите между нуклоните в ядрото са обект на интензивни експериментални и теоретични изследвания в последните двадесет години. Те доказват необходимостта от излизане извън рамките на модела на независимите частици и експлицитно отчитане на нуклон-нуклонните корелации. Съществуват различни по вид корелации – корелации на *Паули*, корелации на сдвояване, късодействащи и тензорни корелации, дългодействащи корелации и други, които оказват решаващо влияние при изучаване на природата на ядрените сили.

В другия край на пространствената скала, в теория на елементарните частици, корелациите също играят съществена роля за правилното разбиране на поведението на системи като нуклона например. Приема се, че той изграден от три кварка, но неговият спин може да се опише само, ако се отчита взаимодействието между кварки и глюони.

Настоящата дисертация е посветена на теоретичното изследване на някои видове нуклон-нуклонни корелации и значението им за реалистичното описание на ядрената структура и основни типове ядрени реакции. Представените резултати са получени главно в Лабораторията по теория на атомното ядро на Института

за ядрени изследвания и ядрена енергетика на Българската академия на науките и в сътрудничество с колеги от Гърция, Великобритания, Русия, Белгия, Италия, САЩ и Испания.

Дисертацията включва пет глави. В уводната част е формулирана многочастичната задача в ядрената физика (Глава 1) и са дискутирани резултатите при решаването ѝ в приближение на средното поле (Глава 2). Изложението в Глава 3 е посветено на основните видове нуклон-нуклонни корелации и методите за тяхното изследване. Поради логиката на предмета на дисертацията пак там са представени и два оригинални подхода за описание съответно на взаимодействието на сдвояване на нуклоните и на конфигурационното смесване в рамките на слоестия модел. Изследванията, обсъждани в Глава 4, са посветени на изучаване на късодействащите корелации в четно-четни ядра със затворени слоеве в метода на *Ястров* и на влиянието им върху характеристиките на ядрената структура. Глава 5 е посветена на ролята на корелациите при описание на някои типове преки ядрени реакции. В заключението са приведени основните резултати, представени в дисертационния труд.

Библиографията съдържа цитираните монографии и статии, подредени по появяването им в изложението.

Списъкът с публикациите, върху които е написана дисертацията, се състои от две части. В първата са изброени статиите в научни списания, а във втората - докладите на международни конференции, означени съответно с А и В преди номера. Работите в списъка са подредени в хронологичен ред.

# Глава 1

## Многочастична задача в теорията на атомното ядро

През 1932г. Дж. Чадуик [1], В. Хайзенберг [2] и Д. Иваненко [3] независимо един от друг изказват предположението, че ядрото се състои от два вида частици – протони и неутрони, и с това полагат основите на съвременната ядрена физика. Три десетилетия по-късно Бракнер, Бете и Голдстоун формулират многочастичната задача в квантовата теория на атомното ядро, като постулират, че:

- характеристиките на ядрата и техните реакции при ниски енергии се описват от многочастичното нерелативистично уравнение на Шрьодингер

$$H\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A; t) = i\hbar \frac{\partial\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A; t)}{\partial t}. \quad (1.1)$$

$H$  е хамилтонианът на системата,  $A$  е броят на нуклоните в ядрото,  $x_i = \{\mathbf{r}_i, \sigma_i, \tau_i\}$  са съответно координатата в пространството, спинът и изоспинът на  $i$ -тия нуклон,  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A; t)$  – многочастичната вълнова функция на системата, зависеща от времето  $t$ .

- всички ефекти, свързани със субнуклонните степени на свобода – мезони, нуклонни резонанси, а в днешни дни и кварки и глюони, могат да бъдат отчетени чрез ефективни нуклон–нуклонни сили и хамилтониан от вида:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i \leq A} \nabla_i^2 + \sum_{i < j \leq A} v_{ij} + \sum_{i < j < k \leq A} V_{ijk}. \quad (1.2)$$

Приема се, че дву- и тричастичните нуклон–нуклонни взаимодействия са достатъчни за реалистично описание на ядрените характеристики и сили от по-висок порядък се пренебрегват.

Нека първо разгледаме някои от свойствата на уравнението на Шрьодингер (1.1). То описва най-общо изменението на състоянието на многочастичната система. В представяне на Шрьодингер, в което се предполага, че хамилтонианът на

системата  $H$  не зависи от времето, то може да се интергира формално и многочастичната вълнова функция да се запише във вида:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A; t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} Ht\right) \Psi(x_1, x_2, \dots, x_A; 0), \quad (1.3)$$

където  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A; 0) \equiv \Psi(x_1, x_2, \dots, x_A)$  е вълновата функция в началния момент  $t = 0$ . Обикновено се решава стационарното уравнение на *Шрьодингер*:

$$H \Psi(x_1, x_2, \dots, x_A) = E \Psi(x_1, x_2, \dots, x_A). \quad (1.4)$$

Всяко решение на уравнение (1.1) може да се представи като суперпозиция от съответните решения на стационарното уравнение:

$$\Psi_n(x_1, x_2, \dots, x_A; t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \Psi_n(x_1, x_2, \dots, x_A), \quad (1.5)$$

където  $E_n$  са собствените стойности, а  $\Psi_n(x_1, x_2, \dots, x_A)$  са собствените вектори на хамилтониана, получени при решаването на уравнение (1.4). Решението, което съответства на най-ниската собствена стойност на хамилтониана  $E_0$ , описва основното състояние на системата, а всички останали отговарят на определени възбудени състояния.

Намирането на собствените стойности и собствените вектори на стационарното уравнение на *Шрьогингер* е задача, определена в случай, че многочастичната вълнова функция и първите ѝ производни по координатите на частиците са непрекъснати и ограничени в пространството. В този случай може да се докажат следните твърдения:

- Ако  $E < 0$ , то ур. (1.4) има решения само за определени стойности на  $E$ , образуващи т.н. дискретен спектър. Съответните собствени функции са локализирани в пространството и системата се намира в свързано състояние.
- Ако  $E > 0$ , всяка стойност на  $E$  е собствена стойност на стационарното уравнение, т.е. енергетичният спектър на системата е непрекъснат. Собствените вектори на безкрайност имат поведението на плоски вълни  $\exp(ik_i \cdot r)$ . Това са несвързани състояния на системата, с които се описват процеси на разсейване.

Когато се изучават свързаните състояния на многочастична система, уравнението на *Шрьодингер* (1.4) е еквивалентно на вариационното уравнение:

$$\delta_\Psi E[\Psi] = 0, \quad (1.6)$$

където

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (1.7)$$

и варирането се извършва в пълното Хилбертово пространство  $H^A$ . В повечето случаи това е невъзможно и на практика пробната вълнова функция  $\Psi$  е елемент на определено подпространство на  $H^A$ . Ако точната собствена функция на уравнението (1.4) не е елемент на това подпространство, то решението на вариационното уравнение (1.6) е само приближение на точното решение. Вариационният принцип е особено удобен за описание на основното състояние на многочастични системи, защото за всяка пробна функция  $\Psi$  е в сила строгото неравенство:

$$E[\Psi] \geq E_0, \quad (1.8)$$

където  $E_0$  е най-ниската собствена стойност на хамилтониана на системата.

Вариационният принцип дава възможност за описание не само на основното, но и на възбудените състояния на системата. В този случай при решаване на вариационното уравнение (1.6) се налага условието полученото решение  $\Psi_1$  да е ортогонално на основното състояние  $\Psi_0$ :

$$\langle \Psi_1 | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (1.9)$$

То се отчита чрез добавяне на множител на Лагранж във вариационното уравнение. Очевидно вариационният подход става математически сложен за високо-възбудени състояния, освен в случаите, когато условията за ортогоналност са изпълнени автоматично поради характерните свойства на симетрия на различните състояния.

Вторият основен елемент на многочастичната квантовомеханична задача в теорията на атомното ядро е нуклон-нуклонното взаимодействие. Дългогодишните експериментални и теоретични неговите основни свойства са следните:

- *Силите, които действат между два нуклона са сили на привличане:* най-убедителното доказателство затова е самото съществуване на ядрата като свързани системи от неутрални и положително заредени частици;
- *Действат на малки разстояния:* от данните по нуклон-нуклонно разсейване може да се направи изводът, че радиусът на действие на ядрените сили е от порядъка на няколко ферми ( $1\text{fm} = 10^{-15}\text{m}$ );
- *Зависят от спина на нуклоните:* всички теоретични пресмятания показват, че свързано състояние на деутрона  ${}^2\text{H}$  с квантови числа  $J^\pi = 0^+$  и  $T = 0$  не съществува, а основното му състояние е триплетно, т.е.  $J^\pi = 1^+$  и  $T = 0$ ;

- *Не са централни:* доказателство затова е експерименталният факт, че квадруполният момент на деутрона е различен от нула. Това означава, че двучастичното взаимодействие не е инвариантно по отношение на ротация само в координатното пространство. Най-общият израз за ротационно инвариантен потенциал, независещ от скоростта, има вида:

$$V = V_0(r) + (\sigma_1 \cdot \sigma_2)V_1(r) + S_{12}V_T(r) , \quad (1.10)$$

където

$$S_{12} \equiv \frac{3(\sigma_1 \cdot \mathbf{r})(\sigma_2 \cdot \mathbf{r})}{r^2} - (\sigma_1 \cdot \sigma_2) , \quad (1.11)$$

премия  $T$  а  $S_{12}V_T(r)$  са така наречените тензорни сили.

- *Не зависят от заряда на нуклоните:* това означава, че силите на взаимодействие на двойка протон-протон ( $pp$ ), неутрон-протон ( $np$ ) и неутрон-неутрон ( $nn$ ) са едни и същи в състояние, разрешено от принципа на *Паули*, за всяка една от трите двойки.
- *Имат обменен характер:* това означава, че силата, описваща взаимодействието на две частици, зависи от симетрията на двучастичната вълнова функция - така може да се обясни симетричността спрямо  $\theta = 90^\circ$  на диференциалното сечението на  $np$  разсейването при енергии от порядъка на 100 MeV - четните парциални вълни формират сечението, а приносят на нечетните е пренебрежимо малък.
- *Съществува твърда сърцевина:* до този извод стига пръв Ястров [4], изучавайки фазовото отместване при  $np$  и  $pp$  разсейване. От анализа на експерименталните данни следва, че на разстояние  $r_0 \approx 0.4 \div 0.5\text{fm}$  между два нуклона, наречено радиус на твърдата сърцевина, започва да действа безкрайно голяма сила на отблъскване.
- *Спин-орбиталното взаимодействие е съществено:* без него не може да се обясни силната поляризация на нуклоните в плоскост, перпендикулярна на плоскостта на нуклон-нуклонно разсейване. Затова към централните и тензорни сили трябва да се добави и спин-орбитално взаимодействие  $V = -V_{SO}\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ , където  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  са съответно ъгловият момент и спинът на нуклона. Емпиричните изследвания показват, че спин-орбиталното взаимодействие е късодействащо.

Възможност за единното описание на ядрените сили предлага мезонната теория на нуклон-нуклоните взаимодействия. В широко използваните съвременни потенциали като *Аргон* и *Бон*, например, се разглеждат  $\{\pi, \sigma, \rho, \omega\}$  мезонни полета.  $\pi$

мезоните имат маса около 140 MeV и радиусът им на взаимодействие е от порядъка на  $\hbar c/m \sim (197\text{MeV}\cdot\text{fm})/(140\text{ MeV}) \sim 1.4\text{ fm}$ . Така нареченият еднопионен обмен е доминиращата компонента в дългодействащата част на ядрените сили. Конкретният вид на съответния потенциал  $v^\pi$  е приведен по-нататък в част (3.4.3). Приносът на останалите мезонни полета също се отчита в дългодействащата част на нуклон-нуклонното взаимодействие, въпреки че техните маси надхвърлят 500 MeV. Произходът на късодействащата част на взаимодействието не е добре изучен. Основният проблем е, че радиусът на действие на мезоните, по-тежки от  $\pi$ , е по-малък от размера на нуклона. Затова ядреното взаимодействие на къси разстояния се параметризира, като се фитират експерименталните данни по нуклон-нуклонно разсейване при високи енергии.

Използването само на двучастични сили в нуклон-нуклонното взаимодействие не е достатъчно за описание на съществени експериментални данни. Например, енергията на връзка на ядрото  ${}^3\text{H}$ , пресметната с реалистични двучастични сили е  $-7.6\text{ MeV}$  [5], докато експерименталната стойност е  $-8.48\text{ MeV}$ . Получената равновесна плътност на ядрената материя е по-голяма от оценките, които следват от анализа на експерименталните данни по разсейване на електрони от тежки ядра [6]. Затова е необходимо ядреният хамилтониан да отчита и действието на тричастичните сили. Тричастичното взаимодействие съдържа два члена: двупионен обменен потенциал, чиято константа на взаимодействие се определя така, че да се възпроизвежда експерименталната стойност на енергията на връзка на ядрата  ${}^3\text{H}$  и  ${}^4\text{He}$ , и феноменологичен потенциал на отблъскване, независещ от спина и изоспина на нуклоните, позволяващ да се получи емпиричната стойност на равновесната плътност на ядрената материя. Тричастичното взаимодействие е значително по-слабо от двучастичното, но не може да се разглежда просто като приближение от първа степен към двучастичния потенциал, защото модифицира вида на тензорните сили.

С хамилтониан, съдържащ двучастични и тричастични сили, могат да се опишат с много добра точност характеристиките на основното състояние на ядрото  ${}^4\text{He}$  [7, 8], затова се приема, че не е необходимо да се отчита експлицитно влиянието на четиричастични сили в нуклон-нуклонното взаимодействие.

Многочастичната квантовомеханична задача за описание на атомното ядро не може да бъде решена точно, както поради математическата сложност на проблема, така и поради липсата на адекватна теория за силното взаимодействие. Затова от началото на развитието на теоретичната ядрена физика, вече повече от седемдесет години, се разработват подходи за приближено описание на ядрената структура и ядрените реакции.

Въпреки голямото разнообразие на микроскопични ядрени модели за описание на структурата на ядрата те могат да се групират в три основни направления: 1) *ab initio* модели; 2) подходи, основани на слоестия модел; 3) самосъгласувани методи на средното поле.

Основа на традиционните *ab initio* модели е ефективно взаимодействие, което описва експерименталните данни по нуклон-нуклонно разсейване [9]. Ядрото се разглежда като силно корелирана квантова течност. За решаването на такава задача се изискват сложни многочастични теории като релятивисткият метод на *Бракнер–Хартри–Фок* [10–12] или методи на корелирания базис [13, 14]. Всички тези изследвания дават задоволителни резултати за кривата на насищане на ядрената материя. Както може да се очаква, пресмятанията, при които нуклон-нуклонното взаимодействие е строго изведено от експерименталните данни по разсейване на нуклони, описват качествено свойствата на кривата на насищане, но точно количествено описание може да се получи само, ако се добавят емпирично тричастични сили. Произходът на тричастичното взаимодействие още е спорен проблем, въпреки че се правят опити то да бъде изведено в рамките на квантовата хромодинамика [15, 16]. Доскоро *ab initio* пресмятания са правени само за ядрената материя, но в момента успешно се извършва и моделиране на леки ядра, като най-тежките от тях са  $^{12,13}\text{C}$  и  $^{11}\text{Be}$  [17, 18].

Диаметрално противоположна е идеологията на макроскопичния течнокапков модел на *Майерс и Свиатецки* [19]. В рамките на този модел енергията на основно състояние на ядрото се параметризира в термини на глобални величини като обемна енергия, повърхностна енергия, енергия на асиметрия и т.н. Отчитането на слоестите ефекти става чрез слоести поправки, предложени от *Струтински* [20]. Те се пресмятат на базата на енергийния спектър на някакъв феноменологичен едничастичен потенциал. Параметрите на течнокапковата формула за енергията в така наречените *мик-мак* модели се получават, като се фитира огромно количество експериментални данни. В днешни дни средноквадратичното отклонение на пресметнатите енергии на връзка в течнокапковия модел, сравнени с експерименталните данни за ядра в цялата масова област, е от порядъка на 0.7 MeV [21]. Проблемите в този модел възникват, когато формулата за енергията на връзка трябва да се прилага за екзотични ядра.

Между двете граници на ”микроскопичност”- *ab initio* моделите от една страна и течнокапковия модел от друга, се намират два типа ядрени подходи, които работят на микроскопични ниво, но използват ефективни нуклон-нуклонни взаимодействия, за да преодолеят ограниченията, наложени от направените приближения – ограничено конфигурационно пространство или определен клас на многочастичната вълнова функция:

- Слоестият модел се основа на феноменологичен едночастичен потенциал, но след това се извършва смесване на всички възможни многочастични конфигурации в определена съвкупност от едночастични нива около нивото на *Ферми*.
- Модели на самосъгласуваното средно поле – методът на *Хартри–Фок* и методът на *Хартри–Фок–Боголюбов*, включващ и ефектите на сдвояване на нуклоните, които се концентрират върху получаването на едночастичния потенциал на основата на ефективни нуклон–нуклонни взаимодействия, които са фитирани специално за самосъгласувани пресмятания.

В следващите страници ще разгледаме подробно процедурите, резултатите и проблемите на тези два типа микроскопични подходи, които могат да бъдат класифицирани общо като модели на независимите частици.

## Глава 2

### Моделите на независимите частици

Уравнението на *Шрьодингер* описва свойствата на нерелативистичните многочастични системи в много области на съвременната физика. За съжаление то може да бъде решено точно само в някои случаи, например за хамилтониани в пространство на вълнови функции с една променлива, за хамилтониани, удовлетворяващи множество симетрии, или за системи с малък брой частици. Във всички останали случаи трябва да се търсят приближени решения.

Едни от първите подходи за приближено решаване на уравнението на *Шрьодингер* са моделите на независими частици. Идеята за независимо движение на частици в силово поле е предложена първоначално за описание на свойствата на атомите. Предполага се, че електроните заемат едночастични орбити, които са собствени функции на хамилтониан с централен потенциал, получен от усредняването на *Кулоновото* взаимодействие на електроните с атомното ядро и помежду им. Пример за точността на това приближение (а това е очевидно приближение, защото корелациите между частиците не се отчитат експлицитно) е разликата в енергията на връзка на неон и аргон, получени в рамките на теорията на *Хартри-Фок* и при решаване на точното уравнение на *Шрьодингер* за основното състояние на атомите – тя е 0.2%!

Докато идеята за средно поле и независимо движение на частиците в него за случая на атомните системи може да бъде възприета интуитивно, то успехът на слоестия модел при описание на свойствата на атомните ядра [22, 23] изненадва много физици [24]. Трудно е да си представим, че независимо движение може да съществува в система с такава висока плътност, каквато е характерна за ядрото, на частици, между които има толкова силно взаимодействие като нуклон–нуклонното. Теоретично основание за такова допускане е принципът на *Паули*, който изключва възможността нуклони да се разсейват и заемат близки нива, населени от други нуклони. Възможно е само взаимодействие с нуклони, които частично запълват орбити, близки до нивото на *Ферми*. Тогава разстоянията между частиците са

сравнително големи и те ”усещат” само дългодействащата част на ядрените сили [26]. Независимо от подобни аргументи, слоестият модел е приет едва след многобройни успешни сравнения на теоретичните резултати за свойствата на основното и на нисколежащите възбудени състояния на ядрата с експерименталните данни [13]. Днес той е утвърден подход, използван често като база за сравнение за други теоретични модели.

## 2.1 Слоест модел – I

По дефиниция слоест модел на атомното ядро, се нарича подходът, при който нуклоните в системата се разглеждат като независими частици, намиращи се под въздействието на средно поле. Трябва да се подчертае, че определението ”независими” е условно, защото самото средно поле е резултат от взаимодействието на всеки нуклон с всички останали.

Ако се ограничим с разглеждането само на двучастичното взаимодействие, хамилтонианът на ядрото (1.2) може да се запише в следния вид:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i \leq A} \nabla_i^2 + \sum_{i,j \leq A} v_{ij} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i \leq A} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^A \left[ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^A v_{ij} \right] \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i \leq A} \nabla_i^2 + \sum_{i \leq A} v_i + V_{res} \quad (2.2)$$

$$= H_0 + V_{res} . \quad (2.3)$$

Основното предположение на слоестия модел е, че може да се подбере такъв едночастичен потенциал  $v_i$ , който да минимизира остатъчното взаимодействие  $V_{res}$ :

$$V_{res} = \sum_{i,j \leq A} v_{ij} - \sum_{i \leq A} v_i . \quad (2.4)$$

Тогава остатъчното взаимодействие се пренебрегва ( $V_{res} = 0$ ) и уравнението на Шрьодингер (1.4) в се записва във вида:

$$H_0 \Psi(x_1, x_2, \dots, x_A) = E \Psi(x_1, x_2, \dots, x_A) . \quad (2.5)$$

От най-общи съображения средното поле  $v_i$  трябва да притежава следните свойства:

- в центъра на ядрото нуклонът трябва да бъде в равновесие, т.е.

$$\left[ \frac{\partial v(r)}{\partial(r)} \right]_{r=0} = 0 \quad (2.6)$$

- силата на средното поле нараства от повърхността на ядрото ( $r \sim r_0$ ) към центъра му ( $r = 0$ ):

$$\left[ \frac{\partial v(r)}{\partial(r)} \right]_{r < r_0} > 0 \dots \quad (2.7)$$

- на разстояния, големи в сравнение с радиуса на ядрото, средното поле клони към нула:

$$v(r \gg r_0) \rightarrow 0 \quad (2.8)$$

Съществуват два подхода за определяне на средното поле – емпиричен, при който потенциалът се задава чрез аналитична функция, чиито параметри се определят от сравнение с експериментални данни, и микроскопичен, основан на реалистично двучастчно взаимодействие.

Емпиричните едночастични потенциали от своя страна са сферични или деформирани, в зависимост от формата на ядрата, които се описват. Най-често използваният сферичен потенциал е този на *Уудс–Саксън*:

$$V^{WS}(r) = -V_0 \left[ 1 + \exp\left(\frac{r - R_0}{a}\right) \right]^{-1} . \quad (2.9)$$

Неговите параметри са радиус  $R$  и дифузност на повърхността  $a$ , които могат да се определят за всяко ядро поотделно, но съществуват и глобални стойности [25]. Потенциалът на хармоничния осцилатор е приближение на потенциала на *Уудс–Саксън* и се използва най-често както заради неговите аналитични свойства, така и поради факта, че движението на центъра на масата на системата може да се отчете точно. Функциите, с които се задават сферични и деформирани емпирични потенциали, техните параметри и свойствата на решенията им могат да бъдат намерени във всеки уводен курс по теоретична ядрена физика, например в [26, 27].

В емпиричните слоести модели към едночастичния потенциал  $V(\mathbf{r})$  се прибавя и спин–орбитален член, който по аналогия със спин–орбиталното взаимодействие на електроните, се записва по следния начин:

$$V_{SL} = f(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} . \quad (2.10)$$

Той води до разцепване на енергетичните нива с различни проекции на спина на нуклоните – факт, който се наблюдава експериментално. Може да се покаже [28], че радиалната функция  $f(r)$  е на повърхността на ядрото и пак по аналогия с електронните системи най-често се избира да бъде пропорционална на производната на средното поле:

$$f(r) = -\lambda \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} . \quad (2.11)$$

На протоните в ядрото действат допълнително *Кулонови* сили на отблъскване, които се отчитат най-често чрез потенциала на хомогенно заредена сфера:

$$V_C(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{R} \frac{1}{2} \left( 3 - \frac{r^2}{R^2} \right) & r \leq R \\ \frac{Ze^2}{r} & r > R \end{cases} \quad (2.12)$$

Да се върнем към едночастичното уравнение на *Шрьодингер* в слоестия модел. Решение на уравнение (2.5) за система от идентични фермиони е *Слейтзрова* детерминанта:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \dots & \phi_1(A) \\ \phi_2(1) & \dots & \phi_2(A) \\ \dots & \dots & \dots \\ \phi_A(1) & \dots & \phi_A(A) \end{vmatrix} , \quad (2.13)$$

построена от едночастични вълнови функции  $\{\phi_i\}$ , собствени вектори на едночастичното уравнение на *Шрьодингер*:

$$h \phi_i = \varepsilon_i \phi_i , \quad (2.14)$$

където

$$h = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + v_i \right] . \quad (2.15)$$

Едночастичните вълнови функции  $\{\phi_i\}$  формират ортонормиран базис. В представяне на вторично квантуване на всяко състояние  $\{i\}$  съответстват оператор на раждане  $a_i^+$  и оператор на унищожение  $a_i$ , които раждат и унищожават нуклон в състояние, описвано с вълнова функция  $\phi_i$ . Тези оператори удовлетворяват фермионни комутационни съотношения. Във вторично квантуван вид хамилтонианът

на системата в слестия модел (2.1) има вида:

$$H_0 = \sum_i \epsilon_i a_i^+ a_i . \quad (2.16)$$

Многочастичната вълнова функция се построява чрез последователно действие на операторите на раждане върху частичния вакуум  $| - \rangle$ :

$$\Phi_{i_1, i_2, \dots, i_A} = a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \dots a_{i_A}^+ | - \rangle , \quad (2.17)$$

а съответната ѝ собствена стойност е равна на:

$$E^{SM} = \sum_{i=1}^A \epsilon_i . \quad (2.18)$$

Съществува просто правило за конструиране на основното състояние на ядрата със запълнени слоеве: започвайки от най-ниското по енергия, всяко състояние се заселва с  $\sigma$  на брой нуклони, където  $\sigma$  е израждането на нивото, докато всички частици от системата заемат местата си в схемата. Между най-високото заето и най-ниското незаето състояние лежи така нареченото ниво на *Ферми*. Всички състоянията под *Ферми* нивото в приближението на средното поле са заети и се наричат дупчести, състоянията над *Ферми* нивото са незаети и се наричат частични.

Най-ниските възбудени състояния в слоестия модел възникват, когато един нуклон от състояние под нивото на *Ферми* засели ниво над него. Това са така наречените едночастични (*1p1h*) възбуждания. Ако нуклон от дупчесто състояние  $i$  се премести на частично ниво  $m$ , неговото състояние ще се описва с вълновата функцията  $| \Phi_{mi} \rangle$ :

$$| \Phi_{mi} \rangle := a_m^+ a_i | \Phi_0 \rangle = \pm a_m^+ a_1^+ \dots a_{i-1}^+ a_{i+1}^+ \dots a_A^+ | - \rangle \quad (2.19)$$

Множеството от *Слейтърови* детерминанти, отговарящи на всевъзможните начини за запълване на състоянията на едночастичен потенциал от  $A$  на брой частици, образува пълна система от ортогонални функции [29] в *Хилбертовото* пространство. Тогава всяка  $A$ -частична вълнова функция може да се запише във вида:

$$| \Phi \rangle = | \Phi_0 \rangle + \sum_{mi} C_{mi} a_m^+ a_i | \Phi_0 \rangle + \sum_{mlj} C_{mlj} a_m^+ a_l^+ a_i a_j | \Phi_0 \rangle + \dots \quad (2.20)$$

Ако моделът на независимите частици е реалистично приближение за дадена ядрена система, то коефициентите  $C_{mi}, C_{mlj} \dots$  би трябвало да клонят към нула.

В представяне на вторично квантуване лесно може да се получи и многочастичната вълнова функция на ядро с един нуклон повече или по-малко от ядро със запълнени слоеве. Ако  $|\Phi_A\rangle$  е вълновата функция на основно състояние на магическо ядро с  $A$  нуклона, то  $(A+1)$ -нуклонна система, в която нуклонът над запълнения слой е в състояние  $m$ , се описва с функцията  $|\Phi_{A+1}\rangle$ :

$$|\Phi_{A+1}\rangle = a_m^+ |\Phi_A\rangle. \quad (2.21)$$

Разликите в енергиите на двете ядра дефинира така наречената едночастична енергия на нивото  $m$ .

$$\epsilon_m = E_{(A+1)} - E_A \quad (2.22)$$

Това е величина, която може да бъде измерена с голяма точност и затова често се използва както за фитиране на параметрите на феноменологични модели, така и за сравнение на теория и експеримент при микроскопични пресмятания.

## 2.2 Метод на Хартри-Фок

В част (1) беше споменато, че средното поле в метода на независимите частици може да бъде зададено както емпирично, така и да бъде изведено микроскопически на базата на нуклон-нуклонното взаимодействие. Най-често използваният самосъгласуван подход за пресмятане на потенциала на средното поле е методът на *Хартри-Фок* [30, 31]. Неговата формулировка е физически най-ясна в термини на фермионните оператори на раждане и унищожение, което позволява автоматично да се отчита принципът на *Паули*.

Както във всеки модел на независимите частици, вълновата функция на системата е *Слейтърова* детерминанта (2.17) от собствените вектори  $\phi_i = a_i^+ |-\rangle$  на едночастичния хамилтониан (2.14). Между *Слейтърова* детерминанта  $\Phi$  и множеството от едночастични състояния  $\{\phi_i\}$  не съществува еднозначно съответствие [26]. Всяка унитарна трансформация, която не смесва дупчести  $\{i \leq A\}$  и частични  $\{m > A\}$  състояния, променя  $\{\phi_i\}$  най-много с несъществен фазов множител. Затова е удобно многочастичната вълнова функция да се представя чрез съответната ѝ едночастична матрица на плътността [32]:

$$\rho_{i'v} = \langle \Phi | a_i^+ a_{i'} | \Phi \rangle \quad (2.23)$$

Може да се докаже, че една многочастична вълнова функция е *Слейтърова* детерминанта тогава и само тогава, когато съответният ѝ едночастичен оператор на плътността

$$\hat{\rho}_\Phi = \sum_{ii'} |\phi_i\rangle \rho_{ii'} \langle \phi_{i'}| \quad (2.24)$$

е проекционен оператор в Хилбертовото пространство, т.е. е изпълнено равенството:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}. \quad (2.25)$$

В пространството на собствените вектори  $\{\phi_i\}$  на едночастичния хамилтониан  $h$  (2.14) едночастичната матрица на плътността (2.23) е диагонална. Собствените й стойности са равни на единица за заетите състояния и на нула за свободните. Следата на матрицата на плътността  $\rho_{ii'}$  е равна на броя на частиците в разглежданата система:

$$\text{Tr} \rho = A \quad (2.26)$$

За решаване на квантовомеханичната задача в метода на Хартри–Фок се използва вариационният принцип на Рун (1.6, 1.7). Нека първо запишем израза за енергията на системата  $E^{HF}$ :

$$\begin{aligned} E^{HF} &= \langle \Phi | H | \Phi \rangle \\ &= \sum_{ii'} t_{ii'} \langle \Phi | a_i^+ a_{i'} | \Phi \rangle + \frac{1}{4} \sum_{ij'j'} \tilde{v}_{ij'j'} \langle \Phi | a_i^+ a_j^+ a_j a_{i'} | \Phi \rangle \\ &= \sum_{ii'} t_{ii'} \rho_{ii'} + \frac{1}{2} \sum_{ij'j'} \rho_{i'i} \tilde{v}_{ij'j'} \rho_{j'j} \end{aligned} \quad (2.27)$$

От горния израз непосредствено следва, че:

- енергията на системата може да се представи като функционал на матрицата на плътността;
- в Хартри–Фоковото пространство, в което едночастичната матрица на плътността е диагонална, тя е равна на:

$$E^{HF} = \sum_{i=1}^A t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \tilde{v}_{ijij} \quad (2.28)$$

Отчитайки еднозначното и обратимо съответствие между Слейтървата детерминанта (2.13) и едночастичната матрица на плътността (2.23), варирането на енергията  $E^{HF}$  в пространството на всички Слейтърви детерминанти е еквивалентно на вариране по всички матрици на плътността със свойството (2.25). Като

се използва това условие, може да се докаже, че в *Хартри–Фоковия* базис е в сила равенството:

$$\begin{aligned}\delta E^{HF}[\rho] &= E^{HF}[\rho + \delta\rho] - E^{HF}[\rho] \\ &= \sum_{im} h_{mi} \delta\rho_{im} + c.c. \quad \text{за } i \leq A, m > A,\end{aligned}\tag{2.29}$$

където

$$h_{ii'} = \frac{\delta E^{HF}[\rho]}{\delta\rho} = t_{ii'} + \Gamma_{ii'}.\tag{2.30}$$

С  $\Gamma$  е означен самосъгласуваният едночастичен потенциал с матрични елементи:

$$\Gamma_{ii'} = \sum_{jj'} \tilde{v}_{ij'ij} \rho_{jj'}.\tag{2.31}$$

Тъй като равенство (2.29) трябва да е изпълнено за произволни стойности на  $\delta\rho_{im}$ , то от вариационния принцип  $\delta E^{HF}[\rho] = 0$  следва, че всички частично-дупчести матрични елементи на едночастичния хамилтониан са равни на нула, т.е.:

$$h_{mi} = t_{mi} + \sum_{j=1}^A \tilde{v}_{mjij} = 0 \quad \text{за } i \leq A, m > A\tag{2.32}$$

Тогава матрицата на хамилтониана има блок-диагонална структура:

$$h = \begin{vmatrix} h_{hh} & \vdots & 0 \\ \dots & \cdot & \dots \\ 0 & \vdots & h_{pp} \end{vmatrix}.\tag{2.33}$$

Вариационният принцип не налага условия върху матричните елементи  $h_{hh}$  и  $h_{pp}$ . Тъй като базисът, в който едночастичната матрица на плътността  $\rho$  е диагонална, е определен с точност до унитарна трансформация, може да се наложи условието в този базис и хамилтонианът да бъде диагонален:

$$h_{ii'} = \epsilon_i \delta_{ii'}.\tag{2.34}$$

Системата уравнения (2.34) са така наречените уравнения на *Хартри–Фок*. Тяхното решаване изисква самосъгласувана итерационна процедура, защото търсените собствени вектори на едночастичния хамилтониан (2.30) участват във формиране-

то на потенциала  $\Gamma$  (2.31). Най-често в първата итерация за пресмятането на  $\Gamma$  се използва набор от вълнови функции, получени в слоестия модел. След това се решава системата уравнения (2.34) и с новите едночастични вълнови функции се пресмята отново  $\Gamma$ . Процедурата се повтаря, докато в две последователни итерации се получат решения, еднакви в рамките на предварително зададена точност. В повечето случаи това правило се прилага за собствените стойности на хамильтониана  $\{\epsilon_i, i = 1 \dots A\}$ . Те представляват едночастичните енергии на нуклоните, а пълната енергия на основното състояние на системата за разлика от слоестия модел  $E^{SM}$  (2.18) има вида:

$$E_0^{HF} = \sum_{i=1}^A \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \tilde{v}_{ijij} \quad (2.35)$$

Няколко десетилетия наред методът на *Хартри-Фок* е основен микроскопичен подход за описание на характеристиките на основно състояние на атомните ядра. Поради наличието на силно отблъскване на малки разстояния и отчитането на ефекта на средата върху нуклон-нуклонното взаимодействие, използването на реалистични феноменологични потенциали е свързано с редица числени проблеми.

Микроскопичният подход за пресмятане на ефективно нуклон-нуклонно взаимодействие в среда от други нуклони и оттам получаването на самосъгласуваното поле, е методът на *Бракнер* [35]. Основен момент в него е решаването на задачата за разсейване на два нуклона в присъствието на други нуклони. По аналогия с уравнението на *Липман-Швингер* за  $T$ -матрицата на разсейване [36] се записва така нареченото уравнение на *Бете-Голдстоун* за  $G$ -матрицата [38]:

$$G^E = \tilde{v} + \tilde{v} \frac{Q_F}{E - H_0} G^E, \quad (2.36)$$

където  $Q_F$  е проекционен оператор, изключващ разсейването на нуклони в състояния под нивото на *Ферми*. Решавайки формално горното уравнение получаваме:

$$G^E = \frac{\tilde{v}}{1 - \tilde{v}Q_F/(E - H_0)}. \quad (2.37)$$

Този израз показва, че  $G$ -матрицата остава крайна, дори когато взаимодействието  $\tilde{v}$  клони към безкрайност.

С помощта на уравнение (2.36) може да се намери връзка между корелираната вълнова функция на два нуклона  $|\Psi_{ij}\rangle$  и тяхната некорелирана функция  $|ij\rangle$ :

$$|\Psi_{ij}\rangle = |ij\rangle + \frac{Q_F}{E - H_0} \tilde{v} |\Psi_{ij}\rangle = \tilde{v}^{-1} G |ij\rangle, \quad (2.38)$$

или

$$\tilde{v} | \Psi_{ij} = G | ij \rangle . \quad (2.39)$$

Следователно при решаване на многочастичната задача може да се работи с некорелирани вълнови функции, а взаимодействието на малки разстояния, включително и наличието на твърда сърцевина, да се отчита посредством  $G$ -матрицата. По този начин се решават проблемите със сингулярността на "голото" нуклон-нуклонно взаимодействие и се отчитат членове от по-висок порядък в ядрените сили.

Основните уравнения на *Бракнер-Хартри-Фок* метода се получават, когато в системата от *Хартри-Фокови* уравнения (2.30, 2.31, 2.34) взаимодействието  $\tilde{v}$  се замени с  $G$ -матрицата. Определянето на характеристиките на основното състояние на ядрата в този подход е трудна задача. Тя изисква самосъгласуваното решаване на уравнението на *Бете-Голдстоун* и на системата от *Хартри-Фокови* уравнения, което означава двойна итерационна процедура. При това получените резултати за енергията на връзка на един нуклон  $E_0/A$  и средноквадратичните радиуси на ядрата  $^{16}\text{O}$ ,  $^{40}\text{Ca}$  и  $^{208}\text{Pb}$  не възпроизвеждат експерименталните данни. Дори включването на тричастично взаимодействие по самосъгласуван начин не води до по-добри резултати.

Стъпка в правилната посока се оказва така нареченото *приближение на локалната плътност*, предложено от *Бете* [39]. То се основава на факта, че  $G$ -матрицата зависи чрез проекционния оператор  $Q_F/(E - H_0)$  от едночастичната матрица на плътността. В рамките на *Бракнеровата* теория може да се получи функционалната зависимост  $G = G[\rho]$ . *Бете* предлага  $G$ -матрицата във всяка точка на ядрото да се апроксимира чрез  $G$ -матрицата на безкрайна ядрена материя, чиято локална плътност е равна на локалната плътност на ядрото в тази точка. Следващ етап в опростяване на *Бракнер-Хартри-Фок* метода е заместването на  $G$ -матрицата с ефективен локален потенциал, параметризиран така, че да възпроизвежда характеристиките на основно състояние на някои леки ядра. Пресмятанията в приближение на локалната плътност водят до задоволително описание на енергията на връзка, на средноквадратичните радиуси и на едночастичните енергии на някои двойно магически ядра [40, 41].

През последните две десетилетия в рамките на *Хартри-Фок* метода се използват сили, зависещи от плътността. Две са основните причини, които налагат директно параметризиране на ядрени сили:

- *Д. Бринк* и *Е. Бюкер* показват, че не съществува ефективно нуклон-нуклонно взаимодействие, независимо от плътността, с което в метода на *Хартри-Фок* могат да се опишат едновременно енергията на връзка, средноквадратичният

радиус и едночастичните енергии [42].

- *Бракнер–Хартри–Фок* методът е свързан с много числени проблеми.

Идеята за използване на ефективни сили, зависещи от плътността, в самосъгласувани пресмятания на средното поле в ядрената физика възниква по аналогия с функционала на плътността на енергията в теорията на електронните системи. Тя е разработена подробно от *Иван Желязков* и *Марио Стоицов* в нерелативисткия [43] и от *Шнайхер* и сътрудници – в релативисткия случай [44, 45].

За разлика от квантовата химия, където функционалът на плътността може да се изведе пряко от *Кулоновото* взаимодействие между електроните, в ядрената физика подобен подход не е възможен. Затова се прилага следната феноменологична процедура: изразът за функционала на плътността на енергията се извежда от вида на нуклон–нуклонното взаимодействие, а включените параметри се получават чрез фитиране на многобройни експериментални данни за ядрената структура в широки области от масовата таблица.

За да илюстрираме тази процедура ще разгледаме един прост пример на локално двучастично взаимодействие  $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Поради късодействието на ядрените сили то може да се разложи по степените на така наречените контактни взаимодействия. Ако пренебрегнем спиновите и изоспиновите координати на едночастичната матрица на плътността (2.23), енергията на системата може да се запише като сума от директен  $E_{dir}$  и обменен член  $E_{ex}$ :

$$E_{dir} = \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}') , \quad (2.40)$$

$$E_{ex} = \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) . \quad (2.41)$$

Използването на едночастичната матрица на плътността в обменния член (2.41) е ”скъпа” числена процедура, а и не е необходима, защото  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  клони бързо към нула с увеличаване на разстоянието  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  между нуклоните. Затова се използва разложение по степените на  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  около точката  $\bar{\mathbf{r}} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$ :

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx \rho(\bar{\mathbf{r}}) + i(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\bar{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \left[ \tau(\bar{\mathbf{r}}) - \frac{1}{4} \Delta_{\bar{\mathbf{r}}} \rho(\bar{\mathbf{r}}) \right] , \quad (2.42)$$

където  $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  е локалната плътност,  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  е плътността на тока:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{i}{2} (\nabla' - \nabla) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}, \quad (2.43)$$

а  $\tau(\mathbf{r})$  е плътността на кинетичната енергия:

$$\tau(\mathbf{r}) = \nabla' \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} . \quad (2.44)$$

Във формулата за обменния член на енергията (2.41) трябва да се замести изразът:

$$|\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \approx \rho^2(\bar{\mathbf{r}}) - (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \left[ \rho(\bar{\mathbf{r}})\tau(\bar{\mathbf{r}}) - \mathbf{j}^2(\bar{\mathbf{r}}) - \frac{1}{4}\rho(\bar{\mathbf{r}})\Delta_{\bar{\mathbf{r}}}\rho(\bar{\mathbf{r}}) \right] . \quad (2.45)$$

Така той може да се запише като локален функционал на плътността на енергията:

$$E_{ex} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left[ V_0 \rho^2 + V_2 \left( \rho\tau - \mathbf{j}^2 - \frac{1}{4}\rho\Delta\rho \right) \right] \quad (2.46)$$

при

$$V_n = \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^n . \quad (2.47)$$

Прекият член на енергията (2.40) зависи само от локалната плътност, но за да се запази съгласуваността му с обменния член, локалната плътност също може да се разложи по аналогичен начин и тогава:

$$E_{dir} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left( V_0 \rho^2 + \frac{1}{2} V_2 \rho \Delta \rho \right) . \quad (2.48)$$

Както беше показано, ефективното нуклон–нуклонно взаимодействие се представя чрез  $G$ -матрицата (2.37). Тя може да се получи например в метода на *Бракнер–Хартри–Фок* и представлява нелокален оператор, зависещ от едночастичната матрица на плътността. Разложение, подобно на представеното по-горе, води до всички онези членове, които формират функционала на плътността на енергията за силите на *Скирм* [46, 47], получен в [48].

Приложението на силите на *Скирм* за ядрената физика [48–50], разработването на силите на *Гони* [51] и накрая формулирането на релятивистки модел на средното поле [52, 53], са основите на трите съвременни подхода за самосъгласувани пресмятания, чиито резултати за структурата на атомните ядра могат да се сравняват успешно с полученото в рамките на най-точните мик-мак модели. Обстоен преглед на резултатите и проблемите на съвременните самосъгласувани подходи, базирани на теорията на функционала на плътността, може да се намери в статиите [34, 54–56].

### 2.3 Приближение на средното поле и нуклон-нуклонните корелации

В модела на независимите частици се пресмята в първо приближение енергията на връзка на ядрата. С добра точност могат да се оценят и други обемни характеристики. За да се постигне по-висока точност, или за да се описва съгласувано различни наблюдаеми величини, трябва да се излезе рамките на приближението на средното поле и да се отчитат корелациите между нуклоните.

Още веднъж ще подчертаем, че само на пръв поглед идеята за средно поле, в което нуклоните се движат независимо един от друг, не отчита нуклон-нуклонни корелации. В действителност параметрите на средното поле се определят така, че да се възпроизведат обемните характеристики на ядрата. Тъй като нуклон-нуклонните корелации влияят върху тези характеристики, то следва, че параметрите на потенциала отчитат индиректно съществуването на корелациите. Подобна е ситуацията и с функционалите на плътността, използвани при самосъгласуваните пресмятания в метода на *Хартри-Фок*.

В работа [57] например е показано, че в рамките на модела на независимите частици не могат да бъдат описани едновременно експерименталните данни за локалната плътност и за импулсното разпределение на нуклоните в ядрото  ${}^4\text{He}$ . И двете величини могат да се получат от едночастичната матрица на плътността на системата (2.23), която в координатно представяне има вида:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{i=1}^A \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}') . \quad (2.49)$$

Локалната плътност се изразява само чрез диагоналните елементи на матрицата:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^A |\phi_i(\mathbf{r})|^2 , \quad (2.50)$$

а импулсното разпределение по дефиниция се получава от *Фурие* образа на едночастичната матрица на плътността и следователно зависи както от нейните диагонални, така и от недиагоналните ѝ елементи:

$$n(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp[i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] . \quad (2.51)$$

В работи [60, 61] е предложена величина  $\sigma$ , с която да се характеризира разликата между некорелираната едночастична матрица на плътността на системата  $\rho_0$ , получена в приближение на средното поле, и едночастичната матрица  $\rho$ , описваща

корелирана система от нуклони:

$$\sigma = \frac{1}{A} \text{Tr}[(\rho - \rho_0)^2] \quad (2.52)$$

Когато така нареченото средно квадратичното отклонение за един нуклон  $\sigma$  има минимална стойност, тогава некорелираната матрица ще описва максимално добре характеристиките на корелираната система. Може да се докаже [62], че  $\sigma = \sigma_{min}$ , когато  $\rho_0$  отговаря на *Слейтърова* детерминанта с размерност  $N > A$ , построена от собствените вектори  $\{\psi_i\}$  на корелираната матрица, т.е. когато:

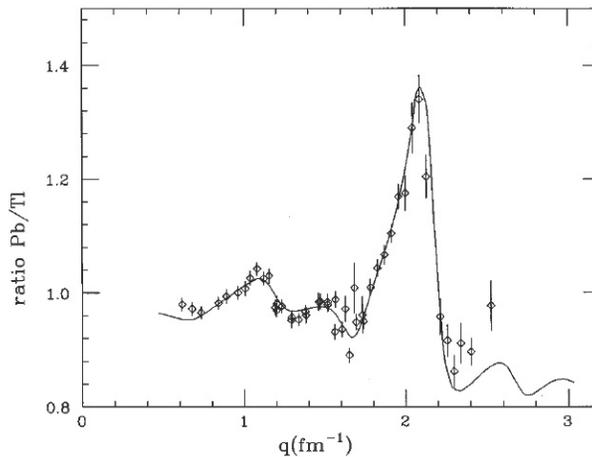
$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i^N n_i \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i^*(\mathbf{r}'), \quad 0 \leq n_i \leq 1, \quad \sum_{i=1}^N n_i = A, \quad (2.53)$$

$$\rho_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{i=1}^A \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i^*(\mathbf{r}') \quad (2.54)$$

Стойността на  $\sigma_{min}$  зависи изцяло от корелираната едночастична матрица на плътността. За реалистични нуклон–нуклонни взаимодействия те е от порядъка на  $0.02 - 0.03$ , което съответства на изпразване на морето на *Ферми* в рамките на  $10-15\%$ . Тези стойности са потвърдени експериментално например в работи [58, 59]. В модела на независимите частици  $\sigma_{min} \equiv 0$ . Въпреки че ролята на различните видове корелации ще бъде обсъждана подробно в част (3), тук е мястото да се спомене, че в модела на случайните фази, в който се отчитат само дългодействащи корелации,  $\sigma_{min} \sim 0.002$ , докато в реалистични пресмятания, при които се отчитат и късодействащите корелации,  $\sigma_{min} \sim 0.02$ . Това показва, че стойността на  $\sigma_{min}$  може да използва като критерий за степента на отчитането на нуклон–нуклонните корелации.

В общия случай  $\rho_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  (2.54) се различава от едночастична матрица на плътността в модела на независимите частици. В метода на *Хартри–Фок* например нуклон–нуклонното взаимодействие, или функционалът на плътността на енергията, може да се фитират така, че да се минимизира стойността на  $\sigma_{min}$  и диагоналните елементи на  $\rho_{HF}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  да възпроизвеждат корелираната локална плътност  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  (2.53). В [61] е показано, че това води непременно до увеличаване на разликите в недиагоналните елементи. Тези изследвания потвърждават извода, направен в работа [57], че в метода на независимите частици не е възможно да се опишат едновременно локалната плътност и импулсното разпределение на нуклоните в ядрото (2.51). Това може да се постигне само, ако се излезе извън рамките на метода на независимите частици и се предположи, че с определена малка вероятност нуклоните заемат и състояния над *Ферми* нивото. В част (4.3) ще бъдат приведени още аргументи в подкрепа на горното твърдение.

Най-убедителният пример за валидността на модела на независимите частици и същевременно за наличието на нуклон–нуклонни корелации представлява сравнението на експерименталните плътности на ядрата  $^{206}\text{Pb}$  и  $^{205}\text{Tl}$ . В слоестия модел тези две ядра се различават по един допълнителен протон в  $3s$  орбитата на  $^{206}\text{Pb}$ . Радиалната вълновата функция  $3s$  има много характерна форма с максимум в центъра на ядрото при  $r = 0$ , с две нули при  $r_1 > r_2$  и два други максимума. Тя може лесно да се ”види” при еластично разсейване на електрони (това е единственият тип реакции, който дава възможност за изследване на плътностите във вътрешността на ядрата). На фигура (2.1) е показано отношението на сеченията на еластично ( $e, e$ ) разсейване върху  $^{206}\text{Pb}$  и  $^{205}\text{Tl}$  [63] и *Фурие* образът на радиалната вълновата функция  $3s$ , получена в слоестия модел и скалирана така, че да описва максимума на експерименталните данни при  $q \sim 2\text{fm}^{-1}$ .



Фигура 2.1: Съотношение на експерименталните данни на сеченията на еластично електронно разсейване върху  $^{206}\text{Pb}$  и  $^{205}\text{Tl}$  и *Фурие* образът на радиалната част на едночастичната вълнова функция на  $3s$  нивото с редуцирано число на запълване (плътната линия).

Наблюдаваното много добро съгласие с експерименталните данни показва, че поведението на радиалната част на едночастичната вълнова функция на  $3s$  орбитата е реалистично в целия обем на ядрото – както във вътрешността, така и на повърхността му. Съгласно модела на независимите частици числото на запълване на нивата под Ферми нивото е равно на 1. Необходимостта от въвеждане на скалиращ фактор, по-малък от 1, е следствие от наличието на нуклон–нуклонни корелации, които не могат да бъдат отчетени в рамките на приближението на средното поле. Това налага разработването на корелационни методи излизайки рамките на моделите на независими частици.

Подобни изводи за валидността на приближението на средното поле при нали-

чието на ясно изразени нуклон-нуклонни корелации са направени и в работа [64]. В нея подробно са изследвани резултатите от експерименталните данни по избиване на протон от ядра при реакции с електрони и  $(e, e'p)$  [65, 66].

## Глава 3

### Нуклон–нуклонни корелации и методи за тяхното описание

Ако се върнем към началото на настоящата дисертация и погледнем формулировката на основната задача в теорията на атомното ядро, ще видим, че тя представлява многочастична задача в квантовата механика. В този смисъл тя е подобна на задачите, които се решават в атомната физика, във физиката на твърдото тяло, в квантовата оптика. Разликите се дължат най–общо казано във взаимодействието между елементите на разглежданата система и оттам в избора на базисните функции, по които е най–удобно да се разлага многочастичната вълновата функция. По принцип за тази цел може да се използва всеки пълен базис от ортонормирани функции, но при подходящ избор на базисните вектори малък брой членове от това разложение ще описват с необходимата точност търсената функция. Още по съществено е, че правилният избор на базисни функции позволява да се извлече физическа информация за структурата на свързаните състояния и механизма на реакциите в многочастичната система.

В теорията на атомното ядро изборът на базисни функции и свързаните с тях пробни вълнови функции се диктува първо, от принципа на Паули, защото нуклоните са фермиони, и второ, от особеностите на ядрените сили. Подробен анализ на методите за описание на нуклон–нуклонните корелации и резултатите, получени до началото на 90-те години на миналия век при изследване на влиянието им върху характеристиките на ядрената структура и ядрените реакции, може да се намери в монографията [67]. Най-важните характеристики на нуклон–нуклонното взаимодействие бяха разгледани в началото на Глава 1. Следващите части на Глава 3 ще разгледаме основните типове корелации между нуклоните в ядрата, условията, които те налагат върху избора на пробната вълнова функция на системата и методите за решаване на съответната многочастична квантовомеханична задача.

### 3.1 Корелации на Паули

Всъщност за корелациите на *Паули* в изложението дотук е ставало дума многократно. Те се дължат на фермионния характер на протоните и неутроните и се проявяват в така наречения *принцип на Паули*. Той е формулиран от *Волфганг Паули* през 1925г. като общо свойство на електроните, което дава възможност да се обяснят свойствата на експериментално наблюдаваните спектри на сложни атоми.

Необходимостта от въвеждане на този постулат възниква при разглеждането на система от тъждествени частици. По дефиниция две частици са тъждествени, ако всички техни физически свойства са еднакви и следователно те не могат експериментално да бъдат различени. В класическата механика неразличимостта на тъждествените частици не играе съществена роля, но в квантовата механика води до съществени ограничения на вида на възможните многочастични вълнови функции. Подробно изследване на този проблем може да се намери във всеки учебник по квантова механика, например в [36, 37], затова тук ще споменем само няколко по-съществени момента.

- Тъждествеността на две частици се изразява в инвариантност на хамилтониана на системата, както и на всички наблюдаеми величини, по отношение на пермутация на координатите на частиците;
- За да се изгради непротиворечива теория, се въвежда *постулат за симетризация*, според който квантовомеханичното състояние на система от тъждествени частици може да бъде или симетрично, или антисиметрично по отношение на пермутация на две частици;
- Дали ще е симетрично или антисиметрично състоянието на системата, зависи от природата на тъждествените частици. Частиците, които се описват със симетрични вълнови функции, се наричат бозони, а тези с антисиметрични вълнови функции са фермиони. Експериментите показват, че елементарните частици със цял спин (фотони,  $W$ -,  $Z$ -бозони ( $J = 1$ ),  $\pi$ -мезони ( $J = 0$ ) и др.) са бозони, а тези със полуцял спин (електрони, протони, неутрони,  $\mu$ ,  $\tau$ -мезони, неутрино ( $J=1/2$ ) и др.) са фермиони;
- Многочастичната вълнова функция на система от  $N$  бозони,  $n_i$  на брой от които се намират в състояние  $\varphi_i$ , като  $n_1 + n_2 + \dots + n_i + \dots = N$ , има вида:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \left[ \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_i! \dots} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{S} | \varphi_1^{n_1} \varphi_2^{n_2} \dots \varphi_i^{n_i} \dots \rangle . \quad (3.1)$$

$\hat{S}$  е симетризиращ оператор:

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_P \hat{P} . \quad (3.2)$$

Действието на оператора  $\hat{P}$  се изразява в пермутация на координатите на две идентични частици. Сумата в ур. (3.2) е по всички възможни пермутации в системата, които са  $N!$  на брой. Пермутацията на две частици, намиращи се в едно и също състояние  $\varphi$ , не променя вълновата функция  $\Psi$  (3.1), докато пермутацията на частици в различни състояния поражда ново състояние на системата  $\Psi' \neq \Psi$ .

- Аналогично може да се представи и вълновата функция на система от тъждествени фермиони:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A) = \left[ \frac{A!}{n_1! n_2! \dots n_i! \dots} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{A} | \varphi_1^{n_1} \varphi_2^{n_2} \dots \varphi_i^{n_i} \dots \rangle \quad (3.3)$$

където  $\hat{A}$  е антисиметризиращ оператор:

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \hat{P} \quad (3.4)$$

Като се използват свойствата на оператора  $\hat{A}$ , може да се покаже, че вълновата функция  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A)$  е различна от нула само и единствено, ако във всяко едно състояние се намира най-много по един фермион, т.е.  $n_i \equiv 0, 1$  за всяко  $i$ . С други думи, два фермиона не могат да заемат едновременно едно и също едночастично състояние. Това е така нареченият принцип на Паули. Многочастичната функция (3.3) е тъждествено равна на *Слейтърова* детерминанта.

Както беше отбелязвано многократно в Глава 2 в приближение на средното поле многочастичната вълнова функция на ядрото се представя в координатното пространство като *Слейтърова* детерминанта, а валидността на модела на независимите частици до голяма степен се обосновава с действието на принципа на Паули.

В следващите части на тази глава ще бъде показано, че *Слейтъровите* детерминанти са важен елемент и от корелираните многочастични вълнови функции, чрез които се описват едночастичните свойства на нуклоните в ядрата.

Отчитането на принципа на Паули става автоматично в конфигурационното пространство чрез комутационните свойства на фермионните оператори на раждане и унищожение.

## 3.2 Корелации на сдвояване

Идеята за съществуване на късодействащи корелации на сдвояване между два нуклона възниква за да обясни редица експериментални факти. Тук ще изброим само някои от тях:

- В спектъра на деформираните четно–четни ядра има малък брой колективни състояния с енергии на възбуждане до 1.5 MeV. В четно–нечетни ядра обаче, в този енергетичен интервал се наблюдават множество колективни и едночастични възбудени състояния.
- Като се отчитат правилата за събиране на ъглови моменти, може да се изчисли броят на изродените по енергия състояния с една и съща стойност на пълния ъглов момент за дадено ядро. Експериментално наблюдаваната плътност на нисколежащите възбудените нива в четно–четните ядра е два пъти по-малка от теоретичните оценки.
- Енергията на връзка на четно–нечетните ядра е по-малка от средноаритметичната стойност на енергиите на двете съседни четно–четни ядра.
- Общият спин на четно–четните ядра в основно състояние е равен на нула, а спинът на четно–нечетните ядра се определя от спина на нечетния нуклон.
- Зависимостта на наблюдаваната деформация от масовото число на ядрата и съответният момент на инерция не могат да се обяснят в модела на независимите частици.
- В четно–четните ядра, близки до ядрата със затворени слоеве, се наблюдават нисколежащи  $2^+$  състояния, които не могат да се интерпретират нито като едночастични, нито като ротационни, но могат да се опишат като възбуждане на двойка нуклони с пълен ъглов момент  $J = 0$ .

Още в средата на миналия век е показано, че ако два нуклона си взаимодействат посредством късодействаща сила на привличане, то по отношение на енергията най-изгодно е състоянието, при което двата нуклона имат еднакви по големина и противоположни по знак проекции на спина и пълен ъглов момент  $J = 0$  [68]. Оттогава насам на корелациите на сдвояване са посветени многобройни изследвания, развити са общопризнати методи и са получени множество резултати, които могат да бъдат проследени в обзори и монографии [26, 34, 69]. В началото хамилтонианът на система от фермиони, между които действат само сили на сдвояване, се описва в рамките на приближението на *Бардин–Купер–Шрифер* (BCS) [70]. Главният недостатък на този метод е явното нарушаване на условието за запазване на

броя на частиците в системата. Флуктуациите на броя на частиците е от порядъка на  $\sqrt{N}$  ( $N$  е броят на частиците) и за ядрата, където  $N \simeq 100$ , очевидно се налага отстраняването на този проблем. В работа [71] е предложен BCS метод с проектиране на броя на частиците, който е широко използван в ядрената физика. Следващата стъпка към реалистичното описание на ядрото с отчитане на силите на сдвояване е методът на *Хартри-Фок-Боголюбов*, който предлага обобщение на идеята за самосъгласуваното средно поле с отчитане на корелациите на сдвояване.

Тук ще се спрем само на два подхода за описание на корелациите на сдвояване, които в момента фокусират интереса на теоретиците. Това са точно решаемите модели, представляващи обобщения на модела на *Ричардсън-Годан* и методът на *Хартри-Фок-Боголюбов* със сили, зависещи от плътността.

### 3.2.1 Точно решаем модел на *Ричардсън*

Точно решаемите модели дават възможност за изследване на структурата на многочастичните квантовомеханични системи. Макар и схематични, те имат две важни предимства: 1) описват аналитично или чрез точно числено решение основни физически явления и 2) служат за сравнение на различни многочастични подходи.

В ядрената физика отдавна се използват моделите на динамична симетрия, които са клас от точно решаемите модели. В този случай хамилтонианът се представя чрез операторите на *Казимир* на верига от вместили алгебри. Примери за такива подходи са  $SU(3)$  моделът на *Елиът* за описание на структурата на деформираните ядра [72] и  $SO(5)$  моделът за  $T = 1$  изовекторно сдвояване на протони и неутрони [73].

Точно решаемите модели са свързани с понятието интегрируемост на квантовите системи. Една система е интегрируема, ако има толкова интеграла на движение, т.е. оператора, комутиращи с хамилтониана, колкото са степените ѝ на свобода.

Моделите на динамична симетрия обикновено се дефинират за изродени едночастични състояния. Свляянето на израждането на нивата води до нарушаване на динамичната симетрия, но запазва интегрируемостта на системата.

Такива свойства притежава моделът на сдвояване в пространство на неизродени нива, изучаван от *У. Ричардсън*. В началото на 60-те години на миналия век той показва, че съществува точно решение на уравнението на *Шрьодингер* за хамилтониан, отчитащ само сдвояването на частиците [74]. По-късно, независимо от него, *М. Годан* стига до същите решения [75]. По това време физическата колегия не обръща внимание на тези резултати. Точните решения на *Ричардсън-Годан* за ”открити” отново в края на миналия век, когато изследването на прехода от режим на свръхпроводимост към режим на флуктуации вследствие на сдвояване-

то на частиците в система от много малки свръхпроводящи зрънца налага да се използва метод, при който не се нарушава законът за запазване на частиците в системата [76]. Оттогава свойствата на точно решаемите модели на сдвояване в *Хилбертово* пространство от едночастични нива се изучават интензивно и се прилагат за описание на системи от метални свръхпроводящи зрънца [77], на електрони в двумерна решетка [78], на модели на взаимодействащи бозони в ядрената физика [79] и др..

Формулировката на задачата е следната: разглежда се система от  $N$  фермиона, които заемат пространство от  $L$  на брой нива,  $l = 1, \dots, L$ , всяко с израждане  $\Omega_l$ . Всяка частицата се характеризира с допълнително квантово число  $m$ , което обозначава състоянието ѝ в подпространството  $l$ . Ако квантовото число  $l$  е пълният ъглов момент на състоянието, то неговото израждане е  $\Omega_l = (2l+1)$  и  $(-l \leq m \leq l)$ . Приема се, че  $\Omega_l$  е четно число и на всяко състояние, характеризирано с квантово число  $m$ , съответства друго, спрегнато по времето състояние с квантово число  $\bar{m}$ . Операторите, от които е построен хамилтонианът на системата, са:

$$\hat{n}_l = \sum_m a_{lm}^\dagger a_{lm}, \quad A_l^\dagger = \sum_m a_{lm}^\dagger a_{l\bar{m}}^\dagger = (A_l)^\dagger, \quad (3.5)$$

където  $a_{lm}^\dagger$  и  $a_{lm}$  са фермионни оператори съответно на раждане и унищожение на частица в състояние  $\{lm\}$ . Операторът на броя на частиците  $\hat{n}_l$  и операторите на раждане и унищожение на двойка частици  $A_l^\dagger$  и  $A_l$  удовлетворяват следните комутационни съотношения:

$$[\hat{n}_l, A_{l'}^\dagger] = 2 \delta_{ll'}, \quad [A_l, A_{l'}^\dagger] = 2 \delta_{ll'} (\Omega_l - 2 \hat{n}_l). \quad (3.6)$$

Те затварят алгебрата  $SU(2)$ .

Най-общият вид на хамилтониана на система от частици, взаимодействащи чрез сили на сдвояване, е следният:

$$H = \sum_l \varepsilon_l \hat{n}_l + \sum_{ll'} V_{ll'} A_l^\dagger A_{l'}. \quad (3.7)$$

В повечето случаи се работи с приближение на горния израз, при който всички матрични елементи на взаимодействието на сдвояване  $V_{ll'}$  са равни на една константа, наречена константа на сдвояване  $g$ . Такъв е хамилтонианът в BSC метода:

$$H_P = \sum_l \varepsilon_l \hat{n}_l + \frac{g}{2} \sum_{ll'} A_l^\dagger A_{l'}. \quad (3.8)$$

Това приближение се допълва от необходимостта от орязване на пространство-то на едночастичните нива. Във физиката на твърдото тяло орязването е свързано

с честотата на *Дебай* на фононите. В ядрената физика изборът на *Хилбертовото* подпространство, в което се разглежда сдвояването, се свежда до ограничен брой нива, заемани от валентните нуклони на ядрото.

Многочастичната вълнова функция на система от  $M$  двойки фермиони и  $\nu$  несдвоени частици може да се запише така:

$$|n_1, n_2, \dots, n_L, \nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(A_1^\dagger\right)^{n_1} \left(A_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(A_L^\dagger\right)^{n_L} |\nu\rangle . \quad (3.9)$$

Броят на двойките частици  $n_l$ , заемащи нивото  $l$ , се определя от принципа на *Паули*:  $0 \leq 2n_l + \nu_l \leq \Omega_l$ , където  $\nu_l$  е броят на несдвоените частици на това ниво. Нивото, на което няма сдвоени частици  $|\nu\rangle = |\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_L\rangle$ ,  $\nu = \sum_l \nu_l$ , се дефинира чрез равенствата:

$$A_l |\nu\rangle = 0 , \quad \hat{n}_l |\nu\rangle = \nu_l |\nu\rangle . \quad (3.10)$$

Размерите на матрицата на хамилтониана (3.8) в пространството на векторите (3.10) бързо надхвърля възможностите за точна диагонализация дори за ограничен брой едночастични нива  $L$  и малък брой частици  $N$ . Затова се налага използването на приближения. В микроскопичните подходи се ограничава класът на пробните функции, сред които се търси решението на хамилтониана. *Ричардсън* успява да намери собствените вектори на хамилтониана (3.8) без диагонализация на съответната матрица. Той показва, че те могат да се запишат във вида:

$$|\Psi\rangle = B_1^\dagger B_2^\dagger \dots B_M^\dagger |\nu\rangle . \quad (3.11)$$

Колективните оператори  $B_\alpha^\dagger$  съответстват на собствени вектори на хамилтониана на сдвояване (3.8) за система от две частици:

$$B_\alpha^\dagger = \sum_l \frac{1}{2 \varepsilon_l - E_\alpha} A_l^\dagger . \quad (3.12)$$

Величините  $E_\alpha$ ,  $\{\alpha = 1, M\}$  са собствените стойности на хамилтониана (3.8) и се наричат енергия на сдвояване. *Ричардсън* предлага те да се разглеждат като параметри, които трябва да се изберат така, че са бъде изпълнено уравнението на *Шрьодингер*  $H_P |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ .

Тук няма да излагаме извода на системата уравнения, които енергиите на сдвояване трябва да удовлетворяват, той може да бъде намерен в [80]. Ще приведем само крайния резултат:

- Многочастичната вълнова функция  $|\Psi\rangle$  (3.11) е собствен вектор на хамилтониана на сдвояване (3.8), ако енергиите на сдвояване  $E_\alpha$  удовлетворяват

системата от  $M$  нелинейни уравнения:

$$1 - 4g \sum_l \frac{d_l}{2 \varepsilon_l - E_\alpha} + 4g \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{E_\alpha - E_\beta} = 0, \quad (3.13)$$

където параметърът  $d_l = \frac{\nu_l}{2} - \frac{\Omega_l}{4}$  е свързан с израждането на едночастичното ниво  $l$ .

- Собствената стойност на хамилтониана, съответстваща на дадено решение на уравненията на *Ричардсън* (3.13) и представляваща енергията на системата, е равна на:

$$E = \sum_l \varepsilon_l \nu_l + \sum_\alpha E_\alpha. \quad (3.14)$$

Докато моделът на *Ричардсън* е свързана със сдвояването на частиците и оттам със свръхпроводимостта, то моделите на *Годан* се прилагат за описание на квантовия магнетизъм. В работа [51] *Годан* предлага семейство от напълно интегрируеми и точно решаеми модели, основани на  $SU(2)$  алгебрата на спиновите оператори. Връзката между модела на *Ричардсън* и моделите на *Годан* е забелязана и изследвана години по-късно [81]. Обобщение на моделите на *Ричардсън-Годан* е направено от *Х. Дукелски* и съавтори. Обзор на тези работи може да се намери в [82].

### 3.2.2 Изовекторно сдвояване в обобщения модел на *Ричардсън-Годан*

Сдвояването на нуклоните в ядрата се дължи на късодействащия характер на ядрените сили и възниква между частици с максимално припокриване на едночастичните им вълнови функции. Това условие се изпълнява за състояния, комплексно спрегнати по времето. Например в сферичния слоест модел, такива са състоянията с еднакъв спин и противоположни проекции на спина, т.е.  $\{jm\}$  и  $\{j-m\}$ . В аксиално симетричен базис се сдвояват нуклони в състояния  $\{\alpha m\}$  и  $\{\alpha - m\}$ .

В леките ядра валентните протони и неутрони се намират в едно и също конфигурационно пространство и затова са допустими два вида сдвояване: ( $T = 0$ ), когато се образуват само протон-неутронни двойки и ( $T = 1$ ), когато възникват протон-протонни, протон-неутронни и неутрон-неутронни двойки (с  $T$  е обозначен изоспинът на системата). В тежките ядра, където валентните протони и неутрони заемат различни слоеве, роля играе само изовекторното ( $T = 1$ ) сдвояване.

Тук ще се спрем на едно разширение на *Ричардсън–Годан* модела за алгебрата от втори ранг  $SO(5)$ , пряко свързано със задачата за изовекторно сдвояване на нуклоните в ядрата [B18, A20, 83]. Започваме разглеждането на проблема с десетте оператора, които дефинират  $SO(5)$  алгебрата. Те са:

- операторите на раждане на  $(T = 1)$  двойки:

$$b_{-1,i}^\dagger = n_i^\dagger n_{\bar{i}}^\dagger, \quad b_{0,i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (n_i^\dagger p_i^\dagger + p_i^\dagger n_{\bar{i}}^\dagger), \quad b_{1,i}^\dagger = p_i^\dagger p_{\bar{i}}^\dagger. \quad (3.15)$$

Означенията  $n$  и  $p$  се отнасят съответно за неутрони и протони.  $i$  обозначава едночастичното ниво ( $\bar{i}$  е спрегнатото му по време състояние).

- операторите на унищожение на  $(T = 1)$  двойки:  $b_{-1,i}$ ,  $b_{0,i}$ ,  $b_{1,i}$
- компонентите на изоспиновия оператор  $\hat{T}$ :

$$\begin{aligned} \hat{T}_{+,i} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (p_i^\dagger n_i + p_i^\dagger n_{\bar{i}}) \\ \hat{T}_{0,i} &= \frac{1}{2} (p_i^\dagger p_i + p_i^\dagger p_{\bar{i}}) - \frac{1}{2} (n_i^\dagger n_i + n_{\bar{i}}^\dagger n_{\bar{i}}) \\ \hat{T}_{-,i} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (n_i^\dagger p_i + n_{\bar{i}}^\dagger p_{\bar{i}}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

- операторът на броя на частиците:

$$\hat{N}_i = p_i^\dagger p_i + p_{\bar{i}}^\dagger p_{\bar{i}} + n_i^\dagger n_i + n_{\bar{i}}^\dagger n_{\bar{i}} \quad (3.17)$$

За система с  $L$  едночастични нива,  $i = 1, \dots, L$ , съществуват  $L$  интеграла на движение:

$$\begin{aligned} \hat{R}_i &= (2 + \Delta) \hat{H}_i + \Delta \hat{T}_{0,i} \\ &+ 2g \sum_{i'(\neq i)=1}^L \frac{1}{z_i - z_{i'}} \left[ \sum_{\mu} \left( \hat{b}_{\mu,i}^\dagger \hat{b}_{\mu,i'} + \hat{b}_{\mu,i'}^\dagger \hat{b}_{\mu,i} \right) + \hat{T}_i \cdot \hat{T}_{i'} + \hat{H}_i \hat{H}_{i'} \right], \end{aligned} \quad (3.18)$$

където  $\hat{H}_i = \hat{N}_i/2 - 1$ . Горният израз е в сила за интегралите на движение на всяка полупроста алгебра от произволен ранг [84]. Тъй като алгебрата  $SO(5)$  е от втори ранг, *Картановата* ѝ субалгебра съдържа два елемента:  $\hat{H}_i$  и  $\hat{T}_{0,i}$ , които поради избрания базис присъстват като линейни членове в (3.18). Може да се докаже, че операторите  $R_i$  комутират помежду си за произволен избор на параметрите  $\{z_i, g, \Delta\}$ .

Собствените стойности на интегралите на движение са равни на:

$$\begin{aligned}
r_i &= 2g \sum_{i'(\neq i)=1}^L \frac{(\frac{1}{2}v_i - 1)(\frac{1}{2}v_{i'} - 1) + t_i t_{i'}}{z_i - z_{i'}} - g \sum_{\beta=1}^{M+T_0+t} \frac{2t_i}{z_i - \omega_\beta} \\
&+ g \sum_{\alpha=1}^M \frac{v_i + 2t_i - 2}{z_i - e_\alpha} + \left[ (2 + \Delta) \left( \frac{v_i}{2} - 1 \right) - \Delta t_i \right], \quad (3.19)
\end{aligned}$$

където спектралните параметри  $e_\alpha$  и  $\omega_\beta$  трябва да удовлетворяват уравненията:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{g} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L \frac{v_i + 2t_i - 2}{z_i - e_\alpha} + \sum_{\alpha'(\neq \alpha)=1}^M \frac{2}{e_{\alpha'} - e_\alpha} - \sum_{\beta=1}^{M+T_0+t} \frac{1}{\omega_\beta - e_\alpha}, \\
\frac{\Delta}{g} &= \sum_{\beta'(\neq \beta)=1}^{M+T_0+t} \frac{2}{\omega_{\beta'} - \omega_\beta} - \sum_{\alpha=1}^M \frac{2}{e_\alpha - \omega_\beta} - \sum_{i=1}^L \frac{2t_i}{z_i - \omega_\beta}. \quad (3.20)
\end{aligned}$$

Квантовите числа, които се появяват в горните уравнения, имат следния смисъл:  $v_i$  е броят на несдвоените частици, заемащи  $i$  нивото,  $t_i$  е изоспинът им,  $t = \sum_i t_i$  е изоспинът на несдвоените фермиони в системата, а  $M$  е броят на двойките с изоспин ( $T = 1$ ).  $T_0$  е  $z$  компонентата на общия изоспин, т.е. собствената стойност на оператора  $T_0 = \sum_i T_{0,i}$ . Общият брой на нуклоните в системата е  $N = N_p + N_n = 2M + \sum_i v_i$ , а разликата между броя на протоните и неутроните е свързана с проекцията на общия изоспин:  $N_p - N_n = 2T_0$ . Квантовите числа  $M$ ,  $T_0$ ,  $v_i$  и  $t_i$  се запазват;  $T$  се запазва само, ако  $\Delta = 0$ .  $g$  и  $\Delta$  са параметри на задачата:  $g$  е константата на сдвояване, а  $\Delta$  се нарича изоспинова симетрия и характеризира разликата в силата на сдвояване на неутрони и протони. Когато  $\Delta = 0$ , взаимодействието на сдвояване няма изоспинова зависимост. Тъй като  $SO(5)$  алгебрата е от втори ранг, в уравнения (3.20) има два набора от спектрални параметри  $\{e_\alpha\}$  и  $\{\omega_\beta\}$ .

Въпреки че всяка функция на интегралите на движение  $\hat{R}_i$  (3.18) представлява интегрируем хамилтониан, линейната комбинация  $\sum_{i=1}^L z_i \hat{R}_i$  води до прост израз за хамилтониана, описващ изовекторното сдвояване:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L z_i \hat{R}_i + g \hat{C} \\
&= \sum_j \varepsilon_j \left( \hat{N}_j + \Delta \hat{N}_{p,j} \right) + \frac{g}{2} \hat{T} \cdot \hat{T} + g \sum_{\mu j m j' m'} \hat{b}_{\mu, j m}^\dagger \hat{b}_{\mu, j' m'}, \quad (3.21)
\end{aligned}$$

където  $\hat{C}$  е константен оператор, зависещ от операторите на величините, които се запазват в задачата. Горният израз е записан в сферичен базис ( $i \equiv jm$ ) и е въведено означението  $\varepsilon_j = z_j/2$ . Членът  $(\hat{T} \cdot \hat{T})$  нарушава изоспиновата симетрия и за  $\Delta \neq 0$  операторът  $\hat{T}^2$  не комутира с хамилтониана (3.21) и следователно,  $T$  не е добро квантово число. Неговата проекция обаче  $T_0$  се запазва. Използвайки същата линейна комбинация за собствените стойности на интегралите на движение  $\{r_i\}$  и уравненията (3.20), получаваме собствената стойност на хамилтониана (3.21):

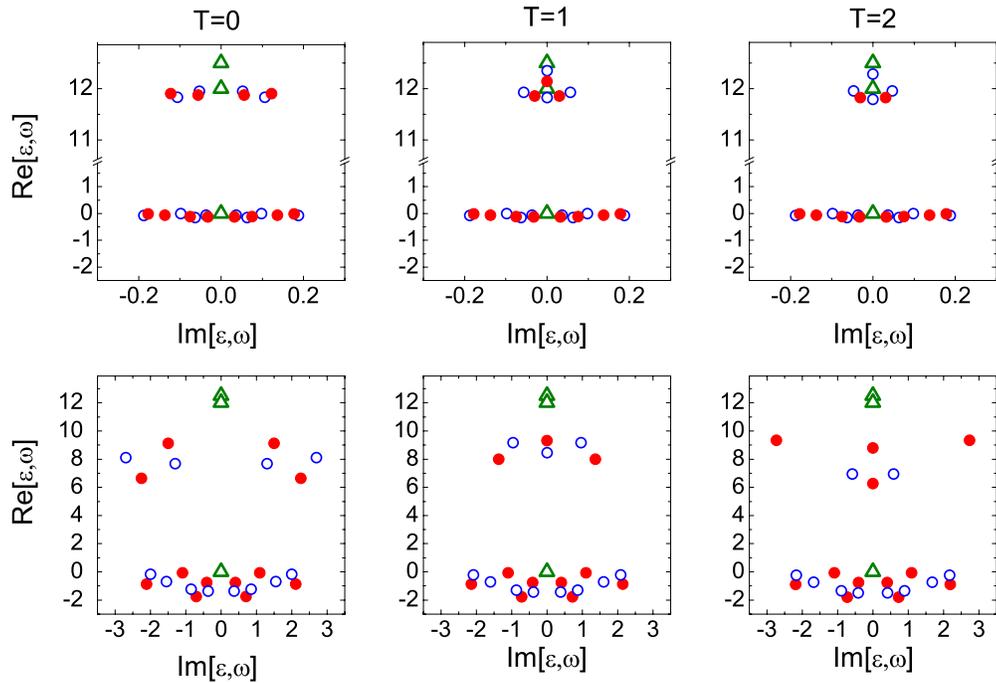
$$E = \sum_{\alpha=1}^M e_{\alpha} + \frac{\Delta}{2} \sum_{\beta=1}^{M+T_0+t} w_{\beta} + \sum_j \varepsilon_j \left[ \frac{v_j}{2} (2 + \Delta) - \Delta t_j \right] + \frac{g}{2} T_0 (T_0 - 1) . \quad (3.22)$$

На всяко решение на системата уравнения (3.20) отговаря собствена стойност (3.23) на хамилтониана на изовекторно сдвояване (3.21).

Свойствата на предложения модел на изовекторно сдвояване ще разгледаме за конкретния случай на ядрото  $^{64}\text{Ge}$ . То се разглежда като  $^{40}\text{Ca}$ -сърцевина, дванадесет валентни неутрона и дванадесет валентни протона, заемащи нивата  $f_{7/2}$ ,  $p_{3/2}$ ,  $f_{5/2}$ ,  $p_{1/2}$  и  $g_{9/2}$  със съответните едночастични енергии (в MeV)  $\varepsilon_{f_{7/2}} = 0.00$ ,  $\varepsilon_{p_{3/2}} = 6.00$ ,  $\varepsilon_{f_{5/2}} = 6.25$ ,  $\varepsilon_{p_{1/2}} = 7.1$  и  $\varepsilon_{g_{9/2}} = 9.60$ . Разглеждаме случая, при който всички нуклони са сдвоени, т.е.  $v_i = 0$  за всяко едночастично ниво и изоспиновата симетрия  $\Delta$  е равна на нула.

Ако тази задача се разглежда като проблем в слоестия модел, то той далеч надхвърля съвременните възможности за точна диагонализация. Решаването му в рамките на предлагания подход изисква да се намерят решенията на система от 12 комплексни нелинейни уравнения за всяка енергия на сдвояване  $\{e_{\alpha}\}$  и  $(12 - T)$  уравнения за спектралните параметри  $\{\omega_{\beta}\}$ . За численото интегриране на системата е използван методът на *Нютон-Рафсън* [86]. Първа стъпка на числената процедура е задаване на подходящи начални стойности на двата класа спектрални параметри. При много слабо сдвояване ( $g \rightarrow 0$ ) нуклоните заемат едночастичните нива съгласно принципа на *Паули*. Например при ( $T = 0$ ) осем двойки нуклони се намират в  $f_{7/2}$  слоя и четири - в  $p_{3/2}$  слоя. Може да се докаже, че спектралните параметри са или реални числа, или възникват като комплексно спрегнати двойки. В ( $T = 0$ ) случая за начални стойности на спектралните параметри при  $g = 0.05$  MeV избираме шест двойки комплексно спрегнати  $\{e_{\alpha}\}$  променливи. Реалните части на 4 от тях са малко по-малки от удвоената стойност на едночастичната енергия на  $f_{7/2}$  нивото. Реалните части на останалите две комплексно спрегнати

двойки са близки до  $2\varepsilon_{p_{3/2}}$ . Имагинерните части на спектралните параметри  $\{e_\alpha\}$  са разпределени равномерно в интервала  $(-0.2 : 0.2)$ . Реалните и имагинерни части на началните стойности на  $\{\omega_\beta\}$  променливите се различават с 0.01 от тези на  $\{e_\alpha\}$ . С така определените начални стойности се намира числено решението на системата уравнения (3.20). Получените спектрални параметри се използват като начални стойности за решаването на уравненията при  $g = g + 0.05$  и т.н. Тази процедура дава възможност да се проследи еволюцията на решенията с нарастване на константата на сдвояване, която ще бъде дискутирана по-късно.



Фигура 3.1: Енергии на сдвояване  $\{e_\alpha\}$  (червени точки) и спектрални параметри  $\{\omega_\beta\}$  (сини кръгчета) за най-ниските състояния с  $(T = 0, 1, 2)$  в ядрото  $^{64}\text{Ge}$ . Със зелени триъгълници са отбелязани удвоените енергии на едночастичните нива. Графиките в горната редица представляват резултатите при  $g = 0.05$  MeV, а в долната – при  $g = 0.5$  MeV.

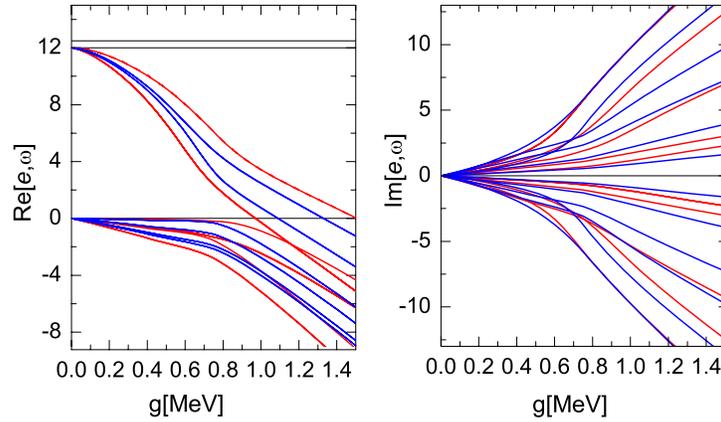
Представянето на резултатите от приложението на точно решаемия модел за описание на изовекторното сдвояване на нуклоните в ядрата ще започнем с анализ на трите най-ниски нива с  $(T = 0, 1, 2)$  на ядрото  $^{64}\text{Ge}$  за две стойности на параметъра на сдвояване  $g = 0.05$  MeV (слабо сдвояване) и  $g = 0.5$  MeV (силно сдвояване). Стойностите на спектралните параметри  $\{e_\alpha\}$  и  $\{\omega_\beta\}$ , заедно с удвоените енергии на едночастичните нива  $f_{7/2, p_{3/2}}$  и  $f_{5/2}$ , са показани на фигура (3.1)

Решението за  $(T = 0)$  описва основното състояние, а  $(T = 1)$  и  $(T = 2)$  – възбудени състояния на ядрото. Както вече казахме, различните конфигурации могат да се класифицират при слабо взаимодействие ( $g \approx 0$ ). Този случай е представен в горната редица на фигура (3.1). В основно състояние осем енергии на сдвояване са близки до  $2\varepsilon_{f_{7/2}}$  и четири – до  $2\varepsilon_{p_{3/2}}$ . Същото важи и за дванадесетте  $\{\omega_\beta\}$  параметъра. Съгласно принципа на *Паули* тази конфигурация е забранена при  $(T = 1)$  състоянието и следователно в този случай една енергия на сдвояване е реално число и е близка до  $2\varepsilon_{f_{5/2}}$ . Близки до  $2\varepsilon_{p_{3/2}}$  остават три енергии на сдвояване – една реална и две комплексно спрегнати.  $\{\omega_\beta\}$  параметрите при  $(T = 1)$  са общо единадесет на брой и три от тях (един реален и два комплексно спрегнати) са разположени в околността на  $2\varepsilon_{p_{3/2}}$ . В  $(T = 2)$  случая разположението на спектралните параметри е подобно на това при  $(T = 1)$ , с тази разлика, че броят на  $\{\omega_\beta\}$  параметрите е  $(M - T) = 10$ .

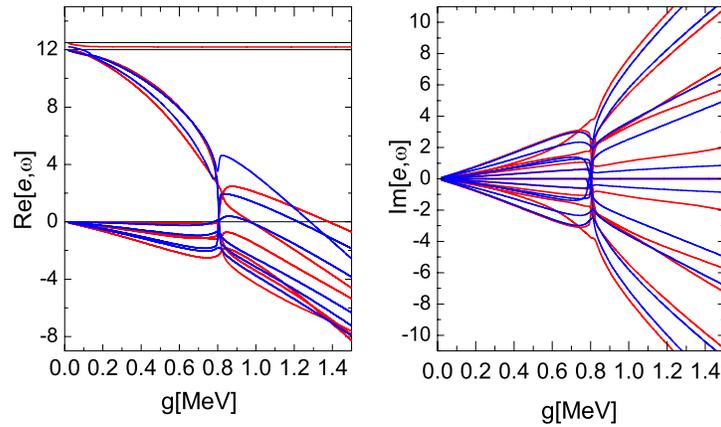
На долната редица на фигура (3.1) се вижда, че с нарастване на константата на сдвояване  $g$  реалната част на спектралните параметри намалява, а абсолютната стойност на имагинерната част се увеличава. Решенията на системата уравнения (3.20) са нестабилни, когато реална енергия на сдвояване стане приблизително равна на удвоената енергия на едночастично състояние, или когато реални  $e_\alpha$  и  $\omega_\beta$  се пресичат. Това се наблюдава например при  $(T = 2)$ , когато едно решение  $e_\alpha$  при  $(g \approx 0)$  се намира над  $p_{3/2}$  нивото, а с увеличаване на  $g$  намалява и става равно на  $2\varepsilon_{p_{3/2}}$ . Вторият типичен случай, при който се наблюдава нестабилност на решенията, е илюстриран в  $(T = 1)$  състояние. При малки стойности на  $g$  реално решение за  $\omega_\beta$  се намира над реална енергия на сдвояване  $e_\alpha$ , докато при силно сдвояване те си разменят местата.

Друг поглед към зависимостта на спектралните параметри от константата на сдвояване предоставят фигура (3.2), (3.3) и (3.4). В левия панел на графиките е показана еволюцията на реалните части на спектралните параметри, а в десните – на имагинерните части при  $(T = 0, 1, 2)$ . Вижда се, че нарастването на сдвояването оказва влияние първо на спектралните параметри, близки до *Ферми* нивото. В основно състояние не се наблюдават сингулярности в решенията на системата уравнения (3.20), докато при  $(T = 1)$  те възникват при две стойности на константата на сдвояване  $g \approx 0.2 \text{ MeV}$  и  $g \approx 0.8 \text{ MeV}$ . В случая, когато изоспинът на системата е  $(T = 2)$ , първата сингулярност възниква при много малка стойност на константата на сдвояване, още при  $g \approx 0.08 \text{ MeV}$ , а се наблюдават и още две в разглеждания интервал на  $g$ : при  $g \approx 0.7 \text{ MeV}$  и  $g \approx 0.9 \text{ MeV}$ .

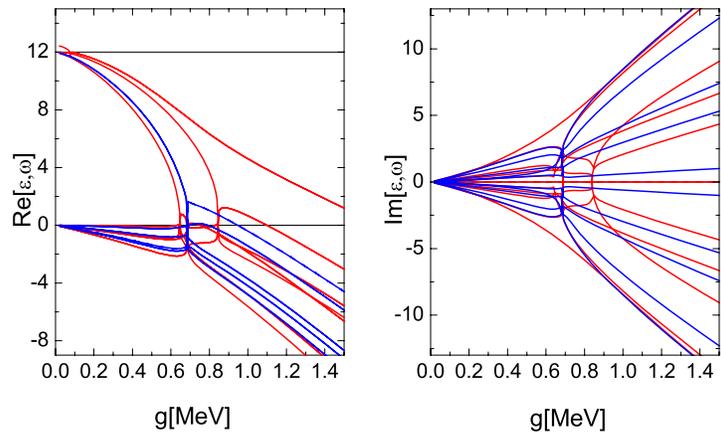
Ще продължим изследването на свойствата на разглеждания точно решаем метод, като представим пълната енергия на системата от нуклони. Когато всички нуклони са сдвоени и изоспиновата симетрия  $\Delta = 0$ , пълната енергия на системата



Фигура 3.2: Спектрални параметри  $\{e_\alpha\}$  (червени линии) и  $\{\omega_\beta\}$  (сини линии) за ядрото  $^{64}\text{Ge}$  при  $(T = 0)$ . Черните линии в левия панел на графиката обозначават удвоените едночастични енергии на нивата  $f_{7/2}$ ,  $p_{3/2}$  и  $f_{5/2}$ .



Фигура 3.3: Спектрални параметри при изоспин  $(T = 1)$ . Означенията са като на фигура (3.2)

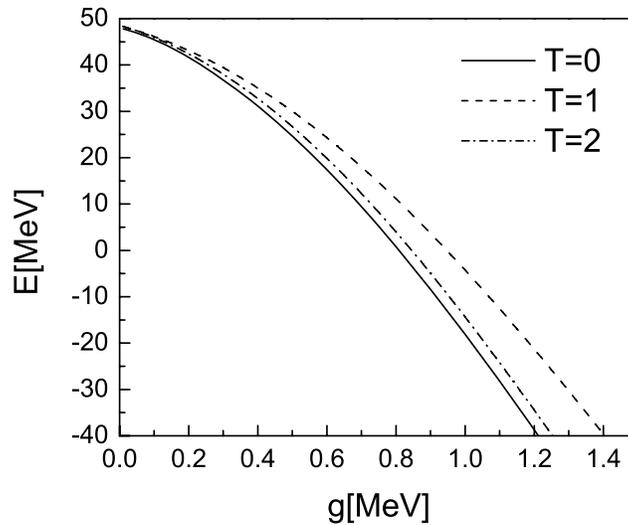


Фигура 3.4: Спектрални параметри при изоспин  $(T = 2)$ . Означенията са като на фигура (3.2)

(3.22) се редуцира до сума от енергиите на сдвояване на нуклоните в системата:

$$E = \sum_{\alpha=1}^M e_{\alpha} \quad (3.23)$$

На фигура(3.5) е показана зависимостта на енергията на ядрото  $^{64}\text{Ge}$  за трите разглеждани състояния на системата с изоспин ( $T = 0, 1, 2$ ) от константата на сдвояване. Както следва да се очаква, при слаба връзка между комплексно спрегнатите по време нива енергията на системата е почти една и съща и в трите случая. С увеличаване на силата на сдвояване енергията намалява. Трябва да се отбележи и фактът, че независимо от стойността на константата на сдвояване, енергията на възбуденото ( $T = 2$ ) състояние не се отличава съществено от енергията на основно състояние, докато ( $T = 1$ ) състоянието има значително по-висока енергия на възбуждане.



Фигура 3.5: Пълна енергия на ядрото  $^{64}\text{Ge}$  за състоянията с ( $T = 0, 1, 2$ ) като функция на константата на сдвояване  $g$ .

Описанието на квантовомеханичното състояние на системата от нуклони в точно решаемия модел на изовекторно протон–неутронно сдвояване се допълва от числата на запълване на отделните едночастични състояния в конфигурационното пространство. Те са дефинират като средна стойност на оператора на броя на частиците за даден слой и се получават от интегралите на движение с помощта на теоремата на Хелман–Файнман. Средната стойност на операторите на броя на неутроните и протоните, заемащи едночастичното ниво  $i$ , са равни съответно на:

$$\begin{aligned}\langle N_{p,i} \rangle &= 1 + \frac{\partial r_i}{\partial \Delta} \\ \langle N_{n,i} \rangle &= r_i - g \frac{\partial r_i}{\partial g} - (1 + \Delta) \left( 1 + \frac{\partial r_i}{\partial \Delta} \right) + 1\end{aligned}\quad (3.24)$$

За параметрите на задачата, които сме приели ( $v_i = 0$ ,  $t_i = 0$ ,  $\Delta = 0$ ), числата на запълване на нуклоните се пресмятат по формулата:

$$\eta_i = g^2 \sum_{\alpha=1}^M \frac{\Omega_i}{(2\varepsilon_i - e_\alpha)^2} \frac{\partial e_\alpha}{\partial g}, \quad (3.25)$$

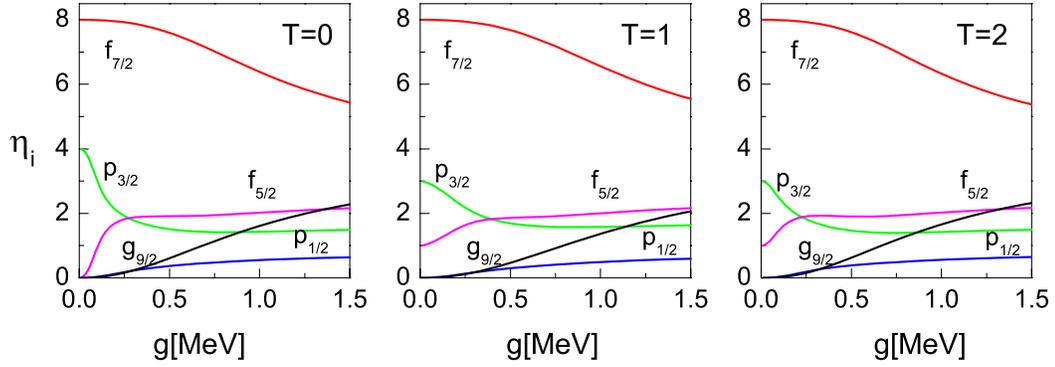
където,  $\Omega_i$  е израждането на едночастичното ниво  $i$ . Производните на енергиите на сдвояване  $\{e_\alpha\}$  по отношение на константата на взаимодействие  $g$  се получават като решения на следната система нелинейни уравненията:

$$\begin{aligned}\frac{1}{g^2} &= \left[ \sum_{l=1}^L \frac{\Omega_l}{(2\varepsilon_l - e_\alpha)^2} - \sum_{\beta=1}^{M-T} \frac{1}{(e_\alpha - w_\beta)^2} + 2 \sum_{\beta(\neq\alpha)=1}^M \frac{1}{(e_\alpha - e_\beta)^2} \right] \frac{\partial e_\alpha}{\partial g} - \\ &2 \sum_{\beta(\neq\alpha)=1}^M \frac{1}{(e_\alpha - e_\beta)^2} \frac{\partial e_\beta}{\partial g} + \sum_{\beta=1}^{M-T} \frac{1}{(e_\alpha - w_\beta)^2} \frac{\partial w_\beta}{\partial g} \\ 0 &= \left[ \sum_{\beta=1}^M \frac{1}{(w_\alpha - e_\beta)^2} - \sum_{\beta(\neq\alpha)=1}^{M-T} \frac{1}{(w_\alpha - w_\beta)^2} \right] \frac{\partial w_\alpha}{\partial g} + \\ &\sum_{\beta(\neq\alpha)=1}^{M-T} \frac{1}{(w_\alpha - w_\beta)^2} \frac{\partial w_\beta}{\partial g} - \sum_{\beta=1}^M \frac{1}{(w_\alpha - e_\beta)^2} \frac{\partial e_\beta}{\partial g}.\end{aligned}$$

На фигура (3.6) са показани числата на запълване на едночастичните нива за ядрото  $^{64}\text{Ge}$  за състоянията с ( $T = 0, 1, 2$ ) като функция на константата на сдвояване  $g$ .

При слабо сдвояване числата на запълване са много близки до стойностите в модела на независимите частици, определени от принципа на *Паули* за съответните едночастични състояния. С нарастване на взаимодействието двойките нуклони започват да населяват с вероятност, различна от нула, орбитите над *Ферми* нивото. Интерес представлява фактът, че при силно сдвояване,  $g \geq 0.3 \text{ MeV}$  за ( $T = 0, 2$ ) състоянията и  $g \geq 0.4 \text{ MeV}$  за ( $T = 1$ ) състояние, вероятността за заселване на  $p_{3/2}$  е по-малка, отколкото за  $f_{5/2}$  нивото.

Тук трябва да отбележим, че въпреки появата на сингулярности в решенията



Фигура 3.6: Числа на запълване на едночастичните нива в  $fp + g_{9/2}$  слоя за ядрото  $^{64}\text{Ge}$  за състоянията с  $(T = 0, 1, 2)$  като функция на константата на сдвояване  $g$ .

на уравненията на Ричардсън за спектралните параметри на системата, наблюдаемите величини като пълна енергия и числа на запълване са гладки функции на константата на сдвояване. Това показва, че предлаганият обобщен модел на *Ричардсън–Годан* реалистично отразява свойствата на система от два типа фермиони, взаимодействащи си чрез силите на сдвояване.

**В заключение** трябва да се подчертае, че предложеното обобщение на модела на *Ричардсън–Годан* дава възможност за намиране на точното решение на проблема за изовекторното протон–неутронно сдвояване в рамките на  $SO(5)$  алгебрата. Стандартният модел на *Ричардсън–Годан* се обобщава за алгебри от втори ранк. Допуска се и нарушаване на изоспиновата симетрия. При тези условия е получена система от нелинейни алгебрични уравнения за двата типа спектрални параметри в модела. Разглеждайки като пример ядрото  $^{64}\text{Ge}$  в  $fp + g_{9/2}$  слоя, са анализирани решенията на уравненията *Ричардсън–Годан*. Специално внимание е отделено на зависимостта на спектралните параметри, енергията на системата и числата на запълване на едночастичните нива като функция на константата на сдвояване. Този цикъл работи показва, че свойствата на системи с голям брой частици, между които действат сили на сдвояване, описвани от алгебрата  $SO(5)$ , могат да се изучават в рамките на точнорешаем модел. Това е изключително важно както за ядрената структура, така и за изследване на високотемпературната свръхпроводимост във физиката на твърдото тяло [87, 88].

### 3.2.3 Метод на Хартри–Фок–Боголюбов със сили, зависещи от плътността

Един от актуалните въпроси на съвременната ядрена физика е: какво свързва неутроните и протоните в стабилни ядра и редки изотопи? Нарастващите възможности на ускорителите на радиоактивни елементи дават възможност да се изучават свойствата на ядра, далече от линията на стабилност от една страна и свръхтежки елементи от друга. Резултатите от тези експерименти представляват голям интерес както за теорията на ядрената структура, така и за астрофизиката. Истинско предизвикателство е да се описват или предсказват в детайли свойствата на екзотичните ядра и да се разкрива произхода на техните особености. Подходът, който дава възможност да се изучават характеристиките на ядрата в цялата масова област и да се предсказва възможността за съществуване на ненаблюдавани досега изотопи, е самосъгласуваният метод на Хартри–Фок–Боголюбов (HFVB) със сили, зависещи от плътността.

Методът на Хартри–Фок–Боголюбов е микроскопичен подход, който включва при описание на характеристиките на ядрената структура както корелациите на средното поле, описани в част (2.2) на настоящата дисертация, така и корелациите на сдвояване. Корелациите на сдвояване се въвеждат чрез понятието независима квазичастица, дефинирана чрез трансформацията на Боголюбов [26]:

$$\hat{b}_n^+ = \sum_i (U_{in} \hat{a}_i^+ + V_{in} \hat{a}_i) , \quad (3.26)$$

която свързва едночастичните оператори на раждане и унищожение  $\hat{a}_i^+$  и  $\hat{a}_i$  с квазичастицата  $\hat{b}_n^+$ . В матрично представяне трансформацията (3.26) може да се запише по следния начин:

$$\begin{pmatrix} \hat{b} \\ \hat{b}^+ \end{pmatrix} = W^+ \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^+ \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Матрицата  $W$  е унитарна, т.е.  $UU^+ + VV^+ = 1$ ,  $UU^+ + V^*V^T = 1$ ,  $U^TV + V^TU = 0$ ,  $UV^+ + V^*U^T = 0$ . Основното състояние на системата се дефинира като квазичастичен вакуум:

$$b_n^+ | \Phi \rangle = 0 \quad \text{за всяко } n . \quad (3.28)$$

Докато в метода на Хартри–Фок за описание на едночастичните оператори е достатъчна едночастичната матрица на плътността (2.23), характеристиките на независимите квазичастици зависят от две величини: едночастичната матрица на плътността  $\rho$  и тензора на сдвояване  $\kappa$ :

$$\rho_{ij} = \langle \Phi | \hat{a}_j^+ \hat{a}_i | \Phi \rangle = (V^* V^T)_{ij} = \rho_{ji}^* \quad (3.29)$$

$$\kappa_{ij} = \langle \Phi | \hat{a}_j \hat{a}_i | \Phi \rangle = (V^* U^T)_{ij} = -\kappa_{ji} \quad (3.30)$$

Удобно е  $\rho$  и  $\kappa$  да се разглеждат като елементи на обобщена квазичастична матрица:

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

При HFВ пресмятания със сили, зависещи от плътността, вместо тензора на сдвояване  $\kappa$  (3.30) се използва матрицата на сдвояване  $\tilde{\rho}$ , която се получава от  $\kappa$  при обръщане на знака на компонентата на спина в единия от индексите. В координатното пространство тя се дефинира по следния начин ([91]):

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \langle \Phi | \hat{a}_{\mathbf{r}', -\sigma', \tau'} \hat{a}_{\mathbf{x}} | \Phi \rangle \\ &= -\sigma \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{r}', -\sigma', \tau') \end{aligned} \quad (3.32)$$

Съгласно вариационния принцип (1.6) основното състояние на системата се намира чрез минимизиране на средната стойност на хамилтониана на системата при условие, че средната стойност на операторите на броя на неутроните и протоните е равен съответно на броя на нуклоните в системата, т.е.:  $\langle \Phi | \hat{N}_q | \Phi \rangle = N_q$ ,  $q = n, p$ . Това води до система уравнения:

$$\mathcal{H} \begin{pmatrix} U_n \\ V_n \end{pmatrix} = e_n \begin{pmatrix} U_n \\ V_n \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

където

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

и

$$h_{ij} = \frac{\delta E}{\delta \rho_{ij}} = h_{ji}^*, \quad \Delta_{ij} = \frac{\delta E}{\delta k_{ij}^*} = -\Delta_{ji}. \quad (3.35)$$

Ако хамилтонианът на системата отчита само двучастичното взаимодействие  $H = T + V$ , матричните елементи на  $h$  и  $\Delta$  се изразяват чрез  $\rho$  (3.29) и  $k$  (3.30):

$$h_{ij} = T_{ij} + \sum_{kl} V_{ikjl} \rho_{lk}, \Delta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{kl} V_{ijkl} k_{kl}, \quad (3.36)$$

където  $V_{ikjl}$  е антисиметризиращият матричен елемент на двучастичното взаимодействие. В най-компактна форма HFV уравнения (3.33) могат да се представят във вида  $[\mathcal{H}, \mathcal{R}] = 0$ .

Квазичастичните енергии  $\{e_n\}$  са множители на *Лагранж*, въведени за да се осигури ортогоналност на квазичастичните състояния. Енергийният спектър в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов* е неограничен както за положителните, така и за отрицателните стойности на квазичастичните енергии. На всяко решение на системата уравнения (3.33) с квазичастични енергии  $\{e_n\}$  съответства и решение с квазичастични енергии  $\{-e_n\}$ . Достатъчно е да се работи само с единия набор от решения, защото всеки един от тях поотделно удовлетворява фермионните антикомутиационни съотношения.

В зависимост от конкретната задача, решенията на HFV уравненията могат да се представят чрез различни системи ортонормирани едночастични функции, всяка от които диагонализира определен оператор. Квазичастичният базис е образуван от функциите, които диагонализират обобщената матрица на плътността  $\mathcal{R}$  (3.31) и същевременно хамилтониана на системата (3.34), защото те комутират помежду си. Едночастичната матрица  $\rho$  (3.29) е диагонална в така наречения каноничен базис, наречен още базис на естествените орбитали. В каноничния базис тензорът на сдвояване  $k$  (3.30) и матрицата  $U_{ni}$  са диагонални, а  $V_{ni}$  може да се представи като  $(2 \times 2)$  матрица, чиито недиагонални елементи са различни от нула. HFV решенията могат да се получат и в *Хартри–Фоковия* базис, който диагонализира хамилтониана на средното поле  $h$ . В този случай HFV уравненията се решават в пространството на ограничен брой нива, между които действат корелациите на сдвояване.

Трансформацията на *Боголюбов* (3.26) е много обща и не налага ограничения върху симетриите на решенията на HFV уравненията. Поради сложността на числената процедура, методът на *Хартри–Фок–Боголюбов* се прилага за задачи, които допускат определени ограничения върху вида на търсените вълнови функции. Най-често се налагат два типа симетрии: 1) пространствени, свързани с формата на разглежданите ядра и 2) изисква се инвариантност по отношение на комплексно спрягане по времето. Подробна дискусия по този въпрос може да се намери в работи [89].

*Пространствените симетрии* се налагат чрез избора на базис, в който се представят търсените решения на HFV уравненията. Разработени са кодове, при които системата уравнения (3.33) се решава в координатното пространство както

при сферична симетрия [90–92], така и за аксиална симетрия на вълновите функции [93], като се използва разложение по собствените функции на хармоничен осцилатор. Аналитичните свойства на осцилаторния базис улесняват значително числените пресмятания, особено при описание на стабилни ядра. Проблем възниква при изследване на екзотични ядра, далече от линията на стабилност. В тези случаи сходимостта на разложенията на вълновите функции с нарастване на броя на включените осцилаторни слоеве е бавна и получените HFV решения бързо клопят към нула на големи разстояния, вместо да възпроизвеждат реалистичната експоненциална асимптотика на вълновите функции. Това води до нереалистични плътности на повърхността на ядрата и оттам до нереалистично описание особено на корелациите на сдвояване.

Начин за преодоляване на този проблем е предложен в работи [94, 95], при която квазичастичните HFV вълнови функции се разлагат в базис на трансформиран хармоничен осцилатор. Трансформираният осцилаторен базис се получава, като върху собствените функции на хармоничния осцилатор се приложи локално мащабно преобразуване. Този метод е предложен и разработен от *И.Ж.Петков* и *М.В.Стоицов* [43, 96, 97]. Трансформираните осцилаторни функции притежават аналитичните свойства на стандартния осцилаторен базис, като в същото време имат реалистично поведение на големи разстояния.

Когато енергията на системата се изследва като функция на някаква пространствена степен на свобода, тогава се налагат допълнителни условия и се търси минимум на израз като този:

$$E = \langle \hat{H} \rangle - \sum_{q=n,p} \lambda_q \langle \hat{N}_q \rangle - \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} \langle \hat{Q}_{\alpha} \rangle . \quad (3.37)$$

$\langle \hat{Q}_{\alpha} \rangle = \langle \Phi | \hat{Q}_{\alpha} | \Phi \rangle$  е средната стойност на оператора, чието влияние върху енергията се изучава, а  $\lambda_i$  са множители на *Лагранж*. Когато се очаква, че енергията има локални минимума, се използват и квадратични ограничения от вида:

$$E = \langle \hat{H} \rangle - \sum_{q=n,p} \lambda_q \langle \hat{N}_q \rangle - \sum_{\alpha} C_{\alpha} (\langle \hat{Q}_{\alpha} \rangle - \mu_{\alpha})^2 , \quad (3.38)$$

където  $\mu_{\alpha}$  е параметър, равен на търсената средна стойност на оператора  $\hat{Q}_{\alpha}$ .

Вторият тип симетрии, който се предполага при изследване на свойствата на ядрената структура в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов*, е инвариантност по отношение на комплексно спрягане по времето. Това ограничава разглежданите системи до четни–четни ядра и до двуквазичастични възбуждания на тези ядра. Квазичастиците заемат състояния, които са изродени по енергия и отговарят на две собствени стойности на оператора  $\hat{R}_x = \exp(i\pi \hat{J}_x)$ , където  $\hat{J}_x$  е оператор на проек-

цията на пълния ъглов момент. За аксиално симетрични ядра тези две състояния имат равни по големина и противоположни по знак проекции на ъгловия момент върху оста на симетрия. В този случай матриците  $U$  и  $V$  могат да се запишат в блок-диагонална форма:

$$U = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & \tilde{u}^* \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{v}^* \\ -v & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.39)$$

където матриците  $(u, v)$  и съответно  $(\tilde{u}, \tilde{v})$  отговарят на състояния с различна проекция на ъгловия момент. Това води до опростяване на изразите за едночастичната матрица на плътността  $\rho$  (3.29) и за тензора на сдвояване  $k$  (3.30):

$$\rho = \begin{pmatrix} r & 0 \\ 0 & \tilde{r}^* \end{pmatrix}, \quad k = \begin{pmatrix} 0 & k \\ -k^T & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} r = \tilde{v}\tilde{v}^+ \\ \tilde{r} = vv^+ \\ k = \tilde{v}\tilde{u} \end{cases}. \quad (3.40)$$

HFV уравненията (3.33) получават прост и симетричен вид:

$$\begin{pmatrix} h & d \\ d^+ & -\tilde{h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u & \tilde{v} \\ -v & \tilde{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u & \tilde{v} \\ -v & \tilde{u} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i^\omega \delta_{ij} & 0 \\ 0 & -E_i^\omega \delta_{ij} \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

където

$$h = \begin{pmatrix} h & 0 \\ 0 & \tilde{h}^* \end{pmatrix}, \quad \Delta = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{d} \\ -d^T & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

За описание на системи, в които сдвояването е между състояния, комплексно спрегнати по времето, най-често се използва методът на *Бардин–Купер–Шриффер* (BCS). Този метод е приближение на HFV метода и изисква да се знаят *a priori* състоянията, които се сдвояват. Тогава сдвоените състояния са изродени по енергия  $e_n = e_{\bar{n}}$ , а едночастичните им функции са комплексно спрегнати по времето. Това води до два пъти по-малко на брой свързани уравнения, в сравнение с HFV уравненията (3.33). В общия случай операторите на средното поле и на сдвояването не комутират, но за стабилни ядра, където може да се приеме предположението за инвариантност по отношение на комплексно спрягане по времето, се постулира, че тези полета комутират. Това означава, че матрицата  $\hat{d}$  е диагонална в базис, в който и средното поле има диагонална форма, т.е.:

$$d_{n\bar{m}} = \delta_{nm} d_{n\bar{m}}, \quad \hat{h}\varphi_n = e_n \varphi_n. \quad (3.43)$$

Тогава двете компоненти  $U_n$  и  $V_n$  на вълновата функция са пропорционални на соб-

ствените вектори на средното поле:  $U_n = u_n \varphi_n$  и  $V_n = v_n \varphi_n$ . BCS методът изисква освен диагонализация на средното поле и определяне на  $u_n$  и  $v_n$  амплитудите от уравнението на процепа:

$$(e_n - \lambda)(u_n^2 - v_n^2) + 2d_{n\bar{n}}u_nv_n = 0 \quad (3.44)$$

BCS методът е значително по-прост от изчислителна гледна точка и дава резултати за основните ядрени характеристики за стабилни ядра в много добро съгласие с експеримента. Съществен недостатък на метода представлява фактът, че матрицата на сдвояване  $\tilde{\rho}$  (3.32) не е локализирана, когато *Ферми* нивото на системата клони към нула. Затова при изследване на слабо свързани ядра, далече от линията на стабилност, и при определяне на бариерата на деление на ядрата трябва да се използва HFB методът, който единствен дава възможност за реалистично описание на ядрената структура в тези случаи.

В съвременните HFB пресмятания, които се прилагат както за описание на свойствата на ядрата, чиито характеристики могат да се мерят, така и за области от масовата таблица, все още недостъпни експериментално, нуклон–нуклонното взаимодействие се представя чрез функционал на енергията, зависещ от плътности и токове, свързани с разпределенията на плътността, спина, импулса и кинетичната енергия. Теоремата, според която съществува универсален функционал на енергията  $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ , с помощта на който по формулата:

$$E[\rho, \tilde{\rho}] = \int d^3\mathbf{r} \mathcal{H}(\mathbf{r}) \quad (3.45)$$

може да се пресметне енергията на ядрена система, ако се знае нейната плътност, е доказана от *Кон* и *Шем* [98]. Приложението на теорията на функционала на плътността за описание на характеристиките на ядрата в нерелативисткия случай е разгледано подробно в монографията [43], а обобщение за релативистки системи и приложения са представени в [54].

Основните преимущества на функционала на плътността на енергията пред другите методи за представяне на нуклон–нуклонното взаимодействие са:

- може да бъде използван за изследване свойствата на ядрата в цялата масова област, включително и за екзотични ядра, далеч от линията на стабилност;
- позволява да се отчитат нарушения на различни симетрии на системата, които водят до голямо разнообразие от деформации;
- подходящ е за описание както на крайни ядра, така и на ядрена материя.

Както беше показано в част (2.2) идеята за съществуване на енергетичен функционал на плътността за ядрени системи възниква исторически във връзка с приложението на ефективни сили, зависещи от плътността, в метода на *Хартри–Фок*. По-късно видът на нуклон–нуклонното взаимодействие се извежда в рамките на теорията на функционала на плътността на енергията.

Енергетичният функционал на плътността зависи най-общо от локални ядрени характеристики. Съгласно стандартните дефиниции [99, 100] това са така наречените частично–дупчести ( $ph$ ) локални плътности: частична –  $\rho(\mathbf{r})$ , кинетична –  $\tau(\mathbf{r})$ , спинова –  $\mathbf{s}_k(\mathbf{r})$ , спин-кинетична –  $\mathbf{T}_k(\mathbf{r})$ , плътност на тока –  $\mathbf{j}_k(\mathbf{r})$ , тензор-кинетична –  $\mathbf{F}_k(\mathbf{r})$ , плътност на тока на спина –  $J_{kl}(\mathbf{r})$ , както и съответните частично–частични ( $pp$ ) плътности или плътности на сдвояване:  $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$ ,  $\tilde{\tau}(\mathbf{r})$ ,  $\tilde{\mathbf{s}}_k(\mathbf{r})$ ,  $\tilde{\mathbf{T}}_k(\mathbf{r})$ ,  $\tilde{\mathbf{j}}_k(\mathbf{r})$ ,  $\tilde{\mathbf{F}}_k(\mathbf{r})$ , и  $\tilde{J}_{kl}(\mathbf{r})$ . Дефинициите на някои от тези плътности са дадени в част (2.2). Тъй като ядрото е система от два вида фермиони, трябва да се въведе и изоспинът като координата на частиците и да се разглеждат съответно изоскаларни и изовекторни компоненти на плътностите.

В съвременната ядрена теория се използват две вида сили, зависещи от плътността – сили на *Гони* и сили на *Скирм*.

Първи *Бринк* и *Бюкер* предлагат нуклон–нуклонни сили, действащи на крайно разстояние, дефинирани като сума от два гаусиана с пространствено, спиново и изоспиново смесване [42]. Използвано в метода на *Хартри–Фок*, това взаимодействие не описва експерименталните стойности на енергията на връзка на сферичните ядра. *Гони* предлага да се добави зависимост от плътността и спин–орбитален член [51]. По-късно е предложена директна параметризация на взаимодействието [101], което днес се нарича сили на *Гони*. То има вида:

$$\begin{aligned}
v_{Gogni}(\mathbf{r}_{12}) = & \sum_{j=1}^2 e^{(r_{12}/\mu_j)^2} (W_j + B_j \hat{P}_\sigma - H_j \hat{P}_\tau - M_j \hat{P}_\sigma \hat{P}_\tau) + \\
& t_3 (1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_{12}) \rho^\alpha \left( \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) + \\
& iW_{ls} (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \cdot \mathbf{k}^\dagger \times \delta(\mathbf{r}_{12}) \mathbf{k} ,
\end{aligned} \tag{3.46}$$

където  $\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)$  е спин–обменният оператор,  $\hat{P}_\tau = \frac{1}{2}(1 + \hat{\tau}_1 \cdot \hat{\tau}_2)$  е изоспин–обменният оператор,  $\mathbf{r}_{12} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  и  $\mathbf{k} = -(i/2)(\nabla_1 - \nabla_2)$ . Останалите величини са параметри на взаимодействието. Особеност на силите на *Гони* е контактният член, зависещ от плътността и пропорционален на спин–обменния оператор. Видът му е избран така, че при  $x_0 = 0$  той не участва в изовекторното сдвояване, което позволява те да бъдат използвани както за описание на средното поле, така и

на сдвояването. Към взаимодействието между протоните се добавя и прекия и обменен член на *Кулоновите* сили. Параметрите на взаимодействието на *Гони* са получени при фитирането на свойствата на сферични четно–четни ядра. Най-често използваният в момента набор от параметри е D1S [102, 103], при който е отчетена и височината на бариера на деление на  $^{240}\text{Pu}$ .

В широкомащабните HFB пресмятания, които се провеждат в днешно време за описание на ядрата, далеч от линията на стабилност, най-често се използват енергетични функционали на плътността, подобни на този, който се генерира от силите на *Скирм* [46, 47]. Енергията на нуклонната система е сума от кинетична енергия, функционал на плътността, който симулира нуклон–нуклонното взаимодействие, *Кулонов* член и енергия на сдвояване. В най-общия случай енергетичният функционал на плътността е квадратичен по локалните плътности и притежава всички симетрии, характерни за силното взаимодействие [100]. В зависимост от описваните ядра, често се използват опростени функционали на плътността. За четно–четни ядра, например в [104], се използва следният израз за плътността на енергията  $\mathcal{H}(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r}) + \tilde{H}(\mathbf{r})$ , където съответните  $ph$  и  $pp$  членове имат вида:

$$\begin{aligned}
H(\mathbf{r}) = & \frac{\hbar^2}{2M} \tau + \frac{1}{2} t_0 \left[ \left(1 + \frac{1}{2} x_0\right) \rho^2 - \left(\frac{1}{2} + x_0\right) \sum_q \rho_q^2 \right] \\
& + \frac{1}{4} t_1 \left[ \left(1 + \frac{1}{2} x_1\right) \rho \left(\tau - \frac{3}{4} \Delta \rho\right) \right] - \left(\frac{1}{2} + x_1\right) \sum_q \rho_q \left(\tau_q - \frac{3}{4} \Delta \rho_q\right) \\
& + \frac{1}{4} t_2 \left[ \left(1 + \frac{1}{2} x_2\right) \rho \left(\tau + \frac{1}{4} \Delta \rho\right) + \left(\frac{1}{2} + x_2\right) \sum_q \rho_q \left(\tau_q + \frac{1}{4} \Delta \rho_q\right) \right] \\
& + \frac{1}{12} t_3 \rho^\alpha \left[ \left(1 + \frac{1}{2} x_3\right) \rho^2 - \left(x_3 + \frac{1}{2}\right) \sum_q \rho_q^2 \right] - \frac{1}{8} (t_1 x_1 + t_2 x_2) \sum_{ij} J_{ij}^2 \\
& + \frac{1}{8} (t_1 - t_2) \sum_{q,ij} J_{q,ij}^2 - \frac{1}{2} W_0 \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} [\rho \nabla_k J_{ij} + \sum_q \rho_q \nabla_k J_{q,ij}] \\
& + H_C(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{3.47}$$

и

$$\tilde{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} V_0 \left[ 1 - V_1 \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^\gamma \right] \sum_q \tilde{\rho}_q^2. \tag{3.48}$$

Индексът ( $q = n, p$ ) се отнася за неутронните и протонни плътности, а там, където той отсъства, съответните функции обозначават изоскаларните плътности, например  $\rho = \rho_n + \rho_p$ .

Плътността на *Кулоновите* сили  $H_C$  отчита прекия и обменния член на взаимодействието, последният в приближение на *Слейтър*ова детерминанта. Функ-

ционалът (3.47, 3.48) зависи от 14 параметъра, някои от които са определени от условието да възпроизвеждат известни свойства на ядрената материя, а други са фитирани по експериментални данни за енергетични и геометрични характеристики на ядрата.

Плътноста на функционала  $\tilde{H}$ , отчитащ сдвояването, отговаря на зависещо от плътността контактно взаимодействие. Този израз е предложен за пръв път в работата [105]. Стойностите на параметрите са фиксирани така:  $\gamma = 1$ ,  $\rho_0 = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ , а  $V_1 = 0, 1$ , или  $1/2$  съответно за обемно сдвояване, повърхностно сдвояване или сдвояване от смесен тип. Всички модели на сдвояване водят до дисперсия на нивата около *Ферми* нивото. Това означава, че в координатното пространство основният принос в сдвояването идва от ядрената повърхност. В работа [106] е направено сравнение между обемното и повърхностно сдвояване, от което следва, че най-реалистично е поведението на сдвояването от смесен тип. Параметърът  $\gamma$  дава възможност да се отчита възникването на неутронна ”шуба” в ядра с неутрони, надхвърлящи значително броя на протоните [107]. От съществуващите експериментални данни неговата стойност не може да се установи еднозначно и затова най-често се приема, че тя е равна на единица. Изразът за функционала на сдвояване (3.48) е изоспиново инвариантен, но в някои случаи се допуска константата на сдвояване  $V_0$  да има различни стойности за протони и неутрони. Тези стойности се определят феноменологично от разликата на енергиите на четно-четни и четно-нечетни ядра в определена верига от изотопи [34]. Трябва да се подчертае, че параметрите на функционала на сдвояване зависят от средното поле, включено в задачата. Например малка стойност на ефективната маса води до ниска плътност на състоянията и изисква по-голяма константа на сдвояване.

Реалистичното описание на сдвояването изисква отчитането на всички свързани състояния на нуклоните в ядрото. От една страна това е практически невъзможно, от друга при използването на контактни сили на сдвояване, каквито са *Скирмовите*, процедурата, при която се включват нарастващ брой състояния, не е сходимата. Сходимост, макар и бавна, се наблюдава при сили на сдвояване с краен радиус на действие, каквито са силите на *Гони*. Затова практически всички методи, отчитащи сдвояването, включват и регулационна процедура за орязване на едночастичния базис. Тя се състои, най-общо казано, в определяне на стойността на константата на сдвояване за всеки избор на броя на участващите в пресмятанията едночастични (или квазичастични) състояния, или еквивалентна за всяка стойност на едночастичната енергия на най-високото състояние [92]. С такава процедура на орязване на практика се елиминира зависимостта на резултатите от HFВ пресмятанията от размера на едночастичния базис. В последните години *Булгак* и *Ю* [108–111] предлагат ренормализационна процедура, която позволява да се из-

бегне разходимостта на контактното взаимодействие на сдвояване с увеличаване на конфигурационното пространство. Двете процедури са сравнени в работа [112] и на базата на резултатите от HFV пресмятания за сферични и деформирани ядра е направен изводът, че регулационната процедура е теоретично по-добре обоснована, по-проста и по-стабилна като числен подход.

### 3.3 Дългодействащи корелации

Обемните характеристики на ядрата като енергия на връзка, средноквадратични радиуси и инерчни моменти, в приближение на средното поле се описват задоволително в цялата масова област. Ако се търси обаче по-голяма точност, или е необходимо съгласуваното описание на различни свойства на група от ядра, трябва да се отчитат експлицитно и нуклон–нуклонните корелации. В тази част ще разгледаме дългодействащите корелации, които включват взаимодействието между голям брой нуклони от ядрената система. Това са най-вече вибрации на ядрената повърхност, свързани с нискоенергетичния спектър, и така наречените модове с нулева енергия, като трансляция и ротация, които възникват при възстановяване на симетриите, нарушени в метода на средното поле. Много успешни методи за описание на такива състояния са приближението на случайните фази [26], квантовото приближение на случайните фази [26] и квазичастично-фонноният модел [113]. В тях се отчита възможността един или няколко нуклона да напуснат дучести състояния и да заселят нива над *Ферми* нивото. Така състоянията от нискоенергетичния спектър се разглеждат като суперпозиция от едночастични ( $1p1h$ ), двучастични ( $2p2h$ ) и т.н. възбуждания.

Тук ще се спрем на подходи, които не само описват характеристиките на възбудените състояния, но отчитат влиянието на нисколежащите възбудени състояния в ядрата върху характеристиките на основното състояние. Ще разгледаме основно два типа подходи – вариационни, като метода на генераторната координата, и такива, основаващи се на смесването на многочастични конфигурации в пълното Хилбертово пространство, като съвременните варианти на слоестия модел.

Преди да пристъпим към разглеждането на тези методи, трябва да обърнем внимание на опасността корелациите да бъдат отчитани два пъти. В метода на Хартри–Фок например, във формирането на самосъгласуваното средно поле се отчита взаимодействието на всеки нуклон с всички останали. Функционалът на плътността на енергията също включва различни ефекти на корелации [26]. Затова използването на тези методи за експлицитно пресмятане на приноса на корелациите върху ядрените характеристики може да доведе до двойното му отчитане. Ако все пак прилагането им е оправдано, то е защото нискоенергетичните и духовите

състояния силно зависят от слоестите ефекти, а те не се отчитат в средното поле или във функционала на енергията.

### 3.3.1 Метод на генераторната координата

Както често се твърди в учебниците по ядрена физика едночастичните и колективни свойства на атомните ядра са неразривно свързани. Методът на генераторната координата (МГК) е може би първият опит да се свържат двата аспекта на поведението на нуклоните в единен квантовомеханичен подход. Той е предложен от *Хил, Уилър* и *Грифин* през 50-те години на миналия век [114, 115]. МГК има много предимства пред другите корелационни подходи – поне теоретично той е прост вариационен метод, който

- позволява смесването на състоянията в конфигурационното пространство да се въведе чрез една или няколко непрекъснати колективни променливи;
- може да се използва за описание на различни колективни движения, като отчита дългодействащите корелации;
- като резултат се получава както нискоенергетичният спектър на ядрото, така и вероятности за преход, които могат да се сравняват с експеримента.

Подробно изложение на МГК и някои от най-важните резултати, получени с негова помощ, могат да бъдат намерени в обзора [116]. Тук ще приведем само някои основни характеристики на метода.

Нека разгледаме съвкупност от многочастични вълнови функции  $|\Phi(q)\rangle$ , зависещи от колективна координата  $q$ . В МГК собствените функции на хамилтониана се представят чрез израза:

$$|\Psi_k\rangle = \int dq |\Phi(q)\rangle f_k(q) \quad (3.49)$$

Тегловната функция  $f_k(q)$  (индексът  $k$  означава  $k$ -тото собствено състояние на хамилтониана) се определя от изискването енергията на системата  $E_k$ :

$$E_k = \frac{\langle \Psi_k | \hat{H} | \Psi_k \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle} \quad (3.50)$$

да бъде стационарна по отношение на произволна вариацията  $\delta f_k$  на тегловната функция. Това изискване води до интегралното уравнение на *Хил–Уилър*:

$$\int dq' [\mathcal{H}(q, q') - E_k \mathcal{I}(q, q')] f_k(q') = 0, \quad (3.51)$$

където ядрото на хамилтониана  $\mathcal{H}(q, q')$  и на функцията на припокриване  $\mathcal{I}(q, q')$  се дефинират съответно така:

$$\mathcal{H}(q, q') = \langle \Psi_k(q) | \hat{H} | \Psi_k(q') \rangle \quad (3.52)$$

и

$$\mathcal{I}(q, q') = \langle \Psi_k(q) | \Psi_k(q') \rangle \quad (3.53)$$

Аналогично може да се дефинира ядро на произволен оператор  $\hat{O}$ :

$$\mathcal{O}(q, q') = \langle \Psi_k(q) | \hat{O} | \Psi_k(q') \rangle . \quad (3.54)$$

Тегловните функции не са ортонормирани и затова ролята на ортонормиран базис изпълняват функциите  $\{g_k(q)\}$ , определени по следния начин [116]:

$$g_k(q) = \int dq' \mathcal{I}^{1/2}(q, q') f_k(q') . \quad (3.55)$$

Матричните елементи на всеки оператор в този базис са равни на:

$$\langle \Psi_k | \hat{O} | \Psi_l \rangle = \int \int dq dq' g_k^*(q) \tilde{\mathcal{O}}(q, q') g_l(q') , \quad (3.56)$$

където

$$\tilde{\mathcal{O}}(q, q') = \int \int dq'' dq''' \mathcal{I}^{1/2}(q, q'') \tilde{\mathcal{O}}(q'', q''') \mathcal{I}^{1/2}(q''', q') . \quad (3.57)$$

Може да се докаже, че енергиите  $E_k$  (3.50) и функциите  $g_k$  (3.55) са собствени стойности и собствени вектори на хамилтониана на системата:

$$\int dq' \tilde{\mathcal{H}}(q, q') g_k(q') = E_k g_k(q) \quad (3.58)$$

Пресмятанията в МГК най-често се извършват с помощта на горното уравнение. На практика функциите  $|\Phi(q)\rangle$  (3.49) са известни само за дискретни стойности на колективна координата  $q$ . Тогава ядрата на операторите се превръщат в матрици и решаването на интегралното уравнение на Хил–Уилър се свежда до диагонализиране на матрица.

Изследванията в МГК показват, че матричните елементи между многочастични вълнови функции, отговарящи на различни стойности на колективната координата, бързо намаляват с увеличаване на разликата между стойностите на колективните координати. Този факт е основание за предлагането на различни прибли-

жения на разглеждания подход.

Като първо приближение на МГК може да се разглежда методът на кохерентните флуктуации на плътността (МКФП), предложен от А. Антонов, В. Николаев и И. Ж. Петков [117, 118]. В МКФП ядрото на хамилтониана (3.52) и ядрото на припокриване (3.53) са апроксимирани чрез делта функция:

$$\mathcal{H}(q, q') \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m_{eff}} \delta''(q - q') + \delta(q - q') V\left(\frac{q + q'}{2}\right) , \quad (3.59)$$

$$\mathcal{I}(q, q') \rightarrow \delta(q - q') . \quad (3.60)$$

Това приближение води до прости зависимости между основните характеристики на ядрата като локална плътност, импулсно разпределение, зарядов форм-фактор.

Най-често ядрото на функцията на припокриване се апроксимира чрез гаусиан:

$$\mathcal{I}(q, q') \approx \mathcal{I}_G(q, q') = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{(q - q')}{a(\bar{q})}\right]^2\right\} , \quad (3.61)$$

където ширината му  $a(\bar{q})$  е функция на средната стойност на колективната координата  $\bar{q} = (q + q')/2$ .

Друг начин за моделиране на  $\mathcal{I}(q, q')$  е чрез дефиниране на канонична колективна координата  $x(q)$ , с помощта на която ядрото се представя като гаусиан с постоянна ширина [26]:

$$\mathcal{I}(q, q') \approx \mathcal{I}_G(q, q') = \exp\left\{-\frac{1}{2}[x(q) - x(q')]^2\right\} . \quad (3.62)$$

Двете приближения (3.61) и (3.62) са еквивалентни до четвърта степен на разложението им по  $(q - q')$ .

В духа на квадратичното разложение на  $\log \mathcal{I}(x, x')$  (3.62) се апроксимира и редуцираното ядро на хамилтониана:

$$\begin{aligned} h(x, x') &= \frac{\mathcal{H}(x, x')}{\mathcal{I}(x, x')} \approx h_G(x, x') \\ &= h_0(\bar{x}) - \frac{1}{2}h_2(\bar{x})(x - x')^2 . \end{aligned} \quad (3.63)$$

Функцията  $h_0(\bar{x})$  е Хартри-Фоковата енергия за дадената стойност на колективната координата:

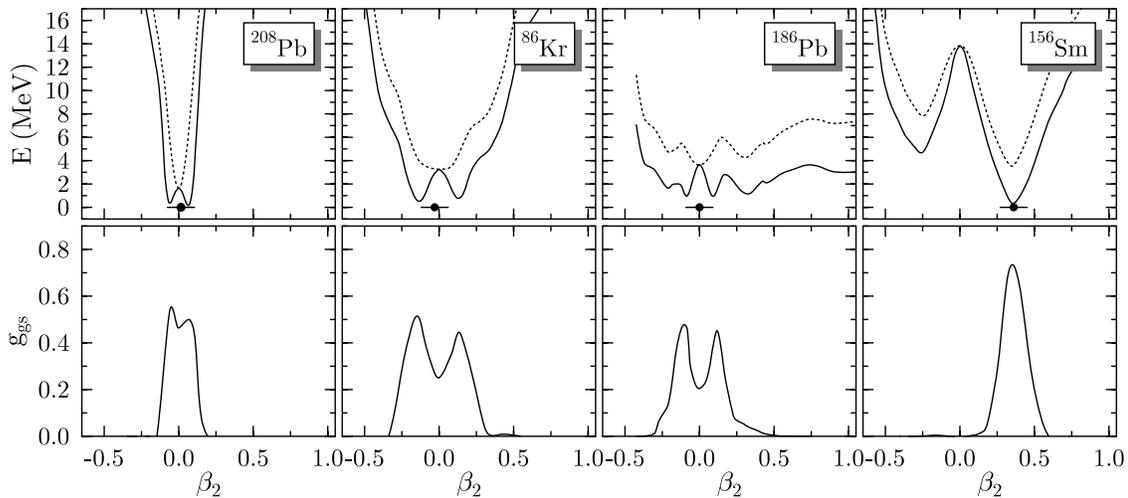
$$h_0(\bar{x}) = h(x, x) = \mathcal{H}(x, x) , \quad (3.64)$$

а  $h_2(\bar{x})$  се намира като втора производна на редуцираното ядро на хамилтониана [116].

Разглеждайки приложенията на МГК, ще се спрем само на два примера. Първият е серия изследване на едно- и двучастичните характеристики на двойномагическите ядра  $^4\text{He}$ ,  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ , проведени от А. Антонов и сътрудници от Лабораторията по теория на атомното ядро на ИЯИЯЕ-БАН [119–121]. В пресмятанятия са използвани сили на *Скирм*, а пробната вълнова функция в МГК (3.49) е построена от *Слейтър*ови детерминанти  $|\Phi(q)\rangle$ , получени в приближение на средното поле с три различни потенциала – на хармоничен осцилатор, на безкрайна правоъгълна яма и на *Уудс-Саксън*. Параметрите на потенциалите изпълняват ролята на колективни координати  $\{q\}$ . Получени са енергии, едночастични и двучастични плътностни и импулсни разпределения, естествени орбитали, числа на запълване и средноквадратични радиуси на основно и първо възбудено колективно  $0^+$  състояние на разглежданите ядра и са направени изводи за разликите между основното и възбуденото състояние: 1) средноквадратичният радиус на ядрата в първо възбудено монополно състояние е по-голям в сравнение с този в основно състояние; 2) изпразването на морето на *Ферми* силно нараства за първо възбудено монополно състояние, като този ефект се проявява най-силно в случая на ядрото  $^4\text{He}$  и намалява при по-тежки ядра; 3) резултатите за едночастичните и двучастичните плътностни и импулсни разпределения, естествените орбитали и числата на запълване, пресметнати в рамките на МГК с различни конструкционни потенциали показват, че нуклон-нуклонните корелации, включени в този метод, са с дългодействащ характер и са свързани с колективното движение на нуклоните. Те се оказват съществени при пресмятането на сеченията на реакции  $(p, d)$ ,  $(e, e'p)$  и  $(\gamma, p)$  на избиване на един или два нуклона от атомни ядра.

МГК е използван успешно за описание на свойства не само на четно-четни системи със затворени слоеве, но и за изследване на ядра в цялата масова област [122–125]. За илюстрация на възможностите на метода за изучаване както на сферични, така и на деформирани ядра, ще приведем резултатите от работа [126]. В нея е изследвано влиянието на двата типа корелации извън приближението на средното поле, които оказват най-голямо влияние върху енергията на основното състояние на ядрата – корелациите на сдвояване и квадруполните корелации. Корелациите на сдвояване се отчитат в рамките на HF+BCS метода, като са използвани силите на *Скирм Slyb*. Получените решения са проектирани за получаване на конфигурации с коректен брой на частиците в ядрата. Зависимостта от квадруполния момент се налага чрез добавяване към средното поле на ограничението  $(\beta_2 Q^2)$ , където  $\beta_2$  е множител на *Лагранж*, характеризиращ деформацията, а  $Q$  е операторът на квадруполния момент. Така получените многочастични вълнови

функции, отговарящи на система със зададен брой протони и неутрони и различни стойности на параметъра на деформация, се "смесват" в рамките на метода на генераторната координата. От практическа гледна точка това означава решаване на уравнието на Хил-Уйлер (3.58) за дискретни стойности на параметъра  $\beta_2$ . Разглеждани са различен по характер ядрата -  $^{208}\text{Pb}$  е двойно магично ядро със сферична форма,  $^{86}\text{Kr}$  е "мек" сферичен вибратор,  $^{186}\text{Pb}$  има няколко почти изродени минимума на енергията, а  $^{156}\text{Sm}$  е типично деформирано ядро. Получените резултати са илюстрирани на фигура (3.7).



Фигура 3.7: Потенциална енергия и относителна амплитуда на състоянията като функции на параметъра на квадруполна деформация  $\beta_2$  за няколко характерни ядра [126].

Горният панел на фигурата показва потенциалната енергия на ядрата като функция на параметъра на деформация (прието е енергията на основно състояние на системата, получена в метода на генераторната координата, да е равна на нула). Пунктирната линия се отнася за енергетичната повърхност, получена в HF+BCS метода и след проектиране на броя на частиците. Допълнително проектиране върху ъглов момент ( $J = 0$ ) води до резултатите, обозначени с пълтна линия. Смесването на конфигурациите с различни стойности на  $\beta_2$ , получени след  $N-$ ,  $Z-$  и  $J-$ проектиране, в рамките на МГК определя нулевата енергия на фигурата. Точката показва средната стойност на деформацията в МГК основното състояние. В долния панел на графиката е представена относителната тежест на конфигурациите с различна деформация, смесвани чрез МГК. Очевидно основното състояние на всички ядра е сферично, с изключение на  $^{156}\text{Sm}$ , което е деформирано *prolate* ядро. Независимо от факта, че са сферични, в ядрата  $^{208}\text{Pb}$ ,  $^{86}\text{Kr}$  и  $^{186}\text{Pb}$  има силно смесване на конфигурации с положителна и отрицателна стойност на параметъра на деформация, което прави тяхното описание по-сложно, отколкото деформи-

раните ядра.

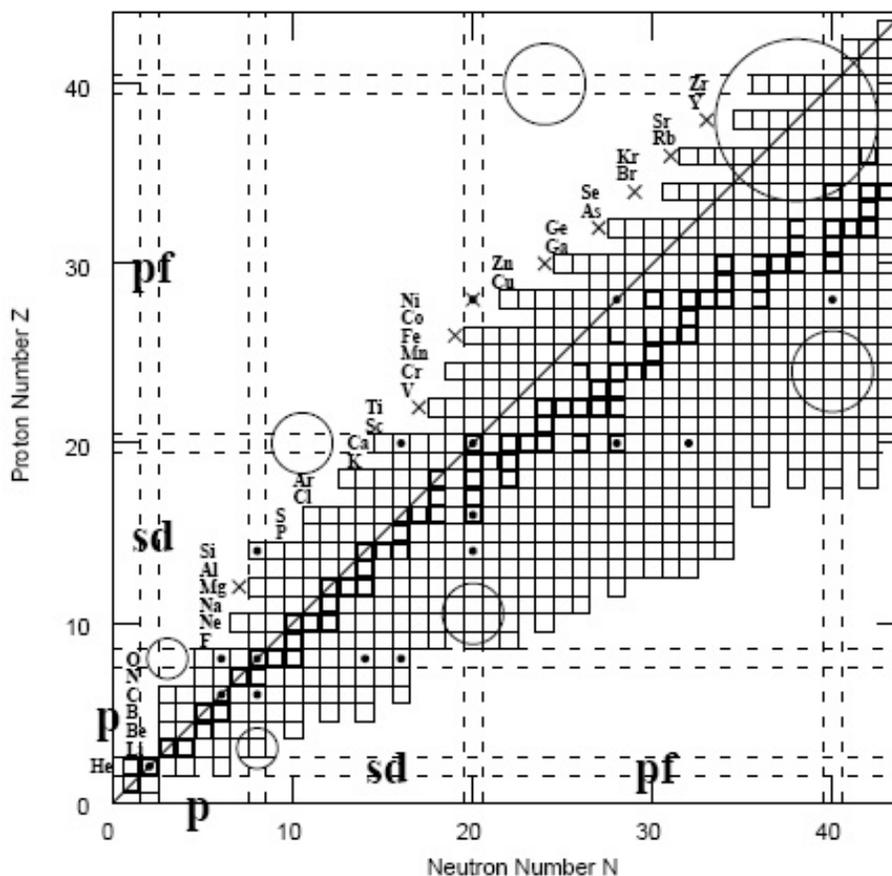
Тук няма да отделяме специално внимание на проекционните методи, само ще отбележим, че те могат да се разглеждат като частни случаи на МГК, при които тегловната функция  $f(q)$  се знае *a priori*. С тях се възстановяват симетриите на основното състояние на ядрените системи (брой на частиците, ъглов момент, център на масите), нарушавани като правило в методите на *Хартри-Фок* и *Хартри-Фок-Боголюбов*. Съответните модове на възбуждане, които по същество са духови състояния, могат да се разглеждат като специфични форми на колективни движения с голяма амплитуда [34].

### 3.3.2 Слоест модел - II

В част (2.1) разгледахме слоестия модел като една от реализациите на приближението на средно поле. Когато днес говорим за слоест модел имаме предвид смесването на различни многочастични конфигурации, т.е. отчитане на дългодействащи корелации извън рамките на модела на независимите частици. Резултатите от съвременните пресмятания в рамките на слоестия модел предоставят най-реалистичната теоретична информация за характеристиките както на основното, така и на нисколежащите възбудени състояния в атомните ядра. За съжаление числените процедури изискват изключително големи компютърни ресурси, което ограничава приложението на метода за ядра в сравнително малки области от масовата таблица. Тези области са показани на фигура (3.8).

Пресмятанията в рамките на слоестия модел имат няколко основни компоненти, които ще обсъдим накратко.

И тук, както преди, ще започнем с идеята за магическите числа. Експериментален факт е, че за някои четно-четни ядра първото възбудено състояние лежи значително по-високо от това в съседните четно-четни ядра. Това означава, че съществува значителна разлика в енергиите на едночастичните състояния под и над нивото на *Ферми* за точно този брой на протоните и неутроните. Тези стойности на  $Z$  и  $N$  са така наречените магически числа. Пресмятанията в слоестия модел започват с предположението, че всяко ядро може да се разглежда като съставено от *инертна сърцевина* и валентни нуклони. Ролята на инертна сърцевина играят магическите ядра, които се описват с много добра точност чрез една *Слейтърова* детерминанта. Например в *sd*-пространството, което включва нивата  $0d$  и  $1s$ , като инертна сърцевина се разглежда ядрото  $^{16}\text{O}$ . В скоби трябва да се отбележи, че идеята за магическите ядра е теоретична конструкция. Когато магически ядра се разглеждат в пространство, съдържащо повече нива от съответните запълнени слоеве, вълновата функция на тяхното основно състояние



Фигура 3.8: Част от масовата таблица, за някои ядра от която са правени пресмятания в рамките на слоестия модел. Стабилните ядра са означени с квадратче, съществуващите в природата изотопи – с тъмно квадратче, магическите ядра – с точка. Магическите числа, съответстващи на  $LS$  слоеве са показани с пунктирни линии, ограничаващи областите, в които валентни протони и неутрони запълват слоевете  $p$ ,  $sd$  и  $pf$ . С кръг са означени регионите, в които се наблюдават вмъкнати (intruder) конфигурации в основното състояние на ядрата [127].

съдържа значителен процент примеси от конфигурации извън затворените слоеве [128–130]. Независимо от това, тези ядра се приемат за инертна сърцевина, като съответното взаимодействие между валентните нуклони се модифицира така, че да компенсира направеното приближение.

Броят на протоните и неутроните в системата определят **моделното пространство**, в което ще се разглежда дадено ядро, т.е. набора от нива, които ще участват в конфигурационното смесване. Най-общо казано, колкото по-голямо е моделното пространство, толкова по-реалистични би трябвало да са получените резултати. В същото време продължителността на пресмятанията расте експоненциално с броя на разглежданите нива. Проблем възниква и със стойностите на матричните елементи на хамилтониана. Те могат да се определят с по-добра точност в по-

ограничено пространство. Затова при избора на моделно пространство се търси компромис между тези две тенденции.

Най-често използваните моделни пространства за описание на леки ядра в рамките на слоестия модел обхващат едночастичните нива на главните затворените  $LS$  слоеве:  $p$ ,  $sd$  и  $pf$ . Те имат много съществени преимущества, но най-важното е, че в този случай движението на центъра на масите е винаги в  $L = 0$  състояние [131–133] и духови състояния не се получават. Ако се разглеждат няколко главни слоя възникват възбудени състояния на центъра на масите. Стандартният метод за отчитането им се състои в добавяне на фиктивен член в хамилтониана, който да повдигне енергията им над ниско енергетичния спектър и по този начин ясно да ги разграничи от описваните състояния. В съвременните пресмятания се използват и моделни пространства, съставени от комбинация от два главни  $LS$  слоя – например  $p - sd$  или  $sd - pf$ .

В зависимост от начина, по който се сумират орбиталните моменти на нуклоните и техните спинове, съществуват  $LS$  и  $jj$  затворени слоеве. Типични  $LS$  магически ядра са  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ . Затворените  $LS$  слоеве съдържат всички нива, съответстващи на дадено главно осцилаторно квантово число  $N_o = 2n + l$ . Това са слоевете, означени с  $p$  ( $N_o = 1$ ),  $sd$  ( $N_o = 2$ ) и  $pf$  ( $N_o = 3$ ). В областта, където броят на валентните нуклони е  $N = 28 - 50$  се работи с  $jj$  затворени слоеве. Добър пример за магически ядра при  $jj$  връзка са  $^{56}\text{Ni}$ ,  $^{132}\text{Sn}$  и  $^{208}\text{Pb}$ .

Друг съществен елемент на слоестия модел е **едночастичният спектър** на нивата в конфигурационното пространство. В слоестия модел най-често се използват експерименталните стойности на едночастичните нива. Когато те не могат да се измерят с достатъчна точност по една или друга причина, се използват резултатите от *Хартри–Фокови* пресмятания.

След като се определи моделното пространство, в стандартните програми за пресмятания в слоестия модел се задават **двучастични матрични елементи** на хамилтониана на системата. Например в  $sd$ -слоя има 3 едночастични матрични елемента, отговарящи на енергиите на нивата  $d_{5/3}$ ,  $d_{3/2}$ ,  $s_{1/2}$  и 63 двучастични матрични елемента на скаларното нуклон-нуклонно взаимодействие  $V$ ,  $\langle j_1, j_2, J | V | j_3, j_4, J \rangle$  за всички възможни орбити  $j_i$ . Когато изоспинът на системата се запазва, тогава двучастичните матрични елементи се характеризират и с неговата стойност ( $T = 0, 1$ ), в противен случай се задават три набора от двучастични матрични елементи:  $pppp$ ,  $nnnn$  и  $ppnn$ , където  $p$  и  $n$  означават съответно протонни и неутронни състояния. Всичките тези входни данни са достатъчни за определяне на енергиите и вълновите функции на около  $10^6$  състояния в масовата област  $A = 16 - 40$ .

В слоестия модел дефинирането на двучастичните матрични елементи започва

от ренормализирана  $G$ -матрица, основана на съвремените нуклон-нуклонни взаимодействия [145] и отчитаща ефектите на поляризация на инертната сърцевина. Така определените двучастични матрични елементи, заедно с експерименталните стойности на едночастичните енергии, дават много добри резултати за системи с малък брой валентни нуклони. С нарастването на броя на валентните нуклони разликите с експеримента стават значителни. Затова се използват линейни комбинации от едночастични и двучастични матрични елементи, чиито коефициенти се фитират така, че да възпроизведат едночастичните енергии на нивата в цялото моделно пространство. По този начин са получени например матричните елементи за  $USD$ -взаимоедействието в  $sd$ -слоя [146, 147].

При смесване на конфигурации в моделното пространство участва ъгловата структура на многочастичната вълнова функция. Радиалната ѝ част се отчита експлицитно при пресмятането на едночастичните и двучастични матрични елементи на хамилтониана. За да се получат структурни характеристики като локални плътности или вероятности за електромагнитни преходи, едночастичните радиални функции се дефинират отделно. Те могат да са получени в метода на *Хартри-Фок*, или в средно поле, моделирано от потенциала на *Уудс-Саксън* или на хармоничен осцилатор, в зависимост от разглеждания проблем.

Аналогичен е и подходът към кинетичната енергия – тя не се разглежда експлицитно, но се отчита имплицитно в едночастичните матрични елементи.

Съществуват три основни подхода за **конструиране на многочастичните състояния** в слоестия модел. В първия случай възможните конфигурации в моделното пространство се дефинират чрез базисни функции с проекция на пълния ъглов момент ( $M = 0$ ) – така наречената  $M$ -схема [134]. След диагонализация на хамилтониана на системата в този базис се получават състояния с определен пълен ъглов момент и изоспин. Друга възможна процедура е свързване на едночастичните състояния до многочастични състояния с дефиниран пълен ъглов момент – това е базисът в  $J$ -схемата [133]. Размерът на  $M$ -базиса е много по-голям от размера на  $J$ -базиса. За ядрото  $^{28}\text{Si}$  например, което може да се разглежда като  $^{16}\text{O}$  инертна сърцевина и 12 валентни нуклона в моделно  $sd$ -пространство, в  $M$ -схемата има 93710, а в  $J$ -схемата – 839 състояния. Въпреки че матрицата на хамилтониана е много по-голяма в  $M$ -схемата, самото пресмятане на матричните елементи е сравнително лесно. Затова и двете схеми имат своите преимущества и недостатъци и коя от тях да се използва, зависи от разглеждания проблем и от съотношението (скорост на процесора/памет) на наличната изчислителна техника. Съществува и трети подход към задачата, при който се стартира в  $M$ -схемата и се конструират състояния с добър пълен ъглов момент чрез проекционна техника [135].

За трите типа пресмятания са разработени **оптимизирани компютърни прог-**

**рами:** в  $M$ -схемата това са ANTOINE [136, 137], VECSSSE [138] и MSCHELL [139], в  $J$ -схемата – RITSSCHIL [140] и NATHAN [141], в  $M$ -схемата с  $J$ -проектиране – OXBASH [135].

Последна стъпка във всеки един от горните подходи е диагонализацията на матрицата на хамилтониана. Най-често използваният метод за диагонализация на големи матрици с малък брой ненулеви елементи, каквито обикновено са матриците в слоестия модел, е този на *Ланцос* [143, 144]. Това е приближена процедура за намиране на определен брой собствени вектори и собствени стойности на матрици, която дава достатъчно добри резултати дори при размерности от порядъка на  $10^6$ .

В последните години областта на приложение на слоестия модел с конфигурационно смесване е значително разширена благодарение на два подхода, основаващи се на метода на *Монте-Карло*. Единият от тях е *Монте-Карло* слоестият модел (Shell-Model-Monte-Carlo) предложен от С. Кунин, Д. Дин и К. Ланганке [148]. В него с помощта на трансформацията на *Хубард-Стратонович* [149, 150] задачата за диагонализация на хамилтониана се свежда до пресмятане на интергал по траектория в пространство с голяма размерност. Този проблем се решава с помощта на стохастична *Монте-Карло* процедура. В този модел възниква така нареченият проблем със знака. При определен тип реалистични нуклон-нуклонни взаимодействия и за системи с нечетен брой нуклони, знакът на тегловна функция, която има смисъл на вероятност, заема отрицателни стойности. Правени са много опити за решаване на този проблем, но засега те не са дали задоволителен резултат.

Друг известен подход за приложение на конфигурационното смесване в слоестия модел е методът за квантова *Монте-Карло* диагонализация (Quantum-Monte-Carlo-Diagonalization) [151]. Той също се основава на трансформацията на *Хубард-Стратонович*, но вместо интегриране в цялото *Хилбертово* пространство, се използва итерационна процедура. Започва се с определен набор от състояния, най-често близки до тези, които задават *Хартри-Фоковия* минимум на енергията на системата. Разглежданото конфигурационно пространство се разширява с ново състояние, което се добавя към първоначалния набор или отхвърля в зависимост дали това води до намаляване на енергията на основното състояние или не. При този подход проблемът със знака не възниква, но могат да се получат решения само за няколко състояния с определена стойност на пълния ъглов момент. Най-тежкото ядро, което е описано в метода на квантова *Монте-Карло* диагонализация е  $^{56}\text{Ni}$  [130]. Ако то се разглежда като  $^{40}\text{Ca}$  сърцевина и 16 валентни нуклона в *pf* слоя в  $M$ -схемата, размерността на хамилтониана му би била 1 087 455 228. Диагонализацията на такава матрица ще изисква ново поколение изчислителни машини.

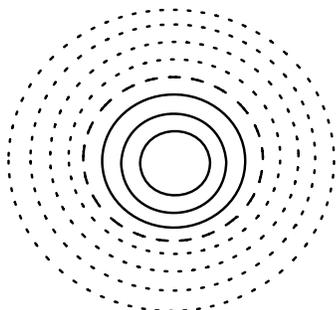
Съществуват и други приближени методи за конфигурационно смесване. Например в работа [153] е показано, че енергията на нисколежащите състояния зависи експоненциално от броя  $n$  на  $(n\rho n h)$  възбужданията, които се отчитат –  $(1\rho 1 h)$ ,  $(2\rho 2 h)$  и т.н.

В следващата част ще разгледаме приближен метод за отчитане на конфигурационното смесване в слоестия модел, който интензивно и много успешно се използва в теорията на силно свързаните системи във физиката на твърдото тяло, но за пръв път се прилага в ядрената физика – метода на ренормализиращата група на матрицата на плътността.

### 3.3.3 Метод на ренормализиращата група на матрицата на плътността

Съществуват много методи за приближено решаване на многочастичното уравнение на *Шрьодингер*, но повечето от тях са пригодени за изследване на специфичен проблем или за определена система. В средата на 70-те години на миналия век *К. Уилсън* предлага универсален метод, метода на ренормализиращата група, който описва със завидна точност системи, съдържащи голям брой частици, дори в такива трудни за изследване режими като фазови преходи [154].

Метод на ренормализиращата група на матрицата на плътността представлява итерационна процедура, при която последователно се пробягва цялото *Хилбертово* пространство. Стартира се от малък брой подходящо подбрани състояния, като на всяка стъпка от процедурата към пространството от предната итерация се прибавя едно или няколко нови състояния. *К. Уилсън* илюстрира този етап от процедурата с фигура (3.9), която заради приликата си с напряко разрязан лук, е известна като "onion picture".



Фигура 3.9: "Лучената картинка" на *К. Уилсън* [154]. Кръговете с плътна линия обозначават вече разгледаните нива, пунктирната линия – нивото, което се добавя при текущата итерация, линиите с точки – неразгледаните нива.

При следващата стъпка от процедурата хамилтонианът на системата се диагонализира и за итерацията, която следва, се запазват състоянията с най-ниски енергии. Разглежданият метод е приложен успешно за решаване на проблема на *Кондо* - важна задача във физиката на твърдото тяло, но не води до задоволително описание например на квантови решетки - също проблем от огромен интерес.

Методът на ренормализиращата група на матрицата на плътността (Density Matrix Renormalization Group Method) (DMRG) е предложен от *Ст. Уайт* през 1992г. [155–157] като опит за преодоляване на ограниченията на модела на *К. Уилсън*. В DMRG метода критерият за отбор на състоянията, а оттам и итерационната процедура е различна: 1) след диагонализация на хамилтониана на системата в разширеното пространство, от неговите собствени вектори се построява матрица на плътността; 2) матрицата на плътността се диагонализира и за следващата итерация се оставят състоянията с най-големи числа на запълване. Този критерий за орязване на базиса е оптимален в смисъл, че гарантира максимално припокриване на апроксимираната вълнова функция (след орязването) и вълновата функция преди орязването.

Така формулиран DMRG методът, наричан метод на ренормализиращата група на матрицата на плътността в реалното пространство (rDMRG), е прилаган успешно за много задачи в теорията на твърдото тяло като спинов вериги и решетки [158–160], модели на *Хубард* [161, 162], модели с примеси [163], полимери [164, 165] и др. Интересно развитие на подхода е приложението му в двумерно *Хилбертово* пространство, което изисква намиране на траектория, която ”обхожда” всички елементи от двумерно конфигурационно пространство [166, 167].

Следваща стъпка в развитието на метода е формулирането му в импулсното пространство [168]. Тази нова версия е означавана с kDMRG. Резултатите от приложението на kDMRG за крайни фермионни системи не е особено убедително, но по-късно подходът е модифициран и прилаган успешно в квантовата химия [169, 170].

В наши дни DMRG се развива главно в две посоки – оптимизиране на подбора на състоянията, запазвани на всяка стъпка от итерационната процедура, с помощта на квантовата теория на информацията [171–176] и приложението на метода за системи, зависещи от времето [177–179].

Съществуващите методи за описание на корелирани фермионни и бозонни системи в рамките на DMRG и основните резултати от пресмятанията са изложени в обзорните работи [180–183].

Оттук нататък в тази част на дисертацията ще говорим за частично–дупчестия метод на ренормализиращата група на матрицата на плътността (phDMRG). Това е DMRG алгоритъм, който отчита особената роля на едночастичните състояния

около *Ферми* нивото в крайните фермионни системи. *phDMRG* е предложен от *Х.Дукелски* и *Х.Сиера* в опита им да опишат свойствата на много малки свръхпроводими зрънца [76, 184]. Адекватното описание на корелациите на фермионите, заемащи състояния около *Ферми* нивото, е добро основание да се предположи, че методът е подходящ за описание на атомните ядра. Идеята за приложението на *phDMRG* в теоретичната ядрена физика е предложена от *Х. Дукелски* и *С. Пител* [186], а по-късно в нейното осъществяване се включват *М. Стоицов* и *С. Димитрова* [A19, B16, B15, B17].

### **phDMRG в контекста на конфигурационно смесване в слоестия модел**

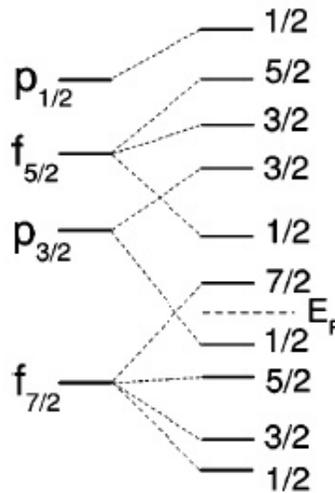
В част (3.3.2) бяха разгледани методите за смесване на конфигурации в слоестия модел и резултатите от тях. Беше подчертано, че назависимо от драстичното ограничаване на размера на конфигурационното пространство вследствие на предположението, че ядрото може да се разглежда като инертна сърцевина и валентни нуклони, слоестият модел може да се прилага само в случаите, когато 1) броят на валентните нуклони е малък или 2) разглежданото конфигурационно пространство е ограничено. Затова се налага използването на приближени подходи. Най-впечатляващи резултати досега са постигнати в метода на квантова *Монте-Карло* диагонализация – в работа [185] са пресметнати енергиите на връзка на бариевите изотопи, като е демонстриран преходът от сферични към деформирани ядра в  $pf + g_{9/2}$  слоя.

В този смисъл *phDMRG*-методът се предлага като алтернативен приближен подход за решаване на многочастичната задача в рамките на слоестия модел [186]. Неговата основната идея е да се разгледат **систематично всички** състояния от конфигурационното пространство. Методът се нарича частично-дупчест, защото едночастичните нива, от които се изгражда конфигурационното пространство, се разделят на дупчести (под нивото на *Ферми*) и частични (над нивото на *Ферми*). Процедурата започва, като първо се разглеждат нивата, най-близки до *Ферми* нивото, защото те участват най-активно при формирането на частично-дупчести възбуждания. Пресмята се матрицата на хамилтониана в това ограничено пространство и се диагонализира, при което се получава нисколежащата част от енергетичния спектър. Така последователно се пробягва по всички едночастични нива, като на всяка стъпка се извършва орязване на броя на разглежданите състояния както в частичното, така и в дупчестото подпространство, следвайки критериите на *DMRG* процедурата, изложени по-горе. Параметър в пресмятанията е броят на състоянията, които се запазват след всяка стъпка. Ще го означаваме с  $p$ . Този параметър постепенно се увеличава и получените резултати се разглеждат като функция на

$p$ . Резултати от приложения на DMRG за други системи показват, че енергията на основното състояние зависи експоненциално от този параметър. Пресмятанията приключват, когато стойностите на търсените величини с определена точност престанат да се променят с нарастване на  $p$ . Така, ако сходимостта е достатъчно бърза, phDMRG би позволил да се опише нискоенергетичния спектър на ядрата, без да е необходимо да се диагонализират матрици с голяма размерност. Това би довело до преодоляване на ограниченията за конфигурационно смесване в слоевия модел и разглеждане на по-тежки ядра, с по-голяма точност, в по-големи конфигурационни пространства.

### Описание на phDMRG процедурата

Проблемът, който искаме да решим, е описание на ядрената структура чрез конфигурационно смесване в рамките на слоевия модел. Системата, която разглеждаме, се състои от  $N_\nu$  валентни неутрона и  $N_\pi$  валентни протона. Нуклон-нуклонното взаимодействие се описва от хамилтониан, съдържащ едночастичен и двучастичен член, и дефиниран в определено едночастично пространство.



Фигура 3.10: Схематично представяне на едночастичните нива в  $pf$  слоя.

Нека първо разгледаме набор от изродени едночастични нива в сферичен базис, например тези в  $pf$  слоя. Те са представени в лявата част на фигура (3.3). Всяко състояние може да бъде населено от  $(2j + 1)/2$  нуклона от един тип. Искаме да преобразуваме това пространство в подредена съвкупност от двукратно изродени състояния. Това може да стане например чрез *Хартри-Фок* пресмятания в аксиално симетричен базис. Схематично резултатите от тези пресмятания са показани в дясната част на (3.3). В зависимост от ъгловия момент на сферичните състояния  $j$ , те се разцепват на едно или няколко двукратно изродени нива, означени чрез

проекцията на ъгловия момент  $m$  върху аксиалната ос на симетрия. Ако предположим, че системата има 8 нуклона от един тип, то те ще заемат в основно състояние четирите най-ниските по енергия нива. С пунктирна линия на фигура (3.3) е означено *Ферми* нивото.

Всяко двукратно изродено аксиално деформирано ниво  $\{\alpha m\}$  се намира в едно от следните четири състояния ( $s = 4$ ). То може да е:

1. празно;
2. на него да има един нуклон с проекция на ъгловия момент върху оста на симетрия  $|m|$ ;
3. да е заето от един нуклон с проекция на ъгловия момент върху оста на симетрия  $-|m|$ ;
4. на него да има два нуклона с проекции на ъгловия момент съответно  $|m|$  и  $-|m|$ ;

Наборът от деформираните *Хартри-Фокови* състояния се разделя от *Ферми* нивото на дупчести, с едночастични енергии по-малки от  $E_F$ , и частични с енергии по-големи от  $E_F$ . В рамките на слоестия модел хамилтонианът на системата се записва във вторично квантуван вид по следния начин:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\alpha m} \epsilon_{\alpha m} a_{\alpha m}^{\dagger} a_{\alpha m} \\
 &+ \sum_{\substack{\alpha_1 m_1, \alpha_2 m_2 \\ \alpha_3 m_3, \alpha_4 m_4}} \langle \alpha_1 m_1, \alpha_2 m_2 | V | \alpha_3 m_3, \alpha_4 m_4 \rangle a_{\alpha_1 m_1}^{\dagger} a_{\alpha_2 m_2}^{\dagger} a_{\alpha_4 m_4} a_{\alpha_3 m_3},
 \end{aligned}
 \tag{3.65}$$

където  $a_{\alpha m}^{\dagger}$  и  $a_{\alpha m}$  са съответно оператори на раждане и унищожение на частица в състояние  $\{\alpha m\}$ .

Нека да предположим, че сме разгледали първите  $n$  едночастични дупчести и частични състояния, отговарящи на нивата, означени с плътна линия на ”лучената картинка” фигура (3.9). Частичните състояния образуват така наречения частичен блок. Нека броят им да означим с  $p$ . Същият брой нива формират съответно и дупчестия блок. Равният брой на състоянията в дупчестия и в частичния блок е предположение, прието за удобство. Освен да определим оптималните състояния, при предходната итерации трябва да сме пресметнали и запазили матричните елементи в разглежданите подпространства на всички оператори, които са ни нужни за получаване на хамилтониана, на пълния ъглов момент и т.н.. За хамилтониан

с двучастично взаимодействие като (3.65) това са матриците на следните комбинации от фермионните оператори на раждане и унищожение:

$$a, aa, a^\dagger a, a^\dagger a^\dagger a, a^\dagger a^\dagger a a, \quad (3.66)$$

пресметнати съответно в частичния и в дупчестия блок, както и техните комплексно спрегнати матрици, които обаче се получават от (3.66) чрез съответните правила за ермитово спрягане.

Сега да добавим по едно ниво съответно към дупчестия и към частичния блок. Броят на състоянията във всеки блок нараства до  $s.p = 4p$ . Състоянията в новите пространства означаваме с  $|i, k\rangle = |i\rangle|k\rangle$ , където  $i = 1, \dots, p$  и  $k = 1, \dots, s$ .

При следващата стъпка от тези  $s.p$  състояния във всеки блок трябва да изберем оптималните  $p$ , същия брой като в началото на итерацията, които да запазим и ”предадем” нататък. Това е ядрото на ренормализационната phDMRG процедура. То означава отново две неща: 1) да определим оптималните състояния и 2) да пресметнем и запазим матричните елементи на всички интересувачи ни оператори в подпространството, зададено от оптималните състояния. За тази цел:

1. Пресмятаме матричните елементи на интересувачите ни оператори в разширения частичен и съответно дупчест блок: за пример ще разгледаме най-простия случай – оператора на унищожение  $a$ , чиито матрични елементи в пространството на векторите  $|i, k\rangle$  могат да се получат, като се приложат фермионните комутационни съотношения. Ако в състоянието  $|j\rangle$  има  $n_j$  на брой частици, то е в сила равенството :

$$\begin{aligned} \langle i, k | a | j, l \rangle &= \langle k | \langle i | a | j \rangle | l \rangle \\ &= \langle i | a | j \rangle \delta_{kl} + (-1)^{n_j} \langle k | a | l \rangle \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.67)$$

От горния израз се вижда, че за пресмятане на матричния елемент в разширеното пространство са необходими матричните елементи на оператора в пространството от предишната итерация  $\{i, j\} = 1, \dots, p$  и в добавяното подпространство  $\{k, l\} = 1, \dots, s$ . Приемаме, че знаем матричните елементи от предишната итерация, а матричните елементи за всяко двукратно изродено състояние, което добавяме, лесно могат да се пресметнат. Те са разписани в Приложение 1. Там са приведени и формулите за пресмятане на матричните елементи и на останалите оператори от (3.66).

2. Конструираме пространство от частичния и дупчестия блок със състояния

$|i_P, j_H\rangle = |i_P\rangle|j_H\rangle$ , наричано суперблок. В суперблока участват не всевъзможните  $|i_P, j_H\rangle$  състояния, а само тези, които имат правилния брой нуклони, отговарящ на броя на фермионите в системата. Това означава, че броят на частиците трябва да бъде равен на броя на дупките. Ако приемем, че хамилтонианът на системата е ротационно инвариантен, достатъчно е да разглеждаме само тези вектори, за които проекцията на пълния ъглов момент е равен на нула. В това ново пространство пресмятаме матричните елементи на хамилтониана. Ако използваме означението  $\gamma = \{\alpha m\}$ , те се задават с равенството:

$$\begin{aligned}
\langle i_P, j_H | H | k_P, l_H \rangle &= \sum_{\gamma} \epsilon_{\gamma} [\langle i_P | a_{\gamma}^{\dagger} a_{\gamma} | k_P \rangle \delta_{j_H, l_H} + \langle j_H | a_{\gamma}^{\dagger} a_{\gamma} | l_H \rangle \delta_{i_P, k_P}] \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{\gamma_i, \gamma_j, \gamma_k, \gamma_l} \langle \gamma_i, \gamma_j | V | \gamma_k, \gamma_l \rangle \left[ \delta_{i_P, k_P} \langle j_H | a_{\gamma_i}^{\dagger} a_{\gamma_j}^{\dagger} a_{\gamma_l} a_{\gamma_k} | l_H \rangle \right. \\
&+ 2(-)^{n_{k_P}} \langle i_P | a_{\gamma_i}^{\dagger} | k_P \rangle \langle j_H | a_{\gamma_j}^{\dagger} a_{\gamma_l} a_{\gamma_k} | l_H \rangle \\
&+ 2(-)^{n_{k_P}} \langle i_P | a_{\gamma_l} | k_P \rangle \langle j_H | a_{\gamma_i}^{\dagger} a_{\gamma_j}^{\dagger} a_{\gamma_k} | l_H \rangle \\
&+ \langle i_P | a_{\gamma_i}^{\dagger} a_{\gamma_j}^{\dagger} | k_P \rangle \langle j_H | a_{\gamma_l} a_{\gamma_k} | l_H \rangle \\
&- 4 \langle i_P | a_{\gamma_i}^{\dagger} a_{\gamma_l} | k_P \rangle \langle j_H | a_{\gamma_j}^{\dagger} a_{\gamma_k} | l_H \rangle \\
&+ \langle i_P | a_{\gamma_l} a_{\gamma_k} | k_P \rangle \langle j_H | a_{\gamma_i}^{\dagger} a_{\gamma_j}^{\dagger} | l_H \rangle \\
&+ 2(-)^{n_{k_P}} \langle i_P | a_{\gamma_j}^{\dagger} a_{\gamma_k} a_{\gamma_l} | k_P \rangle \langle j_H | a_{\gamma_i}^{\dagger} | l_H \rangle \\
&+ 2(-)^{n_{k_P}} \langle i_P | a_{\gamma_i}^{\dagger} a_{\gamma_j}^{\dagger} a_{\gamma_l} | k_P \rangle \langle j_H | a_{\gamma_k} | l_H \rangle \\
&+ \left. \delta_{j_H, l_H} \langle i_P | a_{\gamma_i}^{\dagger} a_{\gamma_j}^{\dagger} a_{\gamma_l} a_{\gamma_k} | k_H \rangle \right] . \tag{3.68}
\end{aligned}$$

Трябва да се обърне внимание на факта, че членовете от горния израз представляват произведения от матричен елемент в частичното пространство и матричен елемент в дупчестото пространство на оператор, комплексно спрегнат на един от тези, които се пресмятат и запазват.

3. Диагонализираме матрицата на хамилтониана (3.68):

$$H |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle , \tag{3.69}$$

където

$$|\Psi_k\rangle = \sum_{i_P, j_P=1}^{s.p} \Psi_{ij}^{(k)} |i_P, j_H\rangle . \tag{3.70}$$

4. Нека припомним, че в DMRG метода орязването на пространството се прави

така, че да се оптимизира припокриването на функцията на системата в основно състояние ( $|\Psi_1\rangle$  в ур. (3.70)) с вълновата функция в редуцираното пространство. В phDMRG подхода има два блока - частичен и дупчест. За всеки един от тях изборът на оптималните състояния се извършва поотделно, като първо се построява редуцирана матрица на плътността в съответното подпространство. В частичния блок се дефинира  $\rho_{ii'}^P$ :

$$\rho_{ii'}^P = \sum_{j_H=1}^{s.p} \Psi_{ij_H}^1 \Psi_{i'j_H}^{1*} . \quad (3.71)$$

5. Така определената редуцираната матрица на плътността  $\rho_{ii'}^P$  с размерност  $(4p \times 4p)$  се диагонализира:

$$\rho^P |u_P^\alpha\rangle = \omega_\alpha^P |u_P^\alpha\rangle . \quad (3.72)$$

Собствените стойности на редуцираната матрица на плътността  $\omega_\alpha^P$  представляват вероятността съответното състояние да присъства в многочастичната вълнова функция  $|\Psi_1\rangle$ . Следователно, оптималното орязване на базиса в описания по-горе смисъл означава запазване за следващата итерация на първите  $p$  състояния с най-големи собствени стойности. Аналогично се дефинира редуцирана матрица на плътността в дупчестия блок  $\rho_{jj'}^H$ :

$$\rho_{jj'}^H = \sum_{i_P=1}^{s.p} \Psi_{i_P j}^1 \Psi_{i_P j'}^{1*} , \quad (3.73)$$

диагонализира се и се запазват  $p$  на брой състояния с най-големи числа на запълване. Определени чрез равенства (3.71) и (3.73), редуцираните матрици на плътността отчитат само основното състояние на системата. Ако искаме да опишем по най-добрия начин не само основното, но да речем първите  $L$  състояния от енергетичния спектър на системата, трябва да построим смесени редуцирани матрици:

$$\rho_{ii'}^P = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \sum_{j_H=1}^{s.p} \Psi_{ij_H}^k \Psi_{i'j_H}^{k*} . \quad (3.74)$$

и

$$\rho_{jj'}^H = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \sum_{i_P=1}^{s.p} \Psi_{i_P j}^k \Psi_{i_P j'}^{k*} , \quad (3.75)$$

6. След като сме идентифицирали  $p$  вектора от частичния блок и  $p$  вектора от дупчестия блок, които описват оптимално основното или първите  $L$  по енергия състояния на системата, остава да трансформираме матриците на интересуващите ни оператори (3.66) от разширеното пространство в орязаното. Ако векторите, които ще запазим за следващата итерация, се изразяват чрез векторите в разширеното пространство по формулата:

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^{s.p} c_i^\alpha |i\rangle, \quad \text{където } \alpha = 1, \dots, p, \quad (3.76)$$

то матричните елементи на всеки оператор  $A$  се ренормализират, т.е. дефинират в ограниченото пространство, чрез равенството:

$$\langle \alpha | A | \beta \rangle = \sum_{i,j} c_i^{\alpha*} c_j^\beta \langle i | A | j \rangle. \quad (3.77)$$

7. С горната стъпка завършва текущата итерация на phDMRG метода – конструирано е подпространство от  $p$  частични и  $p$  дупчести състояния, които оптимално описват основното състояние или първите  $L$  нива от енергетичния спектър на системата и матричните елементи на интересуващите ни оператори в тези подпространства. Можем да се върнем към точка 1. и да добавим нови нива към дупчестия и частичния блок.

Описаната итерационна процедура се прилага, докато се разгледат всички състояния от конфигурационното пространство. Тъй като в phDMRG метода се разглеждат едновременно две подпространства, които могат да съдържат различен брой нива, то итерациите продължават, докато се отчете и последното състояние от по-голямото пространство. Нека се върнем към фигура (3.10). На нея са показани схематично десетте аксиално симетрични двукратно изродени нива на  $pf$  слоя. Да разгледаме система от осем фермиона. *Ферми* нивото разделя пространството на дупчест блок, съдържащо четири дупчести нива и частичен блок от шест нива. phDMRG процедурата започва, като разглеждаме първите две състояния около *Ферми* нивото. Това са нивата с  $|m| = 1/2$  в дупчестия блок и с  $|m| = 7/2$  в частичния. Матричните елементи на необходимите ни оператори (3.66) са показани в таблиците в Приложение 1. Добавяме състояние с  $|m| = 5/2$  към дупчестия блок и състояние с  $|m| = 1/2$  към частичния. Пресмятаме матричните елементи на операторите съгласно формула (3.67) и тези от Приложение 1 в пространство от 16 състояния за всеки блок. Ако броят на състоянията  $p$ , които ще запазваме на всяка итерация е по-голям от 16, орязване на нивата и ренормализация

на операторите не се налага. Това е необходимо, когато е изпълнено неравенството  $p < s^n = 4^n$ , където  $n$  е броят на разгледаните от началото на процедурата нива. След три итерации всички дупчести нива са включени в разглежданията и алгоритъмът продължава, като се добавят нови състояния само към частичния блок, до тяхното изчерпване. Възниква въпросът: "Какво става с матричните елементи на дупчестите оператори след изчерпване на всички нива под *Ферми* нивото, или по-точно, прави ли се орязване на броя на нивата до  $p$  или се запазват всичките  $4p$  състояния и съответните матрични елементи на операторите?" Възможни са и двата подхода. Ако се запазят всички  $4p$  нива, се гарантира по-добро описание на системата. Ако броят на нивата се редуцира до  $p$ , това намалява количеството информация, съхранявана в паметта на компютъра. Как този избор на стратегия влияе върху резултатите за енергията на описваната система, ще бъде показано в следващата част.

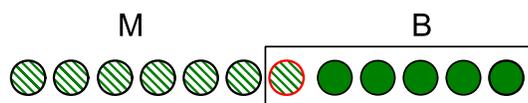
Описаната дотук процедура се нарича "безкраен алгоритъм" и може графично да се илюстрира с фигура (3.11). На нея със зелени кръгчета са отбелязани състоянията, които вече са разгледани в процеса на DMRG итерациите. Новото ниво, което се добавя към тях при текущата итерация, е означено с червено кръгче. Както споменахме по-горе, тези два типа нива формират блок.



Фигура 3.11: Безкраен DMRG алгоритъм.

Основен недостатък на безкрайния DMRG алгоритъм е липсата на информация за нивата, които още не са отчетени при итерационната процедура. Затова той се прилага успешно за хомогенни системи. Приложението му за крайни системи може да се разглежда само като първо приближение в DMRG метода.

Крайният DMRG алгоритъм е показан схематично на фигура (3.12).



Фигура 3.12: Краен DMRG алгоритъм.

Нека предположим, че сме завършили и последната итерация от безкрайния

DMRG алгоритъм, включвайки последователно нивата отляво надясно. При следващата стъпка тръгваме в обратната посока, образувайки състояние като пряко произведение от три вектора – един от стария блок, означен със плътно зелено кръгче, нивото, което добавяме при текущата итерация, означено с червено кръгче, и ниво от така наречената ”среда” (Medium), представено със застриховано зелено кръгче. То представлява състояние, за което сме запазили матричните елементи на интересующите ни оператори в процеса на безкрайния алгоритъм. При всяка итерация от крайния алгоритъм блокът на системата  $B$  расте за сметка на блока на средата  $M$ . Редуциране на базиса и трансформация на матричните елементи на необходимите оператори става само в блок  $B$ . След като в блок  $M$  останат само нива, които се отчитат без редуциране при определен брой на запазените състояния  $p$ , започва ”движение” в обратна посока - отново отляво надясно. Това изграждане на нивата отляво надясно и отдясно наляво дава възможност да се отчита приносът на всички типове състояния по време на всяка итерация. Този процес продължава, докато се постигне насищане на стойността на енергията на основното състояние на системата. Подробно описание на безкрайния и крайния алгоритъм на DMRG, на преимуществата и недостатъци им, на системите, в които те дават най-добри резултати, може да се намери в обзорната статия [182].

### Моделни пресмятания

Както беше отбелязано вече,  $phDMRG$  методът е разработен от *X. Дукелски* и *X. Сиера* за описание на много малки свръхпроводими зрънца, разглеждани като система от фермиони, които си взаимодействат чрез сили на сдвояване в пространство от голям брой двукратно изродени еквиливантни нива [76, 184]. Този проблем е решен за 400 частици в пространство от 400 състояния. Независимо от огромния мащаб на задачата, с помощта на  $phDMRG$  метода е пресметната енергията на основното състояние на системата с впечатляваща точност. Тук трябва да отбележим, че енергията на основното състояние на тази система може да се намери точно като решение на уравненията на *Ричардсън*, разгледани подробно в част (3.2.1). Тези резултати показват, че  $phDMRG$  методът е много подходящ за описание на фермионни системи, в които доминира една степен на свобода.

Атомните ядра са фермионни системи, в които се конкурират поне няколко степени на свобода, най-важните от които са сдвояването и квадрупол-квадруполното взаимодействие. Затова преди да се прилага за реални ядрени системи, ефективността на  $phDMRG$  трябва да се провери при наличието на различни типове колективни ефекти. Това е направено в работи [A19, 186]. Това е първото приложение на  $phDMRG$  метода към задача, свързана с ядрената физика.

Ще прилагаме безкрайния алгоритъм на phDMRG метода. Най-простата схематична задача включва разглеждането на система от идентични нуклони, намиращи се в един голям  $j$  слой и взаимодействащи си чрез сили на сдвояване и квадруполни сили. В такава система няма *Ферми* ниво, защото всички поднива са дадена проекция  $m$  се заемат с равна вероятност. Тъй като наличието на *Ферми* ниво е важна характеристика на реалните ядрени системи, в разглежданите моделни пресмятания то се въвежда, като към хамилтониана на системата се добавя едно-частичен член, нарушаващ израждането в разглеждания  $j$  слой. И така, системата от идентични нуклони се описва с хамилтониан във вида:

$$H = -\chi Q \cdot Q - g P^\dagger P - \epsilon \sum_m |m\rangle a_{jm}^\dagger a_{jm}. \quad (3.78)$$

Последният член в горното равенство разделя нивата в  $j$  слоя, като налага на системата "oblate" деформация. Силата на квадрупол-квадруполното взаимодействие  $\chi$  се прескаляра чрез израза:

$$\chi = \frac{\langle j || Q || j \rangle^2}{2j + 1} \tilde{\chi}, \quad (3.79)$$

където  $\tilde{\chi}$  е силата на квадрупол-квадруполното взаимодействие, което се използва в стандартните пресмятания. Така дефинирани, константите  $\chi$  и  $g$  имат еднаква размерност, която ще игнорираме по-нататък.

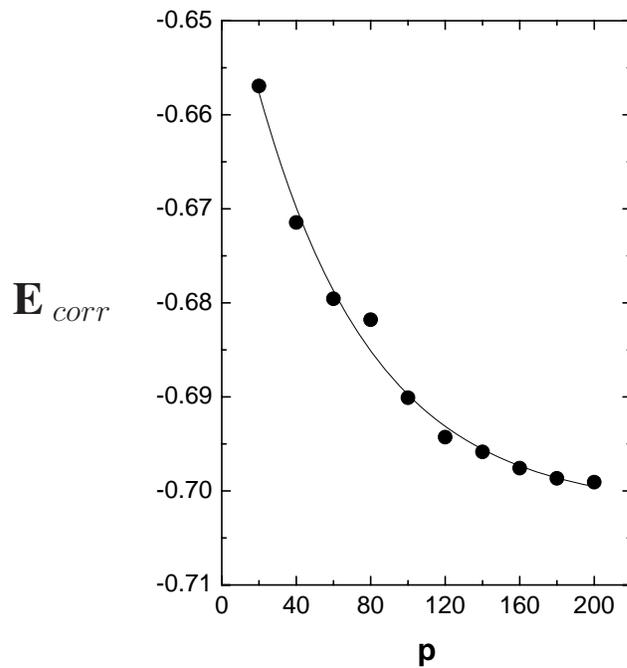
В описаното дотук пространство разглеждаме система от 10 нуклона с еднакъв изоспин. В този случай в  $j = 25/2$  слоя има общо 13 нива, 5 дупчести и 8 частични *Ферми* нивото лежи между състоянията с  $|m| = 17/2$  и  $|m| = 15/2$ . Размерът на суперблока за тази задача в  $M$ -схемата е 109 583. Матрици с такава размерност рутинно се диагонализират със съществуващите програми, основани на метода на *Ланцос*. Това позволява да се направи сравнение между решенията в phDMRG метода и точното решение на проблема, което ще покаже приложимостта на предлагания подход.

В първата статия по този проблем [79] са разгледани два набора от параметри:  $\{\chi = 1, g = 0, \epsilon = 0.1\}$  и  $\{\chi = 1, g = 0.05, \epsilon = 0.1\}$ . И в двата случая за енергията на основното състояние на системата се постига точност от  $\Delta\varepsilon_0/\varepsilon_0 \sim 10^{-6}$  при брой на нивата, запазвани във всеки блок  $p = 140$ .

Сега ще разгледаме резултатите от няколко конкретни пресмятания за разглежданата система, публикувани в [A19].

Започваме със случай, при който редуцираните матрици на плътността в частичния и в дупчестия блок са дефинирани съответно чрез равенства (3.71) и (3.73), т.е. интересуваме се от характеристиките само на основното състояние. След отчитане

на последното ниво от дупчестия блок запазваме всичките  $4p$  състояния. Параметрите на хамилтониана имат следните стойности:  $\{\chi = 1, g = 0.1, \epsilon = 0.1\}$ . Решаваме задачата в рамките на 4 подхода: *Хартри–Фок*, *Хартри–Фок–Боголюбов*, *phDMRG* и при пълно конфигурационно смесване в рамките на слоестия модел. Направените пресмятания в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов* показват, че системата се намира в свръхпроводимо състояние. Това се вижда от сравнението на средната стойност на процеп на сдвояване и средното разстояние между *Хартри–Фок* нивата, което е  $0.39/0.18=2.1$ . Това означава, че се разглежда реалистичен сценарий, при който силите на сдвояване са от порядъка на квадрупол–квадруполното взаимодействие и играят важна роля при формиране на основното състояние на системата.



Фигура 3.13: Корелационната енергия на система от 10 еднакви нуклона, намиращи се в  $j = 25/2$  слой като функция на броя на запазваните състояния при всяка *phDMRG* итерация. Плътната линия показва експоненциалната апроксимация на *phDMRG* резултатите.

Фигура (3.13) показва корелационната енергията на система  $E_{corr}$  като функция на броя на състоянията, запазвани при всяка итерация на *phDMRG* процедурата.  $E_{corr}$  е дефинирана като принос на корелациите спрямо *Хартри–Фоковата* енергия на основното състояние. Стойностите на корелационната енергия при точните пресмятания в слоестия модел и в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов* са съответно

равни на:

$$E_{corr}^{Exact} = -0.70633 ; E_{corr}^{HFB} = -0.20641 \quad (3.80)$$

При стойност на  $p = 200$  в phDMRG се получава повече от 99% от точната корелационна енергия, докато в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов* този процент е само 28. Трябва да се отбележи още, че при  $p = 200$  размерът на суперблока е 2886, много по-малък от размера на точната матрица на хамилтониана, която е 109 583. Показателно е, че дори при  $p = 40$ , когато размерът на суперблока е само 232, корелационната енергия възпроизвежда 95% от точната стойност.

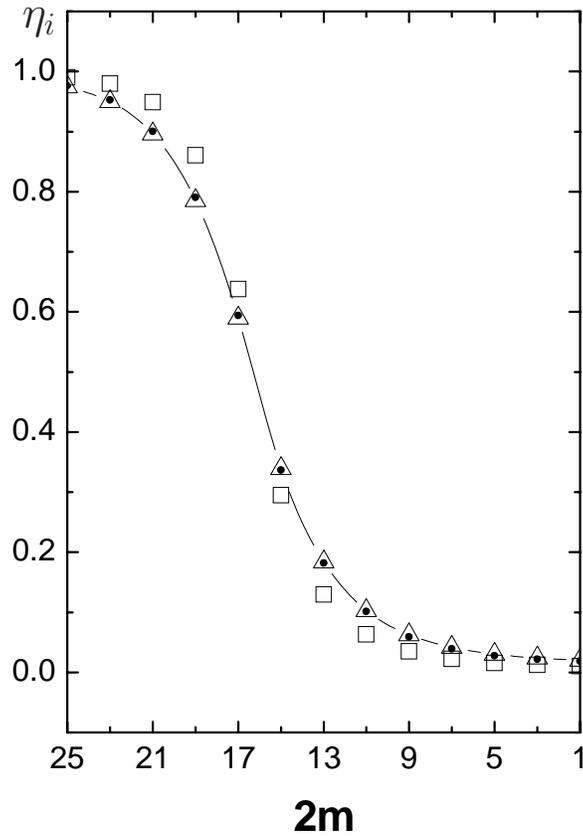
В таблица (2.41) са показани енергиите на първите три възбудени нива на разглежданата система, сравнени с точните им стойности. Въпреки че разглеждаме случая, при който в редуцираните матрици на плътността участва само основното състояние, енергиите на възбудените състояния се възпроизвеждат с почти същата точност, както и на основното състояние. При  $p = 200$  точните стойности се възпроизвеждат до 99%.

Таблица 3.1: Енергия на възбуждане на първите три възбудени състояния за система от 10 еднакви нуклона, намиращи се в  $j = 25/2$  слой.

| $p$          | $\varepsilon_1$ | $\varepsilon_2$ | $\varepsilon_3$ |
|--------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 40           | 0.89040         | 1.26036         | 1.49354         |
| 80           | 0.88266         | 1.18608         | 1.41182         |
| 120          | 0.88791         | 1.18077         | 1.41795         |
| 160          | 0.88794         | 1.17722         | 1.41456         |
| 200          | 0.88784         | 1.17302         | 1.41024         |
| <i>Exact</i> | 0.88578         | 1.16245         | 1.39915         |

На фигура (3.14) са представени числата на запълване на нивата в основно състояние на разглежданата система в три случая: в слоестия модел (точни), в phDMRG и в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов*. phDMRG резултатите, получени при  $p = 200$ , възпроизвеждат много точно числата на запълване в слоестия модел, докато резултатите в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов* водят до занижени стойности на изпразването на морето на *Ферми*.

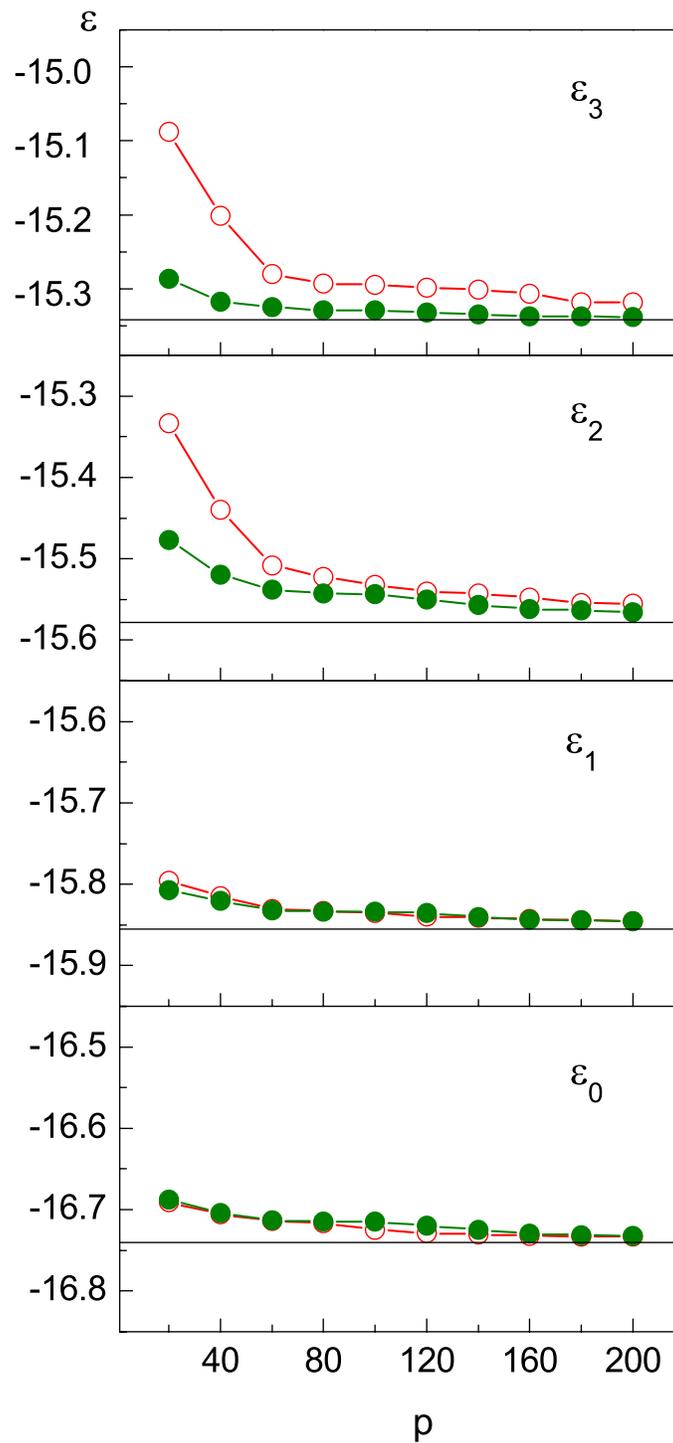
Сега ще разгледаме значението на включването на повече от едно състояние в построяването на редуцираните матрици на плътността. Това означава, че за пресмятане на редуцираните матрици на плътността в частичния и дупчестия блок използваме съответно изразите (3.74) и (3.75). В случая разглеждаме основното и първите три възбудени състояния на системата, т.е. ( $L = 4$ ). На фигура (3.15)



Фигура 3.14: Числа на запълване в система от 10 еднакви нуклона намиращи се в  $j = 25/2$  слой, за нива с проекция на спина  $m$ . Точките представят точните резултати, триъгълничета – phDMRG резултатите при  $p = 200$ , а квадратчетата – числата на запълване в метода на Хартри–Фок–Боголюбов.

с червени кръгчета са означени резултатите за енергията на четирите най-ниско лежащи състояния като функция на броя на нивата, запазвани при всяка итерация. Със зелено са представени енергиите получени в случая, когато в редуцираните матрици на плътността се отчита влиянието на четирите състояния.

Резултатите не са изненадващи. За основно и дори за първото възбудено състояние и двете процедури водят до приблизително еднакви резултати за всички стойности на  $p$ . Там, където съществуват минимални различия, по-добри са резултатите в случая, когато в редуцираните матрици се отчита само основното състояние. Картината е различна при по-високо възбудените нива. При малък брой на запазваните състояния в DMRG итерациите разликите в двата сценария е съществена. За по-доброто описание на енергията на възбудените нивата техният принос



Фигура 3.15: Енергия на основното и първите възбудени състояния на система от 10 нуклона в  $j = 25/2$  слоя. С червено са означени резултатите, когато  $L = 1$ , а със зелено - когато  $L = 4$ . Правите линии показват точните резултати.

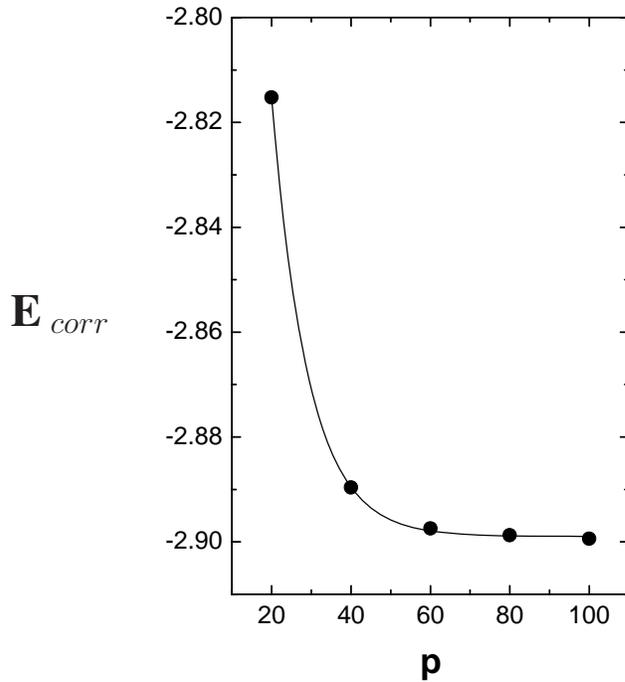
трябва да се отчита при конструирането на редуцираните матрици на плътността. Същественият извод, който следва от сравнението на двата набора от резултати обаче е, че при достатъчно голям брой на запазваните нива  $p$

1. енергиите и при двата сценария за всички разглеждани нива съвпадат помежду си;
2. резултатите възпроизвеждат с голяма точност стойностите на енергиите, получени при пълно конфигурационно смесване в слоестия модел.

Следващият детайл от phDMRG процедурата, който ще разгледаме, е как трябва да се третира дупчестите нива след последната итерация. Двата възможни подхода са следните: 1) редуцираме нивата от  $4p$  на  $p$  и при следващите итерации в частичния блок включваме матричните елементи на оператори в орязания дупчест блок; или 2) запазваме всичките  $4p$  нива на дупчестите оператори след последната итерация. При  $p = 200$  в първия случай енергията на основното състояние е  $\varepsilon_0 = -16.7331$ , а при втория  $\varepsilon_0 = -16.7333$ . Очевидно разликата е несъществена. Следователно орязването на дупчестия блок при последната итерация носи предимството на по-малкото информация, която трябва да се пази в паметта на компютъра, без това да влошава резултатите от пресмятанията. Трябва все пак да отбележим, че горното твърдение е вярно при условие, че броят на запазваните нива при всяка итерация  $p$  е достатъчно голям.

Добрите резултати от моделните пресмятания за дискутирания дотук пример дават основание phDMRG процедурата да бъде тествана за един екстремен случай. Нека разгледаме система от 40 еднакви нуклона, заемащи нива в един слой със пълнен ъглов момент  $j = 99/2$ . Тяхното взаимодействие се описва от хамилтониана (3.78) с параметри  $\{\chi = 1, g = 0.1, \epsilon = 0.2\}$ . Още в началото трябва да отбележим, че това е система с огромна размерност в конфигурационно пространство. Ако тази задача трябва да се решава точно, това би изисквало в  $M$ -схемата диагонализация на матрица на хамилтониана с размер  $3.84 \times 10^{25}$  – очевидно нерешим проблем без драстично ограничаване на броя на нивата, които могат да заемат частиците. Ще приложим phDMRG алгоритъма, като включваме само основното състояние в редуцираните матрици на плътността и след последната двадесета итерация в дупчестия блок запазим само  $p$  състояния. Последното ограничение е задължително при задача от такъв мащаб.

Резултатите за корелационната енергия на системата са показани на фигура (3.16). При  $p = 100$  получената корелационна енергия е  $E_{corr} = -2.8994$ . Ако апроксимираме phDMRG резултатите с експонента (показана на графиката с плътна линия), получаваме стойност от  $-2.8990 \pm 0.0003$ . Двата резултата съвпадат с точност от порядъка на  $\sim 10^{-4}$ .



Фигура 3.16: Корелационната енергия на система от 10 еднакви нуклона, намиращи се в  $j = 99/2$  слой като функция на броя на запазваните състояния при всяка phDMRG итерация. Плътната линия показва експоненциалната апроксимация на phDMRG резултатите.

Пресмятания на корелационната енергия на разглежданата система са направени и в метода на *Хартри–Фок–Боголюбов*. Получената стойност  $E_{corr}^{HFB} = -1.7902$  показва, че системата наистина се намира в свръхпроводимо състояние, но тя е само 62% от експоненциалния фит на phDMRG резултатите.

**В заключение** трябва да се отбележи, че разгледаните моделни пресмятания и резултатите от тях уточняват важни детайли на phDMRG процедурата, преди тя да бъде приложена към реалистични ядрени системи. Когато съществува ясно дефинирано *Ферми* ниво, методът описва с голяма точност енергията както на основното, така и на нисколежащите възбудени състояния, дори при наличие на конкуриращи се степени на свобода на нуклонната система. С голяма точност се получават и стойностите на други характеристики на системата, като числата на запълване на едночастичните състояния. Оптимизираната изчислителна процедура дава възможност да се разглеждат изключително сложни системи и да се получават резултати с голяма точност като се диагонализират матрици със сравнително неголеми размери. Критичният момент при phDMRG метода е бързата експонен-

циална сходимост на резултатите като функция на броя на нивата, запазвани при всяка итерация.

### Реалистични пресмятания

В тази част ще бъдат представени резултатите от първото приложение на phDMRG метода за описание на реалистична ядрена система. Те са публикувани в работите [B15, B16, B17]

Изводите, които бяха направени относно приложението на phDMRG метода за изучаване на система от един вид нуклони, взаимодействащи си чрез сили на вдвояване и квадрупол-квадруполни сили в пространство на състояния от един слой, дават основание да пристъпим към формулиране и решаване на реалистична задача в теоретичната ядрена физика.

На първо място това означава да разглеждаме система, съставена от два вида фермиони – протони и неутрони, които си взаимодействат чрез реалистични нуклон-нуклонни сили. В този случай хамилтонианът на системата съдържа три члена, отчитащи съответно неутрон-неутронното  $H^\nu$ , протон-протонното  $H^\pi$  и протон-неутронното взаимодействие  $H^{\pi\nu}$ :

$$H = H^\nu + H^\pi + H^{\pi\nu} . \quad (3.81)$$

Членовете  $H^\tau$ , ( $\tau = \nu, \pi$ ) съдържат едночастична и двучастична част (3.65) и техните матрични елементи се дефинират с израза (3.68). Протон-неутронното взаимодействие  $H^{\pi\nu}$  се представя само от двучастичен член:

$$H^{\pi\nu} = \sum_{\substack{\alpha_1 m_1, \alpha_2 m_2 \\ \alpha_3 m_3, \alpha_4 m_4}} \langle \alpha_1 m_1, \alpha_2 m_2 | V | \alpha_3 m_3, \alpha_4 m_4 \rangle a_{\alpha_1 m_1}^{\nu \dagger} a_{\alpha_2 m_2}^{\pi \dagger} a_{\alpha_4 m_4}^\nu a_{\alpha_3 m_3}^\pi . \quad (3.82)$$

Наличието на два вида частици означава също, че пълното Хилбертово пространство на системата е пряко произведение от две подпространства – неутронно и протонно. От своя страна нивото на Ферми в протонното подпространство разделя състоянията в него на дупчести и частични. Същото важи и за подпространството на протоните. По този начин в phDMRG алгоритъма участват вече четири блока - дупчест за протони, дупчест за неутрони, частичен за протони и частичен за неутрони.

Чрез диагонализацията на хамилтониана на системата

$$H|\Psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\Psi_\alpha\rangle \quad (3.83)$$

намираме неговите собствени вектори, които представляват линейна комбинация

от произведения на четири състояния, по едно от всеки блок:

$$|\Psi_\alpha\rangle = \sum_{\substack{i_p^\nu, j_h^\nu \\ k_p^\pi, l_h^\pi}} \Psi_{ijkl}^{(\alpha)} |i_p^\nu\rangle |j_h^\nu\rangle |k_p^\pi\rangle |l_h^\pi\rangle, \quad (3.84)$$

където индексите  $\nu$  и  $\pi$  се отнасят съответно за неутрони и протони, а  $h$  и  $p$  – за частици и дупки.

За всеки вид нуклони ( $\tau = \nu, \pi$ ) се дефинират редуцирани матрици на плътността в частичния и в дупчестия блок:

$$\begin{aligned} \rho_{ii'}^{\tau p} &= \frac{1}{L} \sum_{\alpha=1}^L \sum_{j,k,l=1}^{4p} \Psi_{ijkl}^\alpha \Psi_{i'jkl}^{\alpha*}, \\ \rho_{jj'}^{\tau h} &= \frac{1}{L} \sum_{\alpha=1}^L \sum_{i,k,l=1}^{4p} \Psi_{ijkl}^\alpha \Psi_{ij'kl}^{\alpha*}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Матриците  $\rho^{\tau p}$  и  $\rho^{\tau h}$  са с размерност  $(4p \times 4p)$  и съгласно phDMRG алгоритъма трябва да бъдат диагонализирани:

$$\begin{aligned} \rho^{\tau p} |u^\beta\rangle_{\tau p} &= \omega_\beta^{\tau p} |u^\beta\rangle_{\tau p}, \\ \rho^{\tau h} |u^\beta\rangle_{\tau h} &= \omega_\beta^{\tau h} |u^\beta\rangle_{\tau h}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

Тези  $p$  състояния от всеки блок, които имат най-голяма собствена стойност, задават оптималното приближение на многочастична вълнова функция на системата в орязаното пространство.

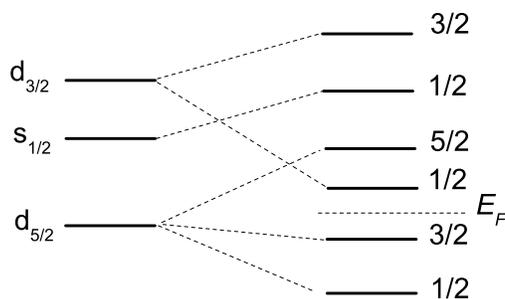
Тук ще обърнем внимание и на една съществена подробност. При диагонализиране на редуцираните матрици на плътността възникват състояния с противоположни стойности на проекцията на пълния ъглов момент  $m$ , които имат еднакви числа на запълване. Когато при редуциране на базиса от  $4p$  на  $p$  едното от тях по правило трябва да отпадне, тогава за следващата итерация запазваме  $(p + 1)$  състояния, включвайки и двете изродени нива.

След пренормиране на матриците на необходимите ни оператори в орязаното пространство, съгласно phDMRG процедурата преминаваме към следващата итерация, като добавяме по едно ново състояние във всеки един от четирите блока. Ако използваме безкрайния алгоритъм, пресмятанятията приключват след изчерпване на всички нива във всяко едно от разглежданите подпространства.

Нека сега формулираме конкретната задача, която ще решаваме. Ще описваме нисколежащия спектър на ядрото  $^{24}\text{Mg}$ . Избираме това ядро, защото то може да

бъде описано точно както в рамките на слоестия модел, така и чрез phDMRG метода, а това е необходимо за изследване качествата на разработвания подход.

Ядрото  $^{24}\text{Mg}$  може да се разглежда като сърцевина от осем протона и осем нейтрона, заемащи нивата  $1s$  и  $1p$  и формиращи ядрото  $^{16}\text{O}$ , и четири валентни протона и четири валентни нейтрона в  $sd$ -слоя. Диаграма на активните нива в разглежданото пространство е представена на фигура (3.17).



Фигура 3.17: Схематично представяне на разцепването на нивата в моделното пространство на  $sd$  слоя на двукратно изродени нива след *Хартри-Фокови* пресмятания в аксиално деформиран базис. С  $E_F$  е означено *Ферми* нивото.

В лявата страна на фигурата са представени нивата в сферичния слоест модел. Те са изродени по проекцията на пълния ъглов момент. Всяко едно от тях може да бъде населено от  $(2j + 2)/2$  нуклона с еднакъв изоспин. Ако в това моделно пространство направим *Хартри-Фокови* пресмятания в аксиално деформиран базис, ще получим набор от двукратно изродени състояния. На фигура (3.17) всяко едно от тези нива е обозначено чрез проекцията на пълния ъглов момент  $j$  върху  $z$ -оста на симетрия. *Ферми* нивото на системата лежи между първото  $m = 3/2$  и второто  $m = 1/2$  ниво. То разделят състоянията на дупчести  $(1/2, 3/2)$  и частични  $(1/2, 5/2, 1/2, 3/2)$ . Тъй като броят на валентните протони и нейтрони е еднакъв, съответните конфигурационни пространства също съвпадат.

Нуклон-нуклонните сили в  $sd$ -слоя се задават от USD взаимодействието [146, 147]. С това задачата в сферичния слоест модел е напълно дефинирана. Тя може да се реши точно, защото размерът на матрицата на хамилтониана в  $m$ -схемата е 28 503. Такава матрица може да се диагонализира без проблем в метода на Ланцос.

Пресмятанията в phDMRG метода извършваме първо при подредбата на състоянията в сферичния базис. Схематично редът на нивата, които се добавят в дупчестия и частичния блок, може да се представи така:

$$\overleftarrow{d_{\frac{5}{2}} 1/2, d_{\frac{5}{2}} 3/2} \quad | \quad \overrightarrow{d_{\frac{5}{2}} 5/2, s_{\frac{1}{2}} 1/2, d_{\frac{3}{2}} 1/2, d_{\frac{3}{2}} 3/2}$$

$$E_F$$

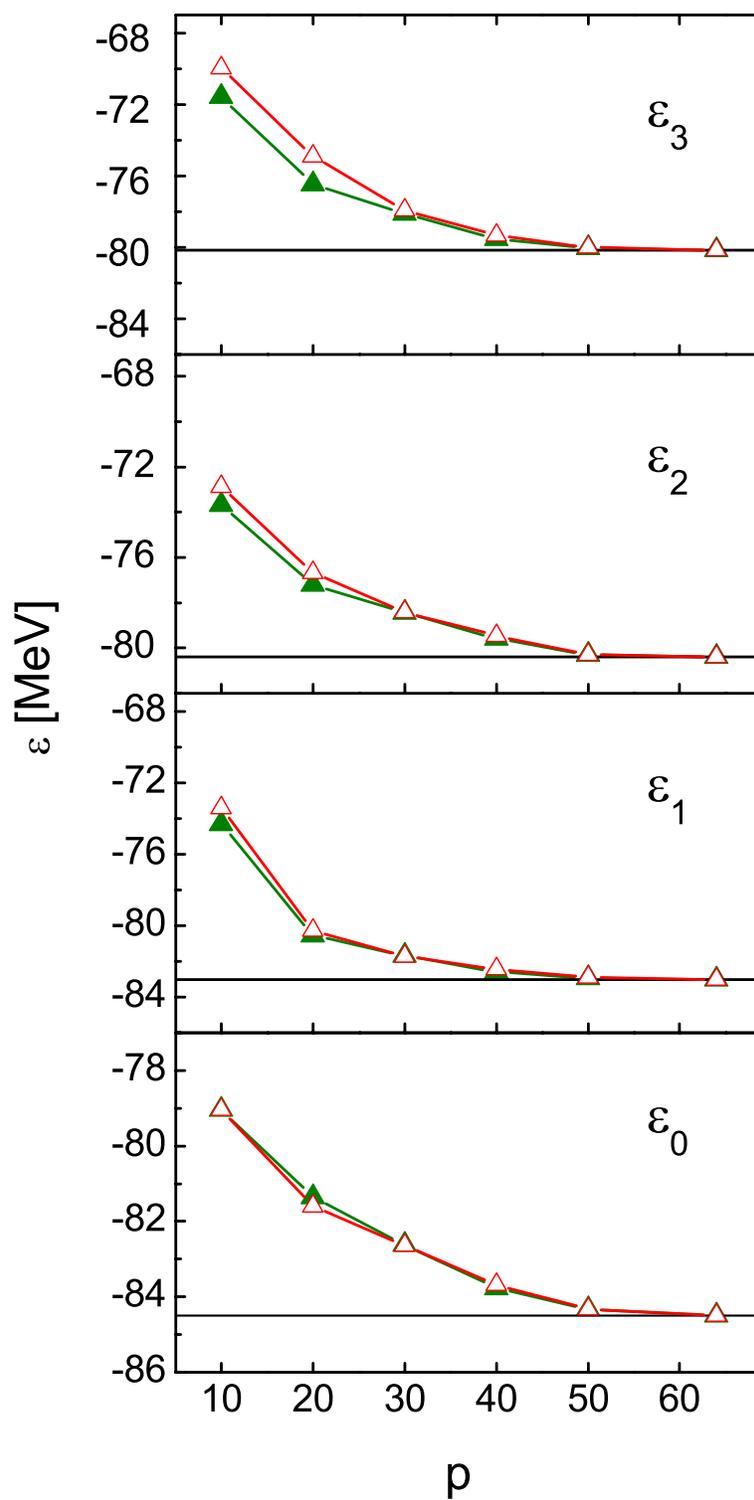
Тъй като дупчестите нива са само две, те се разглеждат още при първата итерация. Ако броят на състоянията, запазвани при всяка итерация, е  $p \geq 16$ , тогава орязване на базиса в дупчестото пространство на неутрони и протони не се налага. В частичния блок могат да се направят три итерации. Ако броят на състоянията, запазвани при всяка итерация, е  $p = 4^3 = 64$ , всички нива ще бъдат отчетени след края на процедурата и тогава трябва да се възпроизведе точното решение, което знаем от диагонализацията на хамилтониана в слоестия модел.

На фигура (3.18) са представени енергиите на основното и първите три възбудени състояния, получени при описаната подредба на състоянията (3.87) за два случая: 1) когато в построяването на редуцираните матрици в четирите блока участва само основното състояние (резултатите са отбелязани с червено на фигурата) и 2) когато матриците се пресмятат по формули (3.74) и (3.75) (резултатите са означени със зелено). Точните решения за енергиите на нивата са показани с прави черни линии [187].

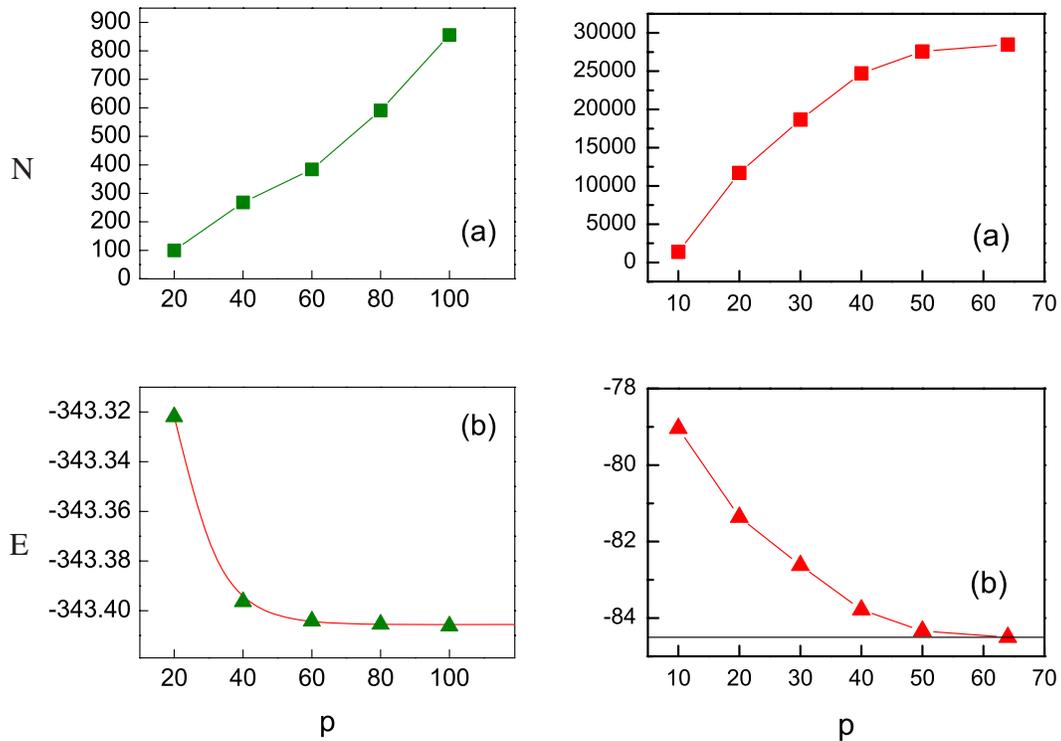
Първият извод, който се налага от показаното на фигура (3.18) е, че за разлика от моделните пресмятания, в този случай експоненциалната сходимост не е особено бърза. Това важи както за основното, така и за възбудените състояния. Включването на нисколежащите нива при пресмятане на редуцираните матрици на плътността подобрява незначително сходимостта при възбудените състояния и то само при малък брой на запазваните нивата  $p$ . Когато той е достатъчно голям, разлика между двата набора резултати на практика няма.

Сравнение между моделните и реалистични пресмятания е направено на фигура (3.19). В горните панели е показана зависимостта на размера на суперблока, а в долните – на енергията на основното състояние като функции на броя на запазваните нива  $p$ , вляво за системата от 40 фермиона в  $j = 99/2$  слоя, а вдясно – за  $^{24}\text{Mg}$ . Докато в моделните пресмятания размерът на суперблока расте линейно с увеличаване на  $p$ , то при  $^{24}\text{Mg}$  тази зависимост е експоненциална. При това точност от 0.2% за енергията на основно състояние на  $^{24}\text{Mg}$  се постига при  $p = 50$  и 97% от точния брой на конфигурациите в слоестия модел.

Това означава, че при приложение на стандартната phDMRG процедура към реалистични ядрени системи се губи основното предимство на метода – възможността с малък брой многочастични състояния да се получава добро приближение за енергията на системата.



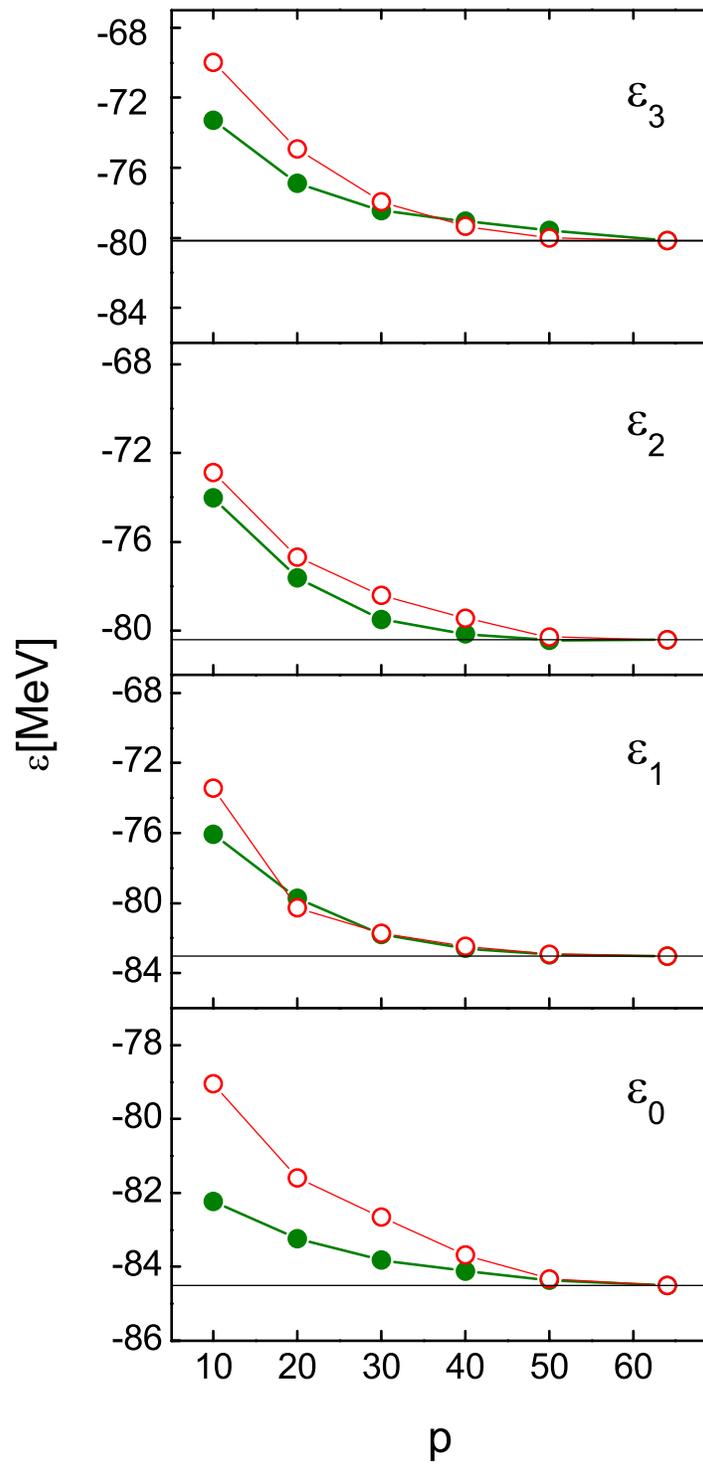
Фигура 3.18: Енергия на основното и първите възбудени състояния в ядрото  $^{24}\text{Mg}$ . Пресмятанията са направени в сферичен базис. С червено са означени резултатите, когато в редуцираните матрици на плътността се отчитат  $L = 1$  състояния, а със зелено - когато  $L = 4$ .



Фигура 3.19: Размер на суперблока (a) и енергия на основното състояние (b) за две системи: вляво на система от 40 еднакви нуклона, намиращи се в  $j = 99/2$  слой, и вдясно на ядрото  $^{24}\text{Mg}$  като функция на броя  $p$  на запазваните състояния при всяка rhDMRG итерация.

Първи опит за подобряване на резултатите е смяната на едночастичния базис. В пресмятанятия дотук бяха използвани сферично симетрични едночастични състояния. На фигура(3.20) е показано сравнението на резултатите за енергия на основното и първите възбудени състояния в ядрото  $^{24}\text{Mg}$  в деформиран *Хартри–Фоков* базис (в зелено) и в сферичен базис. Вижда се, че смяната на базиса води до значително подобрение на резултатите, особено за основно състояние на системата и при малки стойности на броя на запазваните състояния  $p$ . Независимо от това, при стойности на ( $p > 40$ ) едночастичният базис, в който се формулира задачата, не оказва съществено значение и сходимостта остава незадоволителна. И в двата случая не може да се получи висока точност на резултатите, без да се включи голяма част от *Хилбертовото* пространство.

Следващ опит за подобряване на сходимостта на резултатите в рамките на rhDMRG е използване на крайния алгоритъм. За разлика от безкрайния алгоритъм, той дава възможност да се отчита влиянието на състоянието както от блока на системата  $B$ , така и от блока на средата  $M$ , изобразени схематично на фигура



Фигура 3.20: Енергия на основното и първите възбудени състояния в ядрото  $^{24}\text{Mg}$ . С червено са означени резултатите, получени в деформиран Хартри-Фоков базис, а със зелено – в сферично симетричен.

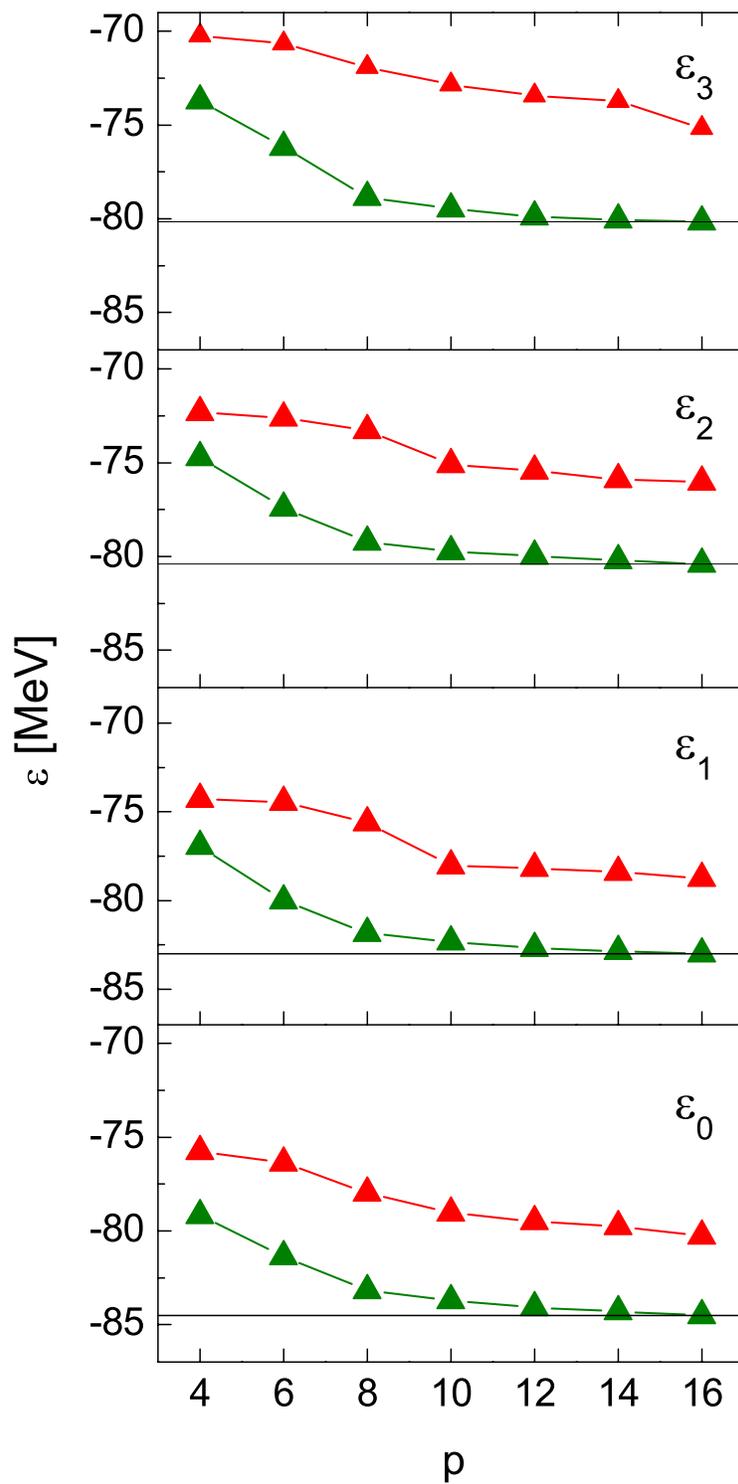
(3.12).

В конкретния случай на  $^{24}\text{Mg}$ , който разглеждаме, крайният алгоритъм може да се прилага само в подпространството на частичните състояния, защото в дупчестия блок има само две нива. Ако при първото ”обхождане” на нивата отляво надясно, което се нарича ”загриване” (warm up), се предават по  $p = 16$  нива от итерация на итерация, и този брой се запазва при следващото обхождане (sweep) на състоянията отляво надясно, всички възможни конфигурации в  $sd$ -пространството ще бъдат отчетени. Това означава, че при  $p = 16$  в рамките на крайния механизъм се получават точните резултати. Енергията на основното и на първите възбудени състояния в  $^{24}\text{Mg}$  са показани на фигура (3.22). Пресмятанията са направени в сферичен базис и при отчитане само на основното състояние при конструиране на редуцираните матрици на плътността. Оказва се, че насищане на стойността на енергията на основно състояние ( $\Delta\varepsilon \leq 10^{-7}$  MeV) се получава след три обхождания на едночастичното пространство.

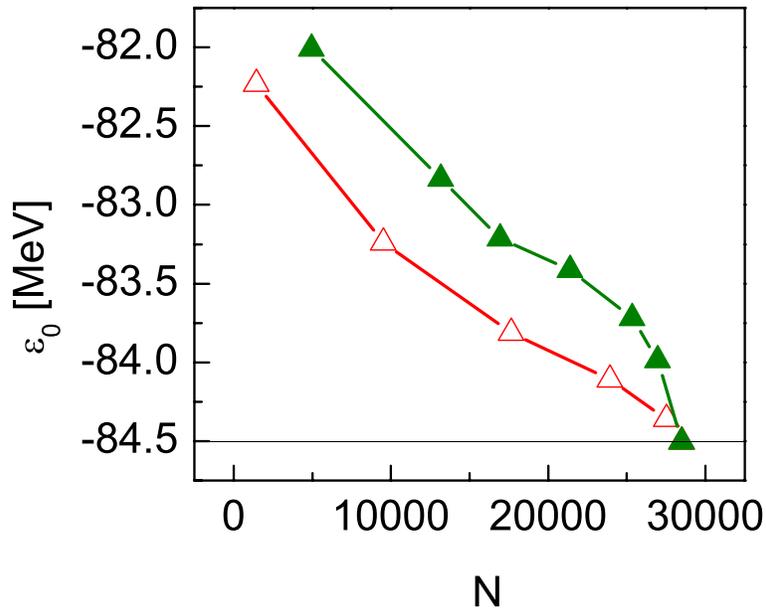
Първият извод, който може да се направи от резултатите, представени на фигурата е, че при един и същ брой на запазваните състояния  $p$ , крайният алгоритъм позволява по-добро описание на системата. Това се дължи на факта, че при него всяко състояние, изграждащо суперблока, е произведение от три нива – едно от блока, едно от средата, и това, което се добавя при дадената итерация, за разлика от безкрайния алгоритъм, където съставните нива са две. В резултат, размерът на суперблока при крайния механизъм е по-голям, оттам и приближението на енергията е по-добро. Това означава, че когато дисковото пространство, на което запазваме матричните елементи на необходимите оператори, е ограничено, трябва да се предпочита крайният механизъм. Спестяването на дисково пространство, разбира се, става за сметка на продължителността на пресмятанията.

Вторият извод, който следва да направим е, че сходимостта на резултатите за енергията с нарастването на  $p$  не се подобрява съществено и при крайния алгоритъм. Очевидно фактът, че още при загриването в rhDMRG процедурата първо се отчитат нивата около *Ферми* нивото, играе много важна роля за правилния подбор на оптималните конфигурации, които осигуряват максимално припокриване на приближената многочастична вълнова функция с точната. Прилагането в последствие на обхожданията на едночастичните нива отляво надясно и обратно, не води до съществено подобряване на подбора от многочастичните конфигурации.

Нещо повече – може да се направи сравнението на зависимостите на енергията на основното състояние от размера на суперблока, при който се получава съответната стойност, за двете процедури. От представеното на фигура (3.22) се вижда, че дадена приближена стойност на енергията се получава при крайния алгоритъм при по-голям размер на суперблока, отколкото при безкрайния алгоритъм.



Фигура 3.21: Енергия на основното и на първите възбудени състояния в ядрото  $^{24}\text{Mg}$ . С червено са означени резултатите от безкрайния алгоритъм, а със зелено – от крайния.



Фигура 3.22: Енергия на основното състояние на ядрото  $^{24}\text{Mg}$  като функция на размера на суперблока. С триъгълници са означени резултатите, получени при безкрайния алгоритъм, а с пълтни триъгълници - при крайния.

Следователно усилията за подобряване на разработваната методика трябва да са насочени към усъвършенстване на безкрайния алгоритъм.

Дотук разглеждахме приложението на phDMRG метода за реалистични пресмятания на характеристиките на ядрото  $^{24}\text{Mg}$ . Изборът на тази ядрена система се диктуваше от факта, че конфигурационното пространство е сравнително малко и точната матрицата на хамилтониана в  $sd$ -пространството може да се диагонализира в метода на *Ланцос*. Недостатъкът на този избор се крие отново в малкия брой едночастични нива, заемани от нуклоните. Това ограничава броя на итерациите при DMRG процедурата и не дава възможност да се проявят стохастичните свойства на метода. Затова прилагаме безкрайния алгоритъм на phDMRG за ядрото  $^{48}\text{Cr}$ .

Ядрото  $^{48}\text{Cr}$  се разглежда като  $^{40}\text{Ca}$  инертна сърцевина и четири валентни неутрона и четири валентни протона в  $pf$ -слоя. Това означава, че дупчестите нива са две, а частичните – осем за всеки вид нуклони. Най-често използваното двучастично взаимодействие в  $pf$ -слоя е така нареченото  $KB3$ -взаимодействие [188, 189]. То е приложено и при настоящите пресмятания. Подредени по едночастичните енергии, зададени от  $KB3$ -взаимодействието, нивата в сферичен базис са както следва:  $(f_{\frac{7}{2}}, p_{\frac{3}{2}}, p_{\frac{1}{2}}, f_{\frac{5}{2}})$ . Следователно, *Ферми* нивото минава между състоянията

$f_{\frac{7}{2} 3/2}$  и  $f_{\frac{7}{2} 5/2}$ :

$$\overleftarrow{f_{\frac{7}{2} 1/2}, f_{\frac{7}{2} 3/2}} \quad | \quad \overrightarrow{f_{\frac{7}{2} 5/2}, f_{\frac{7}{2} 7/2}, p_{\frac{3}{2} 1/2}, p_{\frac{3}{2} 1/2}, p_{\frac{1}{2} 1/2}, f_{\frac{5}{2} 1/2}, f_{\frac{5}{2} 3/2}, f_{\frac{5}{2} 5/2}}$$

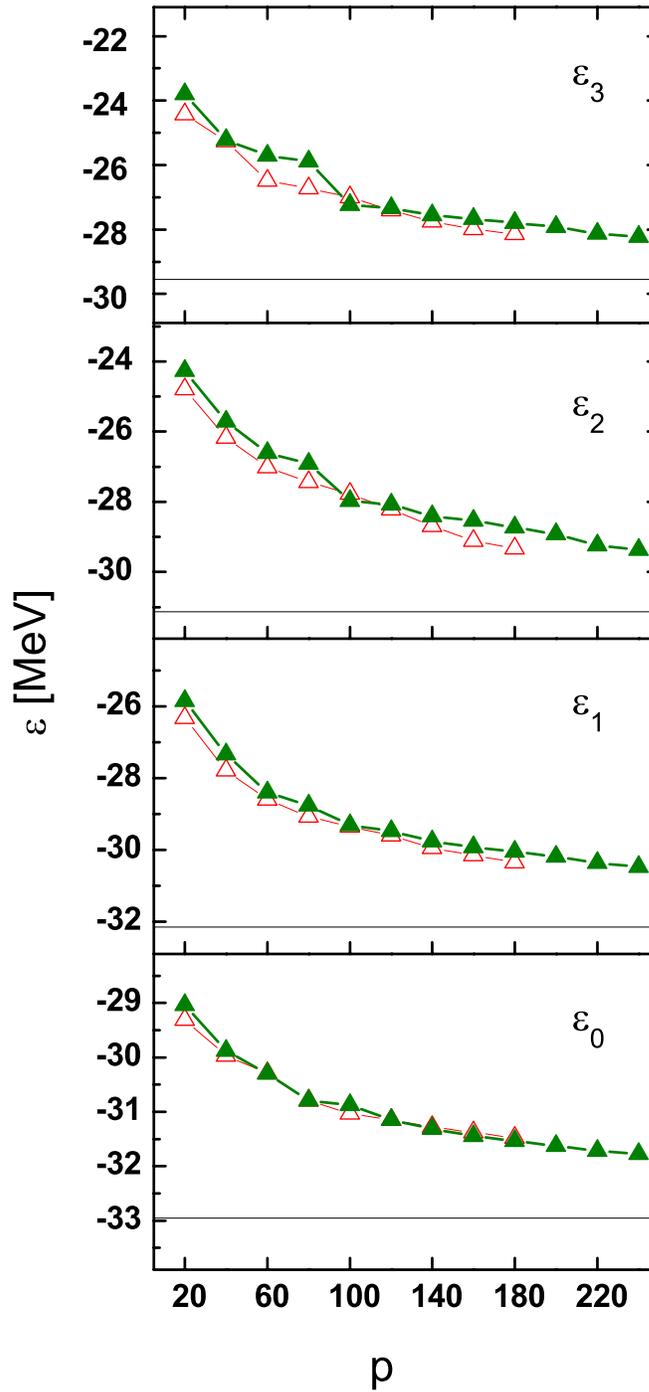
$E_F$

В  $M$ -схемата матрицата на хамилтониана на ядрото  $^{48}\text{Cr}$  в  $pf$ -слоя има размерност 1 963 461. Резултатите от диагонализацията на точната задача са представени в работа [190].

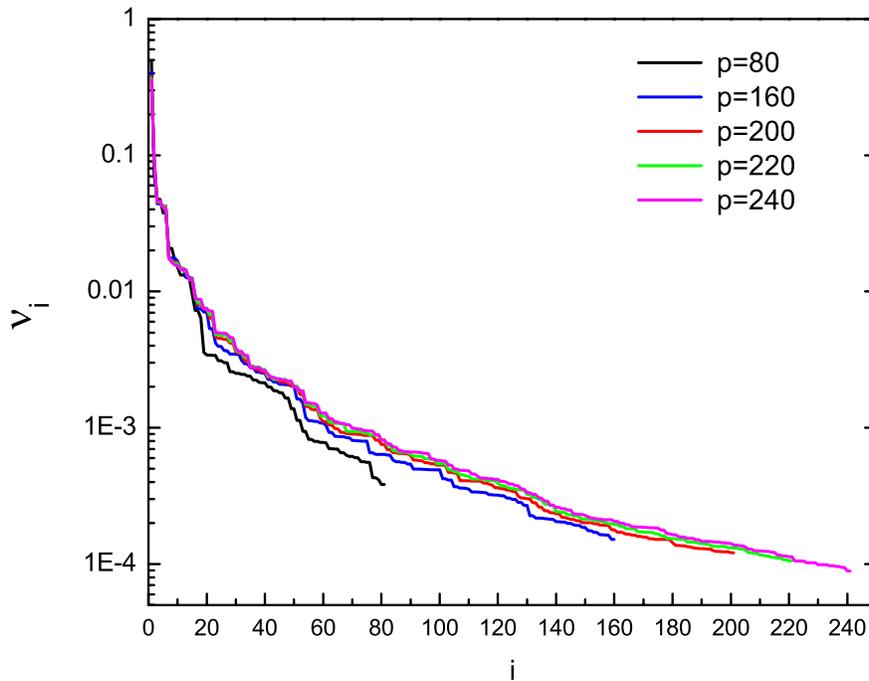
За да се получат точните решения, в рамките на phDMRG процедурата трябва броят на състоянията  $p$ , които се запазват на всяка итерация, да е равен на  $4^7 = 16\,384$ . Очевидно е, че точното решение на задачата изисква съхраняването на огромно количество матрични елементи и не може да стане на персонален компютър. Затова тук ще бъдат представени резултати, получени при  $p \leq 240$ .

На фигура (3.23) за показани енергиите на основното и първите три възбудени нива от спектъра на  $^{48}\text{Cr}$  за два начина на подреждане на едничастичните нива в сферичния базис. Нека отбележим първо, че последователността, по-която се включват състоянията в phDMRG схемата, влияе върху резултатите само при малки стойности на  $p$ . Същественият извод, който следва е, че дори при  $p = 240$ , когато се отчитат почти 25% от цялото конфигурационно пространство, получените стойности на енергиите се отличават от точните с повече от 1 MeV. Дори експоненциалният фит към резултатите за основното състояние клони към  $-31.835$  MeV, докато точната стойност е  $-32.95$  MeV. Това означава, че стандартният критерий за отсяване на нивата в DMRG метода, който се основава на собствените стойности на редуцираните матрици на плътността, не е достатъчен за определяне на нивата, които са необходими за възпроизвеждане на енергетичния спектър. Причина за този резултат може да се търси в структурата на многочастичната вълнова функция на системата в конфигурационното пространство.

Нека разгледаме собствените стойности на частичната редуцирана матрица, получени след диагонализацията ѝ при предпоследната итерация на безкрайния DMRG алгоритъм. На този етап от процедурата от общо  $4p$  състояния се избират тези  $p$ , на които съответстват най-големи собствени стойности. На фигура (3.24) са показани собствените стойности на първите  $p$  състояния с най-големи собствени стойности. Вижда се, че независимо от броя на запазваните състояния, собствена стойност на  $p$ -тото състояние, т.е. на състоянието с най-малка собствена стойност, което се пренася в последната итерация, е в рамките на един порядък около  $5 \cdot 10^{-4}$ . Това означава, че има огромен брой нива с приблизително еднакви собствени стойности и изборът измежду тях не може да бъде направен само въз основа на



Фигура 3.23: Енергия на основното и първите възбудени състояния в ядрото  $^{48}\text{Cr}$ . Пресмятанията са направени в сферичен базис при два начина на подредба на едночастичните нива: със зелено са означени резултатите при  $(f_{\frac{7}{2}}, p_{\frac{3}{2}}, p_{\frac{1}{2}}, f_{\frac{5}{2}})$ , а с червено - при  $(f_{\frac{7}{2}}, p_{\frac{3}{2}}, f_{\frac{5}{2}}, p_{\frac{1}{2}})$ . Черните линии маркират точните резултати.



Фигура 3.24: Собствени стойности на частичната редуцирана матрица на плътността за ядрото  $^{48}\text{Cr}$ , получени при различни стойности на броя  $p$  на запазваните състояния.

този критерий.

Тук трябва да споменем, че настоящите изследвания са първите, но не и единствени опити за приложение на DMRG метода за описание на реалистични нуклонни системи. *Т. Папенброк* и *Д. Дин* прилагат стандартната DMRG процедура за описание на ядрата  $^{28}\text{Si}$  и  $^{56}\text{Ni}$  [192], но и те се сблъскват с проблемите, описани по-горе.

Възможните изходи от ситуацията са два: пресмятания в  $jj$ -схема, или използване на допълнителни критерии за подбор на нивата, които се разработват в квантовата теория на информацията (Quantum information theory) [172, 173].

Резултатите от първия подход, т.е. приложение на крайния DMRG алгоритъм в  $jj$ -схема за ядрото  $^{48}\text{Cr}$ , са много окуражаващи [191]. В този случай размерът на точната матрица на хамилтониана е сравнително малка – 41 355 и диагонализацията ѝ е тривиална задача. В този смисъл изборът на системата е свързан с възможността да се тества процедура за пресмятане на матричните елементи на операторите, необходими за получаване на хамилтониана. За съжаление работата в  $jj$ -схемата е свързана с големи изчислителни трудности, особено за тежки системи.

Приложението на квантовата теория на информацията заедно с DMRG метода

за описание на ядрената структура е все още въпрос на бъдеще.

**В заключение** ще отбележим, че в настоящата част от дисертацията беше представен първият опит за приложение на  $\text{phDMRG}$  метода за описание на ядрената структура. Целта е да се предложи подход за приближено отчитане на конфигурационното смесване в пълното *Хилбертово* пространство, което би позволило да се разшири областта на съвременните пресмятания в рамките на слоестия модел. Разработена е процедура и съответно компютърен код за пресмятане на матричните елементи на операторите, необходими за получаване на хамилтониана на системата за всяка итерация на безкрайния и краен алгоритъм на  $\text{DMRG}$  процедурата. В рамките на две системи от фермиони в един  $j$ -слой и квадрупол-квадруполно взаимодействие плюс взаимодействие на сдвояване са изследвани възможностите за оптимизиране на метода. От получените резултати следва, че  $\text{DMRG}$  методът дава възможност за систематично отчитане на приноса на всички елементи на конфигурационното пространство към многочастичната вълнова функция на системата, като се запазва сравнително малък размерът матриците, които трябва да бъдат диагонализирани. Приложението на метода за реалистични ядрени системи като  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{48}\text{Cr}$  показва, че за достигане на нивото на грешка при описание на енергетичния спектър на ядрата, характерен за стандартните пресмятания в рамките на слоестия модел, е необходимо да се въведат наред с големината на собствените стойности на редуцираните матрици на плътността и допълнителни критерии за подбор на елементите от *Хилбертовото* пространство.

## 3.4 Късодействащи корелации

### 3.4.1 Метод на Ястров

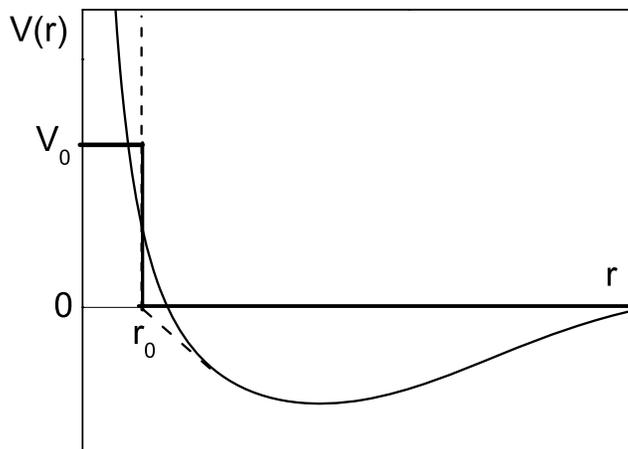
Задачата за описание на основното състояние на квантовомеханична система с голям брой фермиони или бозони с еднаква маса, взаимодействащи посредством централни двучастични сили, е формулирана за пръв път от *Роберт Ястров* [193]. Двучастичното взаимодействие е представено от локален потенциал  $V(r)$ , който е различен от нула на разстояния  $r$ , малки в сравнение с размерите на системата.

Хамилтонианът на системата има стандартен вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^A \nabla_i^2 + \sum_{i<j=1}^A V(r_{ij}) , \quad (3.87)$$

където  $A$  е броят на частиците в системата, а  $m$  е масата им.

Ако двучастичното взаимодействие е отблъскващо на разстояния по-малки от някаква стойност  $r_0$ , наречена радиус на твърдата сърцевина, (плътната линия



Фигура 3.25: Типична зависимост на потенциала на централно взаимодействие на два нуклона от разстоянието между тях.  $r_0$  е радиусът на твърдата сърцевина.

на фигура (3.25)), т.е.:

$$\begin{aligned} V &= |V_0|, & r_{ij} \leq r_0 \\ V &= -|V(r)|, & r_{ij} > r_0 \end{aligned} \quad (3.88)$$

и то се разглежда като пертурбация към модела на независимите частици, тогава многочастичната вълнова функция може да се представи в първо приближение като произведение от едночастични вълнови функции.

$$\Psi \sim \prod_i \phi_i(r_i) . \quad (3.89)$$

Средната стойност на хамилтониана в този случай е приблизително равна на  $(Ar_0^3/\Omega)|V_0|$ . Когато отблъскването на малки разстояния е безкрайно голямо, т.е. когато  $(|V_0| \rightarrow \infty)$ , уравнението на Шрьодингер (3.87) не може да бъде решено, защото матричните му елементи клонят при  $r \leq r_0$  към безкрайност.

Този проблем може да се преодолее, ако върху многочастичната вълнова функция бъде наложено условието:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_A) \equiv 0, \quad \text{за всяко } r_{ij} \leq r_0 . \quad (3.90)$$

Най-простият вид на пробна вълнова функция, изпълняваща това условие, е предложен от *Н.Ф. Мот* за система от бозони, разглеждани като твърди сфери. Тя е произведение от двучастични функции по всички възможни  $A(A-1)/2$  на брой двойки частици от системата:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_A) \sim \prod_{i < j=1}^A f(|r_i - r_j|) \quad (3.91)$$

където  $f(r_{ij})$  е корелационна функция, равна на нула при  $r_{ij} \leq r_0$  и клоняща към константа при  $r_{ij} \rightarrow \infty$ . *Р. Ястров* предлага два начина за определяне на  $f(r)$ : тя може да се зададе феноменологично и той посочва следния конкретен израз:

$$f(r) = \begin{cases} 0, & r \leq r_0 \\ 1 - \frac{\exp[-\beta(r-r_0)]}{r/r_0}, & r > r_0 \end{cases} \quad (3.92)$$

В този случай корелационната функция клони към единица на големи разстояния, а константата  $\beta$  трябва да се определи такава, че да минимизира енергията на системата.

Другият, по-строг, подход се състои в намирането на корелационната функция  $f(r_{ij})$  като собствен вектор на двучастичен хамилтониан:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(r_{ij}) \quad (3.93)$$

при следните гранични условия:

$$f(0) = 0, \quad f(\infty) \rightarrow 1. \quad (3.94)$$

В работа [193] се подчертава, че многочастичната вълнова функция (3.91) съдържа не само двучастични корелации, независимо от това че корелационната функция  $f(r_{ij})$  отчита само двучастичното взаимодействие. Например ефектите от взаимодействието на три частици  $\{i, j, k\}$  присъстват в корелираната вълнова функция чрез произведението  $f(r_{ij})f(r_{jk})f(r_{ki})$ .

Подробно изследване на едночастичната и двучастична матрици на плътността за крайни фермионни системи в метода на *Ястров* е представено в работа [194]. Направено е уточнението, че некорелираната многочастична вълнова функция ще се задава чрез *Слейтърова* детерминанта от едночастични вълнови функции:

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det |\phi_\alpha(r_j)|, \quad \alpha \in F, i = 1 \dots A, \quad (3.95)$$

където с  $F$  е означено множеството от едночастични състояния, принадлежащи на морето на *Ферми*, а корелираната многочастична вълнова функция има вида:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_A) = \prod_{i < j=1}^A f(|r_i - r_j|) \Phi(r_1, r_2, \dots, r_A) \quad (3.96)$$

Специално внимание е отделено на едночастичната матрица на плътността:

$$G(r_1, r'_1) = A \int \Psi^*(r_1, r_2 \dots r_A) \Psi(r'_1, r_2 \dots r_A) dr_2 \dots dr_A \quad (3.97)$$

и на двучастичната матрица на плътността:

$$G(r_1, r_2, r'_1, r'_2) = A(A-1) \int \Psi^*(r_1, r_2, r_3 \dots r_A) \Psi(r'_1, r'_2, r_3 \dots r_A) dr_3 \dots dr_A, \quad (3.98)$$

защото те са необходими за пресмятане на едно- и двучастичните характеристики на системата. Например средната стойност на кинетичната енергия се определя с помощта на едночастичната матрица на плътността:

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int dr_1 \nabla_{r_1} \nabla_{r'_1} G(r_1, r'_1) |_{r_1=r'_1}, \quad (3.99)$$

а на двучастичния потенциал - чрез двучастичната матрица:

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} \int dr_1 dr_2 v(|r_1 - r_2|) G(r_1, r_2, r'_1, r'_2) |_{\substack{r_1=r'_1 \\ r_2=r'_2}} \quad (3.100)$$

В [194] е предложено кластерно разложение на едночастичната и двучастична матрица на плътността по степените на функциите:

$$g(r_{ij}) = |f(r_{ij})|^2 - 1 \quad (3.101)$$

и

$$h(r_{ij}) = f(r_{ij}) - 1 \quad (3.102)$$

Едночастичната матрица на плътността е сума от всички свързани и топологично различни диаграми, които се състоят от:

1. **две външни точки**  $r_1$  и  $r'_1$  и  $p$  **вътрешни точки**, където  $p = 2, 3, \dots$  е порядъкът на диаграмата;
2. **корелационни линии**, свързващи точките. Всяка външна точка трябва да е свързана с поне една друга външна или вътрешна точка на диаграмата; двете външни точки не могат да бъдат свързани с корелационна линия. На корелационна линия, свързваща две вътрешни точки отговаря множител  $g(r_{ij})$ . На корелационна линия, свързваща вътрешна и външна точка, се присписва множител  $h(r_{ij})$ ;
3. **ориентирани линии**, за които важат правилата: всяка вътрешна точка има една влизаща и една излизаща линия; най-много една ориентирана линия

излиза от външната точка  $r_1$  и на-много една ориентирана линия влиза във външната точка  $r'_1$ . На ориентирана линия, излизаща от точка  $r_i$  и влизаща в точка  $r'_i$  отговаря некорелираната едночастична матрица на плътността  $\rho(r_i, r'_i)$ , където

$$\rho(r_i, r'_i) = \int \Phi^*(r_i, r_2, \dots, r_A) \Phi(r'_i, r_2, \dots, r_A) dr_3 \dots dr_A . \quad (3.103)$$

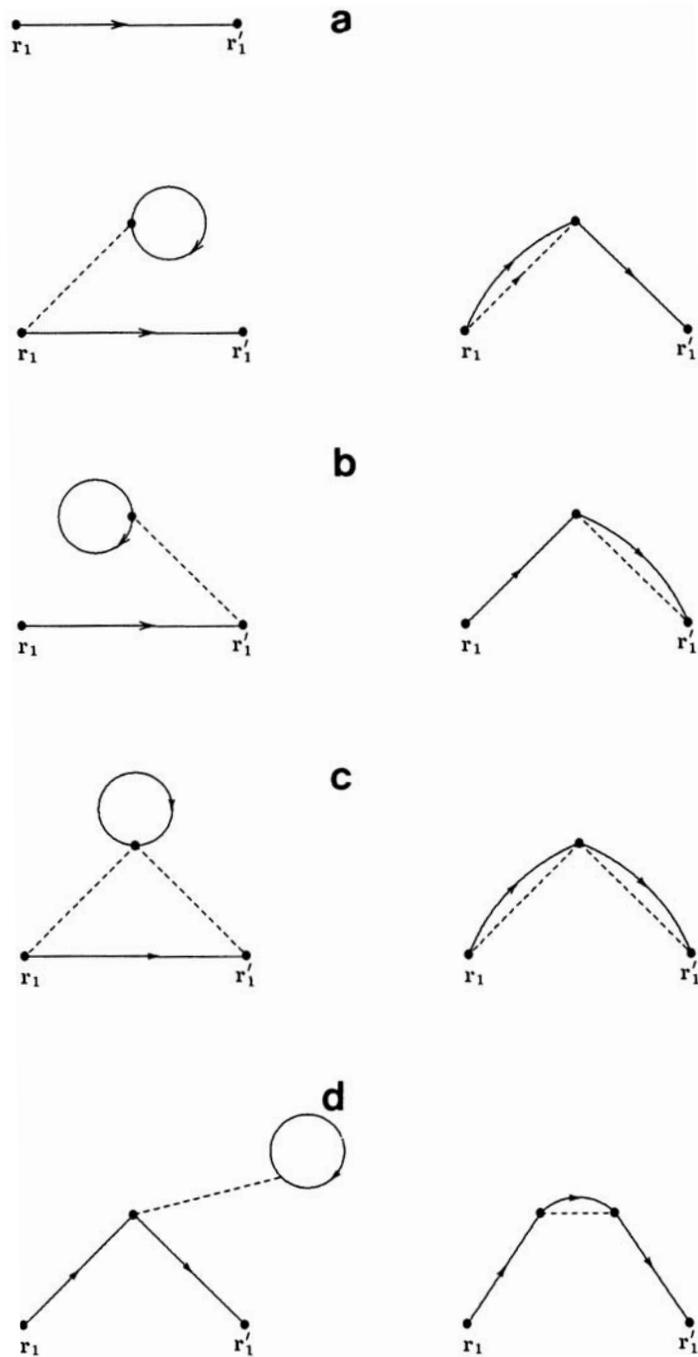
Така получените изрази за всяка диаграма трябва да бъдат интегрирани по координатите на всички вътрешни точки и умножени с фактор  $(-1)^{p+l}$ , където  $p$  е броят на вътрешните точки, а  $l$  е броят на затворените ориентиращи линии. На фигура(3.26) са показани диаграмите от нулев, първи и две диаграми от втори порядък.

По подобен начин изглежда и разложението на двучастичната матрица на плътността, но трябва да се направят следните уточнения:

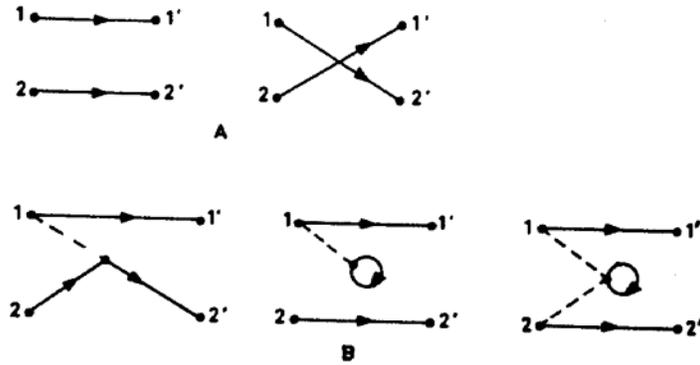
1. в диаграмите има четири външни точки  $\{r_1, r_2; r'_1, r'_2\}$ ;
2. корелационните линии, отбелязани с пунктир на фигура (3.27), не могат да свързват кои да е две външни точки;
3. приносът на всяка диаграма трябва да се умножи с фактор  $\varepsilon(-1)^{(p+l)}$ , където  $\varepsilon$  е равно на  $(+1)$ , когато ориентирана линия свързва например  $r_1$  с  $r'_1$  и  $(-1)$ , когато свързва  $r_1$  с  $r'_2$ ;

Използвайки разложението до първи порядък на диагоналната част на едночастичната матрица на плътността, т.е. на локалната плътност, в работа [194] е пресметнат зарядовият формфактор за ядрото  $^{40}\text{Ca}$ . За първи път е показано, че единствено отчитането на късодействащите корелации дават възможност да се опише зарядовият формфактор както в областта на малките импулси до  $q < 2.5 \text{ fm}^{-1}$ , така и за големи импулси. В същото време е демонстрирано, че корелираната локална плътност може да се възпроизведе с много добра точност, дори ако многочастичната вълнова фикция се представи като *Слейтърова* детерминанта, но при две условия: 1) *Слейтъровата* детерминанта е изградена от естествените орбитали, които диагонализират едночастичната матрица на плътността в метода на *Ястров*; 2) размерността на *Слейтъровата* детерминанта е значително по-голяма от броя на състояния под нивото на *Ферми*.

Конкретни изрази за разложения на зарядовия формфактор и на импулсното разпределение в метода на *Ястров* са предложени в статиите [195, 196], но съществена стъпка напред в изследванията на ролята на късодействащите корелации в



Фигура 3.26: Диаграми от нулев (а), първи (b,c) и две (d) от втори порядък, участващи в разложението на едночастичната матрица на пълтността. Корелационните линии са отбелязани с пунктирана, а ориентираните - с непрекъсната линия [194].



Фигура 3.27: Диаграми от нулев (А) и от първи порядък (В), участващи в кластерното разложение на двучастичната матрица на плътността [194].

ядрата представляват работи [57, 197]. Те се основават на разбирането, че вместо вниманието да се съсредоточава изключително върху енергията на системата, както се прави във вариационните подходи, трябва да се намери феноменологичен модел, който да позволява директно пресмятане на едно- и двучастичните матрици на плътността и оттам на различни физически характеристики на ядрото. Предлаганият подход се основава на метода на *Ястров* и използва кластерното разложение, предложено в [194]. Вместо чрез диаграмна техника едно- и двучастичните матрици на плътността са получени директно чрез разложение по корелационната функция  $g(r_{ij})$ . Използвайки означенията в [197] едночастичната матрица на плътността се записва във вида:

$$\rho_J^{(1)}(x_1; x'_1) = \frac{A}{C_A} \int \left( 1 + \sum_{2 \leq i}^A g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_i; \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_i) + \sum_{2 \leq i < j}^A g(\mathbf{r}_{ij}; \mathbf{r}_{ij}) + O(g^2) \right) * \Phi_{SD}^*(x_1, x_2, \dots, x_A) \Phi_{SD}^*(x'_1, x_2, \dots, x_A) dx_2 \dots dx_A \quad (3.104)$$

където  $(x \equiv \mathbf{r}_i, \sigma_i, \tau_i)$  и интегрирането по  $x_i$  означава интегриране по вектора  $\mathbf{r}_i$  и сумиране по спина  $\sigma_i$  и изоспина  $\tau_i$  на всички  $A$  на брой нуклона в системата.  $\Phi_{SD}$  е некорелираната многочастична вълнова функция на системата, представена от *Слейтърова* детерминанта. Така нареченото ”приближение от нисък порядък”(ПНП) (Low Order Approximation) за едночастичната матрица на плътността се получава, като се запазват само членовете, линейни по  $g(r_{ij})$  (3.101):

$$\begin{aligned}
\rho_{LOA}^{(1)}(x_1; x'_1) &= \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x'_1) + & (3.105) \\
&\int [f^*(\mathbf{r}_{12})f(\mathbf{r}_{1'2}) - 1] \\
&* \left[ \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x'_1)\rho_{SD}^{(1)}(x_2; x_2) - \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x_2)\rho_{SD}^{(1)}(x_2; x'_1) \right] dx_2 + \\
&\int \int [f^*(\mathbf{r}_{23})f(\mathbf{r}_{23}) - 1] \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x_2) \\
&* \left[ \rho_{SD}^{(1)}(x_2; x'_1)\rho_{SD}^{(1)}(x_3; x_3) - \rho_{SD}^{(1)}(x_2; x_3)\rho_{SD}^{(1)}(x_3; x'_1) \right] dx_2 dx_3
\end{aligned}$$

Аналогично се получава и изразът за двучастичната матрица на плътността в ПНП:

$$\begin{aligned}
\rho_{LOA}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) &= \rho_{SD}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) + & (3.106) \\
&[f^*(\mathbf{r}_{12})f(\mathbf{r}_{1'2'}) - 1] \rho_{SD}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) + \\
&\int \{ [f^*(\mathbf{r}_{13})f(\mathbf{r}_{1'3}) - 1] + [f^*(\mathbf{r}_{23})f(\mathbf{r}_{2'3}) - 1] \} \\
&* \left[ \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x'_1)\rho_{SD}^{(2)}(x_2, x_3; x'_2, x_3) + \right. \\
&\quad \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x'_2)\rho_{SD}^{(2)}(x_2, x_3; x_3, x'_1) + \\
&\quad \left. \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x_3)\rho_{SD}^{(2)}(x_2, x_3; x'_1, x'_2) \right] dx_3 + \\
&\int \int g(\mathbf{r}_{34})g(\mathbf{r}_{34}) \left[ \rho_{SD}^{(2)}(x_2, x_4; x_4, x_3)\rho_{SD}^{(2)}(x_1, x_3; x'_1, x'_2) + \right. \\
&\quad \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x_3) \left( \rho_{SD}^{(1)}(x_2; x'_1)\rho_{SD}^{(2)}(x_3, x_4; x'_2, x_4) + \right. \\
&\quad \rho_{SD}^{(1)}(x_2; x'_2)\rho_{SD}^{(2)}(x_3, x_4; x_4, x'_1) + \\
&\quad \left. \left. \rho_{SD}^{(1)}(x_2; x_4)\rho_{SD}^{(2)}(x_3, x_4; x'_1, x'_2) \right) \right] dx_3 dx_4
\end{aligned}$$

В изразите (3.105) и (3.106) участват некорелираните едночастична и двучастична матрици на плътността. В модела на независимите частици те се задават съответно чрез равенствата:

$$\rho_{SD}^{(1)}(x; x') = \sum_{\alpha \in F} \varphi_{\alpha}^*(x)\varphi_{\alpha}(x') \quad (3.107)$$

и

$$\rho_{SD}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x'_1)\rho_{SD}^{(1)}(x_2; x'_2) - \rho_{SD}^{(1)}(x_1; x'_2)\rho_{SD}^{(1)}(x_2; x'_1), \quad (3.108)$$

където  $\{\varphi_{\alpha}(x)\}$  са едночастичните вълнови функции, от които е изградена Слейтървата детерминанта.

Най-същественото преимущество на ПНП е фактът, че то запазва нормиранката на едночастичната и двучастична матрица на плътността, независимо от вида на корелационната функция  $f(r)$ . Директно се проверява, че когато  $\rho_{SD}^{(1)}(x; x')$  и  $\rho_{SD}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2)$  са зададени с изразите (3.105) и (3.106), то:

$$\int \rho_{LOA}^{(1)}(x; x')|_{x=x'} dx = A , \quad (3.109)$$

$$\int \rho_{LOA}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2)|_{x_2=x'_2} dx_2 = (A - 1) \rho_{LOA}^{(1)}(x_1; x'_1) \quad (3.110)$$

и следователно:

$$\int \int \rho_{LOA}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) \Big|_{\substack{x_1=x'_1 \\ x_2=x'_2}} dx_1 dx_2 = A(A - 1) \quad (3.111)$$

Свойството на ПНП да запазва нормиранката на едночастичната и двучастична матрици на плътността го прави много подходящо за изучаване на безкрайната ядрена материя, защото в този случай *Ястровските* корелации не променят броя на частиците в системата, т.е. плътността на ядрената материя се запазва. Подробно изследване на импулсното разпределение на нуклоните в ПНП за симетричната ядрена материя е направено в [198]. Основният извод, който следва от тази работа е, че отчитането на късодействащите корелации води до наличието на високоимпулсни компоненти, зависещи от радиуса  $r_0$  на твърдата сърцевина (виж фигура (3.25)).

В статиите [57, 197] ПНП е приложено за изследване на късодействащите корелации върху едночастичните характеристики на ядрото <sup>4</sup>Не като се използва корелационна функция от вида:

$$f(\mathbf{r}_{ij}) = 1 - c \exp[-\beta^2 \mathbf{r}_{ij}^2] , \quad (3.112)$$

което означава, че нуклон-нуклонното взаимодействие клони към безкрайност, когато разстоянието между частиците е равно на нула. *Слейтървата* детерминанта, представляваща некорелираната многочастична вълнова функция, е построена от собствените функции на хармоничен осцилатор. В този случай локалната плътност:

$$\rho(x) = \rho^{(1)}(x, x) , \quad (3.113)$$

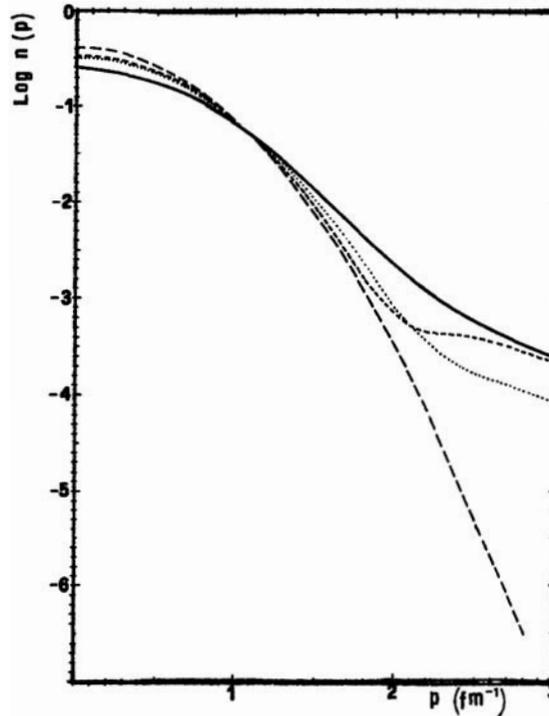
еластичният формфактор:

$$F(\mathbf{p}) = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma, \tau} \int \frac{1}{2} (1 + \tau_3) \exp[i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}] \rho^{(1)}(\mathbf{r}, \sigma, \tau; \mathbf{r}, \sigma, \tau) d\mathbf{r} \quad (3.114)$$

и импулсното разпределение на нуклоните:

$$n(\mathbf{p}) = \frac{1}{8\pi^3 A} \sum_{\substack{\sigma, \tau \\ \sigma', \tau'}} \int \int \exp[i \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \rho^{(1)}(\mathbf{r}, \sigma, \tau; \mathbf{r}', \sigma', \tau') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (3.115)$$

могат да се получат аналитично. Параметри на модела са осцилаторният параметър  $\alpha$  и корелационните параметри  $\beta$  и  $c$  (3.112). Сравнението на точните резултати в метода на *Ястров* с ПНП показва, че ПНП е добро приближение, което позволява качествен анализ на влиянието на късодействащите корелации върху едночастичните характеристики.



Фигура 3.28: Импулсно разпределение на нуклоните в ядрото  ${}^4\text{He}$  [197]. (—) точни пресмятания в метода на *Ястров*, (- - -) ПНП, ( $\cdots$ ) приближение (3.116), (- · -) хармоничен осцилатор

На фигура (3.28) е представено сравнение на импулсното разпределение на нуклоните в ядрото  ${}^4\text{He}$ , пресметнато в различни приближения (стойности на корелационните параметри са  $\alpha = 0.82 \text{ fm}^{-1}$ ,  $\beta = 1.21 \text{ fm}^{-1}$  и  $c = 1$ ). В некорелирания случай, когато едночастичната матрица на плътността (3.107) е построена само от собствените вектори на хармоничен осцилатор, импулсното разпределение клони

към нула при импулси  $p > 2.5 \text{ fm}^{-1}$ . Включването на късодействащи корелации води до появата на високоимпулсни компоненти, като ПНП възпроизвежда по-добре точните резултати в сравнение с приближението, при което корелираната едночастична матрица на плътността се представя чрез формулата:

$$\rho^{(1)}(x_1; x'_1) = \frac{1}{(A-1)} \int [f^*(\mathbf{r}_{12})f(\mathbf{r}_{1'2})] \rho_{SD}^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) \quad (3.116)$$

Трябва да се отбележи, че най-същественният недостатък на приближението (3.116) е фактът, че то не запазва нормировката на матрицата на плътността.

### 3.4.2 Вариационни пресмятания

Методът на корелираните базисни функции е предложен от *Дж. Кларк* и *П. Уестхаус* [199]. Целта на метода е описание на свойствата на системи от фермиони, между които на малки разстояния действат сили на отблъскване. Такива системи са например атомното ядро и течният хелий  $^3\text{He}$ .

Първото предположение, което правят *Кларк* и *Уестхаус* в модела на корелираните базисни функции, е наличието на твърда сърцевина на потенциала. Това означава, че при подходящо избрано малко разстояние между двата фермиона, потенциалът на взаимодействие между тях става положителен и клони към безкрайност, както е показано на фигура (3.25).

Второто предположение, на което почива моделът на корелираните базисни функции, се отнася до вида на пробната многочастична функция. Възприема се така наречената *Bijl–Dingle–Jastrow* форма [193, 200, 201], съгласно която:

$$\Psi = F \Phi , \quad (3.117)$$

където  $\Phi$  е моделна функция, а  $F$  е реален, положително определен, симетричен по отношение на пермутация на координатите на частиците, корелационен фактор.  $\Phi$  отчита свойствата на статистиката и симетриите на разглежданата система. В практически план тя може да е решение на многочастичното уравнение на *Шрьодингер* за потенциал, който няма особености. Многочастичният оператор  $F$  се представя като произведение от двучастични корелационни фактори  $f(r_{ij})$ :

$$F = \prod_{i < j} f(r_{ij}) , \quad (3.118)$$

където

$$f(r_{ij}) \begin{cases} = 0, & r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \leq r_0 \\ \rightarrow 1, & r_{ij} \gg r_0 \end{cases} \quad i, j = 1, 2, \dots, A \quad (3.119)$$

Така дефиниран, корелационният фактор е равен на нула винаги, когато *поне две частици* се намират на разстояние по-малко от  $r_0$  и клони към единица, когато *всички елементи* на системата са безкрайно отдалечени един от друг.

С така определената пробна вълнова функция се пресмята средната стойност на хамилтониана на системата:

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (3.120)$$

Съгласно вариационния принцип на *Риц* решението на уравнението на *Шрьодингер* минимизира средната стойност на енергията на системата (3.120) по отношение на пробната вълнова функция, т.е. вариационното уравнение:

$$\delta_{\Psi} E[\Psi] = 0 \quad (3.121)$$

е еквивалентно на уравнението на *Шрьодингер* (1.4).

Решаването на многочастичната задача се свежда до минимизиране на функционала на енергията (3.120). Проблемът би могъл да се реши точно, без приближения за функционала на енергията, ако интегралите в координатното пространство на системата се пресмятат в метода на *Монте Карло*. Поради сложността и обема на пресмятанята това засега е направено само за системи с брой на частиците  $A \leq 12$  [203–206].

За изследване на по-тежки системи се налага приближено третиране на многочастичната задача. Това означава, че трябва *първо* – да се ограничи класът на разглежданите пробни функции и *второ* – да се намерят приближени изрази за матричните елементи на хамилтониана  $H_{mn}$ :

$$H_{mn} = \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle \quad (3.122)$$

и на единичния оператор

$$I_{mn} = \langle \psi_m | \psi_n \rangle \quad (3.123)$$

в подходящо избран базис от корелирани многочастични вълнови функции  $\{\psi_m\}$ :

$$\psi_m = \frac{F |\phi_m\rangle}{\langle \phi_m | F^2 | \phi_m \rangle^{1/2}} \quad (3.124)$$

В [199] е предложено кластерно разложение за величините  $H_{mn}$  (3.122) и  $I_{mn}$  (3.123) при *Bijl–Dingle–Jastrow* вид на многочастичната вълнова функция (3.118,3.119). Членовете на разложението са класифицирани по степените на величината  $\rho\omega$ , където  $\rho$  е средната локална плътност на частиците в системата, а  $\omega$  е корелационен параметър, дефиниран по следния начин:

$$\omega = \int_{V_\infty} [f^2(\mathbf{r}) - 1] d\mathbf{r} \quad (3.125)$$

Когато стойността на  $\omega$  е малка, той може да се разглежда като параметър на разложение.

Специално внимание е отделено на изследване на свойствата на всеки ред от разложението. Показано е, че за всяка степен на  $\omega$  матричните елементи на разглежданите оператори запазват свойства като ермитовост, симетричност и нормировка, присъщи на оригиналните оператори.

Конкретни пресмятания за реалистични физически системи в модела на *Кларк* и *Уестхаус* не са правени. Първите опити за приближено решаване на многочастичната вариационна задача за ядра в метода на корелираните базисни функции, са публикувани почти двадесет години по-късно. В работи [202, 207, 208] е предложен така нареченият Вариационен *Монте Карло* метод и са представени резултати за свойствата на основното състояние на ядрото  $^{16}\text{O}$ . Вариационният проблем е решен, като е използвано кластерно разложение за средните стойности на енергията и на единичния оператор и *Монте Карло* техника за интегриране на матричните им елементи в координатното пространство. Нуклон–нуклонното взаимодействие е моделирано чрез потенциала *Аргон*  $v_{14}$  [209]. Той представлява сума от следните двучастични оператори:

$$v_{ij} = \sum_{p=1,14} v_p(\mathbf{r}_{ij}) \hat{O}_{ij}^p, \quad (3.126)$$

където:

$$\begin{aligned} \hat{O}_{ij}^{p=1,\dots,14} = & 1, (\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j), (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j)(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), S_{ij}, S_{ij}(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), \\ & \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), (\mathbf{L})^2, (\mathbf{L})^2(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), (\mathbf{L})^2(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j), \\ & (\mathbf{L})^2(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j)(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j), (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})^2, (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S})^2(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j) \end{aligned} \quad (3.127)$$

Първите четири оператора ( $p = 1 \div 4$ ) представляват централно взаимодействие, следващите два ( $p = 5, 6$ ) - изоскаларно и изовекторно взаимодействие, а ( $p = 7, 8$ ) моделират спин-орбиталното взаимодействие. В работа [208] е показано, че последните шест оператора ( $p = 9 \div 14$ ) влияят слабо върху характеристиките на основното състояние на ядрото

Дългодействащата част на *Аргон*  $v_{14}$  потенциала се представя от член, отчитащ еднопионния обмен:

$$v_{ij}^{\pi} = \frac{f_{\pi AA}^2 m_{\pi}}{4\pi} \frac{1}{3} X_{ij}(\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j) \quad (3.128)$$

$$X_{ij} = Y_{\pi}(r_{ij})(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j) + T_{\pi}(r_{ij}) S_{ij} ,$$

където  $X_{ij}(r)$  и  $Y_{\pi}(r)$  са съответно потенциалът на *Юкава* и тензорният потенциал на *Юкава*.

В пресмятанията са включени и тричастични оператори [210], отчитащи дългодействащ двупионен обмен и късодействащо отблъскване.

Пробната вълнова функция представлява произведение на дву- и тричастични корелационни оператори, действащи върху *Ястровска* многочастична функция:

$$|\Psi_V\rangle = \left[ \prod_{IT} (1 + U_{ijk}) \right] \left[ \widehat{S} \prod_{i<j} (1 + U_{ij}) \right] |\Psi_J\rangle , \quad (3.129)$$

$$|\Psi_J\rangle = \left[ \prod_{i<j} f_c(r_{ij}) \right] |\Phi\rangle . \quad (3.130)$$

Операторите  $U_{ij}$  зависят от спина и изоспина на частиците,  $\widehat{S}$  е симетризиращ оператор,  $f_c(r_{ij})$  е скаларен корелационен фактор, а  $|\Phi\rangle$  е *Слейтърова* детерминанта. В работа [211] е показано, че основните характеристики на нуклон-нуклонните фазови отмествания могат да бъдат описани като се вземат под внимание само първите осем оператора в (3.127). Затова двучастичните корелационни оператори  $U_{ij}$  се записват във вида:

$$U_{ij} = \sum_{p=2}^8 \beta_p u_p(r_{ij}) \widehat{O}_{ij}^p \quad (3.131)$$

При дефинирането на тричастичните корелационни оператори се използва така нареченото произведение на независимите триплети (означението  $IT$  в ур.(3.127)):

$$\prod_{IT} (1 + U_{ijk}) = 1 + \sum_{i<j<k} U_{ijk} + \sum_{\substack{i<j<k \\ i'<j'<k'}} U_{ijk} U_{i'j'k'} + \dots \quad (3.132)$$

Тричастичните функции  $U_{ijk}$  не зависят от спина и изоспина на частиците, а радиалната им зависимост е същата, както на тричастичното взаимодействие.

Кластерното разложение на средната стойност на хамилтониана (3.120) се представя във вида:

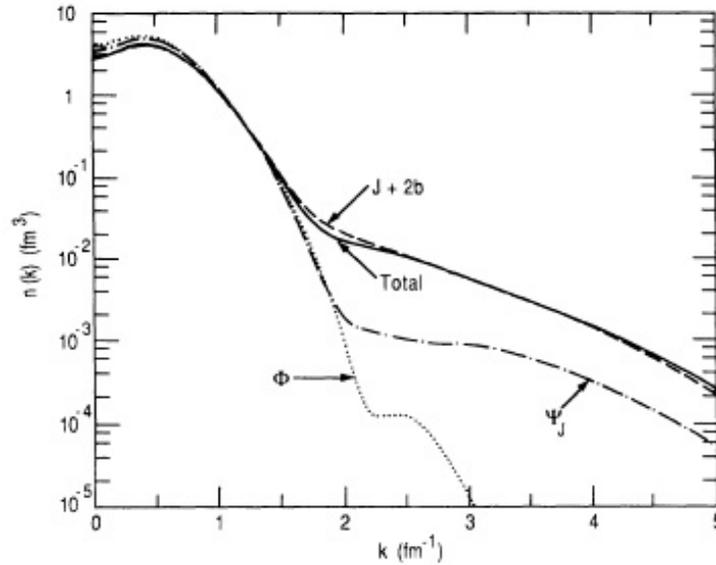
$$\frac{\langle \Psi | \sum_i \hat{O}_i | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sum_i c_i + \sum_{i < j} c_{ij} + \sum_{i \neq j < k} c_{i,jk} + \sum_{i < j, k} c_{ijk} + \dots \quad (3.133)$$

То е изведено от уравнението:

$$\left[ \sum_i c_i + \sum_{i < j} c_{ij} + \dots \right] \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_i \hat{O}_i | \Psi \rangle \quad (3.134)$$

и всеки негов едночастичен  $c_i$ , двучастичен  $c_{ij}$  и т.н. принос е сходящ. В [208] се използва кластерно разложение на хамилтониана на системата до четвърта степен.

Вариационната задача се свежда до решаване на уравнения на *Ойлер-Лагранж* за определяне на параметрите на многочастичната вълнова функция.



Фигура 3.29: Принос на отделните членове на кластерното разложение на импулсното разпределение на ядрото  $^{16}\text{O}$  [208].  $\Phi$  показва импулсното разпределение, получено от некорелираната многочастична вълнова функция,  $\Phi_J$  илюстрира приноса на централните (*Ястровски*) корелации,  $(J + 2b)$  отчита и двучастичните, а плътната линия и на тричастичните членове в разложението.

Представени са данни за енергията на свързване на основното състояние, локалната плътност, импулсното разпределение, зарядовия формфактор и други характеристики на  $^{16}\text{O}$ . Анализът на резултатите показва, че при локалната плътност и импулсното разпределение най-съществен е приносът на централните корелации и двучастичните кластерни диаграми, особено на тензорните поправки.

Фиг.(3.29) илюстрира приноса на различните части от кластерното разложение на импулсното разпределение.

Поради бързото нарастване на обема на необходимите компютърни ресурси, вариационни пресмятания в метода на корелираните базисни функции не са правени за по-тежки ядра. Въпреки това ние ще се връщаме към резултатите от тези изследвания и ще ги използваме за сравнение с нашите пресмятания.

### 3.4.3 Кластерни разложения

Друг подход за описание на свойствата включително и на среднотежки ядра е методът на *Ферми* за хиперсвързаната верига (*Fermi Hypernetted Chain (FHAC)*). Той също използва свойствата на корелираните базисни функции, но дава възможност да се преодолеят техническите и изчислителни проблеми на Вариационния *Монте Карло* метод. Приложен е първоначално за безкрайни фермионни системи като течен хелий и ядрена материя [214, 215], а по-късно в [217–219] за двойно магическите ядра  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ . Както във Вариационния *Монте Карло* метод многочастичната вълнова функция на системата се записва във вида (3.117), но корелационният фактор  $F$  съдържа само част от двучастични оператори – първите осем от (3.127):

$$F(1, 2, \dots, A) = \prod_{i < j} f(r_{ij}) \widehat{S} \prod_{i < j} f_{SD}(i, j) \quad (3.135)$$

В горното уравнение  $f(r_{ij})$  е *Ястровски* корелационен фактор, функция на разстоянието  $r_{ij}$  между двете частици,  $f_{SD}(i, j)$  е двучастичен корелационен фактор, зависещ както от разстоянието  $r_{ij}$ , така и от спина и изоспина им, а  $\widehat{S}$  е симетризиращ оператор, действащ върху произведението:

$$f(r_{ij})f_{SD}(i, j) = 1 + \sum_{p=1}^8 f^p(r_{ij})\widehat{O}^p(i, j), \quad (3.136)$$

където  $f^{(p=1)}(r) = f(r) - 1$ . Корелационните функции  $f^p$  зависят от множество параметри, които се опрелят така, че да минимизират средната стойност на хамилтониана (3.120).

В *FHAC* метода средната стойност на хамилтониана на системата  $E$  (3.120) се представя като разложение по степените на функцията  $h(i, j)$  :

$$h(i, j) = f^2(r_{ij}) - 1 \quad (3.137)$$

Всеки член от разложението се характеризира с броя на частиците, чийто принос към средната стойност на оператора се отчита, и с броя на корелационните

функции  $h(i, j)$ , свързващи всяка една двойка от частици. Той може да съдържа и статистически корелации, възникващи поради принципа на *Паули*. Въпреки че разложенията на числителя и знаменателя в израза (3.120) представляват поотделно крайни редове, то  $E$  като цяло е безкраен ред от кластерни диаграми.

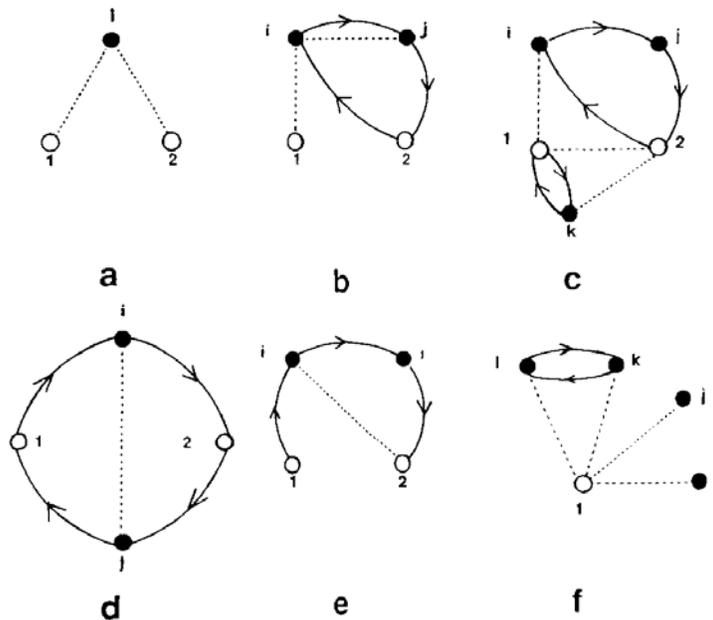
Двете основни величини в *FNAC* метода, чиито разложения се използват за пресмятане на средната стойност на енергията са локалната плътност  $\rho_1(r_1)$  и едночастичната матрица на плътността  $\rho_2^{(n \leq 4)}(r_1, r_2)$ , които в [217] се наричат съответно едночастична и двучастична функции на разпределение. Те са дефинирани по следния начин:

$$\rho_1(r_1) = \langle \Psi_0^* | \sum_i \delta(r_1 - r_i) | \Psi_0 \rangle \quad (3.138)$$

и

$$\rho_2^{(n \leq 4)}(r_1, r_2) = \langle \Psi_0^* | \sum_{i \neq j} \delta(r_1 - r_i) \delta(r_2 - r_j) O^{(n)}(i, j) | \Psi_0 \rangle \quad (3.139)$$

Отделните членове в разложението на функциите на разпределение могат да се представят като топологични диаграми. На фигура(3.30) са показани няколко примера на диаграми, участващи в израза за двучастичната функция на разпределение (3.139).



Фигура 3.30: Няколко примера за кластерни диаграми [217]. На пунктирната линия съответства корелационната функция  $h(i, j)$  (3.137), на ориентираната линия – некорелираната едночастична матрица на плътността, а черната точка означава интегриране по съответните координати  $(r_i, \sigma_i, \chi_i)$

Те са класифицирани по следния начин:

- **възлови**, в които съществува поне една вътрешна точка  $i$ , през която минават линиите, свързващи външните точки 1 и 2 (например диаграми 1a, 1b, 1e);
- **комплексни**, които могат да се представят като отделни възлови диаграми (например диаграми 1c, 1f);
- **елементарни** - всички останали диаграми;

Пресмятане на всички видове диаграми и сумирането им до произволен ред изисква решаване на система от интегрални уравнения. Елементарните диаграми трябва да се отчитат една по една по правилата на теорията на пертурбациите и в първо приближение те се пренебрегват. Обстойна дискусия за приноса на отделните видове диаграми в *FNHC* метода може да бъде намерена в статиите [212, 213].

В работи [214, 215] е предложена процедура, обозначавана с *FNHC/0*, при която се отчитат всички *възлови* и *комплексни* диаграми. Тя е използвана за изследване на уравнението на състоянието на ядрената материя в [216]. Показано е, че ролята на елементарните диаграми може да бъде пренебрегната поради относително малката плътност на системата. В крайните ядра значението на елементарните диаграми за пресмятане на средната стойност на потенциали, отчитащи обменните нуклон-нуклонни взаимодействия, е по-съществено [217]. Най-общо казано, мярка за приноса на диаграмите, които не са отчетени при разложението, е отклонението на нормировката на приближената локалната плътност от броя на частиците в системата.

В [217, 218, 220] *FNHC* методът е приложен за двойно магическите ядра, като в разложенията на Функциите на разпределения се отчитат както *възловите*, така и някои *елементарни* диаграми. Това приближение е наречено *FNHC/1*. Едночастичната функция на разпределение, например, има вида:

$$\rho_1(r_1) = [\rho_0(r_1) + U_e(r_1)]e^{U_d(r_1)} \quad (3.140)$$

където величините  $U_d(r_1)$  и  $U_e(r_1)$  са суми от *възлови* и *елементарни* диаграми, които имат една външна точка  $r_1$ . Точните правила за пресмятането на едночастичната и двучастична функции на разпределение и на хамилтониана на системата в *FNHC/1* приближението са дадени в работа [217]. Конкретни пресмятания са направени при следните предположения: некорелираната многочастична вълнова функция е представена от *Слейтърова* детерминанта от едночастични функции, получени при решаването на уравнението на *Шрьодингер* с два локални потенциала – на хармоничен осцилатор и на *Уудс-Саксън*; корелационната функция  $f(r_{ij})$  е

представена също по два начина - или се задава в *Гаусова* форма или се търси като решение на уравнение на *Ойлер–Лагранж*, минимизиращо първото приближение на разложението на енергията на ядрената материя, като импулсът на *Ферми* се разглежда като вариационен параметър; използвани са някои математически прости нуклон–нуклонни взаимодействия. Пресметнати са енергиите на основно състояние на ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  и е показано, че резултатът за  ${}^{16}\text{O}$  е в много добро съгласие с полученото във Вариационния *Монте Карло* метод [207]. Изследвана е и ролята на късодействащите корелации върху локалната плътност на ядрата и е показано, че на малки разстояния от центъра на ядрото некорелираното разпределение надвишава корелирана плътност с около 15%. В същото време нормировката на локалната плътност се удовлетворява в рамките на 0.1%.

При прилагане на *FNHC* метода към реалистични нуклон–нуклонни взаимодействия, съдържащи различни спинови, изоспинови и тензорни компоненти, възникват множество технически проблеми: корелираната многочастична вълнова функция (3.135,3.136) не комутира с хамилтониана на системата, не може да се сумира приносът на различните типове кластерни диаграми, възникват и редица изчислителни проблеми. Затова се налага допълнително приближение – освен *взловите* диаграми, от *елементарните* диаграми се разглеждат тези, които съдържат само по един оператор  $O^{(p=1,8)}$  (3.127). Това е така нареченият метод на разложение по един оператор (*Single Operator Chain*), предложен още през 1979г. в работа [221]. В [222] се предлага процедура за пресмятане на едночастичната (3.138) и двучастична (3.139) функции на разпределение в *FNHC-SOC* метода. В това по-силно приближение нормировката на локалната плътност се удовлетворява с грешка от около 5%.

Таблица 3.2: Енергия на връзка на нуклоните в MeV за ядрата  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  за два типа пресмятания в *FNHC-SOC* метода и във Вариационния *Монте Карло* метод (VMC) [207], сравнени с експерименталната стойност.

|                    | <i>FNHC-SOC-corr</i> | <i>FNHC-SOC-full</i> | VMC  | exp   |
|--------------------|----------------------|----------------------|------|-------|
| ${}^{16}\text{O}$  | -5.41                | -5.48                | -7.7 | -7.97 |
| ${}^{40}\text{Ca}$ | -6.64                | -6.97                | -    | -8.55 |

*FNHC-SOC* методът е използван за изследване на ролята на късодействащите корелации върху характеристиките на основно състояние на ядрата  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  [223–225]. Нуклон–нуклонното взаимодействие е моделирано чрез двучастичния потенциал *Аргон V8'* и тричастичните сили *Урбана IX*. В таблица (3.2) са сравнени стойностите на енергията на връзка на един нуклон  $E/A$  за ядрата  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ . С *FNHC-SOC-corr* са означени резултатите, получени при минимизация

Таблица 3.3: Числа на запълване на естествените орбитали в ядрата  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ . С  $J$  е отбелязан случая, в който са разглеждани само *Ястровските* корелации, а с  $f_6$  – когато е отчетен и приносът на тензорните корелации.

| nl | $n_{nl}(f_6;^{16}\text{O})$ | $n_{nl}(J;^{16}\text{O})$ | $n_{nl}(f_6;^{40}\text{Ca})$ | $n_{nl}(J;^{40}\text{Ca})$ |
|----|-----------------------------|---------------------------|------------------------------|----------------------------|
| 1s | 0.858                       | 0.960                     | 0.864                        | 0.952                      |
| 2s | 0.019                       | 0.005                     | 0.780                        | 0.962                      |
| 3s | 0.010                       | 0.002                     | 0.052                        | 0.002                      |
| 4s | 0.005                       | 0.001                     | 0.013                        | 0.001                      |
| 1p | 0.919                       | 0.980                     | 0.841                        | 0.949                      |
| 2p | 0.021                       | 0.004                     | 0.024                        | 0.009                      |
| 3p | 0.011                       | 0.003                     | 0.016                        | 0.006                      |
| 1d | 0.025                       | 0.006                     | 0.956                        | 0.983                      |
| 2d | 0.011                       | 0.003                     | 0.030                        | 0.007                      |
| 3d | 0.006                       | 0.001                     | 0.019                        | 0.006                      |

само на корелационните функции, а с *FNHC-SOC*-full – резултатите при минимизация както на корелационните, така и на едночастичните функции. Вижда се, че обхватът на минимизационната процедура в *FNHC-SOC* метода не оказва съществено влияние на енергията на връзка. В същото време разликата с Вариационния *Монте Карло* метод (VMC) [207] е значителна и показва, че в кластерното разложение на *FNHC-SOC* метода не се отчитат диаграми, важни за възпроизвеждане на енергията на основното състояние на ядрата.

Все пак основната цел на пресмятанията в *FNHC-SOC* метода е да се изследва приносът на различните видове късодействащи нуклон–нуклонни корелации върху едночастичните характеристики на ядрата. Затова е пресметната едночастичната матрица на плътността и са анализирани локалната плътност и импулсното разпределение на ядрата. Направен е изводът, че импулсните разпределения имат ясно изразени високоимпулсни компоненти, дължащи се както на *Ястровските*, така и на тензорните корелации.

В представяне на естествените орбитали едночастичната матрица на плътността е разгледана в работа [224].

Както се вижда от таблица (3.3), числата на запълване на дупчестите едночастични нива (  $1s$  и  $1p$  състояния за  $^{16}\text{O}$  и  $1s, 2s, 1p$  и  $1d$  за  $^{40}\text{Ca}$ ) са по-малки от 1, както би следвало да бъдат в модела на независимите частици. За сметка на това са заселени състояния над нивото на *Ферми*. Сумата на числата на запълване на частичните състояния възлиза на около 10% от броя на частиците. Сравнението между числата в колоните  $f_6$  и  $J$  показва, че спин–изоспиновите тензорни корелации играят по-съществена роля за изпразването на морето на *Ферми*, отколкото централните *Ястровски* корелации.

Към тази група от изследвания трябва да прибавим и работи [226, 227], в които след допълнително опростяване на кластерното разложение се разглеждат локалната плътност и импулсното разпределение на ядрата  $^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$ ,  $^{40}\text{Ca}$  и  $^{48}\text{Ca}$ . Използва се в  $JJ$  представяне в сферичен базис, различен за неутрони и протони. Показано е, че *Ястровските* корелации водят до намаляване на локалната плътност в близост до центъра на ядрото и до появата на високоимпулсни компоненти. Късодействащите корелации, зависещи от спина и изоспина на нуклоните, действат върху разпределението на локалната плътност в обратна посока и сумарният ефект от корелациите води до незначително изменение на локалната плътност в сравнение с некорелираното разпределение. При импулсното разпределение и двата типа корелации действат в една посока – на повишаване Стойностите на импулсното разпределение при големи стойности на импулса на нуклоните.

В последната работа от този цикъл [228] *FNHC-SOC* методът се прилага за описание на средно тежки двойно магически ядра, включително и  $^{208}\text{Pb}$ . Двучастичното нуклон–нуклонно взаимодействие е представено от два вида сили - *Аргон*  $v'_8$  [204] и *Урбана*  $v_{14}$  [229, 230], като са включени всички оператори до спин–орбиталния в (3.127). Тричастичните сили са съответно *Урбана*  $UIX$  [204] и *Урбана*  $UVII$  [210]. За радиалните части на едночастичните вълнови функции са използвани собствените функции на сферичен потенциал на *Уудс-Саксън* със спин–орбитален член, чиито параметри, различни за протонната и неутронна система, са подбрани така, че максимално добре да описват едночастичните енергии на състоянията около *Ферми* нивото. За да се облекчи числената процедура във вариационните пресмятания участват само параметрите на корелационните функции. В статията подробно са изследвани приносите на различните типове корелации към енергията на връзка на нуклоните, но в таблица (3.4) е представено само сравнение между теоретичните стойности и експерименталните данни за тази величина:

Таблица 3.4: Енергии на връзка на нуклоните в MeV за два вида нуклон–нуклонно взаимодействие, сравнени с експерименталните стойности [231].

|                 | $^{12}\text{C}$ | $^{16}\text{O}$ | $^{40}\text{Ca}$ | $^{48}\text{Ca}$ | $^{208}\text{Pb}$ |
|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|-------------------|
| $v'_8 + UIX$    | -0.91           | -4.49           | -4.58            | -4.14            | -3.43             |
| $v_{14} + UVII$ | -1.18           | -4.99           | -6.09            | -5.56            | -4.91             |
| $E_{exp}$       | -7.68           | -7.97           | -8.55            | -8.66            | -7.86             |

Първият извод, който следва от горната таблица, е, че пресметнатата енергия на връзка е по–малка от експерименталната стойност с 3 – 4 MeV. Трябва да се отбележи, че с това е постигната същата точност за енергията на връзка, получена

за ядрената материя в първите работи по *FNHC* метода [214, 215]. Това показва, че настоящата версия на *FNHC-SOC* подхода представлява адекватно микроскопично описание на двойно магическите ядра, което отчита късодействащите и тензорни корелации между нуклоните. Вторият извод е свързан с ядрото  $^{12}\text{C}$ . То има много малка енергия на връзка и представлява изключение от общата тенденция. Предполага се, че това се дължи на деформацията на  $^{12}\text{C}$ , която не е отчетена в тези пресмятания.

В статията са изследвани и едночастичните и двучастични матрици на плътността за подсистемите с различни спинове и изоспинове в ядрата. Показано е, че късодействащите корелации не влияят съществено върху локалната плътност. Приносът е съществен в центъра на ядрото, ако се отчитат само скаларните корелации, но останалите членове на корелационните функции водят до намаляване на този ефект. Видът на двучастичните матрици на плътността показва, че късодействащите корелации водят до значително намаляване на вероятността два нуклона да се намират на разстояние по-малко от  $0.5 - 0.6 \text{ fm}$ .

Според авторите на статията следващата стъпка в развитието на *FNHC-SOC* метода е коректното отчитане на дългодействащите корелации.

## Глава 4

### **Късодействащи корелации в метода на Ястров и влиянието им върху характеристиките на ядрената структура**

Ролята на късодействащите корелации за реалистичното описание на едночастичните и двучастични характеристики на ядрените системи е добре известна и систематично изследвана, например в [67]). В множество експерименти при средни и по-високи енергии ( $E_{lab} \geq 100$  MeV/нуклон) се търсят проявите на силното отблъскване на частиците на малки разстояния. Наблюдават се високоимпулсни компоненти в импулсното разпределение на нуклоните в ядрата, например в [233, 235–240], които не могат да се обяснят в рамките на модела на независимите частици. В същото време, както беше разисквано в част (2.3), едночастичните вълнови функции, получавани в приближение на средното поле, са много близки до експериментално наблюдаваните. Съществуват и експериментални доказателства за изпраждане на морето на *Ферми* и заселването на нива, които в модела на независимите частици би следвало да са незаети [65, 66]. Трябва обаче да се подчертае, че тези характеристики на ядрата не се измерват пряко и определянето им до голяма степен е моделно зависимо. Това поставя специфични изисквания към теоретичните модели, наети за интерпретиране на експерименталните резултати. От една страна те трябва адекватно да отразяват късодействащото взаимодействие на нуклоните, от друга страна – да позволяват просто, по възможност аналитично, представяне на необходимите едночастични и двучастични оператори в ядрените системи, за да се преодолее изключителната сложност, свързана с описанието на ядрените процеси.

Цел на представените тук изследвания е изучаването на късодействащите корелации в атомните ядра в рамките на физически адекватен и в същото време прост аналитичен модел. Това ще даде възможност за подробен анализ на влиянието на корелациите върху едночастичните и двучастични характеристики на ядрата както

в теоретичен аспект, така и при анализа на експерименталните данни.

Възможност за получаване на аналитични изрази за основните ядрени характеристики предоставя Приближението от нисък порядък (ПНП) в модела на *Ястров*. Това е подходът, който е използван в описваната в тази и в следващата глава от дисертацията серия от изследвания на късодействащите корелации в някои сферични четно-четни ядра.

## 4.1 Аналитичен модел

Както беше изложено подробно в част (3.4.1) на дисертацията, в основата на всички теоретични подходи за описание на късодействащите корелации в ядрата лежи предположението на *Bijl–Dingle–Jastrow* за вида на корелираната многочастична функция на нуклонната система [193, 200, 201]. Тя се представя като произведение от некорелирана многочастична вълнова функция и корелационен фактор (3.117). Разликата в корелационните подходи се състои в конкретния избор за вида на тези два елемента на вълнова функция и на приближенията, които се правят за решаване на многочастичната квантовомеханична задача.

Изборът на пробна многочастична вълнова функция в настоящите изследвания се определя от следните фактори [A1, A2]:

- Ще разглеждаме късодействащи корелации, независещи от квантовомеханичното състояние, в което се намират нуклоните;
- Ще изследваме ефектите на късодействащите корелации в двойномагическите ядра в *sd*-слоя;
- Ще търсим аналитично представяне на средните стойности на основните едночастични и двучастични оператори;

Корелирана многочастична вълнова функция на *A*-нуклонна система, която удовлетворява горните изисквания, има вида:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_A) = C_A^{-1/2} \prod_{1 \leq i < j \leq A} f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \Psi_{SD}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_A), \quad (4.1)$$

където  $\mathbf{x}_i = \{\mathbf{r}_i, \sigma_i, \tau_i\}$  е обобщената координата на *i*-тия нуклон, включваща пространствена, спинова и изоспинова компонента.

Корелационният фактор *F* в израза (3.117) е представен чрез произведение от  $A(A-1)/2$  на брой множители, отговарящи на всяка двойка нуклони от системата. Функцията  $f_{ij} = f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$  е скаларна, независеща от състоянието на нуклоните,

които свързва, и удовлетворява граничните условия (3.94). Тя има експоненциален вид по отношение на разстоянието между частиците  $r = | \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j |$ :

$$f(r; c, \beta) = 1 - \exp(-\beta^2 r^2) . \quad (4.2)$$

и зависи от параметъра  $\beta$ . Както ще видим по-късно, този прост израз за корелационната функция е важно условие за получаване на аналитични изрази за едночастичната и двучастична матрици на плътността.

Некорелираната многочастичната вълнова функция представлява  $A$ -частична *Слейтър*ова детерминанта:

$$\Psi_{SD}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_A) = (\mathbf{A}!)^{-1/2} \det | \psi_i(\mathbf{x}_j) | , \quad (4.3)$$

изградена от ортонормирани едночастични вълнови функции, собствени вектори на хамилтониана на  $A$ -частична система.

Константата  $C_A$  в израза (4.1) за корелираната многочастична вълнова функция се определя от изискването:

$$\int | \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_A) |^2 d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_A = 1 \quad (4.4)$$

Така дефинирана, пробната вълнова функция (4.1) е антисиметризирана и нормирана функция, която съдържа статистическите корелации на *Паули* чрез *Слейтър*овата детерминанта (4.3) и динамичните късодействащи корелации чрез корелационния фактор (4.2).

В Глава 3 на дисертацията беше показано, че влиянието на късодействащите корелации върху ядрените характеристики е съществено при леките и намалява при тежките ядра. Затова обект на представените тук изследвания са двойномагическите ядра при  $LS$ -връзка в  $sd$ -слоя. Това са  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ , като очевидно първото е леко ядро, а последното може да се разглежда като тежко за дадения тип взаимодействия. Нуклоните в тези ядра запълват съответно нивата  $(1s)$ ,  $(1s, 1p)$  и  $(1s, 1p, 1d, 2s)$ .

Най-подходящ едночастичен базис за описание на ядрата от  $sd$ -слоя в рамките на слоестия модел е този на сферичния хармоничен осцилатор. Едночастичните вълнови функции на състоянията в този случай имат вида:

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}, \sigma, \tau) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{m_\sigma}(\sigma) \chi_{m_\tau}(\tau) , \quad (4.5)$$

В горния израз  $R_{nl}(r)$  са радиални функции, пропорционални на обобщените полиноми на *Лагер* [241],  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  са сферичните хармоники, а  $\chi_{m_\sigma}(\sigma)$  и  $\chi_{m_\tau}(\tau)$  са

съответно собствените функции на операторите на спина и изоспина на частицата.

За пресмятане на едночастичната и двучастична матрици на плътността в разглеждания цикъл работи е използвано Приближението от нисък порядък, подробно описано в част (3.4.1). Ще използваме съответно формули (3.105) и (3.106). В тях участва некорелираната едночастична матрица на плътността  $\rho_{SD}^{(1)}$  (3.107). Следвайки правилото за сумиране на произведение от две сферични хармоники [37]:

$$P_\ell(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{m=\ell} Y_{\ell m}(\theta', \varphi') Y_{\ell m}(\theta'', \varphi'') , \quad (4.6)$$

където  $P_\ell$  са полиномите на *Лежандър*, а  $\theta$  е ъгълът, който сключват радиус-векторите  $\mathbf{r}'$  и  $\mathbf{r}''$ , за  $\rho_{SD}^{(1)}$  получаваме следния израз:

$$\begin{aligned} \rho_{SD}^{(1)}(x, x') &= \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\tau\tau'} \frac{\alpha^3}{2\pi^{3/2}} \exp \left[ \frac{\alpha^2}{2} (r^2 + r'^2) \right] \times \\ & \left[ a_1 + a_2 \alpha^2 r r' \cos \theta + a_3 \alpha^2 (r^2 + r'^2) \right. \\ & \left. + a_4 \alpha^4 r^2 r'^2 + a_5 \alpha^4 r^2 r'^2 \cos^2 \theta \right] . \end{aligned} \quad (4.7)$$

$\alpha = (m\omega/\hbar)^{1/2}$  е осцилаторният параметър, а коефициентите  $a_i, \{i = 1, 5\}$  са свързани с числата на запълване  $\varepsilon_{nl}$  на съответните слоеве, които са равни на 1 или 0 в зависимост от това, дали дадено състояние се намира под или над *Ферми* нивото за разглежданото ядро:

$$\begin{aligned} a_1 &= 2\varepsilon_{1s} + 3\varepsilon_{2s} & a_2 &= \frac{4}{3}\varepsilon_{1p} & a_3 &= -2\varepsilon_{2s} \\ a_4 &= \frac{4}{15}(-\varepsilon_{1d} + 5\varepsilon_{2s}) & a_5 &= \frac{1}{10}\varepsilon_{1d} \end{aligned} \quad (4.8)$$

С това са определени всички елементи на разглеждания аналитичен модел и сега можем да пресметнем едночастичната и двучастична матрица на плътността, а оттам и всички едночастични и двучастични ядрени характеристики.

## 4.2 Едночастична матрица на плътността и едночастични ядрени характеристики

### 4.2.1 Дефиниции и свойства на основните едночастични характеристики

Замествайки некорелирана едночастична матрица на плътността  $\rho_{SD}^{(1)}$ , дефинирана в част (4.1), в израза (3.105), получаваме едночастичната матрица на плътността в ПНП. След сумиране по спина и изоспина на частиците, за пространствената част

на  $\rho_{LOA}^{(1)}$  получаваме:

$$\begin{aligned} \frac{2\pi^{3/2}}{\alpha^3} \rho_{LOA}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & [\mathcal{A}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') + \mathcal{D}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')] \exp\left[-\frac{1}{2}(z^2 + z'^2)\right] + \\ & \mathcal{B}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1+3y}{1+y}z^2 + z'^2\right)\right] + \mathcal{B}(\mathbf{z}', \mathbf{z}) \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1+3y}{1+y}z'^2 + z^2\right)\right] \\ & \mathcal{C}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[(1+2y)(z^2 + z'^2) - \frac{2y^2}{1+2y}(\mathbf{z} + \mathbf{z}')^2\right]\right\} . \end{aligned} \quad (4.9)$$

В горния израз са направени следните замествания:  $y = \beta^2/\alpha^2$ , където  $\beta$  е корелационният параметър в (4.2),  $\mathbf{z} = \alpha\mathbf{r}$  и  $\mathbf{z}' = \alpha\mathbf{r}'$ . Приносите на диаграмите (a), (b), (c) и (d) от фигура (3.26) съответстват на членовете от равенство (4.9), които съдържат множителите  $\mathcal{A}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$ ,  $\mathcal{B}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$ ,  $\mathcal{C}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$  и  $\mathcal{D}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$ . Тези множители са полиноми на  $r$ ,  $r'$  и  $\cos\theta$  и за всички двойномагически ядра в  $sd$ -слоя те могат да се запишат в един и същ вид. Конкретните им изрази за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  са разписани в Приложение 2.

За разглежданията ни по-нататък е необходимо да дефинираме едночастичната матрица на плътността и в импулсното пространство:

$$n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = A \int \tilde{\Psi}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_A) \tilde{\Psi}^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_A) d\mathbf{k}_2 \dots d\mathbf{k}_A . \quad (4.10)$$

Тя е *Фурие* образ на едночастичната матрица на плътността в координатното пространство:

$$n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')] \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' . \quad (4.11)$$

Замествайки в горната формула  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  с изрази (4.9) се получава  $n(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  в ПНП:

$$\begin{aligned} n_{LOA}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = & \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')] \rho_{LOA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ = & \frac{1}{\alpha^3 \pi^{3/2}} \left[ \tilde{\mathcal{A}}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') + \tilde{\mathcal{D}}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') \right] \exp\left[-\frac{1}{2}(z^2 + z'^2)\right] + \\ & \tilde{\mathcal{B}}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1+3y}{1+y}z^2 + z'^2\right)\right] + \tilde{\mathcal{B}}(\mathbf{z}', \mathbf{z}) \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1+3y}{1+y}z'^2 + z^2\right)\right] \\ & \tilde{\mathcal{C}}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[(1+2y)(z^2 + z'^2) - \frac{2y^2}{1+2y}(\mathbf{z} + \mathbf{z}')^2\right]\right\} \end{aligned} \quad (4.12)$$

където  $\mathbf{z} \equiv \mathbf{k}/\alpha$ , а полиномите  $\tilde{\mathcal{A}}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$ ,  $\tilde{\mathcal{B}}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$  и  $\tilde{\mathcal{C}}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$  имат същия вид като полиномите  $\mathcal{A}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$ ,  $\mathcal{B}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$  и  $\mathcal{C}(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$  в (4.9), но с различни коефициенти. Те могат да се получат от коефициентите, представени в Приложение 2.

След като едночастичната матрица на плътността е дефинирана в координатното и в импулсното пространство, ур. (4.9) и (4.12), от нея могат да се получат всички едночастични характеристики на ядрената система. Ние ще изследваме поведението на локалната плътност в координатното пространство:

$$\begin{aligned} \rho_{LOA}(r) &= \rho_{LOA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \\ &= \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} [\mathcal{A}(z) + \mathcal{D}(z; y)] \exp(-z^2) + \\ &+ \mathcal{B}(z; y) \exp\left[-\frac{1+2y}{1+y}z^2\right] + \mathcal{C}(z; y) \exp\left[-\frac{1+4y}{1+2y}z^2\right], \end{aligned} \quad (4.13)$$

където  $z \equiv \alpha r$ ,

еластичния формфактор:

$$\begin{aligned} F_{LOA}(q) &= A_1 \int \rho_{LOA}(r) \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \frac{\alpha^{-3}}{\pi^{3/2}} [\mathcal{A}^F(z) + \mathcal{D}^F(z; y)] \exp(-z^2) + \\ &+ \mathcal{B}^F(z; y) \exp\left[-\frac{1+y}{1+2y}z^2\right] + \mathcal{C}^F(z; y) \exp\left[-\frac{1+2y}{1+4y}z^2\right], \end{aligned} \quad (4.14)$$

при  $z \equiv (q/2\alpha)$  и

импулсното разпределение на нуклоните:

$$\begin{aligned} n_{LOA}(k) &= n_{LOA}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \\ &= \frac{\alpha^{-3}}{\pi^{3/2}} [\tilde{\mathcal{A}}(z) + \tilde{\mathcal{D}}(z; y)] \exp(-z^2) + \\ &+ \tilde{\mathcal{B}}(z; y) \exp\left[-\frac{1+y}{1+2y}z^2\right] + \tilde{\mathcal{C}}(z; y) \exp\left[-\frac{1+2y}{1+4y}z^2\right], \end{aligned} \quad (4.15)$$

за  $z \equiv (k/\alpha)$ . Всички полиноми, които участват във формулите (4.13), (4.14) и (4.15), могат лесно да се получат от полиномите на едночастичната матрица на плътността. Като пример ще приведем полиномите в израза за локалната плътност

(4.13):

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(z) &= \mathcal{A}(\mathbf{z}, \mathbf{z}) \\ &= \mathcal{A}_1 + (2\mathcal{A}_2 + \mathcal{A}_4)z^2 + (2\mathcal{A}_3 + \mathcal{A}_5)z^4\end{aligned}\quad (4.16)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{B}(z; y) &= \mathcal{B}(\mathbf{z}, \mathbf{z}; y) \\ &= \mathcal{B}_1(y) + [\mathcal{B}_2(y) + \mathcal{B}_5(y) + \mathcal{B}_9(y)]z^2 \\ &+ [\mathcal{B}_3(y) + \mathcal{B}_6(y) + \mathcal{B}_{10}(y) + \mathcal{B}_{12}(y)]z^4 \\ &+ [\mathcal{B}_4(y) + \mathcal{B}_7(y) + \mathcal{B}_{11}(y) + \mathcal{B}_{13}(y)]z^6 \\ &+ [\mathcal{B}_8(y) + \mathcal{B}_{14}(y)]z^8\end{aligned}\quad (4.17)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{C}(z; y) &= \mathcal{C}(\mathbf{z}, \mathbf{z}; y) \\ &= \mathcal{C}_1(y) + [2\mathcal{C}_2(y) + \mathcal{C}_{10}(y)]z^2 \\ &+ [2\mathcal{C}_3(y) + \mathcal{C}_6(y) + 2\mathcal{C}_{11}(y) + \mathcal{C}_{16}(y)]z^4 \\ &+ [2\mathcal{C}_4(y) + 2\mathcal{C}_7(y) + 2\mathcal{C}_{12}(y) + \mathcal{C}_{14}(y) + 2\mathcal{C}_{17}(y) + 2\mathcal{C}_{20}(y)]z^6 \\ &+ [2\mathcal{C}_5(y) + 2\mathcal{C}_8(y) + \mathcal{C}_9(y) + 2\mathcal{C}_{13}(y) + 2\mathcal{C}_{15}(y) \\ &+ 2\mathcal{C}_{18}(y) + \mathcal{C}_{19}(y) + 2\mathcal{C}_{21}(y) + 2\mathcal{C}_{22}(y)]z^8\end{aligned}\quad (4.18)$$

По аналогичен начин могат да се получат и аналитични изрази за средноквадратичния радиус на ядрото:

$$\langle r \rangle_{LOA}^2 = A^{-1} \int_{V_{r\infty}} r^2 \rho_{LOA}(r) dr \quad (4.19)$$

и за кинетичната енергия на нуклоните:

$$T_{LOA} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{V_{k\infty}} k^2 n_{LOA}(k) dk . \quad (4.20)$$

Всички разгледани дотук едночастични характеристики на ядрата в ПНП зависят от два параметъра - осцилаторния параметър  $\alpha$  и корелационния параметър  $\beta$ . Стойностите на параметрите могат да се намерят чрез вариационни пресмятания, подробно изложени в част (3.4.2). Тъй като цел на настоящите изследвания е не прецизно описание на експерименталните данни, а изучаване на механизма на влияние на късодействащите корелации върху характеристиките на ядрата, параметрите на задачата ще бъдат определени от изискването аналитичният израз за еластичния формфактор (4.14) да възпроизвежда максимално добре съществуващите експериментални данни. При това ефекти като влияние на центъра на масите, на

мезонните обменни токове, на формфактора на нуклона, релятивистки ефекти и др. няма да отчитаме. Независимо от това феноменологичният поход дава възможност за получаване на реалистични стойности на параметрите  $\alpha$  и  $\beta$ , а оттам и адекватен анализ на късодействащите корелации.

На фигура (4.1) са показани експериментални данни за еластичния формфактор [242–244] и функцията  $F_{LOA}(q)$  за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ . Параметрите в израза (4.14) са подбрани така, че теоретичната крива да възпроизвежда експерименталните резултати максимално добре. За сравнение е показан и некорелираният формфактор, получен в слоестия модел. Той лесно може да се получи и от израза (4.14) за корелирания еластичен формфактор при  $y = 0$ .

От показаното на фигура (4.1) следва, че корелираният еластичен формфактор възпроизвежда задоволително структурата на експерименталните резултати в цялата изследвана областта, докато некорелираният формфактор фитира добре експеримента само за малки стойности на импулса  $q < 2 \text{ fm}^{-1}$ .

Стойностите на параметрите в модела, получени по описания феноменологичен начин, са следните:

Таблица 4.1: Осцилаторен параметър  $\alpha$  и корелационен параметър  $\beta$  за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ .

|                    | $\alpha[\text{fm}^{-1}]$ | $\beta[\text{fm}^{-1}]$ |
|--------------------|--------------------------|-------------------------|
| ${}^4\text{He}$    | 0.82                     | 1.23                    |
| ${}^{16}\text{O}$  | 0.59                     | 1.43                    |
| ${}^{40}\text{Ca}$ | 0.52                     | 1.21                    |

Тези стойности на параметрите ще бъдат използвани при всички пресмятания оттук нататък.

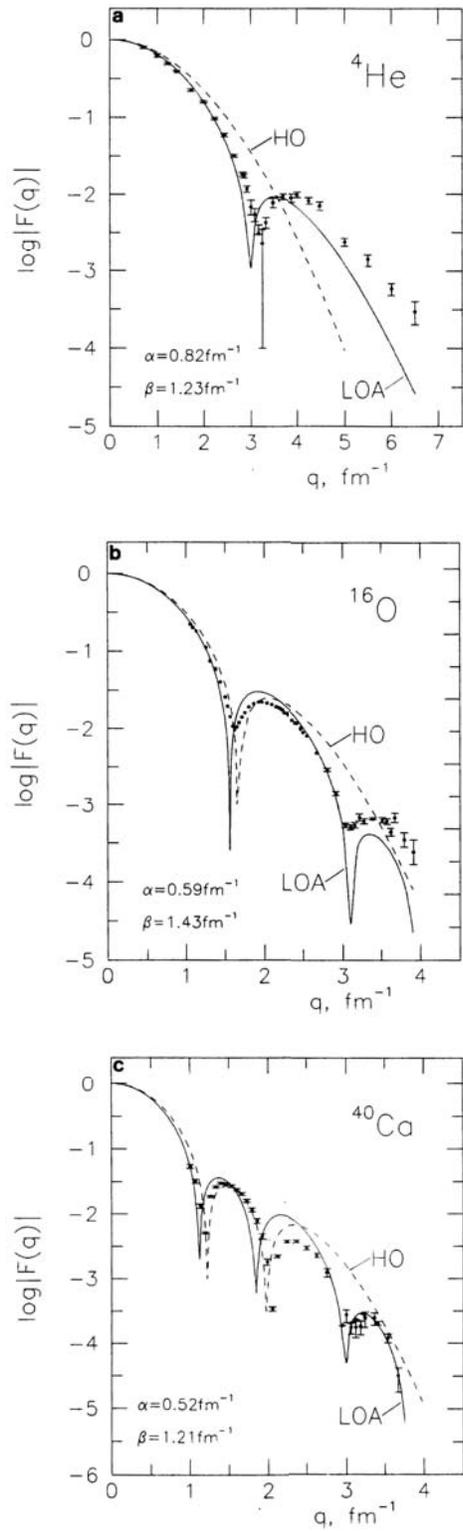
Нека разгледаме сега локалната плътност  $\rho_{LOA}(r)$  (4.13) и импулсното разпределение  $n_{LOA}(k)$  (4.15). Двете разпределения са нормирани по следния начин:

$$4\pi \int \rho_{LOA}(r) r^2 dr = \frac{A}{2}, \quad (4.21)$$

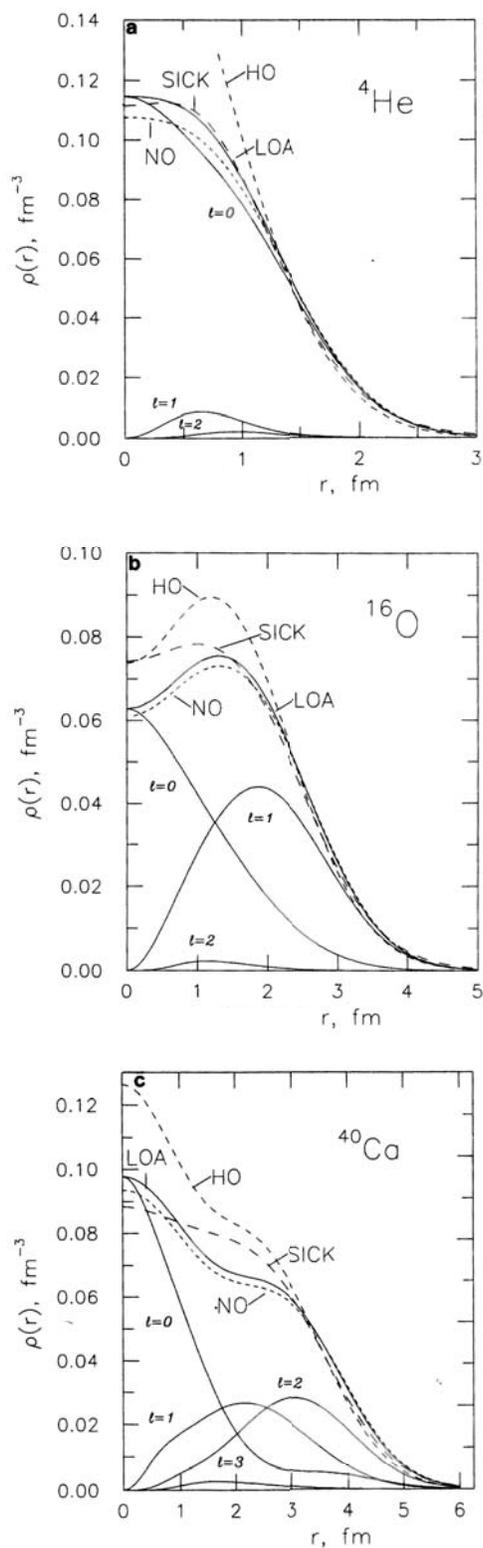
$$4\pi \int n_{LOA}(k) k^2 dk = 1. \quad (4.22)$$

Те са показани съответно на фигура (4.2) и фигура (4.3).

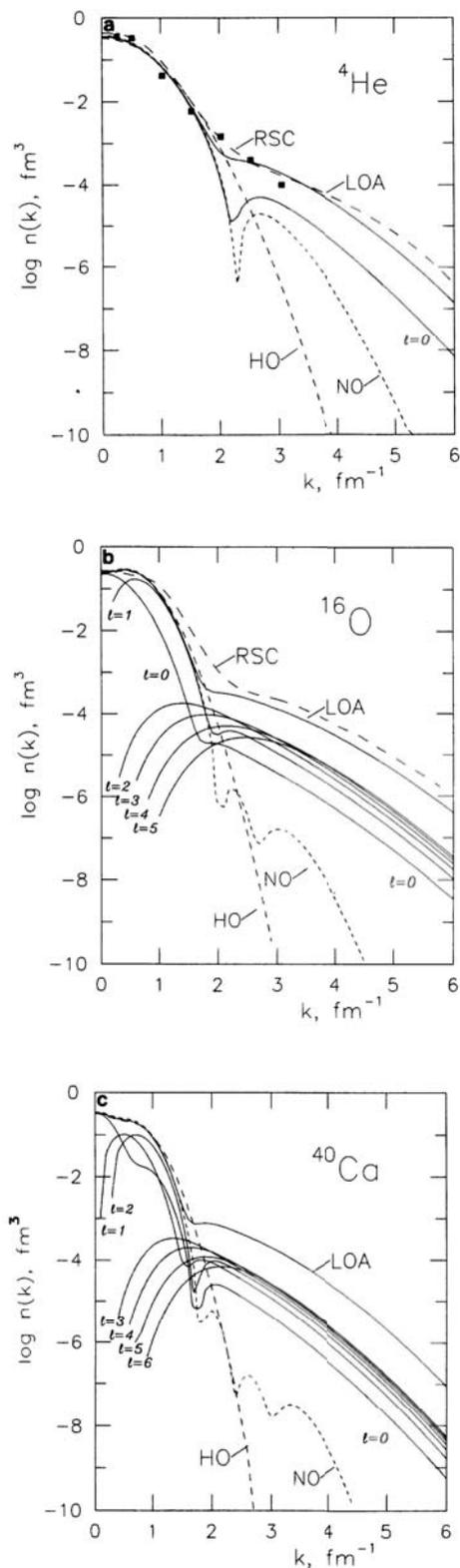
Независимо от простотата на израза (4.13), с който се описва, локалната плътност в ПНП задоволително възпроизвежда поведението на ”експерименталната” кривата, отбелязана на фигура (4.2) с (SICK) и получена от моделно-



Фигура 4.1: Сравнение на експерименталните данни за еластичния формфактор [242–244] с корелирания формфактор (LOA) в ПНП ур. (4.14) (пътна линия) и с некорелирания формфактор (НО) (пунктирна линия).



Фигура 4.2: Локално разпределение на плътността за ядрата  ${}^4\text{He}$  (а),  ${}^{16}\text{O}$  (б) и  ${}^{40}\text{Ca}$  (с). С (LOA) е означено корелираното разпределение, с (HO) - некорелираното, с (NO) - това, получено от една *Слейтърова* детерминанта от естествени орбитали, чиито числа на запълване са близки до единица. Показани са и резултатите от моделно независим анализ на експериментални данни по разсейване на електрони на Сик (SICK) [245]. С  $\ell$  са означени приносите на всички естествени орбитали с даден ъглов момент.



Фигура 4.3: Импулно разпределение в ядрата  ${}^4\text{He}$  (a),  ${}^{16}\text{O}$  (b) и  ${}^{40}\text{Ca}$  (c). С (LOA) е означено корелираното разпределение, с (HO) - некорелираното, с (NO) - това, получено от една *Слейтър*ова детерминанта от естествени орбитали, чиито числа на запълване са близки до единица. С  $\ell$  са означени приносите на всички естествени орбитали с даден ъглов момент. Показани са и резултатите от пресмятания в  $\exp(S)$ -метода [246](RSC) и експериментални данни за  ${}^4\text{He}$  [233] (точки).

независим анализ на експериментални данни по разсейване на електрони от ядра [245]. В същото време сравнението на некорелираното локално плътностно разпределение (НО) с експеримента показва, че в приближение на средното поле локалната плътност, особено в средата на ядрата, значително надвишава експерименталните данни.

Подобни изводи могат да се направят и от сравнението на импулсното разпределение в ПНП с експерименталните данни за ядрото  ${}^4\text{He}$  [233] и с резултатите за  ${}^4\text{He}$  и  ${}^{16}\text{O}$  от  $\text{exp}(S)$ -метода [246] с ”мек” потенциал на *Peïd*, който отчита отблъскването на нуклоните на малки разстояния. Корелираното импулсно разпределение има ясно изразени високи компоненти, съществуването на които доказват експерименталните данни за ядрото  ${}^4\text{He}$ . Подобно поведение на импулсното разпределение се получава и в  $\text{exp}(S)$ -метода [246], който е значително по-сложен подход от разглежданото тук приближение. Доброто описание на експериментални данни и на резултати от други теоретични подходи в Приближението от нисък порядък на метода на *Ястров* очевидно се дължи на адекватното включване на късодействащите корелации в израза за пробната многочастична вълнова функция на системата (4.1) и в отчитането на диаграмите с най-голям принос в разложението на едночастичната матрица на плътността (4.9).

Към фигури (4.2) и (4.3) ще се върнем отново по-късно, когато разглеждаме представянето на естествените орбитали.

Таблица 4.2: Средноквадратичен радиус във [fm] и кинетична енергия в [MeV] за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ .

|                             | ${}^4\text{He}$ | ${}^{16}\text{O}$ | ${}^{40}\text{Ca}$ |
|-----------------------------|-----------------|-------------------|--------------------|
| $R_{HO}$                    | 1.49            | 2.54              | 3.33               |
| $R_{LOA}$                   | 1.60            | 2.63              | 3.50               |
| $R_{exp}$                   | 1.67            | 2.71              | 3.48               |
| $T_{HO}$                    | 83.66           | 259.84            | 672.80             |
| $T_{LOA}$                   | 103.44          | 341.42            | 934.24             |
| $T_B$                       | -54.84          | -93.48            | -430.36            |
| $T_C$                       | 43.64           | 117.64            | 408.46             |
| $T_D$                       | 30.98           | 57.42             | 283.33             |
| $T_{corr}$                  | 19.79           | 81.58             | 261.44             |
| $\varepsilon_{corr}^T [\%]$ | 19.19           | 23.90             | 27.98              |
| $T_{LOA}/T_{HO}$            | 1.24            | 1.31              | 1.39               |

За пълнота сега ще разгледаме две други едночастични характеристики на

ядрата – средноквадратичния радиус  $R = [\langle r^2 \rangle]^{1/2}$  и кинетичната енергия на системата. В ПНП те се изразяват аналитично съответно чрез равенствата (4.19) (4.20). В таблица (4.2.1) са приведени корелираните (LOA) и некорелирани (НО) стойности на средноквадратичния радиус и кинетичната енергия за ядрата  $^4\text{He}$ ,  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ .

Сравнявайки пресметнатите средноквадратични радиуси с експерименталните [245] може да се направи заключението, че отчитането на късодействащите корелации води до по-добро съгласие с експерименталните данни за  $R$ .

Нека сега разгледаме приноса на отделните диаграми в разложението на едночастичната матрица на плътността при формиране на кинетичната енергия на системата. Първият извод, който може да се направи от резултатите за кинетичната енергия, представени в таблица (4.2.1), е, че приносът на всички диаграми е от един и същи порядък. Диаграмата (A) е от нулев порядък и нейният принос представлява некорелираната част на кинетичната енергия  $T_{HO}$ . Останалите диаграми участват в получаването на корелационната енергия  $T_{corr} = T_{LOA} - T_{HO} = T_B + T_C + T_D$ . Частта на корелационната енергия в пълната кинетична енергия  $\varepsilon_{corr}^T = 100 \times T_{corr}/T_{LOA}$ , както и отношението на корелираната към некорелираната кинетична енергия  $T_{LOA}/T_{HO}$  расте с нарастването на масовото число на ядрото.

**В заключение** ще изброим основните резултати, обсъждани в тази част от Глава 4:

- получени са аналитични изрази за корелираната едночастична матрица на плътността в приближение от нисък порядък в метода на *Ястров* за двойномагическите ядра в *sd*-слоя;
- изведени са формули за основните едночастични характеристики: локална плътност, импулсно разпределение, еластичен формфактор;
- параметрите на модела са определени феноменологично от сравнение на теоретичните резултати с експерименталните данни за еластичния формфактор на ядрата;
- анализиран е приносът на късодействащите корелации върху едночастичните характеристики на ядрата;
- получените резултати са в съгласие с експерименталните данни и с изводите, направени в други теоретични подходи;

## 4.2.2 Представяне на естествените орбитали

В корелационните подходи, надхвърлящи рамките на модела на независимите частици, съществува един важен проблем: "Как да се запази простотата на едночастичната картина при описанието на системата от силновзаимодействащи си нуклони?" Казано с други думи, желателно е да се намери процедура за получаване на набор от едночастични вълнови функции и числа на запълване от корелирана  $A$ -частична вълнова функцията. Този проблем е обсъден подробно в работа [64]. В нея е показано, че не може да се определи по моделно независим начин, дали корелациите оказват влияние върху едночастичните вълнови функции, или върху числата на запълване, или и върху двете характеристики на едночастичните състояния. Съществуват прецизни експериментални данни, получени в  $(e, e'p)$  реакции с импулс на налитащите частици до  $k \simeq 250 \text{ MeV}/c$  [247, 248], от които са получени импулсни разпределения както за отделните валентни състояния на ядра със затворени слоеве, така и за пълните импулсни разпределения. От тях ясно следва, че в пълното импулсно разпределение ясно се наблюдават високи компоненти, свързани с късодействащите корелации. В едночастичните импулсни разпределения такива компоненти няма и следователно те могат да се описват в приближение на средното поле. Затова е важно да се изследва влиянието на късодействащите корелации върху характеристиките на ядрата, свързани с едночастичната им структура.

В тази част от дисертацията ще бъдат изложени резултатите, получени при изучаване на нуклон-нуклонните корелации в представяне на естествените орбитали. Те са публикувани в работи [A3, A4, B1, B2, A11, B8].

Понятията естествени орбитали и естествени числа на запълване и свързаното с тях представяне на естествените орбитали са въведени от *П. Льовдин* [29]. Той показва, че съществува моделно-независим подход за получаване на едночастични вълнови функции и числа на запълване, съответстващи на дадена корелирана едночастична матрица на плътността. След диагонализация, всяка унитарна матрица може да се запише във вида:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}') . \quad (4.23)$$

Собствените функции  $\{\psi_{\alpha}(\mathbf{r})\}$  на  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  образуват ортонормиран базис и се наричат естествени орбитали. Съответните собствени стойности  $\{n_{\alpha}\}$  носят името естествени числа на запълване. Те удовлетворяват условията:

$$0 \leq n_{\alpha} \leq 1, \quad \sum_{\alpha} n_{\alpha} = A \quad (4.24)$$

и затова се интерпретират като вероятност дадено състояние, описвано с функция

$\psi_\alpha$ , да бъде заето. Ако разглеждаме  $A$ -нуклонна система, на  $A$  на брой естествени орбитали отговарят числа на запълване, значително по-големи от останалите. По аналогия с модела на независимите частици, тези функции се наричат дупчести орбитали. Те образуват морето на *Ферми*  $F'$ . Останалите орбитали, които не принадлежат на морето на *Ферми*, се наричат частични [249].

Основното преимущество на представянето на естествени орбитали представлява фактът, че то дава възможност за изразяване на едночастичните характеристики на системите в най-прост вид. Например локалната плътност се задава с формулата:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} n_{\alpha} |\psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2, \quad (4.25)$$

където нормировката на  $\rho(\mathbf{r})$  се осигурява от свойството на естествените числа на запълване:

$$\sum_{\alpha} n_{\alpha} = A. \quad (4.26)$$

По подобен начин се записва и импулсното разпределение на нуклоните в системата:

$$n(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha} n_{\alpha} |\tilde{\psi}_{\alpha}(\mathbf{k})|^2. \quad (4.27)$$

В горния израз участват същите естествени числа на запълване, както във формулата (4.25), а естествените орбитали в импулсното пространство  $\tilde{\psi}_{\alpha}(\mathbf{k})$  са *Фурие* образите на орбиталите  $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$  в координатното пространство:

$$\tilde{\psi}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{(3/2)}} \int \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4.28)$$

В представяне на естествените орбитали може да се дефинира некорелирана многочастична функция  $\Phi_{NO}$ , която представлява *Слейтєрова* детерминанта, образувана от естествените орбитали, принадлежащи на морето на *Ферми*. Съответната некорелирана едночастична матрица на плътността  $\rho_{NO}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  или  $n_{NO}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  зависи само от  $A$  на брой естествени орбитали:

$$\rho_{NO}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha \in F'} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})\psi_{\alpha}(\mathbf{r}'), \quad (4.29)$$

$$n_{NO}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\alpha \in F'} \tilde{\psi}_{\alpha}^*(\mathbf{k})\tilde{\psi}_{\alpha}(\mathbf{k}'). \quad (4.30)$$

В израза за корелационната част на едночастичната матрица участват пълният

набор от естествени орбитали и естествени числа на запълване:

$$\Delta\rho \equiv \rho - \rho_{MFA} = \sum_{\alpha \in F'} (n_\alpha - 1)\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}') + \sum_{\alpha \notin F'} n_\alpha\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}') \quad (4.31)$$

Интегрирайки диагоналните елементи на  $\Delta\rho$  по цялото пространство при условието (4.26) получаваме величината, наречена изпразване (depletion) на морето на Ферми:

$$D_< = \sum_{\alpha \in F'} (1 - n_\alpha) , \quad (4.32)$$

което е равно на сумата на числата на запълване на частичните състояния:

$$D_> = \sum_{\alpha \notin F'} n_\alpha . \quad (4.33)$$

Както вече беше споменато, естествените орбитали образуват ортонормиран базис. Той е "оптимален" за приближението на средното поле в смисъл, че минимизира изпразването на морето на Ферми  $D_>$  и позволява корелираната системата да се опише максимално добре чрез една единствена СлейтEROва детерминанта  $\Phi_{NO}$ . При това величината  $\sigma$ , обсъждана в част(2.3), е минимална за едночастичната матрица  $\rho_{MFA}$  (4.29) измежду всички възможни некорелираната матрици:

$$\sigma_{min} = \frac{1}{A} \text{Tr} \left[ (\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \rho_{MFA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))^2 \right] . \quad (4.34)$$

Нека сега приложим представянето на естествени орбитали за корелираната едночастична матрица, получена в рамките на разглеждания в част (4.2) аналитичен модел. За тази цел трябва да диагонализираме матриците  $\rho_{LOA}$  (4.13) и  $n_{LOA}$  (4.15) съответно в координатното и в импулсното пространство, като решим задачата за собствени стойности и собствени вектори:

$$\int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\psi_\alpha(\mathbf{r}') = n_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r}) \quad (4.35)$$

и

$$\int d\mathbf{k}' n(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{k}') = n_\alpha\tilde{\psi}_\alpha(\mathbf{k}) . \quad (4.36)$$

С така получените естествени орбитали и числа на запълване може да представим корелираната едночастична матрица на плътността във вида (4.23) и некорелираната - в вида (4.29).

За ядра със затворени слоеве едночастичната матрица на плътността трябва да се диагонализира в  $\{n\ell m\}$ -подпространството на естествените орбитали [251]. Това означава, че собствените функции се търсят във вида:

$$\psi_\alpha \equiv \psi_{n\ell m}(\mathbf{r}) = \psi_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta_r, \varphi_r) \quad (4.37)$$

и

$$\tilde{\psi}_\alpha \equiv \tilde{\psi}_{n\ell m}(\mathbf{k}) = \tilde{\psi}_{n\ell}(k) Y_{\ell m}(\theta_k, \varphi_k) , \quad (4.38)$$

където  $Y_{\ell m}$  са сферичните хармоники. Замествайки равенства (4.37) и (4.38) в уравнения (4.35) и (4.36) и интегрирайки по ъгловите променливи, получаваме уравненията за собствените стойности и собствените вектори на радиалните части на естествените орбитали:

$$\int_0^\infty dr' r'^2 \rho_\ell(r, r') \psi_{n\ell}(r') = n_{n\ell} \psi_{n\ell}(r) , \quad (4.39)$$

$$\int_0^\infty dk' k'^2 n_\ell(k, k') \tilde{\psi}_{n\ell}(k') = n_{n\ell} \tilde{\psi}_{n\ell}(k) . \quad (4.40)$$

Подинтегралните функции  $\rho_\ell(r, r')$  и  $n_\ell(k, k')$  са коефициентите в разложението по полиноми на *Лежандър* на едночастичната матрица на плътността съответно в координатното и в импулсното пространство:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \rho_l(r, r') \mathbf{P}_l(\cos \gamma_{rr'}) , \quad (4.41)$$

$$n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} n_l(k, k') \mathbf{P}_l(\cos \gamma_{kk'}) . \quad (4.42)$$

където  $\gamma_{rr'}$  и  $\gamma_{kk'}$  са ъглите, сключени от радиус-векторите  $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  и  $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ . Имайки

предвид факта, че едночастичната матрица на плътността на ядра със затворени слоеве не зависи от ъгъла  $\varphi$  и интегрирането по него води само до множител  $(2\ell + 1)$ , горните уравнения се записват така:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{n\ell} (2\ell + 1) n_{n\ell} \psi_{n\ell}(r) \psi_{n\ell}(r') \mathbf{P}_\ell(\cos \gamma_{rr'}) , \quad (4.43)$$

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{n\ell} (2\ell + 1) n_{n\ell} \tilde{\psi}_{n\ell}(r) \tilde{\psi}_{n\ell}(r') \mathbf{P}_\ell(\cos \gamma_{rr'}) . \quad (4.44)$$

Очевидно корелираната едночастична матрица на плътността (4.43) се различава от некорелираната матрица в модела на хармоничния осцилатор:

$$\rho_{HO}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{n\ell} (2\ell + 1) n_{n\ell} \varphi_{n\ell}^{HO}(r) \varphi_{n\ell}^{HO}(r') \mathbf{P}_\ell(\cos \gamma_{rr'}) , \quad (4.45)$$

и по-общо от матрицата в модела на независимите частици:

$$\rho_{MFA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{n\ell} (2\ell + 1) n_{n\ell} \varphi_{n\ell}(r) \varphi_{n\ell}(r') \mathbf{P}_\ell(\cos \gamma_{rr'}) . \quad (4.46)$$

Числената процедура по решаване на задачата за намиране на естествените орбитали и числата на запълване за всяка парциална матрица на плътността в координатното и в импулсното пространство включва:

1. дискретизиране на  $\rho_\ell(r, r')$  и  $n_\ell(k, k')$  по отношение на координатите  $(r, r')$  и  $(k, k')$ ;
2. диагонализация на получените матрици.

Възможен е и друг подход:

1. дискретизиране например на  $\rho_\ell(r, r')$  по отношение на координатите  $(r, r')$  ;
2. диагонализация на получената матрица;
3. числата на запълване в импулсното пространство са равни на числата на запълване в координатното пространство, а естествените орбитали в импулсното пространство се намират чрез *Фурие* трансформация (4.28) на съответните естествени орбитали в координатното пространство.

Ние сме използвали първата процедура, защото тя дава възможност за проверка на решенията чрез сравняване на двата набора естествени числа на запълване, получени независимо един от друг в координатното и в импулсното пространство.

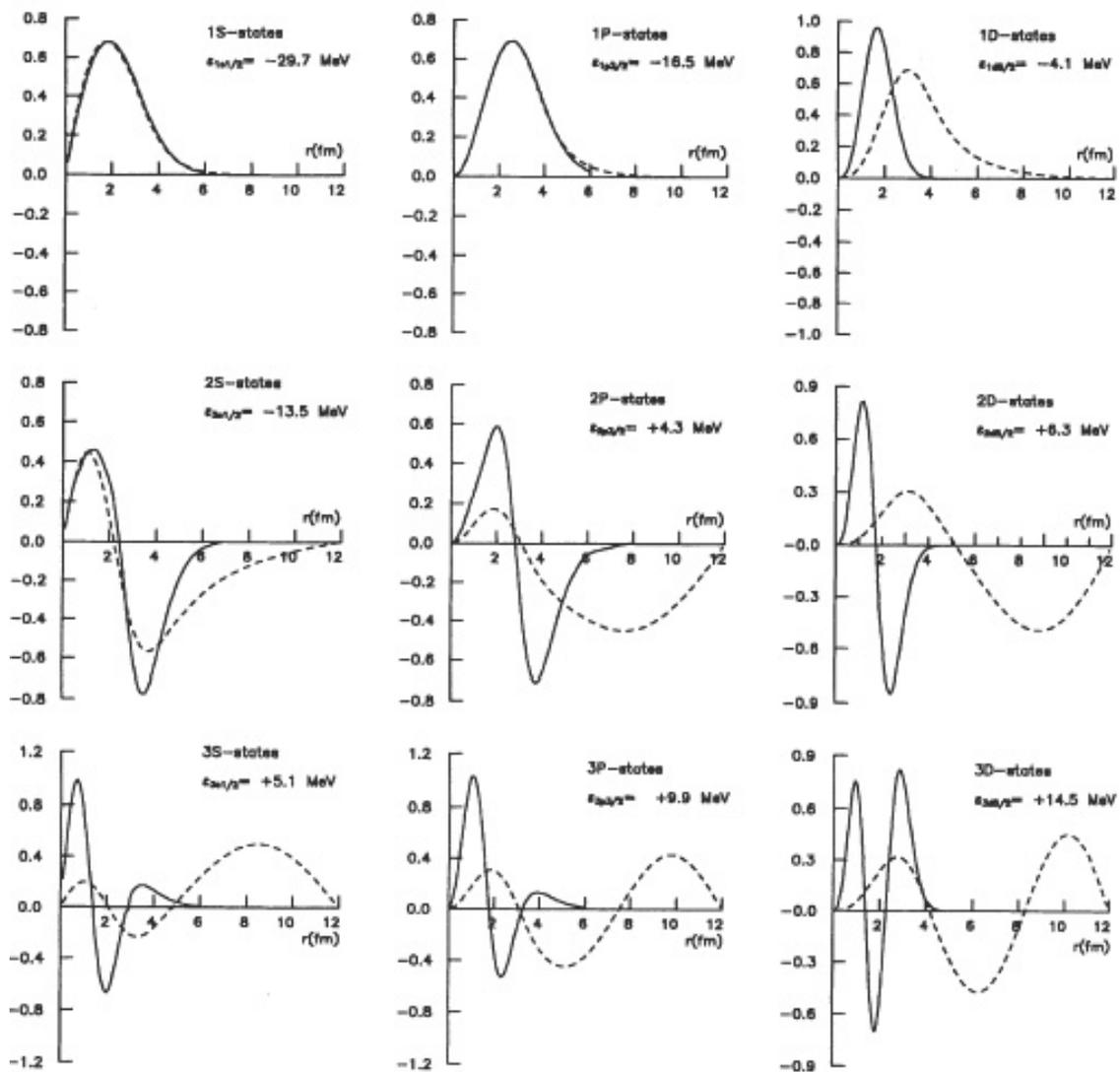
Започнахме обсъждането на представянето на естествени орбитали с твърдението, че то дава възможност за описание на основните свойства на корелирани системи, запазвайки простотата на метода на независимите частици. Дотук показахме, че едночастичните характеристики на системи от силно взаимодействащи си нуклонни могат да се представят във вид, подобен на тези в приближението на средно поле. Сега трябва да изследваме влиянието на корелациите върху типичните за едночастичното описание на ядрата величини като вълновите функции на частичните и дупчести състояния, локалната плътност и импулсното разпределение на нуклоните и т.н. За тази цел ще разгледаме сравнението на числените резултати за едночастичните характеристики на ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  в основно състояние в рамките на представянето на естествени орбитали с резултатите, получени в метода на *Хартри-Фок* с ефективни сили на Ским SKM\* [252].

Нека първо сравним естествените орбитали и едночастичните *Хартри-Фокови* вълнови функции за дупчестите състояния на ядрата  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  в координатното пространство. На фигура (4.4) са показани естествени орбитали  $\{r\psi\}$  (плътна линия) и едночастичните *Хартри-Фокови* вълнови функции  $\{r\varphi\}$  (пунктирна линия) за ядрото  ${}^{16}\text{O}$ . Очевидно двата типа функции за нивата  $1s_{1/2}$  и  $1p_{3/2}$  са много близки.

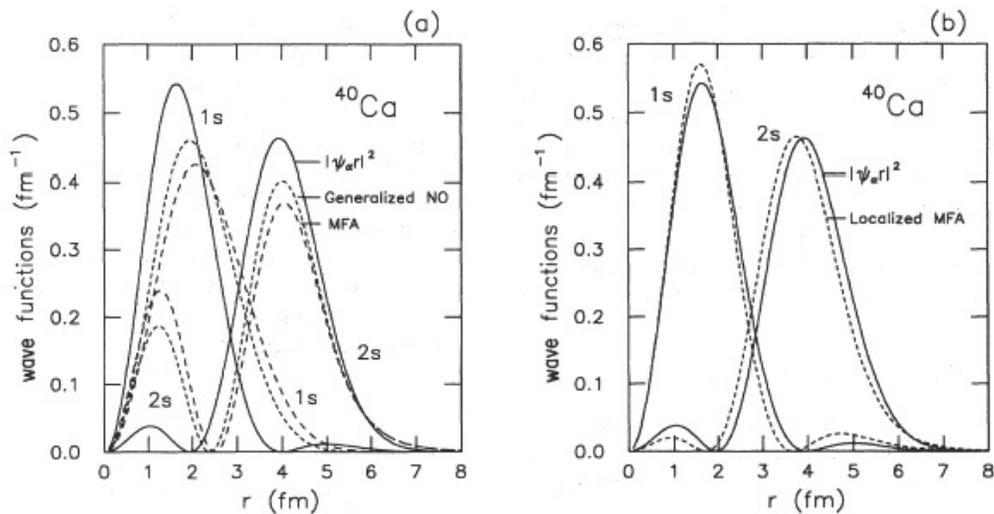
Същото важи и за дупчести нива  $1p$  и  $1d$  в ядрото  ${}^{40}\text{Ca}$ . За разлика от тях, естествените орбитали на  $s$ -нивата се различават съществено от вълновите функции в средното поле. Както е показано на фигура (4.5) *Хартри-Фоковата*  $1s$ -функция няма нули, а  $2s$ -функцията има една. За разлика от тях и двете  $2s$ -естествени орбитали имат по една нула. При това орбиталата, локализирана при по-малка стойност на радиус-вектора  $r$  има по-малко число на запълване  $n_{1s} = 0.8899$  (показано в таблица (4.3)), в сравнение с числото на запълване  $n_{2s} = 0.9588$  на  $2s$ -състоянието, чиято орбитала е локализирана на повърхността на ядрото.

Подобно поведение на естествените орбитали и едночастичните функции на средното поле е характерно за дупчести състояния, които са повече от едно с една и съща мултиполност за дадено ядро, каквито са  $2s$ -нивата в  ${}^{40}\text{Ca}$ . То е наблюдавано и анализирано и в система от  $70$   ${}^3\text{He}$  атома, разглеждани като сферична система от фермиони [249].

Като е известно, ортогоналните трансформации на дупчестите вълнови функции не променят едночастичната матрица на плътността в метода на независимите частици (4.46). В работа [249] са дефинирани локализирани вълнови функции в приближение на средното поле  $\{\varphi'_{ns}\}$  като линейна комбинация от  $\{\varphi_{ns}\}$ :



Фигура 4.4: Естественни орбитали  $\{r\psi\}$  (пътна линия) и едночастични *Хартри-Фокови* вълнови функции  $\{r\varphi\}$  (пунктирна линия) ( в  $\text{fm}^{-1/2}$ ) за ядрото  $^{16}\text{O}$  в координатното пространство. Дадени са и едночастичните енергии на съответните състояния.



Фигура 4.5: Естественни орбитали  $|\psi r|^2$  за състоянията  $1s$  и  $2s$  в ядрото  $^{40}\text{Ca}$  (пълтна линия), сравнени със съответните едночастични *Хартри-Фокови* вълнови функции (MFA), обобщените естественни орбитали (NO) и локализираните MFA едночастични функции.

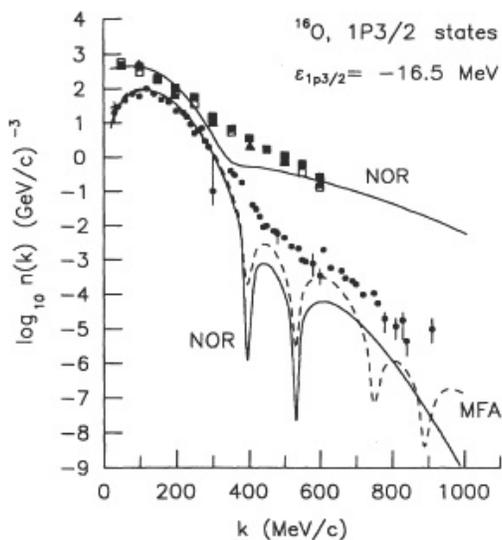
$$\begin{aligned}\varphi'_{1s}(r) &= \cos \theta \varphi_{1s}(r) + \sin \theta \varphi_{2s}(r) \\ \varphi'_{2s}(r) &= -\sin \theta \varphi_{1s}(r) + \cos \theta \varphi_{2s}(r)\end{aligned}\quad (4.47)$$

Ако поставим условието сумата от максимумите на локализираните вълнови функции да има максимум, за стойността на  $\theta$  получаваме  $\theta = 0.5847\text{rad}$ . В десния панел на фигура (4.5) са сравнени получените локализирани функции  $\varphi'_{1s}$  и  $\varphi'_{2s}$  с естествените орбитали. Очевидно, двата типа функции са много близки.

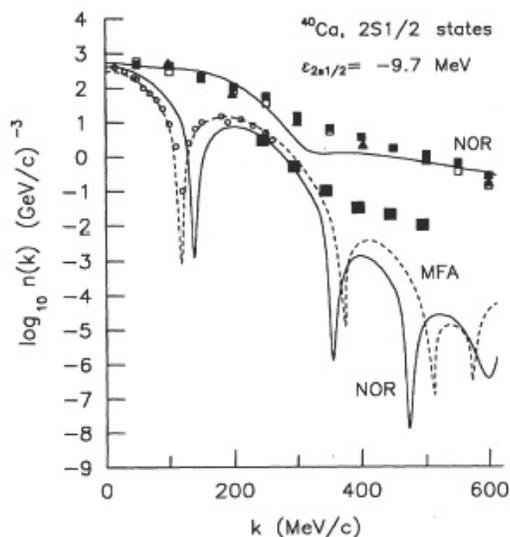
Сега да сравним естествените орбитали и вълновите функции в приближението на средно поле за дупчестите състояния в импулсното пространство. На фигура (4.6) е показано импулсното разпределение за нивото  $1p_{3/2}$  в ядрото  $^{16}\text{O}$ , пресметнато в представяне на естественни орбитали и в метода на *Хартри-Фок*. Разлика между двете криви се наблюдава при импулси  $k > 400 \text{ MeV/c}$  благодарение на логаритмичната скала на графиката. При това и двата типа разпределения възпроизвеждат добре ”експерименталните” данни. Определението ”експериментални” е написано в кавички, защото показаните резултати са екстрахирани по моделно-зависим начин от данни по разсейване на електрони от ядра на  $^4\text{He}$  и  $^{12}\text{C}$  [233, 237].

Подобни заключения могат да се направят и при сравняване на едночастичните импулсни разпределения за нивото  $2s_{1/2}$  в ядрото  $^{40}\text{Ca}$ , показани на фигура (4.7).

От представеното на фигура (4.6) и (4.7) следва, че докато едночастичните импулсни разпределения не притежават високоимпулсни компоненти, то те очевидно присъстват в пълното импулсно разпределение, при това както в експерименталните данни, така и в резултатите от настоящите разглеждания в рамките на ПНП



Фигура 4.6: Пълно импулсно разпределение (NOR) (горна пълтна линия) и едночастично импулсно разпределение за състоянието  $1p_{3/2}$  (NOR) (долна пълтна линия), сравнено с едночастично импулсно разпределение в метода на Хартри-Фок (MFA) (пунктирна линия) за ядрото  $^{16}\text{O}$ . Експериментални данни за пълното импулсно разпределение са показани с квадрати и триъгълници [233, 237], а за едночастичното импулсно разпределение за нивото  $1p_{3/2}$  - с пълтни кръгчета [247].



Фигура 4.7: Импулсни разпределения за ядрото  $^{40}\text{Ca}$  и нивото  $2s_{1/2}$ . Означенията са същите като на горната фигура с изключение на експерименталните данни за едночастичното състояние, тук означени кръгчета и големи квадратчета [66].

на метода на *Ястров*.

Нека сега обсъдим резултатите от отчитането на късодействащите корелации върху числата на запълване на едночастичните нива. За ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  те са представени в таблица (4.3).

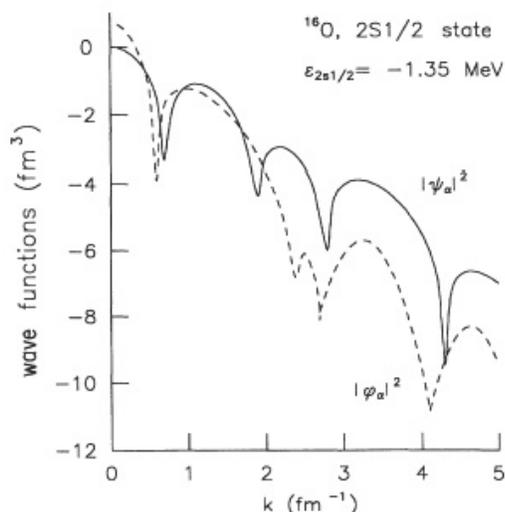
Да разгледаме първо дупчестите състояния. Това са нивата  $1s$  в  ${}^4\text{He}$ ,  $(1s, 1p)$  в  ${}^{16}\text{O}$  и  $(1s, 1p, 2s, 1d)$  в  ${}^{40}\text{Ca}$ . В модела на независимите частици числата на запълване на дупчестите състояния са равни на единица. След отчитане на късодействащите корелации стойностите им намаляват, но остават близки до единица. Възниква изпразване на морето на *Ферми*, равно съответно на 5.7%, 3.9% 6.3%, което означава, че 0.23, 0.63 и 2.53 нуклона са заселили състояния над *Ферми* нивото.

*Обобщавайки този кръг резултати, следва да се подчертае, че едночастичните характеристики на дупчестите състояния (вълнови функции, числа на запълване, импулсни разпределения) на корелирана нуклонна система, се описват задоволително в рамките на приближението на средно поле, при това както в координатното, така и в импулсното пространство.*

Да разгледаме сега естествените орбитали и числата на запълване на частичните състояния. Нека първо се върнем към фигура(4.4), на която е представено сравнение на естествените орбитали, получени от диагонализацията на корелираната едночастична матрица на плътността (4.9), и едночастичните *Хартри-Фокови* вълнови функции за ядрото  ${}^{16}\text{O}$  в координатното пространство. Очевидно двата типа вълнови функции се различават съществено. За разлика от дупчестите състояния, естествените орбитали на състоянията над нивото на *Ферми* са драстично локализирани в сравнение с едночастичните вълнови функции в модела на независимите частици. Последните имат ненулеви стойности в цялата област, задавана от граничните условия, в която се решава уравнението на *Шрьодингер*. Естествените орбитали имат същия брой нули, като *Хартри-Фоковите* вълнови функции, но са съсредоточени само в областта, в която локалната плътност на ядрото  $\rho_{LOA}(r)$  (4.13) е различна от нула. Тази особеност на естествените орбитали е характерна за всички частични състояния, независимо от квантовите им числа, и се наблюдава при всички разглеждани ядра.

Локализацията на естествените орбитали води до малки стойностите на средноквадратичните радиуси и високи компоненти в импулсното разпределение на частичните нива. На фигура (4.8) е представено сравнение на естествената орбитала и едночастичната *Хартри-Фокова* вълнова функция за състоянието  $2s_{1/2}$  в ядрото  ${}^{16}\text{O}$  в импулсното пространство. В областта на високите импулси  $k > 2 \text{ fm}^{-1}$  стойностите на  $|\psi|^2$  надвишават с почти два порядъка тези на  $|\varphi|^2$ .

Късодействащите корелации влияят съществено и върху числата на запълване



Фигура 4.8: Естествена орбитала  $|\psi|^2$  (плътна линия) и едночастична *Хартри-Фокова* вълнова функция  $|\varphi|^2$  (пунктирна линия) за състоянието  $2s_{1/2}$  в ядрото  $^{16}\text{O}$  в импулсното пространство.

на едночастичните състояния над *Ферми* нивото. Докато в приближение на средното поле числата на запълване на частичните нива са равни на нула по дефиниция, то вследствие отчитането на корелациите, както се вижда от таблица (4.3), техните стойности са ненулеви.

Тези две характерни особености на частичните нива в корелирани ядрени системи: 1) наличието на високоимпулсни компоненти на естествените орбитали и 2) ненулевите стойности на числата на запълване показват, че едночастичните състояния над *Ферми* нивото влияят съществено при формиране на високите ”опашки” на импулсното разпределение на нуклоните. Добра илюстрация на това заключение представлява фигура (4.3), на която са показани парциалните компоненти на импулсното разпределение на ядрата  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ . В областта на малките импулси  $k \geq 2\text{fm}^{-1}$  импулсното разпределение се формира от дупчестите състояния, докато при високи импулси приносът и на частичните нива е много съществен. Интересно е да се види, какво е значението на изпразването на морето на *Ферми* върху импулсното разпределение.  $S(\text{NO})$  на фигура (4.3) е означено импулсното разпределение, получено от естествените орбитали само на дупчестите състояния (ур. (4.30)). То съдържа корелации чрез естествените орбитали, но изпразването на морето на *Ферми* (4.32) в този случай е равно на нула. Като резултат, в така дефинираното ”некорелирано” импулсно разпределение не се наблюдават високоимпулсни компоненти. В същото време определеното по аналогичен начин разпределение на локалната плътност, показано на фигура (4.2), не се различава съществено от корелираното. Това може да се обясни с факта, че частичните естествени орбитали

Таблица 4.3: Числа на запълване на едночастичните нива с главно квантово число  $n$  и ъглов момент  $\ell$  за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ . Общото изпразване на морето на Ферми е отбелязано с  $TD$ .

| ${}^4\text{He}$<br>TD=5.72% |                | ${}^{16}\text{O}$<br>TD=3.92% |                | ${}^{40}\text{Ca}$<br>TD=6.29% |                |
|-----------------------------|----------------|-------------------------------|----------------|--------------------------------|----------------|
| $n\ell$                     | $\eta_{n\ell}$ | $n\ell$                       | $\eta_{n\ell}$ | $n\ell$                        | $\eta_{n\ell}$ |
| 1s                          | 0.9428         | 1s                            | 0.9495         | 1s                             | 0.9588         |
| (2s)                        | -0.0024        | (2s)                          | -0.0016        | 2s                             | 0.8899         |
| 3s                          | 0.0044         | 3s                            | 0.0038         | (3s)                           | -0.0097        |
| 4s                          | 0.0001         | 4s                            | 0.0013         | 4s                             | 0.0113         |
|                             |                |                               |                | 5s                             | 0.0030         |
| 1p                          | 0.0097         | 1p                            | 0.9646         | 1p                             | 0.9296         |
| 2p, 1f                      | 0.0007         | (2p)                          | -0.0018        | (2p)                           | -0.0054        |
|                             |                |                               |                | 3p                             | 0.0122         |
|                             |                |                               |                | 4p                             | 0.0041         |
|                             |                |                               |                | 5p                             | 0.0015         |
| 1d                          | 0.0027         | 1d                            | 0.0057         | 1d                             | 0.9468         |
| 2d, 1g                      | 0.0002         | 2d, 1g                        | 0.0017         | (2d)                           | -0.0063        |
|                             |                |                               |                | 3d                             | 0.0082         |
|                             |                |                               |                | 4d                             | 0.0028         |
|                             |                | 1f                            | 0.0035         | 1f                             | 0.0127         |
|                             |                | 2f, 1h                        | 0.0010         | 2f, 1h                         | 0.0050         |
|                             |                |                               |                | 3f, 2h, 1j                     | 0.0018         |
|                             |                |                               |                | 4d                             | 0.0028         |
|                             |                |                               |                | 1g                             | 0.0087         |
|                             |                |                               |                | 2g, 1i                         | 0.0031         |
|                             |                |                               |                | 3g, 2i, 1k                     | 0.0010         |

в координатното пространство са силно локализирани в обема на ядрото, техните стойности са сравними с тези на дупчестите орбитали, а числата им на запълване - почти два порядъка по-малки.

Трябва да отбележим, че подобни изводи за представянето на естествени орбитали са направени и при изследване на корелациите в други фермионни системи като капка от атоми на  ${}^3\text{He}$  [249] и в атома  ${}^4\text{He}$  [254].

Накрая ще отбележим, че изследването на влиянието на късодействащите корелации в представяне на естествени орбитали на едночастичната матрица на плътността води до следните **заключения**:

- Късодействащите корелации, така както са отчетени в приближението от нисък порядък в метода на *Ястров*, не оказват съществено влияние вър-

ху естествените орбитали на дупчестите състояния. Те са много близки до едночастичните вълнови функции в метода на *Хартри-Фок* както в координатното, така и в импулсното пространство. Числата на запълване на тези нива са близки, но все пак по-малки от единица. Това води до изпразване на морето на *Ферми* от порядъка на няколко процента за разглежданите ядра.

- Естествените орбитали на частичните нива са силно локализирани в обема на ядрото, за разлика от *Хартри-Фок*овите едночастични вълнови функции. Те имат високоимпулсни компоненти и числа на запълване, различни от нула.
- Последните две характеристики на частичните нива разкриват механизма на формиране на високите ”опашки” на пълното импулсно разпределение на ядрата. Те почти изцяло се дължат на заселването на състояния над *Ферми* нивото.

### 4.2.3 *A*-представимост на едночастичната матрица на плътността

Разглеждайки таблица (4.3) вниманието на читателя неминуемо е било привлечено от нефизичните отрицателни стойности на числата на запълване на някои нива. Този факт се наблюдава във всички разглеждани ядра за първите частични състояния с мултиполност  $\ell$ , която е характерна и за дупчестите състояния. За ядрото  ${}^4\text{He}$  това е  $2s$  нивото, за  ${}^{16}\text{O}$  –  $2s$  и  $2p$ , за  ${}^{40}\text{Ca}$  –  $3s$ ,  $2p$  и  $2d$ .

Наличието на отрицателни собствени стойности на едночастичната матрица на плътността означава нарушение на така наречената *A*-представимост [255]. С това понятие се обозначава наборът от необходими и достатъчни условия за едночастична, двучастична и най-общо казано  $n$ -частична матрица на плътността на *A*-частична фермионна система да бъде получена от пълна *A*-частична матрица на плътността (ensemble *A*-representability) или от *A*-частична вълнова функция (*A*-representability by pure states).

Задачата за *A*-представимост е решена за едночастичната матрица на плътността. Доказано е, че условията (4.24) и (4.26) са необходими и достатъчни за *A*-представимост по ансамбъл на фермионна система [256], и необходими, но не и достатъчни за *A*-представимост по състояния [257].

В случая на двучастична матрица на плътността условията за *A*-представимост се записват като безкрайна система от неравенства [257], а в общия случай проблемът не е решен [255].

От таблица (4.3) се вижда, че едночастичната матрица на плътността в Приближението от нисък порядък в метода на *Ястров*  $\rho_{LOA}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  (4.9) не удовлетворява

условието (4.24) за  $A$ -представимост. Въпреки че нарушението е малко, то оказва съществено влияние при кластерните разложения, дискутирани в част (3.4.3). Проблем представлява и фактът, че поради нарушаването на  $A$ -представимостта не може да се каже нищо за вероятността за заселване на състоянията с отрицателни числа на запълване.

Сега да се върнем малко назад. Когато в част (2.3) дискутирахме подходите за отчитане на корелациите в рамките на средното поле, споменахме че са правени опити за построяване на корелирана едночастична матрица на плътността във вида:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}') , \quad (4.48)$$

включваща както дупчести, така и някои частични състояния за дадено ядро. При това стойностите на числата на запълване  $\{n_i\}$  са определени експериментално, а едночастичните вълнови функции  $\{\psi(\mathbf{r})\}$  са получени в метода на независимите частици [60, 250, 251]. Това приближение е в съгласие с представянето на естествените орбитали (4.23), но то притежава един съществен недостатък. В предната част показахме, че естествените орбитали на дупчестите състояния са много близки до едночастичните вълнови функции, получени в метода на средното поле, но естествените орбитали на частичните нива са локализирани в обема на ядрото, за разлика от вълновите функции  $\{\psi(\mathbf{r})\}$ . Следователно не може да се очаква, че матрицата (4.48) ще отчита коректно нуклон-нуклонните корелации.

В работа [A2] е предложен метод за построяване на корелирана едночастична матрица на плътността основана на  $\rho_{LOA}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , която удовлетворява условията за  $A$ -представимост.

Нека представим  $\rho_{LOA}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  (4.9) като сума от два члена:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (4.49)$$

Първият член  $\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  съдържа частите  $A$ ,  $B$  и  $D$ , а вторият - частта  $C$  от израза (4.9). Ако разгледаме поотделно приноса на отделните части, например към импулсното разпределение на нуклоните, ще се види, че първата част почти изцяло описва разпределението до  $k < 2\text{fm}^{-1}$ , докато втората част отчита влиянието на късодействащите корелации и възпроизвежда високоимпулсните опашки на пълното импулсно разпределение. Нека сега диагонализираме поотделно двете части на едночастична матрица на плътността:

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{\alpha} n_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}') & (4.50) \\
&= \sum_{\alpha} v_{\alpha} \varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}') + \sum_{\alpha} \eta_{\alpha} \chi_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \chi_{\alpha}(\mathbf{r}') .
\end{aligned}$$

Резултатите за числата на запълване  $\{n_{\alpha}\}$ ,  $\{v_{\alpha}\}$  и  $\{\eta_{\alpha}\}$  за ядрото  $^{40}\text{Ca}$  са показани в таблица (4.4). От нея се вижда, че отрицателните числа на запълване  $n_{\alpha}$  са свързани със състоянията  $\varphi_{\alpha}$  (4.50), на които съответстват отрицателни собствени стойности  $v_{\alpha}$ .

Таблица 4.4: Числа на запълване на едночастичните нива за ядрото  $^{40}\text{Ca}$ . Показани са стойностите на величините  $\{v_{\alpha}\}$  и  $\{\eta_{\alpha}\}$  в ур.(4.50), както и на  $\{\tilde{\eta}_{\alpha}\}$ , с които се възстановява  $A$ -представимостта на едночастичната матрица.

| nl | $n_{\alpha}$ | $v_{\alpha}$ | $\eta_{\alpha}$ | $\tilde{\eta}_{\alpha}$ |
|----|--------------|--------------|-----------------|-------------------------|
| 1s | 0.8899       | 0.8569       | 0.0195          | 0.8899                  |
| 2s | 0.9588       | 0.9517       | 0.0359          | 0.9579                  |
| 3s | -0.0097      | -0.0220      | 0.0082          | 0.0187                  |
| 4s | 0.0113       | -0.0001      | 0.0030          | 0.0060                  |
| 1p | 0.9296       | 0.9213       | 0.0244          | 0.9376                  |
| 2p | -0.0055      | -0.0158      | 0.0127          | 0.0168                  |
| 3p | 0.0121       | 0.0000       | 0.0050          | 0.0073                  |
| 4p | 0.0041       | 0.0000       | 0.0017          | 0.0028                  |
| 1d | 0.9468       | 0.9377       | 0.0177          | 0.9463                  |
| 2d | -0.0063      | -0.0156      | 0.0079          | 0.0128                  |
| 3d | 0.0082       | 0.0000       | 0.0030          | 0.0055                  |
| 4d | 0.0028       | 0.0000       | 0.0010          | 0.0019                  |
| 1f | 0.0127       | 0.0000       | 0.0127          | 0.0127                  |
| 2f | 0.0050       | 0.0000       | 0.0500          | 0.0500                  |
| 3f | 0.0018       | 0.0000       | 0.0018          | 0.018                   |
| 4f | 0.0006       | 0.0000       | 0.0006          | 0.0006                  |

Декомпозицията (4.50) дава възможност за възстановяване на  $A$ -представимостта на корелираната едночастична матрица на плътността. Тук ще представим един от възможните начини това да бъде направено. От първата сума трябва да бъдат отстранени състоянията с отрицателни числа на запълване и резултатът да се пренормира. Така получената едночастична матрица  $\tilde{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  е  $A$ -представима. Нейните числа на запълване  $\{\tilde{n}_{\alpha}\}$  са представени също в таблица (4.4). Те не се отличават съществено от тези на изходната матрица, защото и

нарушаването на  $A$ -представимостта е малко.

Наред с демонстрираните дотук предимства на представянето на естествените орбитали, то има един съществен "недостатък" - естествените орбитали са математически обекти и не могат да се свържат директно с физическите характеристики на квантовите системи. Те не могат да се получат като решение на уравнение на Шрьодингер при зададен потенциал. Ако такъв потенциал съществуваше, то естествените орбитали биха удовлетворявали равенството:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\alpha(\mathbf{r}) + U_\psi(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \varepsilon_\alpha\psi_\alpha(\mathbf{r}) \quad (4.51)$$

Като имаме предвид сферичната симетрия на разлежданите системи и вида на естествените орбитали (4.37), за потенциала  $U_\psi(\mathbf{r})$  получаваме следния израз:

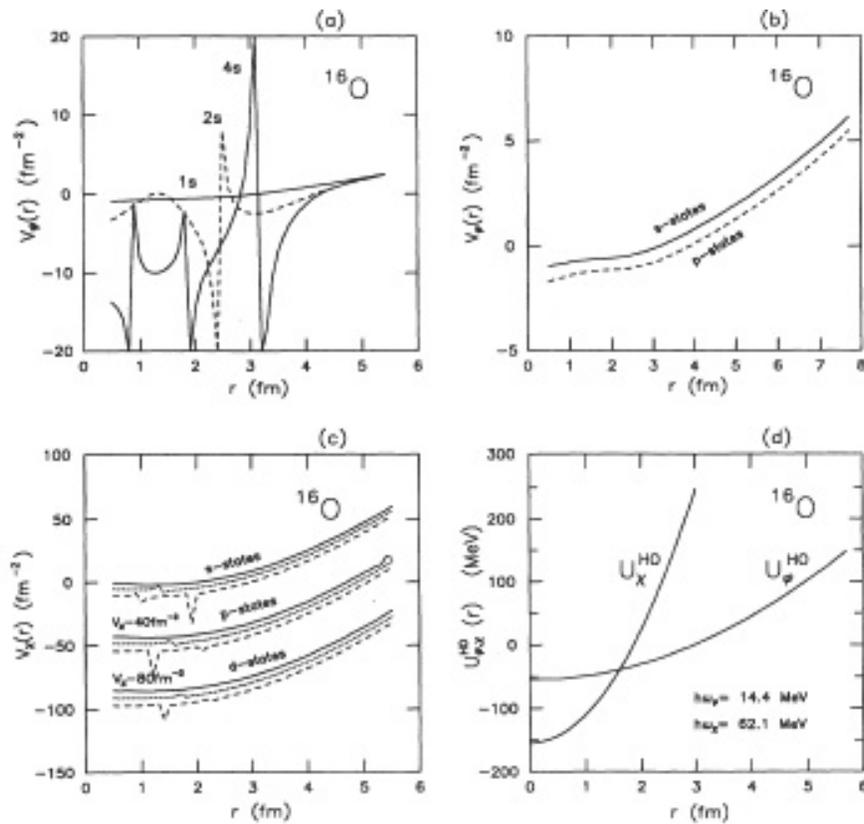
$$U_\psi(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{[r\psi_\alpha(r)]'''}{[r\psi_\alpha(r)]} - \frac{\ell_\alpha(\ell_\alpha + 1)}{r^2} \right] + \varepsilon_\alpha \quad (4.52)$$

След като диференцираме числено естествените орбитали, които сме намерили след диагонализация на корелираната едночастична матрица на плътността, може да пресметнем функциите  $U_\psi(r)$  (4.52). Резултати за величините

$$V_\psi(r) = \frac{2m}{\hbar^2}[U_\psi(r) - \varepsilon_\alpha] \quad (4.53)$$

са показани на фигура (4.9а) за първите  $s$  - състояния за ядрото  $^{16}\text{O}$ . Очевидно е, че естествените орбитали  $\psi_\alpha$  не могат да се свържат с физически приемливи едночастични потенциали. Не е такова положението с функциите  $\{\varphi_\alpha\}$  и  $\{\chi_\alpha\}$ . Съответните криви  $V_\varphi(r)$  и  $V_\chi(r)$ , получени от израза (4.53), са показани на фигура (4.9b) и (4.9c). С точност до адитивна константа  $\varepsilon_\alpha$  те са равни на съответните едночастични потенциали  $U_\varphi(r)$  и  $U_\chi(r)$ . Апроксимирани с хармоничен осцилатор, те са представени на (4.9d). Оказва се, че на потенциала  $U_\varphi(r)$  съответства честота  $\hbar\omega \cong 14.4 \text{ MeV}$ , която е от порядъка на използваните стойности в приближението на средното поле. Честотата на втория потенциал е значително по-висока  $\hbar\omega \cong 62.14 \text{ MeV}$ . Следователно въз основа на декомпозицията (4.50) може да се изработи процедура за получаване на корелирана едночастична матрица на плътността. Първо се решава уравнение (4.51) с потенциал, получен в модела на независимите частици, за функциите  $\{\varphi(r)\}$ . В първия член в ур. (4.50) ще се сумира само по дупчестите състояния, като съответните числа на запълване са или равни на единица, или стойностите им са определени експериментално. Във втория член ще участват както дупчести, така и частични нива, вълновите функции  $\{\chi(r)\}$  ще бъдат получени като решения на ур. (4.51) с потенциал от типа на  $U_\chi(r)$ , който ще отчита високоимпулсните компоненти в многочастичната вълнова функция за

основното състояние на системата. Числата на запълване във втората сума трябва да бъдат определени от допълнителни съображения.



Фигура 4.9: Едночастични потенциали, свързани с естествените орбитали от израза (4.50) за декомпозиция на корелираната едночастична матрица на плътността.

В края на тази част могат да се направят следните **изводи**:

- Приближението от нисък порядък в метода на *Ястров* нарушава  $A$ -представимостта на едночастичната матрица на плътността;
- изразът за корелираната едночастична матрица на плътността може да се представи като сума от две части: първата определя поведението на едночастичните характеристики на ядрата, чувствителни към ниски импулси; чрез втората се отчита влиянието на късодействащите корелации, най-вече в областта на високите импулси;
- предложената декомпозиция на едночастичната матрица на плътността дава възможност за възстановяване на  $A$ -представимостта;
- показано е, че докато естествените орбитали, съответстващи на корелираната матрица, не могат да бъдат получени като решения на уравнението на *Шрьо-*

дингер с определен потенциал, то това твърдение е вярно за двете части от декомпозицията на матрицата на плътността, разглеждани поотделно;

#### 4.2.4 Метод за конструиране на корелирана едночастична матрица на плътността

Както беше споменато по-рано, многократно са правени опити за получаване на едночастична матрица на плътността, излизаща извън рамките на метода на независимите частици и отчитаща нуклон-нуклонните корелации [250, 251]. В работата [250] например е разработен феноменологичен подход, основаващ се на израза (4.50). За числата на запълване на дупчестите орбитали за използвани както стойностите  $n_\alpha = 1$ , характерни за приближението на средното поле, така и  $n_\alpha < 1$ , означаващи частично заселване на състоянията под Ферми нивото. Едночастичните вълнови функции са представени чрез разложение в осцилаторен базис. Коефициентите на разложение и числата на запълване са получени в метода на най-малките квадрати от сравнението на теоретичните резултати и експерименталните данни за средноквадратичния радиус на нуклонната система. Разгледани са ядрата  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ .

Основният недостатък на едночастичната матрица на плътността, получена в работа [250] е, че при получаване на нейните параметри всъщност участват само диагоналните и матрични елементи в координатното пространство, които определят локалната плътност и съответно средноквадратичния радиус на системата. В предните части на дисертацията беше подчертано, че за да описва коректно експерименталните данни за едночастичните характеристики на ядрата както в координатното, така и в импулсното пространство, е необходимо реалистично описание както на диагоналните, така и на недиагоналните елементи на едночастичната матрица на плътността.

За изследване точно на този елемент от феноменологичната процедура по конструиране на реалистична едночастична матрица на плътността в работа [A9] е разработен подход, който отчита едновременно свойствата както на локалната плътност, така и на импулсното разпределение. Разгледани са двойномагическите ядрата  $^4\text{He}$ ,  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ .

Едночастичната матрица на плътността се представя чрез формула (4.48), като се предполага сферична симетрия на системата. Тогава едночастичните вълнови функции са произведение от сферични хармоники  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  и радиални функции  $R_{n\ell}(r)$ . Следвайки метода, предложен в работа [250], разлагаме  $R_{n\ell}(r)$  по ортогоналните базисни функции  $\varphi_{i\ell}$ , като разглеждаме само първите три члена:

$$R_\alpha(r) = \sum_{i=1}^3 C_i^\alpha \varphi_{i\ell}(r), \quad \text{където } \alpha \equiv \{n\ell\} \quad (4.54)$$

За да удовлетворяват автоматично условията за ортогоналност, коефициентите от горното разложение  $C_i^\alpha$  се предефинират чрез полярните параметри  $\theta_\alpha$  и  $\varphi_\alpha$ :

$$\begin{aligned} C_1^\alpha &= \cos \theta_\alpha \\ C_2^\alpha &= \sin \theta_\alpha \cos \varphi_\alpha \\ C_3^\alpha &= \sin \theta_\alpha \sin \varphi_\alpha \end{aligned} \quad (4.55)$$

От условието за нормираност броят на коефициентите намалява с единица.

Така дефинирана, едночастичната матрица на плътността задава локална плътност във вида:

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n\ell} 4(2\ell + 1) \alpha_{n\ell} |R_{n\ell}(r)|^2, \quad (4.56)$$

като числата на запълване  $\{\eta_{n\ell}\}$  изпълняват равенството:

$$\sum_{n\ell} 4(2\ell + 1) \alpha_{n\ell} = A \quad (4.57)$$

Аналогично се изразява и импулсното разпределение:

$$n(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n\ell} 4(2\ell + 1) \alpha_{n\ell} |\tilde{R}_{n\ell}(k)|^2, \quad \int n(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = A. \quad (4.58)$$

Радиалните вълнови функции в импулсното пространство  $\{\tilde{R}_{n\ell}(k)\}$  зависят от Фурие трансформираниите базисни функции:

$$\tilde{R}_{n\ell}(k) = \sum_{i=1}^3 C_i^\alpha \tilde{\varphi}_{i\ell}(k). \quad (4.59)$$

Поради малкия брой членове в разложението на едночастичните вълнови функции ( $i = 1, 3$ ), търсените резултати зависят съществено от вида на базисните функции. Тук ще използваме три набора функции – собствените функции на едночастичното уравнение на Шрьодингер със следните потенциали:

- хармоничен осцилатор (НО):

$$V(r) = -V_0 + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2, \quad V_0 > 0 \quad (4.60)$$

- правоъгълна яма (SW):

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r \leq x, \\ \infty, & r > x \end{cases} \quad V_0 > 0 \quad (4.61)$$

- модифициран хармоничен осцилатор (МНО):

$$V(r) = -V_0 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + \frac{B}{r^2}, \quad V_0 > 0, \quad B \geq 0 \quad (4.62)$$

Модифицираният хармоничен осцилатор има поведението на хармоничен осцилатор за големи стойности на  $r$ . При  $r \rightarrow 0$  доминира вторият член в израза (4.62), който симулира силно отблъскване на нуклоните на малки разстояния. Този потенциал е предложен в работите [258, 259] и използван за изследване на средноквадратичните радиуси и импулсните разпределения в леки ядра [260, 261]. Съществено преимущество на този потенциал представлява фактът, че съответните едночастични вълнови функции могат да се изразят аналитично.

В представяните изследвания в израза (4.56) за едночастичната матрица на плътността се включват всички дупчести състояния за съответното ядро и някои частични нива. В конкретния случай за ядрата  ${}^4\text{He}$  и  ${}^{16}\text{O}$  това са състоянията  $\{1s, 1p, 1d, 2s\}$ , а за  ${}^{40}\text{Ca}$  –  $\{1s, 1p, 1d, 2s, 1p, 1f, 1g\}$

Така определена, корелираната едночастична матрица на плътността зависи от числата на запълване на отчитаните нива  $\{\eta_\alpha\}$ , коефициентите  $\{\theta_\alpha\}$  и  $\{\varphi_\alpha\}$  на разложението на едночастичните вълнови функции и от параметрите на базисните функции. Те ще бъдат определени в рамките на минимизационна процедура, сравняваща получените резултати и експерименталните данни за локалната плътност и импулсното разпределение чрез функциите  $\chi_D^2$  и  $\chi_M^2$ :

$$\chi_D^2 = \sum_q \left[ \frac{\rho_q^{exp}(r) - \rho_q^{th}(r)}{\rho_q^{exp}(r)} \right]^2 \quad (4.63)$$

и

$$\chi_M^2 = \sum_q \left[ \frac{\log n_q^{exp}(k) - \log n_q^{th}(k)}{\log n_q^{exp}(k)} \right]^2. \quad (4.64)$$

Експерименталните данни за локалната плътност са взети от работи [244, 262–264], а за импулсното разпределение за  ${}^4\text{He}$  са използвани данните от [235]. Поради липса на експериментални данни за ядрата  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  в израза (4.64) са използвани стойностите на импулсното разпределение, получени в Приближение от нисък порядък в метода на *Ястров* [A2]. Всъщност,  $\chi_M^2$  се пресмята не за самото импулсно

разпределение, а за функцията  $\log n(k)$ , защото тя има стойности от един същи порядък в целия интервал на импулса, който се разглежда. Това дава възможност в минимизационната процедура да участват с приблизително еднаква тежест всички точки  $\{q\}$ . Величината  $F$ :

$$F = \sqrt{\chi_D^2} + \sqrt{\chi_M^2} \quad (4.65)$$

се минимизира по 12 параметъра за ядрата  ${}^4\text{He}$  и  ${}^{16}\text{O}$  (13 в случая на модифициран хармоничен осцилатор) и 20 за ядрото  ${}^{40}\text{Ca}$ . Качеството на минимизационната процедура е илюстрирано от таблица (4.65). От нея се вижда, че най-малка стойност за  $F$  и за трите ядра се получава, когато едночастичните вълнови функции се разлагат в базис на собствените функции на потенциала на правоъгълна яма (SW). При това  $\chi_D^2/q$  и  $\chi_M^2/q$  имат стойности от един и същи порядък. Това означава, че и локалната плътност, и импулсното разпределение се описват еднакво добре чрез разглежданото приближение на едночастичната матрица на плътността. Не такъв е случаят с (НО)- и (МНО)-резултатите. За ядрото  ${}^{16}\text{O}$ , например,  $F_{\text{НО}} \sim F_{\text{МНО}}$ , но разликата между  $\chi_D^2/q$  и  $\chi_M^2/q$  е почти два порядъка. т.е. локалната плътност и импулсното разпределение не могат да се опишат едновременно.

Таблица 4.5: Стойности на величините  $\chi_D^2$ , ур. (4.63), и  $\chi_M^2$ , ур. (4.64), нормирани на броя на точките  $q$ , участващи в минимизационната процедура, и  $F$  за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ .

| ядро               | потенциал | $\chi_M^2/q$ | $\chi_D^2/q$ | F     |
|--------------------|-----------|--------------|--------------|-------|
| ${}^4\text{He}$    | НО        | 0.0040       | 0.0379       | 1.204 |
|                    | МНО       | 0.0031       | 0.0260       | 1.027 |
|                    | SW        | 0.0068       | 0.0036       | 0.931 |
| ${}^{16}\text{O}$  | НО        | 0.0098       | 1.2458       | 6.239 |
|                    | МНО       | 0.0019       | 0.1271       | 2.104 |
|                    | SW        | 0.0199       | 0.0179       | 1.888 |
| ${}^{40}\text{Ca}$ | НО        | 0.1805       | 0.6678       | 8.147 |
|                    | SW        | 0.0168       | 0.0352       | 2.190 |

Тук ще отворим една скоба и ще отбележим, че минимумът на величината  $F$  (4.65) не е единственият възможен критерий за качеството на фита на локалната плътност и на импулсното разпределение.

В квантовата теория на информацията се дефинират понятията ентропия в координатното пространство  $S_r$  и ентропия в импулсното пространство  $S_k$ :

$$S_r = - \int \rho(\mathbf{r}) \ln \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad , \quad (4.66)$$

$$S_k = - \int n(\mathbf{k}) \ln n(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (4.67)$$

Установено е, че за електронни системи сумата  $S_r + S_k$  има максимална стойност при най-добро описание на разпределенията  $\rho(\mathbf{r})$  и  $n(\mathbf{k})$  [265, 266]. Верността на това твърдение за ядрени системи е проверена в работа [A16].

Таблица 4.6: Стойности на величините  $S_r$ ,  $S_k$  и  $S_r + S_k$  за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ , получени за три набора базисни функции: хармоничен осцилатор (НО), модифициран хармоничен осцилатор (МНО) и правоъгълна яма (SW).

| ядро               | потенциал | $S_r$ | $S_k$ | $S_r + S_k$ |
|--------------------|-----------|-------|-------|-------------|
| ${}^4\text{He}$    | НО        | 7.27  | 2.06  | 9.33        |
|                    | МНО       | 7.10  | 2.28  | 9.38        |
|                    | SW        | 6.91  | 4.26  | 11.17       |
| ${}^{16}\text{O}$  | НО        | 27.96 | 3.69  | 31.65       |
|                    | МНО       | 28.02 | 1.20  | 29.22       |
|                    | SW        | 27.91 | 2.80  | 30.71       |
| ${}^{40}\text{Ca}$ | НО        | 66.22 | 7.82  | 74.04       |
|                    | SW        | 65.67 | -5.81 | 59.86       |

В таблица (4.6) се показани стойностите на ентропията съответно в координатното и в импулсното пространство и тяхната сума. В съгласие с критерия за максимум на ентропията, най-добрият фит за  ${}^4\text{He}$  е получен, когато за пресмятане на локалната плътност и на импулсното разпределение са използвани собствените функции на уравнението на *Шрьодингер* с потенциал, описван с правоъгълна яма. Резултатите за ядрата  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  показват, че максимум на ентропията се достига при използване на базиса на хармоничен осцилатор, което не отговаря на най-добрия фит на разпределенията. Налага се изводът, че критерият за максимум на така дефинираната ентропия на системата не гарантира най-реалистично описание на експерименталните данни за едночастичните разпределения в координатното и в импулсното пространство.

Резултатите от минимизационната процедура - числата на запълване  $\{\alpha_{n\ell}\}$  в приближения израз за едночастичната матрица (4.56), коефициенти на разложение  $C_i^{n\ell}$   $\{i = 1, 2, 3\}$  и параметри на базисните вълнови функции за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  са представени в таблици (4.7), (4.8) и (4.9). За сравнение са приведени и естествените числа на запълване  $\{n_{n\ell}\}$  на едночастичната матрица на плътността в Приближението от нисък порядък в метода на *Ястров*, която може да се разглежда като "точна граница" на разглежданата матрица. Най-добро съгласие с "точните" резултати за числата на запълване и за стойността на изпраждането на

Таблица 4.7: Числа на запълване на едночастичните нива  $\alpha_{n\ell}$ , коефициенти на разложение  $C_i^{n\ell}$   $\{i = 1, 2, 3\}$ , параметри на едночастичните вълнови функции и числа на запълване  $n_{n\ell}$  от таблица (4.3) за ядрото  ${}^4\text{He}$ .

|         | НО<br>$\alpha = 0.648 \text{ fm}^{-1}$ |               | МНО<br>$\alpha = 0.687 \text{ fm}^{-1}$<br>$b = 0.511$ |               | SW<br>$x = 3.70 \text{ fm}$ |               |                |
|---------|--|---------------|--|---------------|-----------------------------|---------------|----------------|
| $n\ell$ | $\alpha_{n\ell}$                       | $C_i^{n\ell}$ | $\alpha_{n\ell}$                                       | $C_i^{n\ell}$ | $\alpha_{n\ell}$            | $C_i^{n\ell}$ | $\eta_{n\ell}$ |
| 1s      | 0.8138                                 | 0.9806        | 0.8679   | 0.9699        | 0.8873                      | 0.9755        | 0.9428         |
|         |  | 0.1937        |  | 0.2435        |                             | -0.2191       |                |
|         |  | -0.0308       |  | 0.0001        |                             | 0.0182        |                |
| 1p      | 0.0392                                 | -0.5893       | 0.0145   | -0.9643       | 0.0063                      | 0.1411        | 0.0097         |
|         |  | 0.5011        |  | -0.1136       |                             | -0.9576       |                |
|         |  | -0.6337       |  | 0.2391        |                             | 0.2513        |                |
| 1d      | 0.0033                                 | 0.1848        | 0.0064   | -0.3959       | 0.0187                      | -0.3405       | 0.0027         |
|         |  | 0.1256        |  | 0.1115        |                             | 0.5185        |                |
|         |  | -0.9747       |  | 0.9115        |                             | -0.7843       |                |
| 2s      | 0.0521                                 | 0.1319        | 0.0566   | -0.1974       | 0.0002                      | -0.1848       | 0.0002         |
|         |  | -0.7674       |  | 0.7864        |                             | -0.7222       |                |
|         |  | -0.6275       |  | 0.5854        |                             | 0.6079        |                |

Таблица 4.8: Числа на запълване на едночастичните нива  $\alpha_{n\ell}$ , коефициенти на разложение  $C_i^{n\ell}$   $\{i = 1, 2, 3\}$ , параметри на едночастичните вълнови функции и числа на запълване  $n_{n\ell}$  от таблица (4.3) за ядрото  ${}^{16}\text{O}$ .

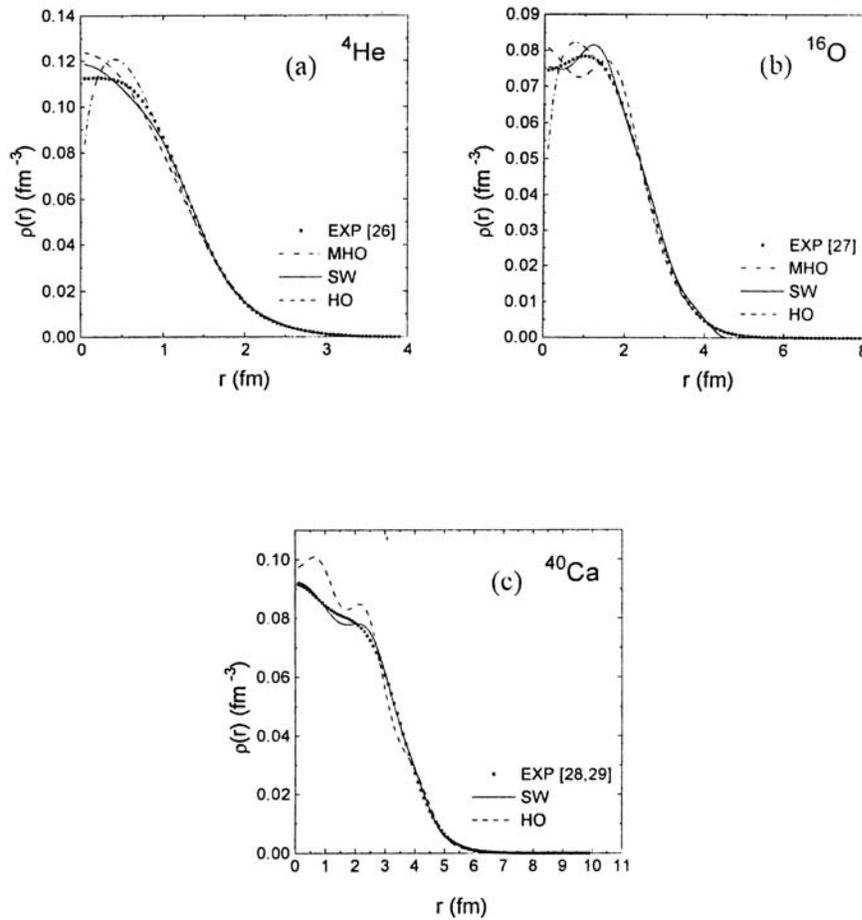
|         | НО<br>$\alpha = 0.604 \text{ fm}^{-1}$ |               | МНО<br>$\alpha = 0.582 \text{ fm}^{-1}$<br>$b = 0.731$ |               | SW<br>$x = 4.60 \text{ fm}$ |               |             |
|---------|--|---------------|--|---------------|-----------------------------|---------------|-------------|
| $n\ell$ | $\alpha_{n\ell}$                       | $C_i^{n\ell}$ | $\alpha_{n\ell}$                                       | $C_i^{n\ell}$ | $\alpha_{n\ell}$            | $C_i^{n\ell}$ | $n_{n\ell}$ |
| 1s      | 0.8002                                 | 0.9174        | 0.9359   | 0.9576        | 0.9940                      | 0.9967        | 0.9495      |
|         |  | -0.2686       |  | -0.0740       |                             | -0.0087       |             |
|         |  | 0.2936        |  | 0.2783        |                             | -0.0808       |             |
| 1p      | 0.8278                                 | 0.9959        | 0.8000   | -0.9928       | 0.8370                      | 0.9919        | 0.9646      |
|         |  | 0.0008        |  | -0.0035       |                             | -0.1251       |             |
|         |  | -0.0899       |  | 0.1194        |                             | 0.0214        |             |
| 1d      | 0.1249                                 | 0.2225        | 0.0973   | 0.5289        | 0.0655                      | 0.4743        | 0.0057      |
|         |  | 0.8353        |  | 0.7562        |                             | 0.1129        |             |
|         |  | 0.5928        |  | 0.3651        |                             | 0.8731        |             |
| 2s      | 0.0920                                 | 0.1416        | 0.1774   | 0.0780        | 0.1672                      | -0.0315       | 0.0002      |
|         |  | -0.4582       |  | 0.9970        |                             | 0.8750        |             |
|         |  | -0.8767       |  | -0.0032       |                             | -0.4831       |             |

Таблица 4.9: Числа на запълване на едночастичните нива  $\alpha_{n\ell}$ , коефициенти на разложение  $C_i^{n\ell}$   $\{i = 1, 2, 3\}$ , параметри на едночастичните вълнови функции и числа на запълване  $n_{n\ell}$  от таблица (4.3) за ядрото  $^{40}\text{Ca}$ .

| $n\ell$ | HO<br>$\alpha = 0.627 \text{ fm}^{-1}$ |               | SW<br>$x = 6.40 \text{ fm}$ |               | $n_{n\ell}$ |
|---------|--|---------------|-----------------------------|---------------|-------------|
|         | $\alpha_{n\ell}$                       | $C_i^{n\ell}$ | $\alpha_{n\ell}$            | $C_i^{n\ell}$ |             |
| 1s      | 0.8027                                 | 0.5352        | 0.9227                      | -0.5092       | 0.8898      |
|         |  | 0.7972        |                             | 0.8385        |             |
|         |  | -0.2849       |                             | -0.1939       |             |
| 1p      | 0.8000                                 | 0.9733        | 0.8718                      | 0.9959        | 0.9376      |
|         |  | -0.5923       |                             | -0.5181       |             |
|         |  | 0.0746        |                             | 0.0560        |             |
| 1d      | 0.8005                                 | 0.8023        | 0.8013                      | 0.8548        | 0.9463      |
|         |  | -0.5923       |                             | -0.5181       |             |
|         |  | 0.0746        |                             | 0.0335        |             |
| 2s      | 0.8020                                 | -0.8440       | 0.9558                      | 0.8517        | 0.9579      |
|         |  | 0.5261        |                             | 0.4586        |             |
|         |  | -0.1045       |                             | -0.2536       |             |
| 2p      | 0.1005                                 | 0.2179        | 0.1689                      | -0.0203       | 0.0168      |
|         |  | 0.5283        |                             | -0.7750       |             |
|         |  | 0.8201        |                             | 0.6317        |             |
| 1f      | 0.0000002                              | 0.9913        | 0.0465                      | 0.2265        | 0.0127      |
|         |  | -0.1106       |                             | 0.2341        |             |
|         |  | -0.0717       |                             | 0.9454        |             |
| 1g      | 0.1879                                 | 0.0453        | 0.0742                      | 0.0598        | 0.0087      |
|         |  | 0.5765        |                             | -0.2858       |             |
|         |  | 0.8158        |                             | 0.9565        |             |

морето на *Ферми* има в случая на правоъгълна яма.

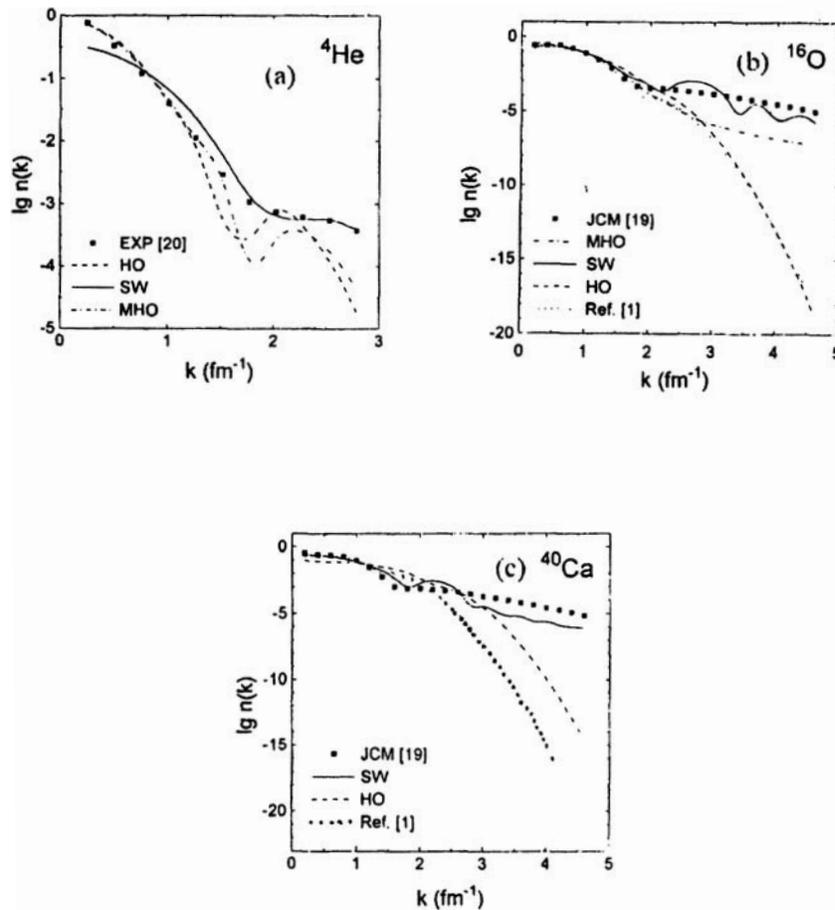
С определянето на числата на запълване на едночастичните нива  $\alpha_{n\ell}$ , коефициенти на разложение  $C_i^{n\ell}\{i = 1, 2, 3\}$  и параметри на едночастичните вълнови функции локалната плътност (4.56) и импулсното разпределение (4.58) за разглежданите ядра са напълно определени. Кривите, получени с различни базисни функции, са сравнени на фигура (4.10) и (4.11). Най-добро описание като цяло на експерименталните данни [242, 244, 264] и съответните референтни стойности [A2] се получава, както трябва да се очаква, в случая на правоъгълна яма. Все пак за локалната плътност (фигура (4.10)), особено в областта на ядрената повърхност, всички моделни резултати дават задоволителни резултати. Аналогично твърдение за импулсното разпределение не е вярно. От показаното на фигура (4.11) се вижда, че единствено в случая на правоъгълна яма приближеното разпределение



Фигура 4.10: Локални плътности за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ , получени с различни базисни функции. Нормировката на разпределенията е  $\int \rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} = A/2$ .

за всички ядра има високоимпулсни компоненти. Както може да се предположи, с базисните функции на хармоничен осцилатор се описва задоволително локалната плътност, но не и импулсното разпределение. По-добро описание на импулсното разпределение при стойности на импулса  $k > 2 \text{ fm}^{-1}$  за ядрата  ${}^4\text{He}$  и  ${}^{16}\text{O}$  се получава, когато се използва модифицираният хармоничен осцилатор, защото той отчита ефективно късодействащите корелации, водещи до високоимпулсни компоненти.

Тук трябва да се подчертае, че използването само на първите три члена от разложението на естествените орбитали във формулите (4.56) и (4.58) е продиктувано от желанието да се сравнят при същите условия резултатите от представените изследвания и тези от работа [250]. Ако в израза (4.54) се използва пълният набор от базисни функции, представянето на естествените орбитали ще бъде точно. Това, разбира се, не е възможно, затова трябва да се търси компромис между необходимостта да се използва голям брой базисни вектори, за да се намали влиянието на вида на базиса върху резултатите, и органиченията върху броя на параметрите,



Фигура 4.11: Импулсни разпределения за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ , получени с различни базисни функции. Нормировката на разпределенията е  $\int n(\mathbf{k})d\mathbf{k} = 1$ .

по които се минимизира функцията  $F$  (4.65).

**Обобщавайки резултатите**, изложени в тази част, ще отбележим, че е разработен феноменологичен метод за получаване на едночастичната матрица на плътността. За разлика от подхода, предложен в работа [250], той дава възможност за реалистично описание както на диагоналните, така и на недиагоналните матрични елементи, отчитайки късодействащите нуклон-нуклонни корелации. Като следствие се получава добро описание както на локалната плътност, така и на импулсното разпределение на ядрата за широк диапазон от импулси.

#### 4.2.5 Отчитане на късодействащите корелации в модела на независимите частици

В части (4.2) и (4.2.4) разгледахме подробно два метода за отчитане на късодействащите корелации, които излизат извън приближението на средното поле. В тази

част ще направим още една стъпка към опростяване на процедурата по отчитане на късодействащите корелации. В модела на независимите частици ще апроксимираме средното поле, в което се движат нуклоните, с феноменологичен потенциал, отчитащ експлицитно отблъскването между нуклоните на малки разстояния. Разгледаният в предишната част модифициран хармоничен осцилатор (4.62) клони към безкрайност в центъра на ядрото. По-реалистично е да се предположи, че при ( $r = 0$ ) стойността на потенциала е крайна (виж фигура (3.25)). Такова поведение има потенциалът на Морз [267]:

$$\begin{aligned} V(r) &= D \{ \exp[-2a(r - r_0)] - \exp[-a(r - r_0)] \} \\ &= -D + D \{ 1 - \exp[-a(r - r_0)] \}^2 . \end{aligned} \quad (4.68)$$

Работи [A15, B5, B6] са посветени на изследване на особеностите на основните едночастични характеристики - формфактор, локална плътност и импулсно разпределение, за ядрото  ${}^4\text{He}$  в рамките на слоестия модел, като средното поле на ядрото е представено чрез потенциала на Морз.

Радиалната част на едночастичните вълнови функции за свързаните  $s$ -състояния са решения на уравнението на Шрьодингер. Ако се използва заместването  $\gamma = (2\mu/\hbar^2)D = d^2a^2$  и  $y = (2\gamma/a) \exp[-a(r - r_0)]$ , то се преобразува в конволюционно хипергеометрично уравнение. Налагайки обичайните гранични условия, решенията могат да се представят във вида:

$$\Phi_{n0}(y) = A_{n0} y^{\beta/a} \exp(-y/2) {}_1F_1(\lambda; c; y) , \quad (4.69)$$

а собствените стойности на хамилтониана се намират като корени на трансцедентното уравнение:

$${}_1F_1(\lambda; c; y) = 0 \quad y_0 = \frac{2\gamma}{a} \exp(ar_0) , \quad (4.70)$$

което се решава числено. Съдържащите се в него параметри са дефинирани по следния начин:

$$\beta^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E , \quad c = \frac{2\beta}{a} + 1 , \quad \lambda = \frac{1}{2} c - \frac{\gamma}{a} . \quad (4.71)$$

Приблизени аналитични изрази за собствените стойности и собствените вектори на радиалното уравнение на Шрьодингер могат да се получат от ур. (4.70) [268, 269] при условие, че параметърът  $y_0$  има достатъчно голяма стойност. Както ще видим по-късно, това е изпълнено за параметрите, получени от фитиране на теоретичните резултати за зарядовия формфактор към експерименталните данни.

Локалната плътност, еластичният формфактор и импулсното разпределение се пресмятат по стандартните формули:

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi Z} |R_{00}(r)|^2, \quad (4.72)$$

$$n(k) = \frac{1}{4\pi Z} |\tilde{R}_{00}(k)|^2, \quad (4.73)$$

$$F(q) = \int \exp(iq \cdot r) \rho(r) \, d^3r. \quad (4.74)$$

При леките ядра отчитане на влиянието на центъра на масите върху еластичния формфактор е от съществено значение. В разглеждания случай за тази цел е използвана поправката, предложена в работа [270], съгласно която:

$$\tilde{F}(q) = \frac{\int d^3\omega F(|q + \omega|) F^3(\omega)}{\int d^3\omega F^4(\omega)} \quad (4.75)$$

Зарядовият формфактор е получен от еластичния (4.75) чрез допълнителен множител, отчитащ формфактора на протона:

$$F_{ch}(q) = f_p(q) \tilde{F}(q) \quad (4.76)$$

където за  $f_p(q)$  е използвана параметризацията, предложена в [271].

Параметрите на задачата са определени в рамките на два подхода: в първия е използван критерият  $\chi^2$  за зарядовия формфактор като теоретичните резултати в няколко случая са сравнени с експериментални данни [242], а във втория същият критерий е приложен към импулсното разпределение, като експерименталните данни са взети от работа [272].

Нека разгледаме процедурата по определяне на параметрите на задачата от зарядовия формфактор. Изследвани са три приближения, при които са използвани:

**FFE** – точната вълнова функция, поправка за отчитане на центъра на масите съгласно ур. (4.75) и  $\mu$  равно на масата на нуклона; получените стойности на параметрите са: ( $a = 1.5501 \text{ fm}^{-1}$ ,  $d = 1.2262$  ( $D = 74.9 \text{ MeV}$ ),  $r_0 = 0.9216 \text{ fm}$ );

**FFA** – приближената вълнова функция, поправка за отчитане на центъра на масите съгласно ур. (4.75) и  $\mu$  равно на масата на нуклона; получените стойности на параметрите са: ( $a = 1.6897 \text{ fm}^{-1}$ ,  $d = 1.1134$  ( $D = 73.4 \text{ MeV}$ ),  $r_0 = 0.9095 \text{ fm}$ );

**FFRM** – точната вълнова функция, поправка за отчитане на центъра на масите

съгласно ур. (4.75) и  $\mu$  равно на редуцираната масата на нуклона; получените стойности на параметрите са: ( $a = 1.5476 \text{ fm}^{-1}$ ,  $d = 1.4785 (D = 144.7 \text{ MeV})$ ,  $r_0 = 0.8822 \text{ fm}$ );

При фитиране на импулсното разпределение са разгледани два случая, в които са използвани съответно:

**MDE** – точната вълнова функция; получените стойности на параметрите са: ( $a = 2.2563 \text{ fm}^{-1}$ ,  $d = 1.0215 (D = 146.9 \text{ MeV})$ ,  $r_0 = 0.3195 \text{ fm}$ );

**MDA** – приближена вълнова функция; получените стойности на параметрите са: ( $a = 2.1427 \text{ fm}^{-1}$ ,  $d = 0.8928 (D = 101.2 \text{ MeV})$ ,  $r_0 = 0.5321 \text{ fm}$ );

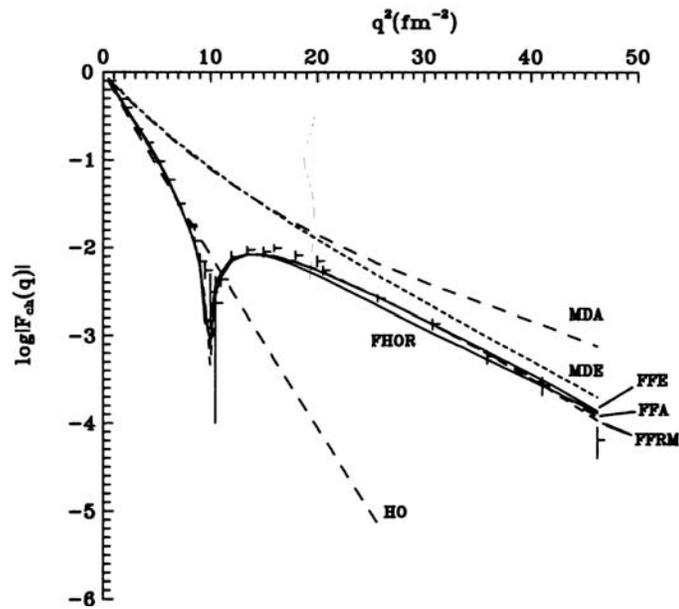
Нека разгледаме първо фигури (4.12) и (4.13), на които са представени резултатите за зарядовия формфактор и импулсното разпределение на нуклоните в ядрото  ${}^4\text{He}$ . Кривите, отбелязани с *FFE*, *FFA* и *FFRM* от една страна и *MDE* и *MDA* от друга, са много близки, особено за реалистични стойности на импулса до около  $4 - 5 \text{ fm}^{-1}$  и за двата вида наблюдаеми. Следователно използването на приближените изрази за вълновата функция  $R_{00}$  [268, 269] е напълно оправдано.

На двете фигури са показани и резултатите в случая, когато средното поле се описва с потенциала на хармоничен осцилатор:  $HO(a)$  – когато е фитиран формфакторът и  $HO(b)$  – при фитиране на импулсното разпределение. Очевидно използването на потенциала на Морз дава възможност за по-реалистично описание както на зарядовия формфактор, така и на импулсното разпределение в сравнение с полученото чрез потенциала на хармоничен осцилатор.

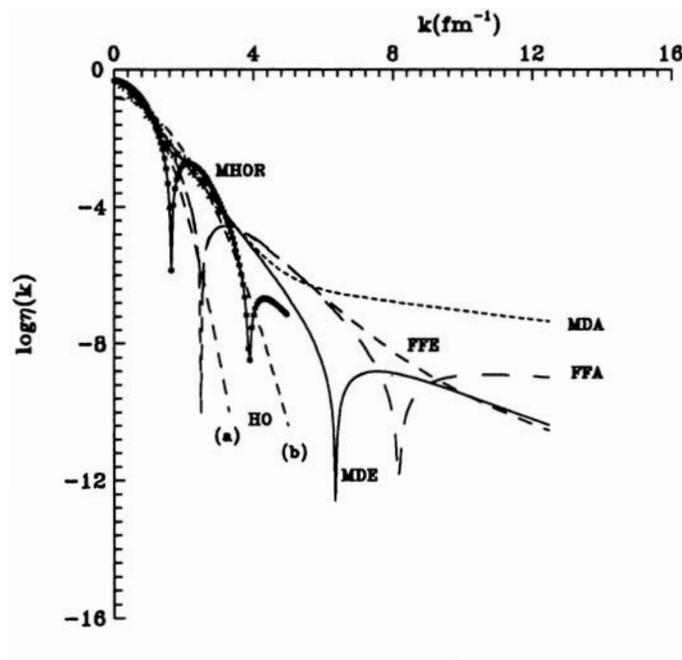
В същото време двете групи резултати (*FFE*, *FFA*, *FFRM*) и (*MDE*, *MDA*) значително се различават една от друга. От сравнение на параметрите в отделните случаи също се вижда, че те са съществено различни в зависимост от това, дали се фитира импулсното разпределение или зарядовият формфактор. Това е още едно доказателство за верността на извода, направен в част (2.3), че независимо от факта, че в потенциала на средното поле се отчитат късодействащите корелации, в модела на независимите частици не могат да се опишат едновременно със задоволителна точност импулсното разпределение и локалната плътност, респективно формфактора на ядрото.

### 4.3 Двучастична матрица на плътността и двучастични ядрени характеристики

Двучастичната матрица на плътността е важна характеристика на ядрените системи, защото участва при пресмятането на матричните елементи на двучастичното



Фигура 4.12: Зарядов формфактор за ядрото  $^4\text{He}$ , пресметнат в различни случаи, описани в текста. Експерименталните данни [242] са отбелязани с кръстчета.



Фигура 4.13: Импулсно разпределение за ядрото  $^4\text{He}$ , пресметнато в различни случаи, описани в текста. Експерименталните данни [242] са отбелязани със звездички.

нуклон-нуклонно взаимодействие. Тя трябва да съдържа информация както за едночастичните свойства на нуклоните, т.е. да отчете принципа на Паули, така и за нуклон-нуклонните корелации - късодействащи и дългодействащи.

Основен метод за изучаване на двучастичната матрица на плътността са реакциите с избиване на два нуклона. Реакциите от вида  $(\gamma, NN)$  са изследвани подробно в работи [273, 274], а в статиите [275–277] са разгледани  $(e, e'NN)$  процесите. И двата типа реакции се описват в рамките на Плосковълново импулсно приближение (Plane Wave Impulse Approximation(PWIA)) [278]. За пресмятане на сечението на реакциите в този подход е необходимо познаването на двучастичната спектрална функция. В работа [279] за пръв път е предложена процедура за получаване на двучастичната спектрална функция за ядрото  $^{16}\text{O}$ , при която са отчетени както дългодействащите корелации в рамките на Приближението на случайните фази, така и късодействащото взаимодействие при решаване на уравнението на *Бете-Голдстоун* за крайни ядра. Резултатите са приложени за описание на  $(e, e'pp)$  реакции.

Двучастичната спектрална функция е много сложен обект, защото съдържа информация както за основното, така и за възбудените състояния на системата. Затова са правени опити чрез добре мотивирани приближения да се получи израз за сеченията на реакции с избиване на два нуклона, съдържащ двучастични характеристики на ядрото като спектроскопични фактори, функция на припокриване, относителното импулсно разпределение на двойката избивани нуклони, импулсното разпределение на центъра на масата на двойката и т.н. [280–282]. Всички тези величини могат да се получат от двучастичната матрица на плътността.

В Приближението от нисък порядък на метода на *Ястров* освен едночастичната матрица, в аналитичен вид може да се запише и двучастичната матрица на плътността ур. (3.106). В тази част от дисертацията ще разгледаме свойствата на двучастичната матрица на плътността и основните двучастични ядрени характеристики, получени в рамките на аналитичния модел, представен в част (4.1). Представените тук резултати са публикувани в работи [A18, B13].

### 4.3.1 Дефиниции и свойства на основните двучастични характеристики

На всяка антисиметризирана  $A$ -частична вълнова функция  $\Psi^A$  отговаря набор от  $p$ -частични матрици на плътността  $p = 1, 2, \dots, A$ :

$$\rho^{(p)}(x_1, x_2, \dots, x_p; x'_1, x'_2, \dots, x'_p) = \langle \Psi | a^\dagger(x_1) a^\dagger(x_2) \dots a^\dagger(x_p) a(x'_1) a(x'_2) \dots a(x'_p) | \Psi \rangle , \quad (4.77)$$

където  $a^\dagger(x_i)$  и  $a(x_i)$  са операторите на раждане и унищожение на фермион в състояние  $x_i$ , което включва пространствената координата  $\mathbf{r}_i$ , спина  $s_i$  и изоспина  $\tau_i$ . В частност едночастичната и двучастична матрица имат вида:

$$\rho^{(1)}(x, x') = \langle \Psi^{(A)} | a^\dagger(x) a(x') | \Psi^{(A)} \rangle , \quad (4.78)$$

и

$$\rho^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = \langle \Psi^{(A)} | a^\dagger(x_1) a^\dagger(x_2) a(x'_1) a(x'_2) | \Psi^{(A)} \rangle . \quad (4.79)$$

От тези дефиниции веднага следват някои от свойствата им. Те са ермитови:

$$\rho^{(1)}(x, x') \equiv \rho^{(1)*}(x'; x) , \quad \rho^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = \rho^{(2)*}(x'_1, x'_2; x_1, x_2) . \quad (4.80)$$

Следата на едночастичната матрица е нормирана на броя на частиците, а следата на двучастичната матрица – на броя на двойките нуклони:

$$\text{Tr } \rho^{(1)} = \int \rho(x) dx = A , \quad (4.81)$$

$$\text{Tr } \rho^{(2)} = \frac{1}{2} \int \rho^{(2)}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \frac{A(A-1)}{2} , \quad (4.82)$$

с диагонални елементи съответно равни на:

$$\rho(x) = \rho^{(1)}(x, x) , \quad \rho^{(2)}(x_1, x_2) = \rho^{(2)}(x_1 x_2; x_1 x_2) . \quad (4.83)$$

Двучастичната матрица е антисиметрична по отношение на пермутация на индексите в смисъл, че:

$$\rho^{(2)}(x_1 x_2; x'_1 x'_2) = -\rho^{(2)}(x_2 x_1; x'_1 x'_2) , \quad (4.84)$$

откъдето следва, че диагоналните ѝ елементи са равни на нула, ако двете координати са равни, т.е.  $\rho^{(2)}(x_1, x_1) = 0$ .

Едночастичната матрица на плътността може да се получи от двучастичната по формулата:

$$\int \rho^{(2)}(x_1 x_2; x'_1 x'_2) dx_2 = \frac{A-1}{2} \rho^{(1)}(x_1, x'_1) , \quad (4.85)$$

Чрез *Фурие* преобразуване матриците се дефинират и в импулсното пространство:

$$n^{(1)}(k; k') = \int \rho(x, x') \exp [i (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')] d\mathbf{r} d\mathbf{r}' , \quad (4.86)$$

$$n^{(2)}(k_1, k_2; k'_1, k'_2) = \int \rho^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) \exp [i (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2 - \mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{r}'_1 - \mathbf{k}'_2 \cdot \mathbf{r}'_2)] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 , \quad (4.87)$$

където координатата  $k_i$  представлява импулса  $\mathbf{k}_i$ , спина  $s_i$  и изоспина  $\tau_i$  на  $i$ -тата частица. Съотношения, подобни на равенства (4.80)-(4.84) могат да се запишат и в импулсното пространство.

Основните величини, асоциирани с двучастичната матрица на плътността, са локалното разпределение на центъра на масата на двойка нуклони:

$$\rho^{(2)}(\mathbf{R}) = \int \rho^{(2)}(\mathbf{R} + \mathbf{s}/2, \mathbf{R} - \mathbf{s}/2) d\mathbf{r} , \quad (4.88)$$

и относителното локално разпределение на плътността

$$\rho^{(2)}(\mathbf{s}) = \int \rho^{(2)}(\mathbf{R} + \mathbf{s}/2, \mathbf{R} - \mathbf{s}/2) d\mathbf{R} . \quad (4.89)$$

Диагоналните елементи на двучастичната матрица в импулсното пространство ур. (4.87) дефинират съответните импулсно разпределение на центъра на масите и относително импулсно разпределение на двойка частици:

$$n^{(2)}(\mathbf{K}) = \int n^{(2)}(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}, \mathbf{K}/2 - \mathbf{k}) d\mathbf{k} , \quad (4.90)$$

и

$$n^{(2)}(\mathbf{k}) = \int n^{(2)}(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}, \mathbf{K}/2 - \mathbf{k}) d\mathbf{K} . \quad (4.91)$$

Величините  $\rho^{(2)}(\mathbf{s})$  и  $n^{(2)}(\mathbf{k})$  представляват вероятностите две частици да се намират на разстояние  $\mathbf{s} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  една от друга и да се движат с относителен импулс  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$  една спрямо друга. Аналогично  $\rho^{(2)}(\mathbf{R})$  и  $n^{(2)}(\mathbf{K})$  се интерпретират като вероятности центърът на масата на двойката нуклони да има координата  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  и импулс  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ .

### 4.3.2 Двучастични ядрени характеристики в рамките на аналитичния модел

В част (4.1) беше представен аналитичен модел, основан на Приближението от нисък порядък в метода на *Ястров*. Вълновите функции на едночастичните състояния, принадлежащи на морето на *Ферми* за дадено ядро, се представят чрез собствените функции на хармоничен осцилатор  $\varphi_i^{HO}(x)$ , а късодействащите корелации между нуклоните се въвеждат чрез експоненциален фактор  $f(\mathbf{r})$  (4.2), независещ от едночастичното състояние на нуклоните.

Двучастичната матрица на плътността ще разглеждаме в рамките на същия аналитичен модел, с тази разлика, че в израза за корелационната функция ще въведем допълнителен параметър  $c$ , определящ амплитудата на късодействащите корелации:

$$f(\mathbf{r}) \equiv f(r) = 1 - c \exp(-\beta^2 r^2), \quad (4.92)$$

Замествайки некорелирана едночастична матрица на плътността  $\rho_{SD}^{(1)}$ , дефинирана в израза (3.106), получаваме аналитичен израз за двучастичната матрица на плътността в ПНП:

$$\rho_{LOA}^{(2)}(\mathbf{r}_1, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, s_2, \tau_2; \mathbf{r}_3, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_4, s_2, \tau_2) = \rho_{SD}^{(2)} + \rho_A^{(2)} + \rho_B^{(2)} + \rho_C^{(2)}. \quad (4.93)$$

$\rho_{SD}^{(2)}$  е некорелираната двучастична матрица на плътността. Тя е равна на:

$$\begin{aligned} \rho_{SD}^{(2)}(\mathbf{r}_1, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, s_2, \tau_2; \mathbf{r}_3, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_4, s_2, \tau_2) = \\ \frac{1}{2} [\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3)\rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) - \delta_{\tau_1\tau_2}\delta_{s_1s_2}\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rho(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)]. \end{aligned} \quad (4.94)$$

В горната формула участва едночастичната матрица на плътността, в която е извършено сумирането по спина и изоспина на частицата:

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{s\tau} \rho_{SD}(\mathbf{r}_1, s, \tau; \mathbf{r}_2, s, \tau). \quad (4.95)$$

Вторият член в израза (4.93) има вида:

$$\begin{aligned} \rho_A^{(2)} = \\ \frac{1}{2} \{ c^2 \exp[-(\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2)^2 - (\mathbf{z}_3 - \mathbf{z}_4)^2] - c \exp[-(\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2)^2] - c \exp[-(\mathbf{z}_3 - \mathbf{z}_4)^2] \} \\ \times \{ \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3)\rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) - \delta_{\tau_1\tau_2}\delta_{s_1s_2}\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rho(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \}, \end{aligned} \quad (4.96)$$

като е направена смяната на променливите  $\mathbf{z}_i = \beta \mathbf{r}_i$ , ( $\beta$  е корелационният параметър в ур. (4.2)). Както беше споменато в част (3.4.1), сумата  $\rho_{SD}^{(2)} + \rho_A^{(2)}$  може да се разглежда като нулево приближение на корелираната двучастична матрица на плътността [194]. Основен недостатък на това приближение е, че то не запазва нормировката на матрицата.

Третият член  $\rho_B^{(2)}$  в ур. (4.93) е равен на:

$$\begin{aligned} \rho_B^{(2)} = & \frac{c^2}{2} \{ 4 [\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) - \delta_{\tau_1 \tau_2} \delta_{s_1 s_2} \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)] (I_{13} + I_{24}) - \\ & \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) (I_{1324} + I_{2424}) - \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) (I_{1313} + I_2) + \\ & \delta_{\tau_1 \tau_2} \delta_{s_1 s_2} [\rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) (I_{1314} + I_{2414}) + \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) (I_{1324} + I_{2424})] \} - \\ & \frac{c}{2} \{ 4 [\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) - \delta_{\tau_1 \tau_2} \delta_{s_1 s_2} \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)] (I_1 + I_2 + I_3 + I_4) - \\ & \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) (I_{124} + I_{224} + I_{324} + I_{424}) - \\ & \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) (I_{113} + I_{213} + I_{331} + I_{413}) + \\ & \delta_{\tau_1 \tau_2} \delta_{s_1 s_2} [\rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) (I_{114} + I_{214} + I_{314} + I_{414}) - \\ & \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) (I_{123} + I_{223} + I_{323} + I_{423})] \} , \end{aligned} \quad (4.97)$$

а последният  $\rho_C^{(2)}$  се задава с формулата:

$$\begin{aligned} \rho_C^{(2)} = & c \mathcal{M}(\mathbf{r}_1, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, s_2, \tau_2; \mathbf{r}_3, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_4, s_2, \tau_2; y) \\ & - \frac{1}{2} c^2 \mathcal{M}(\mathbf{r}_1, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, s_2, \tau_2; \mathbf{r}_3, s_1, \tau_1; \mathbf{r}_4, s_2, \tau_2; 2y) , \end{aligned} \quad (4.98)$$

като

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = & 4 [\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) Y_{24} - \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) Y_{13}] - \\ & Y_{1324} + \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) Z_{42} - \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) Z_{13} - \\ & \delta_{\tau_1 \tau_2} \delta_{s_1 s_2} \{ 4 [\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) Y_{23} - \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) Y_{14}] - \\ & Y_{1423} - \rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) Z_{14} - \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) Z_{23} \} . \end{aligned} \quad (4.99)$$

В горните изрази участват следните произведения от експонента и полином, зависещи от координата  $\mathbf{x}_i = \alpha \mathbf{r}_i$  и безразмерния параметър  $y = \beta^2 / \alpha^2$ :

$$I_1 = \exp\left[-\frac{y x_1^2}{1+y}\right] P_{I_1}(\mathbf{x}_1) \quad (4.100)$$

$$I_{12} = \exp\left[-\frac{y (x_1^2 + x_2^2 + 2y (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2)}{1+2y}\right] P_{I_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad (4.101)$$

$$I_{123} = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} \exp\left[-\frac{x_2^2 + x_3^2 + y (2x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}{2(1+y)}\right] P_{I_3}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) \quad (4.102)$$

$$I_{1234} = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} \exp\left[-\frac{x_3^2 + x_4^2 + 2y(x_1^2 + x_2^2) + 2y^2(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2}{2(1+2y)}\right] \times P_{I_4}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4) \quad (4.103)$$

$$Y_{12} = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} \exp\left[-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2}\right] P_{Y_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 y) \quad (4.104)$$

$$Z_{12} = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} \exp\left[-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2}\right] P_{Z_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 y) \quad (4.105)$$

$$Y_{1234} = \frac{\alpha^6}{\pi^3} \exp\left[-\frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2}{2}\right] P_{Y_3}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4; y) \quad (4.106)$$

Дефинирана чрез равенства ((4.93)-(4.106)), двучастичната матрица на плътността не зависи от ядрото, за което се отнася. Информацията за структурата на ядрената система се съдържа в полиномите  $\{P_I, P_Y, P_Z\}$ . Техният конкретен вид за ядрата  $^4\text{He}$  и  $^{16}\text{O}$  е представен в Приложение 3. Съответните изразите за  $^{40}\text{Ca}$  имат подобна структура, но са твърде дълги, за да бъдат представени на хартия. Те са на разположение като файлове от програмата Mathematica.

Ако в аналитичната формула за двучастичната матрица на плътността координатите на двете частици  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  се заменят с координатата на центъра на масата им  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  и разстоянието между тях  $\mathbf{s} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ , могат да се получат съответно локалните плътностни разпределения  $\rho^{(2)}(\mathbf{R})$ , ур.(4.88) и  $\rho^{(2)}(\mathbf{s})$ , ур.(4.89). Въвеждайки безразмерните променливи  $R = \alpha|\mathbf{R}|$  и  $s = \alpha|\mathbf{s}|$ , те имат следния вид:

$$\rho^{(2)}(R) = \mathcal{A} \exp\left[-(\sqrt{2}R)^2\right] + \mathcal{B} \exp\left[-\frac{2(1+2y)}{2+3y}(\sqrt{2}R)^2\right] + \mathcal{C} \exp\left[-\frac{1+4y}{1+3y}(\sqrt{2}R)^2\right], \quad (4.107)$$

$$\rho^{(2)}(s) = \mathcal{D} \exp\left[-(s/\sqrt{2})^2\right] + \mathcal{E} \exp\left[-\frac{2(1+2y)}{2+3y}(s/\sqrt{2})^2\right] + \mathcal{F} \exp\left[-\frac{1+4y}{1+3y}(s/\sqrt{2})^2\right] + \mathcal{G} \exp\left[-(1+4y)(s/\sqrt{2})^2\right] - \mathcal{H} \exp\left[-(1+2y)(s/\sqrt{2})^2\right], \quad (4.108)$$

където

$$\mathcal{A} = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} [\eta_1(R) + 2c\eta_2(R, y) - c^2\eta_2(R, 2y)], \quad (4.109)$$

$$\mathcal{B} = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} c\eta_3(R), \quad \mathcal{C} = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} c^2\eta_4(R),$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D} &= \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} [\mu_1(s) + 2c\mu_2(s; y) - c^2\mu_2(s; 2y)], \\
\mathcal{E} &= -\frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} 2c\mu_3(s; y), & \mathcal{F} &= \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} c^2\mu_3(s; 2y), \\
\mathcal{G} &= \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} c^2\mu_1(s), & \mathcal{H} &= -\frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} 2c\mu_1(s).
\end{aligned} \tag{4.110}$$

Импулсното разпределение на центъра на масата на частиците  $n^{(2)}(\mathbf{K})$ , ур.(4.90) и относителното импулсно разпределение  $n^{(2)}(\mathbf{k})$ , ур.(4.91), се получават като се направи *Фурие* трансформация върху съответните матрици на плътността в координатното пространство  $\rho^{(2)}(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$  и  $\rho^{(2)}(s, s')$ . Използвайки отново безразмерни импулси  $K = |\mathbf{K}|/\alpha$  and  $k = |\mathbf{k}|/\alpha$  получаваме:

$$n^{(2)}(\mathbf{K}) = \mathcal{A}' \exp \left[ -\left(\frac{K}{\sqrt{2}}\right)^2 \right] + \mathcal{B}' \exp \left[ -\frac{1+2y}{2+5y} \left(\frac{K}{\sqrt{2}}\right)^2 \right] + \mathcal{C}' \exp \left[ -\frac{1}{(1+y)} \left(\frac{K}{\sqrt{2}}\right)^2 \right], \tag{4.111}$$

$$\begin{aligned}
n^{(2)}(\mathbf{k}) &= \mathcal{D}' \exp \left[ -(\sqrt{2}k)^2 \right] + \mathcal{E}' \exp \left[ -\frac{2(1+2y)}{2+5y} (\sqrt{2}k)^2 \right] + \mathcal{F}' \exp \left[ -\frac{1}{1+y} (\sqrt{2}k)^2 \right] \\
&+ \mathcal{G}' \exp \left[ -\frac{1}{1+4y} (\sqrt{2}k)^2 \right] - \mathcal{H}' \exp \left[ -\frac{1+2y}{1+4y} (\sqrt{2}k)^2 \right],
\end{aligned} \tag{4.112}$$

където

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} (\gamma_1(K) + 2c\gamma_2(K, y) - c^2\gamma_2(K, 2y)), \\
\mathcal{B}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} c\gamma_3(K), & \mathcal{C}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} c^2\gamma_4(K),
\end{aligned} \tag{4.113}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} (\theta_1(k) + 2c\theta_2(k, y) - c^2\theta_2(k, 2y)), \\
\mathcal{E}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} c\theta_4(k), & \mathcal{F}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} c^2\theta_6(k), \\
\mathcal{G}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} c^2\theta_5(k), & \mathcal{H}' &= \frac{\sqrt{2}}{2\alpha^3 \pi^{3/2}} c\theta_3(k).
\end{aligned} \tag{4.114}$$

В горните изрази експоненциалната зависимост на разпределенията е представена експлицитно, а полиномите  $\{\eta_i\}$ ,  $\{\mu_i\}$ ,  $\{\gamma_i\}$  и  $\{\theta_i\}$  за ядрата  ${}^4\text{He}$  and  ${}^{16}\text{O}$  са разписани в Приложение 3.

Интерес представлява сравнението на двучастичните импулсни разпределения

$n^{(2)}(\mathbf{K})$ , ур. (4.111) и  $n(\mathbf{k})$ , ур. (4.112) с едночастичното импулсно разпределение (4.15). Ако използваме същите означения, като в ур. (4.111) и (4.112), последното се записва във вида:

$$n(\mathbf{k}) = \mathcal{A}'' \exp[-k^2] + \mathcal{B}'' \exp\left[-\frac{1}{1+2y}k^2\right] - \mathcal{C}'' \exp\left[-\frac{1+2y}{1+3y}k^2\right]. \quad (4.115)$$

Очевидно е, че променливите в експонентите се различават помежду си с множител  $\sqrt{2}$ .

### 4.3.3 Резултати

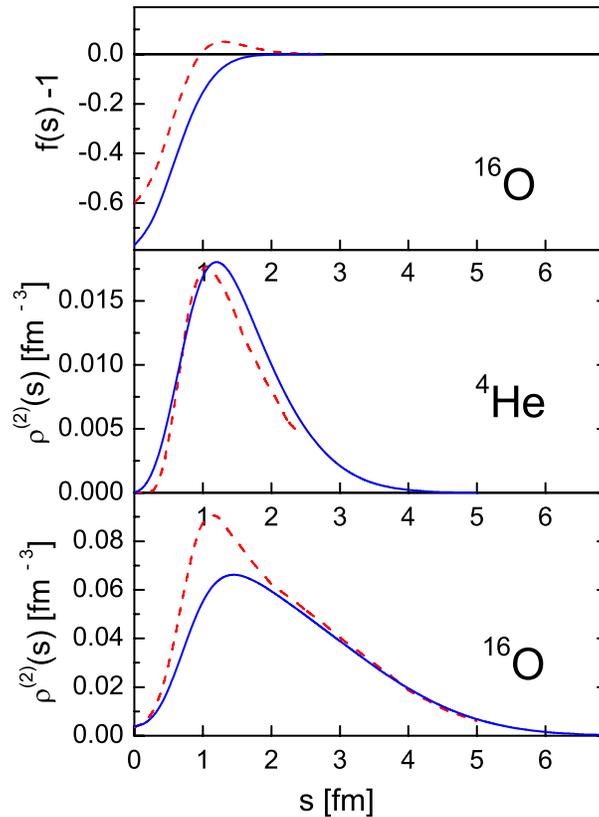
Последна стъпка при дефиниране на двучастичните ядрени характеристики е определяне стойностите на параметрите на задачата. В случая те са три - осцилаторният параметър  $\alpha$  и параметрите  $\beta$  и  $c$  на корелационната функция  $f(r)$  ур. (4.92). И тук, както при изследване на едночастичната матрица на плътността, стойностите им ще определим феноменологично, като фитираме с аналитичния израз експерименталните данни за еластичния формфактор на разглежданите ядра. Трябва да отбележим още веднъж, че в рамките на представения модел не отчитаме съществени детайли като движението на центъра на масата на ядрената система, влиянието на мезонните токове, формфактора на нуклона и т.н. Този факт, заедно с простия израз за корелационния фактор и избора на собствените функции на хармоничния осцилатор за едночастични вълнови функции, задават ограниченията на разглеждания подход. За сметка на това той дава възможност за получаване на аналитични изрази за основните едночастични и двучастични характеристики на ядрата, което позволява изследването на механизма на влияние на късодействащите корелации върху свойствата на ядрената структура.

Параметрите за ядрата  ${}^4\text{He}$  и  ${}^{16}\text{O}$  са определени при допълнителното условие стойността на относителното локално разпределение на плътността  $\rho^{(2)}(\mathbf{s})$ , ур.(4.108) при ( $s = 0$ ) да бъде равна на съответната стойност, получена във Вариационния метод на *Монте Карло* [208, 284]. Тъй като не съществуват вариационни пресмятания за  ${}^{40}\text{Ca}$ , в този случай е приета стойността  $c = 1$ . При пресмятанията оттук нататък са използвани следните стойности на параметрите:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.82 \text{ fm}^{-1}, & \beta &= 1.23 \text{ fm}^{-1}, & c &= 0.76 & \text{for } {}^4\text{He}, \\ \alpha &= 0.61 \text{ fm}^{-1}, & \beta &= 1.30 \text{ fm}^{-1}, & c &= 0.77 & \text{for } {}^{16}\text{O}, \\ \alpha &= 0.52 \text{ fm}^{-1}, & \beta &= 1.21 \text{ fm}^{-1}, & c &= 1.00 & \text{for } {}^{40}\text{Ca}. \end{aligned} \quad (4.116)$$

Нека започнем представянето на получените резултати с едно сравнение. На

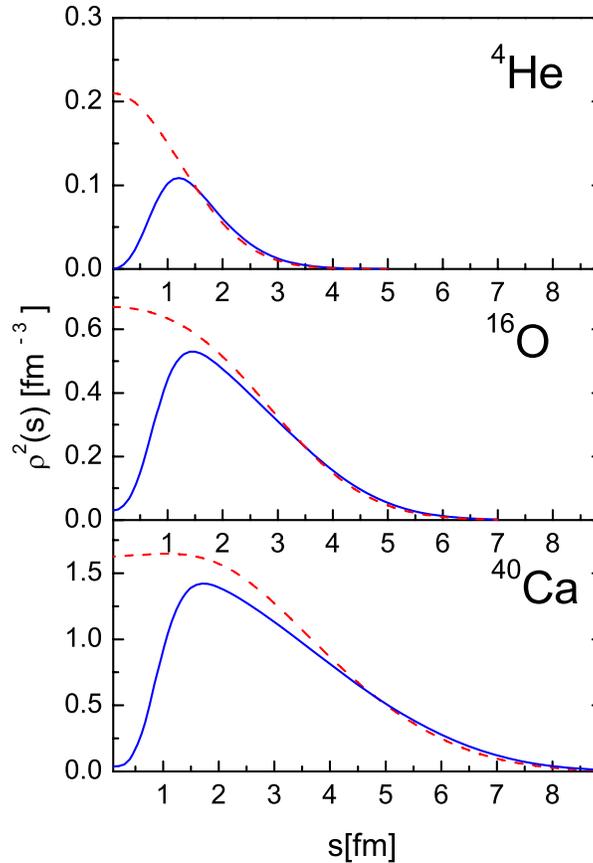
фигура (4.14) са представени настоящите резултати заедно с тези, получени в рамките на Вариационния метод на *Монте Карло* [208, 284]. Този метод беше подробно обсъждан в част (3.4.2), но да повторим, че той предполага сложна, зависеща от едночастичните състояния корелационна функция и съответно голям брой параметри.



Фигура 4.14: Сравнение между настоящите резултати (плътни линии) и тези, получени в рамките на Вариационния метод на *Монте Карло* [208, 284] (пунктирни линии). В горния панел - корелационната функция, в долните два - относителното локално разпределение на двойка частици, нормирано на  $4\pi \int \rho^{(2)}(s) s^2 ds = 1$  съответно за ядрата  ${}^4\text{He}$  и  ${}^{16}\text{O}$ .

В горния панел на фигурата са показани корелационната функция в аналитичния модел и скаларната корелационна функция във Вариационния *Монте Карло* метод. Очевидно *Гаусовата* функция  $f(r)$ , ур.(4.92), използвана при настоящите изследвания, може да се разглежда само като приближение от първи порядък по отношение на реалистичната корелационна функция. Независимо от това, аналитичните резултати за относителното локално разпределение на плътността  $\rho^{(2)}(s)$ , ур.(4.108) за ядрата  ${}^4\text{He}$  и  ${}^{16}\text{O}$  са в добро съгласие с плътностните разпределения

във Вариационния *Монте Карло* метод. Възпроизведено е характерното поведение на разпределенията, както в центъра на ядрото, така и на повърхността му. Ниските стойности на  $\rho^{(2)}(s)$  при ( $s = 0$ ) са признак за силно нуклон-нуклонно отблъскване на малки разстояния.

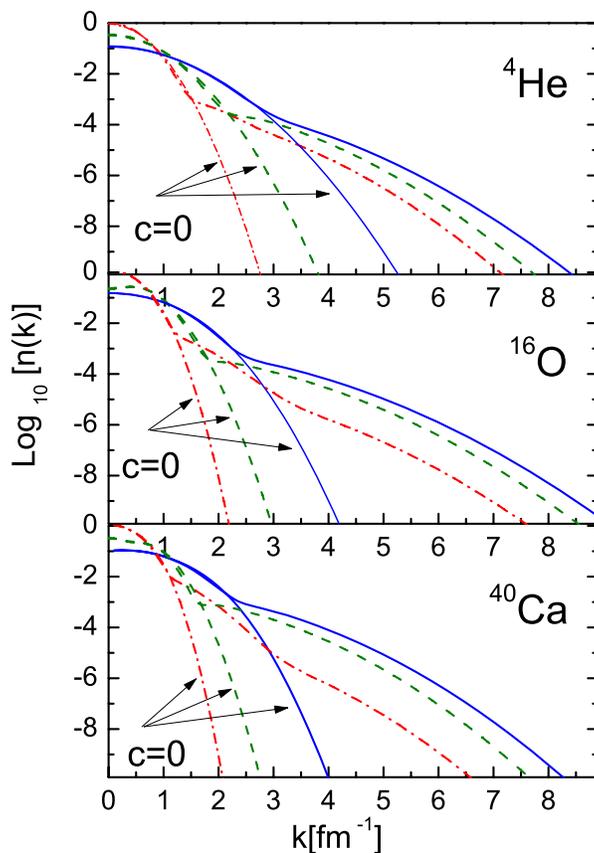


Фигура 4.15: Сравнение между корелираното ( $c \neq 0$ , пълни линии) и некорелираното ( $c = 0$ , пунктирни линии) относителното плътностно разпределение (4.108), нормирано на  $4\pi \int \rho^{(2)}(s) s^2 ds = 1$  за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ .

Фигура (4.15) илюстрира влиянието на късодействащите корелации върху формата на относителното плътностно разпределение на двойките частици. Те водят до бърз спад на стойностите на разпределението в центъра на ядрото, докато некорелираното разпределение достига насищане при малки стойности на  $s$ .

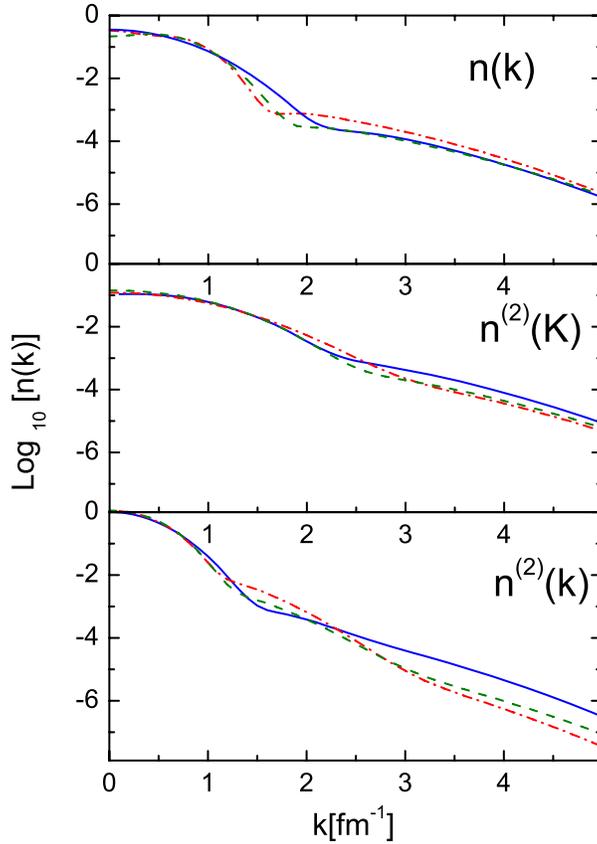
Сравнението между корелираното и некорелирано локално разпределение на центъра на масите на двойките частици  $\rho^{(2)}(\mathbf{R})$ , ур. (4.107), показва, че включването на късодействащите корелации не води до съществено изменение на тази величина.

Пряка информация за ефектите на отблъскване на нуклоните на малки разстояния може да се получи от реакциите на електрони с избиване на двойка нуклони ( $e, e'2N$ ). В изразите за сеченията на тези типове реакции участват импулсните



Фигура 4.16: Сравнение между корелираните ( $c \neq 0$ ) и некорелирани ( $c = 0$ ) импулсно разпределение на центъра на маса  $n^{(2)}(K)$  (плътни линии) и относително импулсно разпределение  $n^{(2)}(k)$  (пунктирни линии с точка) на двойка частици, както и едночастичното импулсно разпределение  $n(k)$  (пунктирни линии) за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ . Всички разпределения са нормирани на единица, например  $4\pi \int n(k)k^2 dk = 1$ .

разпределения на двойки частици. На фигура (4.16) са представени импулсното разпределение на центъра на масата  $n^{(2)}(K)$ , ур. (4.111), и относителното импулсно разпределение  $n^{(2)}(k)$ , ур. (4.112), за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ . Направено е и сравнение между корелираните ( $c \neq 0$ ) и некорелираните резултати ( $c = 0$ ). За пълнота на фигурата е представено и локалното импулсно разпределение  $n(k)$ , ур. (4.15), получено от едночастичната матрица на плътността в Приближението от нисък порядък на метода на *Ястров*. Най-същественният извод, който може да се направи от показаните на фигура (4.16) резултати, е, че вследствие на късодействащите корелации и трите типа импулсни разпределения притежават високи ”опашки”. От сравнението с некорелираните резултати следва, че корелационните ефекти започват да влияят първо на формата на относителното импулсно разпре-



Фигура 4.17: Корелирани импулсни разпределения  $n(k)$  (горен панел),  $n^{(2)}(K)$  (среден панел) и  $n^{(2)}(k)$  (долен панел) за ядрата  ${}^4\text{He}$  (плътна линия),  ${}^{16}\text{O}$  (пунктирна линия) и  ${}^{40}\text{Ca}$  (пунктирна линия с точка).

деление  $n^{(2)}(k)$ , а при по-високи стойности на импулса – последователно върху едночастичното разпределение  $n(k)$  и върху разпределението на центъра на масата на двойката нуклони  $n^{(2)}(K)$ . За ядрото  ${}^4\text{He}$  например, късодействащите корелации започват да доминират в разпределенията  $n^{(2)}(k)$ ,  $n(k)$  и  $n^{(2)}(K)$  съответно за стойности на импулса 1.4, 2.1, 2.7  $\text{fm}^{-1}$ . Подобен извод може да се направи и по отношение на ядрата  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ . Това се дължи очевидно на множителя  $\sqrt{2}$ , който присъства в аналитичните изрази за разглежданите разпределения. Затова в областта на високите импулси се наблюдава съотношението:

$$n^{(2)}(k) < n(k) < n^{(2)}(K) , \quad (4.117)$$

както за корелираните, така и за некорелираните разпределения. Разбира се, когато се сравняват различните видове импулсни разпределения, трябва да се има предвид различното значение на аргументите им.

Друга интересна особеност на разглежданите импулсни разпределения може да

се забележи, когато на една графика се представят разпределенията за различни ядра. Това е направено на фигура (4.17). Очевидно, в областта на високите импулси разглежданите разпределения са универсални, в смисъл, че не зависят от масовото число на ядрото. Този факт е забелязан и преди по отношение на едночастичното локално импулсно разпределение [A1, A2, A3, 67, 208, 283], но сега може да се твърди, че тази характеристика е в сила и за двучастичните локални импулсни разпределения.

**В заключение** ще отбележим, че в тази част от дисертацията бяха представени аналитични изрази за двучастичната матрица на плътността и за някои основни двучастични характеристики на ядрената структура като локалното разпределение на центъра на масата на двойка частици, относителното локално разпределение, импулсното разпределение на центъра на масата и относителното импулсно разпределение за два нуклона за ядрата със запълнени нива в  $s-d$  слою в приближението от нисък порядък на метода на *Ястров*. Сравнението на резултатите с тези, получени в рамките на Вариационния метод на *Монте Карло*, показва, че независимо от сравнително простия модел за описание на късодействащите корелации, който предлагаме, разглежданите двучастични величини реалистично отразяват корелационните ефекти. В частност е показано, че като едночастичното, така и двучастичните импулсни разпределения притежават високоимпулсни компоненти, които са универсални за всички разглеждани ядра. Като първо приближение, предлаганият аналитичен подход спомага за решаване на сложните проблеми, свързани с интерпретацията на резултатите от преките реакции с избиване на два нуклона.

## Глава 5

### Отчитане на късодействащите корелации при описание на преки реакции

#### 5.1 Спектрални функции

Първо *Опенхаймер* и *Филипс* [285] отбелязват, че при ниски енергии ( $E_{inc} \leq 100$  MeV) измерваното сечение на реакцията ( $d, p$ ) е силно пикирано напред при малки ъгли, или назад при ъгли, близки до  $180^\circ$ . *Сербер* [286] предлага прост механизъм за тези реакции: ядрото-мишена захваща неутрона от налитания деутрон, а протонът продължава движението си самостоятелно. Ширината на ъгловото разпределение на сечението на протона носи информация за импулсното му разпределение в деутрона преди взаимодействието с мишената. При сравнително ниски енергии на налитания деутрон сечението на излитания протон има максимум при ъгли, близки до  $180^\circ$ . Този факт има просто физическо обяснение – поради *Кулоновото* отблъскване деутронът не достига до мишената на разстояния, на които действат ядрените сили и протонът след реакцията се връща в посоката, от която е дошъл. При достатъчно високи енергии налиташката частица може да преодолее *Кулоновите* сили на отблъскване и да премине напред през полето на ядрото. Тези два прости модела описват зависимостта на така наречените *стрипинг* реакции от енергията на налиташката частица.

Стрипинг реакция, при която нуклон от налиташката частица заселва определено състояние на остатъчното ядро, е възможна само ако то не е запълнено или само частично запълнено. Обратният процес, при който налиташката частица избива нуклон от определено ниво в ядрото-мишена, също има вероятност да се осъществи, но само ако това ниво е запълнено с голяма вероятност. Следователно реакциите с избиване или захващане на един нуклон носят съществена информация за структурата на ядрата, участващи в процеса.

Стрипинг реакциите, заедно с обратния процес на захващане на нуклон, например при ( $p, d$ ) реакцията, са вид преки реакции.

Най-общо казано, преки реакции се наричат тези процеси, които свързват директно началното и крайно положение на ядрената система без образуване на междинно свързано състояние на налитащата частица и ядрото-мишена. Типични преки реакции, освен вече споменатите, са еластичното разсейване, нееластичното разсейване и реакциите с обмен за заряд.

Характеристиките и особеностите на преките реакции носят важна информация за свойствата на ядрата. Затова те са били постоянно във фокуса на интерес както на експериментатори, така и на теоретици. Подробен преглед на експерименталните резултати и на основните теоретични подходи за описание на конкретни типове преки реакции може да се намери в монографиите [278, 287, 288].

Тази част от дисертацията е посветена на изучаване на преките реакции с избиране на един нуклон. Типични примери за такива процеси са  $(p, d)$ ,  $(e, e'p)$  и  $(\gamma, p)$ . Най-общо, сечението на тези реакции се представя във вида:

$$\frac{d^4\sigma}{d\Omega_{e'}d\varepsilon_{e'}d\Omega_pdT_p} = C \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ep} S(\mathbf{k}, E) , \quad (5.1)$$

където  $C$  е кинематичен множител,  $(d\sigma/d\Omega)_{ep}$  е сечението на елементарния акт на разсейване на налитащата частица, или фотон, с протон от ядрото-мишена, а  $S(\mathbf{k}, E) \equiv S(\mathbf{k}, \mathbf{k}, E)$  е диагоналният елемент на спектралната функция в импулсно представяне, отнасяща се до дупчестите състояния на ядрото-мишена:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) = \langle \Psi_0 | a^+(\mathbf{k}') \delta(E + \hat{H} - E_A^0) a(\mathbf{k}) | \Psi_0 \rangle . \quad (5.2)$$

В дефиницията за спектрална функция (5.2)  $|\Psi_0\rangle$  е вълновата функция, описваща основното състояние на ядрото-мишена,  $a^+(\mathbf{k}')$  и  $a(\mathbf{k})$  са съответно операторите на раждане и унищожение на нуклон с импулс  $\mathbf{k}$ ,  $\hat{H}$  е хамилтонианът на системата от  $(A - 1)$  нуклона и  $E_A^0$  е енергията на основното състояние на ядрото-мишена с  $A$  нуклона.

Основните свойства на спектралната функция  $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E)$  ур. (5.2) и връзката и с други видове едночастични функции са изследвани в работа [A8].

Нека първо припомним дефиницията за естествени орбитали и естествени числа на запълване (представянето на естествените орбитали е разгледано подробно в част (4.2.2)). Това са функциите  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ , които диагонализират едночастичната матрица на плътността:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}') , \quad (5.3)$$

като естествените числа на запълване  $n_{\alpha}$  изпълняват условията:

$$0 \leq n_\alpha \leq 1, \quad \sum_\alpha n_\alpha = A. \quad (5.4)$$

Трябва да отбележим, че сумата в ур. (5.3) включва краен брой дискретни състояния. Това е следствие от факта, че  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , а оттам и естествените орбитали, са локализирани в обема на ядрото.

Едночастичната матрица на плътността може да се представи и чрез функциите на припокриване. Свойствата и един метод за получаването им ще бъдат разгледани в част (5.2), но тук ще приведем само тяхната дефиниция [64, 331], като се органичим само до функциите на припокриване, отговарящи на процеса на избиване на един нуклон:

$$\phi_f(\mathbf{x}) \equiv \langle \Psi_f^{(A-1)} | a(\mathbf{x}) | \Psi_0^{(A)} \rangle. \quad (5.5)$$

Функциите на припокриване свързват вълновата функция на основно състояние на  $A$ -нуклонната система на ядрото-мишена, върху която е действал оператор на унищожение, и собствените състояния на  $(A - 1)$ -нуклонната система на остатъчното ядро. Броят на функциите на припокриване е безкраен, тъй като функциите  $\varphi = a(\mathbf{k}) | \Psi_0 \rangle$  например, не са собствени вектори на хамилтониана на  $(A - 1)$ -нуклонната система.

Чрез функциите на припокриване  $\phi_f(\mathbf{x})$  едночастичната матрица на плътността се представя във вида:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_f \phi_f^*(x) \phi_f(x'), \quad (5.6)$$

От своя страна функциите на припокриване  $\phi_f(\mathbf{x})$  могат да се разложат по пълния базис на естествените орбитали (тук в импулсното пространство):

$$\phi_f(\mathbf{k}) = \sum_\alpha \langle \psi_\alpha | \phi_f \rangle \psi_\alpha(\mathbf{k}). \quad (5.7)$$

Нека сега се върнем към дефиницията за спектрална функция (5.2). Ако пълният ъглов момент и четността на ядрото-мишена имат стойности  $J^\pi = 0^+$  и в израза (5.2) вмъкнем пълен набор от собствени функции на хамилтониана  $\hat{H}$ , включваща дискретна и непрекъсната част, то  $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E)$  придобива вида:

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) &= \sum_f \langle \Psi_0 | a^+(\mathbf{k}') | \Psi_f \rangle \langle \Psi_f | a(\mathbf{k}) | \Psi_0 \rangle \delta(E + E_f - E_A^0) \quad (5.8) \\
&= \sum_f \phi_f^*(\mathbf{k}') \phi_f(\mathbf{k}) \delta(E + E_f - E_A^0) .
\end{aligned}$$

Като заместим в горния израз представянето на функциите на припокриване, ур. (5.7), за спектралната функция получаваме:

$$\begin{aligned}
S(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) &= \sum_{\alpha\beta} \psi_\alpha^*(\mathbf{k}') \psi_\beta(\mathbf{k}) \sum_f \langle \phi_f | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\beta | \phi_f \rangle \delta(E + E_f - E_A^0) \quad (5.9) \\
&= \sum_{\alpha\beta} \psi_\alpha^*(\mathbf{k}') \psi_\beta(\mathbf{k}) S_{\alpha\beta}(E) ,
\end{aligned}$$

където

$$S_{\alpha\beta}(E) = \sum_f \langle \phi_f | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\beta | \phi_f \rangle \delta(E + E_f - E_A^0) . \quad (5.10)$$

Величината  $S_{\alpha,f}^{1/2} \equiv \langle \psi_\alpha | \phi_f \rangle$  характеризира приноса на естествената орбитала  $\alpha$  към функцията на припокриване при прехода от основно състояние на ядрото-мишена към състояние  $f$  на  $(A-1)$ -нуклонната система на остатъчното ядро. Тя определя както спектроскопичния фактор на състоянието  $\Psi_f$  [64]:

$$S_f^{(A-1)} \equiv \langle \phi_f | \phi \rangle = \sum_\alpha S_{\alpha,f} = \sum_\alpha \langle \psi_\alpha | \phi_f \rangle , \quad (5.11)$$

така и естественото число на запълване на орбиталата  $\alpha$ :

$$n_\alpha = \sum_f S_{\alpha,f} = \sum_f \langle \psi_\alpha | \phi_f \rangle . \quad (5.12)$$

Ако въведем различни означения за собствените функции на остатъчното ядро  $|\Psi_f\rangle$  за дискретния спектър  $|\Psi_{E_\nu, \mu}\rangle$ , където  $E_\nu$  е енергията, а  $\mu$  - израждането на разглежданото ниво, и за състоянията от непрекъснатия спектър  $|\Psi_{E_f, c}\rangle$  с енергия  $E_f$  в канала на разсейване  $c$ , ур. (5.10) може да се запише по следния начин:

$$\begin{aligned}
S_{\alpha\beta}(E) &= \sum_{\nu\mu} \langle \phi_{\nu\mu} | \psi_{\alpha} \rangle \langle \psi_{\beta} | \phi_{\nu\mu} \rangle \delta(E + E_f - E_A^0) \\
&+ \sum_c \langle \phi_{E_f=E_A^0-E_{f,c}} | \psi_{\alpha} \rangle \langle \psi_{\beta} | \phi_{E_f=E_A^0-E_{f,c}} \rangle \theta(E_A^0 - E^{trh} - E) \\
&\equiv S_{\alpha\beta}^{d.s.}(E) + S_{\alpha\beta}^{c.s.}(E) .
\end{aligned} \tag{5.13}$$

В горния израз са използвани следните означения:  $\phi_{\nu\mu}$  и  $\phi_{E_f=E_A^0-E_{f,c}}$  са функциите на припокриване съответно към дискретно ниво и състояние от непрекъснатия спектър на остатъчното ядро,  $E^{trh}$  е минималната енергия, при която законът за запазване на енергията позволява напускане на една частица от  $A$ -нуклонната система на ядро-мишена.

В следващата част ще покажем, че съществува процедура, по която функциите на припокриване за дискретни нива на остатъчното ядро може да се получи от едночастичната матрица на плътността на ядрото-мишена. Тогава съгласно ур. (5.13) може да се пресметне и спектралната функция  $S_{\alpha\beta}^{d.s.}(E)$  за състояния от дискретния спектър на остатъчното ядро. По този начин от едночастичната матрица на плътността на  $A$ -нуклонна система на ядрото-мишена се получава информация за сеченията на преките реакции с избиване на един нуклон и за структурата на остатъчното ядро.

## 5.2 Едночастични функции на припокриване и спектроскопични фактори

Функциите на припокриване и спектроскопичните фактори са основните елементи, необходими за пресмятането на сеченията на преките реакции с избиване на един нуклон. Те носят информация за структурата както на ядрото-мишена, така и на остатъчното ядро. По дефиниция функция на припокриване се нарича матричният елемент на оператора на унищожение на нуклон между многочастичната вълнова функция  $\Psi^{(A)}$ , описваща основното състояние на ядрото-мишена, и многочастичната вълнова функция  $\Psi_{\alpha}^{(A-1)}$  на остатъчното ядро в крайно състояние  $\alpha$ :

$$\phi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \langle \Psi_{\alpha}^{(A-1)} | a(\mathbf{r}) | \Psi^{(A)} \rangle , \tag{5.14}$$

В общия случай тя не е нормирана, затова се дефинира величината спектроскопичен фактор за дадения преход:

$$S_{\alpha} = \langle \phi_{\alpha} | \phi_{\alpha} \rangle , \tag{5.15}$$

който представлява нормата на  $\phi_\alpha(\mathbf{r})$ . С негова помощ се задава нормирана функция на припокриване:

$$\tilde{\phi}_\alpha(\mathbf{r}) = S_\alpha^{-1/2} \phi_\alpha(\mathbf{r}) \quad (5.16)$$

Обикновено  $\tilde{\phi}_\alpha$  се представя чрез собствена функция на потенциала на *Уудс-Саксън* (2.9), различна за всеки преход  $\alpha$ . Параметрите на потенциала - радиус и дифузност, както и спектроскопичният фактор се определят от изискването за максимално добро описание на експерименталните данни за сечението на реакцията.

Този емпиричен подход се прилага в случаите, когато изследванията на преките реакции са фокусирани главно върху механизма на реакцията, но не и върху свойствата на ядрата, участващи във взаимодействието. Когато от експерименталните данни за характеристиките на реакцията трябва да се извлече информация за ядрената структура, очевидно функцията на припокриване и спектроскопичния фактор за даден преход трябва да се определят в рамките на микроскопичен модел. Този проблем е изследван подробно в работа [64]. В нея е показано, че  $\tilde{\phi}_\alpha$  не може да се идентифицира с феноменологични едночастични вълнови функции, особено при преходи към състояния, далеч от нивото на *Ферми*. Известно е, че в приближението на независимите частици не може да се обясни наблюдаваната фрагментация на силата на дупчестите състояния [67, 247]. В следствие на остатъчното взаимодействие дупчестото състояние в ядрото-мишена не е собствено състояние на остатъчното ядро и неговата сила е разпределена върху няколко негови състояния.

Важна крачка напред в разбирането за връзката на функциите на припокриване, спектроскопичните фактори и енергията на отделяне на един нуклон представлява работа [289]. В нея е показано, че тези величини, поне по принцип, могат да бъдат получени от едночастичната матрица на плътността на ядрото мишена. В тази част от дисертацията ще обсъждаме резултатите, получени от приложението на тази процедура към корелираната едночастична матрица на плътността в Приближението от нисък порядък в метода на *Ястров*  $\rho_{LOA}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , ур. (4.9). Ще разгледаме и сравнението между едночастични функции в средно поле, естествени орбитали и функции на припокриване, които често се използват алтернативно при описанието на преките ядрени реакции. Основните изводи от този кръг изследвания са публикувани в работи [A10, A13].

Нека за начало да запишем дефиницията за едночастичната матрица на плътността, отговаряща на основното състояние  $\Phi^{(A)}$  на ядрена система с  $A$ -нуклона, в координатното пространство:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Phi^{(A)} | a^+(\mathbf{r})a(\mathbf{r}') | \Phi^{(A)} \rangle . \quad (5.17)$$

Ако вмъкнем пълен набор от собствени функции  $\{\Phi_\alpha^{(A-1)}\}$  на системата от  $(A - 1)$ -нуклона, получаваме едночастичната матрица на плътността на  $A$ -нуклонната система  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , ур. (5.17), изразена чрез функциите на припокриване  $\phi_\alpha$ , ур. (5.14), или чрез нормираните функции на припокриване  $\tilde{\phi}_\alpha$ , ур. (5.16), и спектроскопичните фактори  $S_\alpha$ , ур. (5.15), за даден преход:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{\alpha} \langle \Phi^{(A)} | a^+(\mathbf{r}) | \Phi_{\alpha}^{(A-1)} \rangle \langle \Phi_{\alpha}^{(A-1)} | a(\mathbf{r}') | \Phi^{(A)} \rangle \\ &= \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(\mathbf{r})\phi_{\alpha}(\mathbf{r}') = \sum_{\alpha} S_{\alpha} \tilde{\phi}_{\alpha}^*(\mathbf{r})\tilde{\phi}_{\alpha}(\mathbf{r}') . \end{aligned} \quad (5.18)$$

В горното уравнение сумирането включва всички възможни собствени състояния на  $(A - 1)$ -нуклонната система, в това число и тези от непрекъснатия спектър.

Сравнявайки едночастичната матрица на плътността, изразена чрез функциите на припокриване, и представянето ѝ в термини на естествени орбитали, ур. (4.23), става очевидно, че те имат много сходна структура.

Когато основното състояние  $\Phi^{(A)}$  на системата от  $A$ -нуклона се характеризира с ъглов момент и четност  $J^{\pi} = 0^{+}$ , всяко собствено състояние  $\Phi_{\alpha}^{(A-1)}$  се характеризира с "едночастични" квантови числа  $\{ljm\}$ , т.е.  $\{\alpha \equiv nljm\}$ , където  $n$  е поредният номер на  $\{ljm\}$  състоянието. Тогава функциите на припокриване  $\phi_{\alpha}$ , както и естествените орбитали, ур. (4.37), могат да се представят като произведения от радиална и спин-орбитална част:

$$\phi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \phi_{nlj}(r) Y_{ljm}(\Omega, \sigma) , \quad (5.19)$$

където  $Y_{ljm}(\Omega, \sigma) = [Y_l(\Omega) \times \chi^{1/2}(\sigma)]_m^j$  и  $\sigma$  е спиновата променлива. Замествайки ур. (5.19) в израза (5.18), за едночастичната матрица на плътността получаваме:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{lj} \rho_{lj}(r, r') \sum_{m\sigma} Y_{ljm}^*(\Omega, \sigma) Y_{ljm}(\Omega', \sigma) . \quad (5.20)$$

Поради сферичната симетрия радиалната компонента  $\rho_{lj}(r, r')$  и спектроскопичният фактор  $S_{nlj}$  не зависят от проекцията на ъгловия момент  $m$ . От сравнението на ур. (4.23) и ур. (5.18), както и на ур. (4.26) и ур. (5.12), следва, че за всяко  $\{lj\}$  подпространство спектроскопичният фактор  $S_{nlj}$  е по-малък от най-голямото число на запълване  $n_{nlj}^{max}$  с квантови числа  $\{lj\}$ , т.е:

$$S_{nlj} \leq n_{nlj}^{max} . \quad (5.21)$$

В основата на метода за получаване на функциите на припокриване от едно-частичната матрица на плътността [289] лежи теоремата, че функциите на припокриване могат да се получат като решения на едночастичното уравнение на Шрьодингер:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_\alpha(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \mathcal{M}(r, r'; E_\alpha^{(A-1)}) \phi_\alpha(\mathbf{r}') = [E_\alpha^{(A)} - E_\alpha^{(A-1)}] \phi_\alpha(\mathbf{r}) , \quad (5.22)$$

където  $\mathcal{M}(r, r'; E_\alpha^{(A-1)})$  играе ролята на зависещо от енергията средно поле. Поради крайните размери на средното поле, асимптотичното поведение на функцията на припокриване за всяко свързано състояние на  $(A - 1)$ -нуклонната система има формата на плоска вълна:

$$\phi_{nlj}(r) \rightarrow C_{nlj} \exp(-k_{nlj} r) / r . \quad (5.23)$$

Вълновото число

$$k_{nlj} = \hbar^{-1} \sqrt{2m(E_{nlj}^{(A-1)} - E_0^{(A)})} \quad (5.24)$$

зависи от енергията на отделяне  $\epsilon_{nlj} = E_{nlj}^{(A-1)} - E^{(A)}$ . Очевидно, по-високо възбудените състояния имат по-бърз разпад. От ур. (5.18) и (5.20) следва, че при  $r' \equiv a \rightarrow \infty$  е в сила зависимостта:

$$\rho_{lj}(r, a) \longrightarrow \phi_{n_0 lj}(r) C_{n_0 lj} \exp(-k_{n_0 lj} a) / a , \quad (5.25)$$

където  $\phi_{n_0 lj}(r)$  е радиалната част на функцията на припокриване, съответстваща на състояние с най-ниска енергия в разглежданото подпространството  $\{lj\}$ . Неизвестната константа  $C_{n_0 lj}$  може да се получи от израза за радиалната част на диагоналния елемент на едночастичната матрица на големи разстояния. тъй като

$$\rho_{lj}(a, a) \longrightarrow |C_{n_0 lj}|^2 \exp(-2k_{n_0 lj} a) / a . \quad (5.26)$$

От изразите (5.25) и (5.26) следват функцията на припокриване на най-ниското по енергия свързано състояние с квантови числа  $\{lj\}$ :

$$\phi_{n_0 lj}(r) = \frac{\rho_{lj}(r, a)}{C_{n_0 lj} \exp(-k_{n_0 lj} a) / a} , \quad (5.27)$$

енергията на отделяне:

$$\epsilon_{n_0 l_j} = \hbar^2 k_{n_0 l_j}^2 / 2m , \quad (5.28)$$

и спектроскопичният фактор:

$$S_{n_0 l_j} = \langle \phi_{n_0 l_j} | \phi_{n_0 l_j} \rangle . \quad (5.29)$$

По принцип описаната процедура може да се повтори за получаване на характеристиките на прехода към следващото по енергия състояние в същото подпространство  $\{l_j\}$ , както и за анализиране на останалите свързани състояния на  $(A - 1)$ -нуклонната система на остатъчното ядро, като се знае едночастичната матрица на плътността на ядрото-мишена.

Тук трябва да обърнем внимание на факта, че при разглежданията досега действието на *Кулоновите* сили не е отчитано. Това означава, че направените дотук изводи се отнасят за свързани състояния на неутроните в остатъчното ядро. Ако се изследват функциите на припокриване за протони, трябва да се отчита и асимптотиката на *Кулоновото* взаимодействие.

Процедурата за получаване на функциите на припокриване, спектроскопичните фактори и енергиите на отделяне, представена чрез уравнения (5.25)-(5.29), е приложена върху корелираната едночастична матрица на плътността  $\rho_{LOA}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , ур. (4.9), за ядрата  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ . Пак ще подчертаем, че тази матрица отчита късодействащите корелации между нуклоните в ядрото и нейното представяне в термини на естествените орбитали е добре изучено. Това дава възможност за сравняване на едночастични вълнови функции, естествени орбитали и функции на припокриване от една страна, и от друга страна - на естествените числа на запълване и на спектроскопичните фактори.

Проблем при използването на матрицата възниква поради факта, че за построяване на некорелираната ѝ част са използвани осцилаторни вълнови функции. Те притежават *Гаусова* асимптотика на големи разстояния, която е твърде далеч от реалистичното експоненциално поведение на едночастичните вълнови функции. Тази трудност се преодолява, като се разглежда не една точка  $a$  в асимптотичната област, а интервал  $[a_L, a_H]$  около нея, като този интервал се избира там, където стойността на диагоналния елемент  $\rho_{l_j}(r, r')$  е по-малка от 10% от максималната му стойност. Търси се такава радиална част  $\rho_{n_0 l_j}(r, r') = \phi_{n_0 l_j}(r) \phi_{n_0 l_j}(r')$ , чийто диагонален елемент не надвишава  $\rho_{l_j}(r, r)$  за всяка точка  $r$  и която минимизира величината  $Tr[(\rho_{l_j} - \rho_{n_0 l_j})^2]$ . Налага се и допълнителното условие функцията на припокриване  $\phi_{n_0 l_j}(r)$ , ур. (5.27), да удовлетворява уравненията (5.25) и (5.26), като минимизира отклонението от матричните елементи в интервала  $[a_L, a_H]$ . Като следствие се дефинират еднозначно стойностите на  $a$ ,  $a_L$ ,  $a_H$ ,  $C_{n_1 l_j}$  и  $k_{n_1 l_j}$ . Пред-

ложената рецепта за решаване на проблема с асимптотиката на аналитичната матрица на плътността не е еднозначна, но при реалистични едночастични матрици на плътността тази трудност не възниква изобщо.

Процедурата по възстановяване на функциите на припокриване на  $(A - 1)$ -нуклонната система от едночастичната матрица на плътността на система с  $A$  частици е приложена отделно за всеки набор квантови числа  $\{nl\}$  (използваният аналитичен модел за едночастичната матрица на плътността (част (4.1)) не различава състояния с  $j = l \pm 1/2$ ). Получените енергии на отделяне  $\epsilon_\alpha$ , спектроскопични фактори  $S_\alpha$  и функции на припокриване  $\phi_{n_0 l j}$  за ядрата  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$  са представени съответно в таблица (5.1) и фигура (5.1).

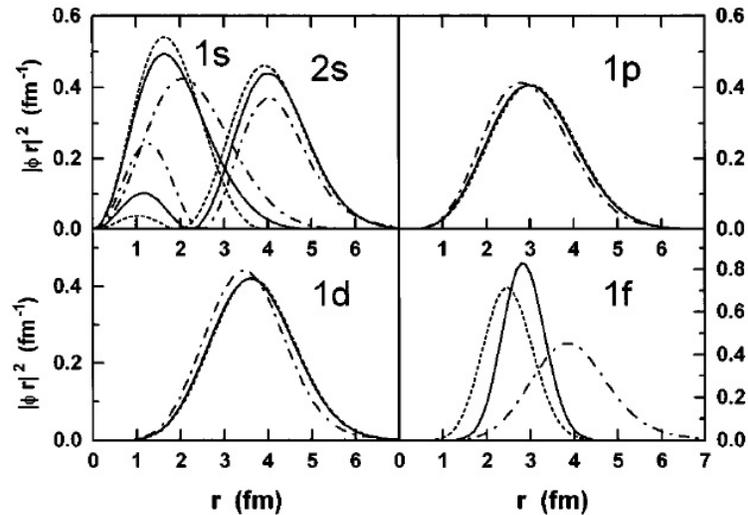
Таблица 5.1: Енергии на отделяне  $\epsilon_\alpha$  и спектроскопични фактори  $S_\alpha$  за ядрата  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ , сравнени с едночастични енергии в метода на Хартри-Фок  $\epsilon_\alpha^{HF}$  (набор параметри SkI [50]), естествени числа на запълване  $n_\alpha$  [A3] и експериментални данни.

|                  | $nl$ | $\epsilon_\alpha^{HF}$ [MeV] | $\epsilon_\alpha$ [MeV] | $\epsilon_{exp}$ [MeV] | $S_\alpha^{HF}$ | $S_\alpha$ | $n_\alpha$ | $S_{exp}$         |
|------------------|------|------------------------------|-------------------------|------------------------|-----------------|------------|------------|-------------------|
| $^{16}\text{O}$  | 1s   | 32.96                        | 35.82                   | 47.0 <sup>a</sup>      | 1               | 0.940      | 0.95       |                   |
|                  | 1p   | 20.81                        | 17.48                   | 21.8 <sup>b</sup>      | 1               | 0.953      | 0.965      |                   |
|                  | 1d   | 5.31                         | 12.76                   | 4.14 <sup>b</sup>      | 0               | 0.004      | 0.006      |                   |
| $^{40}\text{Ca}$ | 1s   | 41.04                        | 32.85                   | 56.0 <sup>a</sup>      | 1               | 0.763      | 0.89       | 0.75 <sup>d</sup> |
|                  | 1p   | 32.17                        | 29.54                   | 40.0 <sup>a</sup>      | 1               | 0.89       | 0.938      | 0.72 <sup>d</sup> |
|                  | 1d   | 22.16                        | 24.75                   | 22.38 <sup>c</sup>     | 1               | 0.907      | 0.946      | 0.74 <sup>d</sup> |
|                  | 2s   | 15.67                        | 13.07                   | 18.2 <sup>c</sup>      | 1               | 0.953      | 0.958      | 0.64 <sup>d</sup> |
|                  | 1f   | 11.25                        | 8.69                    | 8.36 <sup>c</sup>      | 0               | 0.01       | 0.013      | 0.11 <sup>d</sup> |

<sup>a</sup> от [250], <sup>b</sup> от [290], <sup>c</sup> от [64], <sup>d</sup> от [65]

Резултатите за енергиите на отделяне  $\epsilon_\alpha$  са в добро съгласие със стойностите, получени в метода на *Хартри-Фок* [50], и със съществуващите експериментални данни. За разлика от тях, спектроскопичните фактори  $S_\alpha$  не възпроизвеждат числата на запълване в метода на средното поле. Наличието на корелации в едночастичната матрица на плътността води до изпразване на морето на *Ферми* и заселване на частичните състояния. Пресметнатите стойности на  $S_\alpha$  са близки до експерименталните данни, като са систематично по-високи от тях. Това се дължи на схематичното отчитане на корелациите в разглеждания аналитичен модел за едночастичната матрица на плътността. Тази е причината и за по-малката стойност на спектроскопичния фактор за състоянието 1s в ядрото  $^{40}\text{Ca}$  в сравнение с лежащото до *Ферми* ниво състояние 2s.

В таблица (5.1) са представени и стойностите на естествените числа на запълване  $n_\alpha$ , получени при диагонализацията на същата едночастична матрица на плътността (част (4.2.2)). Сравнението със спектроскопичните фактори  $S_\alpha$  показва, че неравенството (5.21) е изпълнено за всички разглеждани състояния, като стойностите на  $S_\alpha$  следват тенденцията на естествените числа на запълване.



Фигура 5.1: Функции на припокриване (плътни линии), едночастични вълнови функции в метода на Хартри-Фок (пунктирни линии с точки) и естествени орбитали (пунктирни линии) за ядрото  $^{40}\text{Ca}$ .

Подобен извод може да се направи и за сравнението между функциите на припокриване  $\tilde{\phi}_\alpha$  и естествените орбитали, показано на фигура (5.1). За дупчестите състояния ( $1s$ ,  $2s$ ,  $1p$  и  $1d$  в ядрото  $^{40}\text{Ca}$ ) и трите типа едночастични функции са много близки. Това оправдава използването на едночастични вълнови функции, получени в слоестия модел, в пресмятане на сечения на реакции за тези нива в Плосковълново импулсно разпределение, например в [287, 291]. Картината е различна, сравнявайки функции на частичните състояния ( $1f$  в ядрото  $^{40}\text{Ca}$ ). Очевидно едночастичната Хартри-Фокова функция значително се отличават от функцията на припокриване, която е локализирана в обема на ядрото. Естествената орбитала е близка до функцията на припокриване. В част (4.2.2) беше показано, че в следствие на късодействащите корелации орбиталите са различни от нула в областта, в която локалната плътност на системата е различна от нула. По тази причина и функциите на припокриване са пикирани на разстояния, далеч по-малки от тези, характерни за едночастичните вълнови функции в метода на средното поле за частичните състояния. Изводът, който следва от направеното сравнение, показва, че нито естествените орбитали, а още по-малко едночастичните Хартри-Фоккови функции, могат да се използват вместо частичните функции на припокриване при

анализа на експерименталните данни за сеченията на реакциите с избиване на нуклон.

**В заключение** ще повторим, че е показана възможността за получаване на функции на припокриване и спектроскопични фактори на  $(A - 1)$ -нуклонна система на базата на едночастичната матрица на плътността на ядрото с масово число  $A$ . Въпреки че за корелираната едночастична матрица на плътността е използвано едно схематично приближение, описаната процедура води до задоволителни количествени резултати. Следователно, предложен е алтернативен подход за получаване на важните за описанието ядрени процеси с избиване на един нуклон характеристики – функции на припокриване и спектроскопични фактори, изискващ значително по-малък ресурс в сравнение например с метода, представен в [64]. За получаване на адекватни резултати е необходимо само използването на реалистична едночастична матрица на плътността, която може да се пресметне в рамките на метода на *Бракнер-Хартри-Фок* [292, 293], на Вариационния метод на *Монте Карло* [208, 249] или на метода на хиперсвързаната верига, подробно описан в част (3.4.3).

### 5.3 Преки реакции с избиване на един нуклон

Както беше вече отбелязано, преките реакции с избиване на един нуклон са важен източник на информация както за структура на ядрата, така и за механизма на взаимодействие на налитащото ядро и ядрото-мишена. Например, от измерените сечения на реакцията  $(p, d)$  се пресмятат стойностите на спектроскопичните фактори  $S_\alpha$ , ур. (5.15) [300, 301]. Реакциите с избиване на протон от електрон  $(e, e'p)$  служат за получаване на импулсните разпределения на нуклоните в ядрото-мишена [65, 247, 302]. При анализа на експерименталните данни се използват едночастични функции, получени в метода на средното поле – феноменологичните собствени функции на потенциала на *Уудс-Саксън* или *Хартри-Фокови* вълнови функции. Както беше показано в част (5.2), това приближение е оправдано в случая, когато се разглеждат дупчести състояния, но е неприложимо за частични състояния.

В тази част от дисертацията ще разгледаме приложението на естествените орбитали и функциите на припокриване при описание на някои преки реакции.

#### 5.3.1 $(e, e'p)$ реакции

Най-прекият път за получаване на информация за характеристиките на едночастичните състояния са процесите по избиване (knock-out) на един нуклон от ядрото-

мишена. Като илюстрация на това твърдение ще представим резултатите за едно-частичното импулсно разпределение, полученото от анализа на експериментите по избиване на един протон. Те са представени подробно в работи [A12, A13, B7].

Сечението на  $(e, e')$  реакцията в PWIA-приближението е равно на:

$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_{e'} d\mathbf{k}_p} = K \sigma_{ep} S(\mathbf{p}_m, E_m) . \quad (5.30)$$

В горната формула  $K$  е кинематичен фактор, а  $\sigma_{ep}$  е елементарното електрон-протонно сечение [295]. Липсващата енергия  $E_m$  и липсващият импулс  $p_m$  на протона могат да се изразят чрез загубата на енергия  $\omega$  и импулс  $q$  на електрона:

$$E_m = \omega - E_p - T_{A-1} , \quad (5.31)$$

$$p_m = k_p - q , \quad (5.32)$$

където  $E_p$  и  $k_p$  са съответно енергията и импулса на избития протон, а  $T_{A-1}$  е кинетичната енергия на остатъчното ядро. Спектралната функция  $S(\mathbf{p}_m, E_m)$  представлява вероятността за избиване на протон, заселващ състояние с енергия на избиване  $E_m$  и импулс  $\mathbf{p}_m$ . При преход към дискретно състояние  $\alpha$  в остатъчното ядро тя се записва във вида:

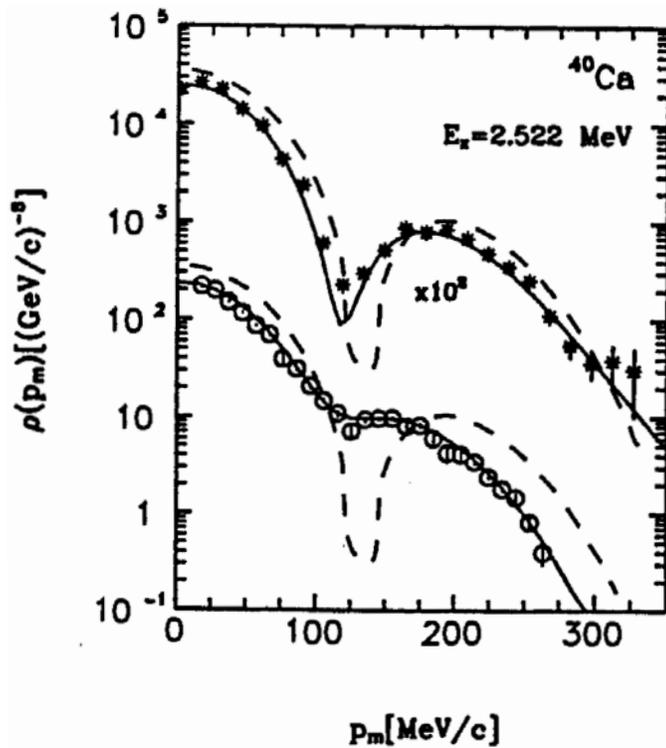
$$S(\mathbf{p}_m, E_m) = \rho_\alpha(\mathbf{p}_m) \delta(E_m - E_\alpha) , \quad (5.33)$$

където импулсното разпределение  $\rho_\alpha$  е *Фурие* образ на функцията на припокриване между състоянията на ядрото-мишена и на остатъчното ядро:

$$\rho_\alpha(p_m) = | \phi_\alpha(\mathbf{p}_m) |^2 . \quad (5.34)$$

Спектроскопичният фактор на дадено състояние е равен на скалиращия фактор, който е необходим за възпроизвеждане от импулсното разпределение  $\phi_\alpha(\mathbf{p}_m)$  на експерименталните данни.

На фигура (5.2) са представени ”експерименталните” данни за импулсното разпределение при реакцията  $^{40}\text{Ca}(e, e')^{39}\text{K}$ , получени при различни кинематични условия във входния канал. Те са сравнени с теоретичните пресмятания за  $\rho_\alpha(p_m)$ , ур. (5.34), като е използвана функцията на припокриване, описаната в част (5.2). Представени са и резултатите в Импулсно приближението с *Кулоново* смутени вълни (Coulomb Distorted Wave Impulse Approximation (CDWIA)) [65]. Свободни параметри при тези пресмятания са спектроскопичният фактор на едночастичното ниво и средноквадратичният радиус на съответната функция на припокриване. Тук



Фигура 5.2: Импулсно разпределение за преход към възбуденото  $1/2^+$  състояние в ядрото  $^{39}\text{K}$ , получено в реакцията  $^{40}\text{Ca}(e, e'p)$ . Резултатите, получени с функция на припокриване за  $2s$ -състоянието, са показани с пунктирна линия. С плътна линия са представени резултатите в Импулсно приближението с Кулоново смутени вълни [65]. Емпиричните данни, получени при различни кинематични условия във входния канал, са представени съответно с кръгчета и точки [65].

трябва още веднъж да повторим, че в процедурата за екстрахиране на функции на припокриване от корелирана едночастична матрица на плътността, изложена в част (5.2), не съществуват свободни параметри. Недостатък на настоящите пресмятания е фактът, че при получаване на функции на припокриване не са взети под внимание корекциите, необходими за отчитане на Кулоновото взаимодействие на избивания протон с остатъчното ядро. Независимо от това сравнението на емпиричните данни с настоящите теоретични резултати в областта на липсващия момент, по-малък и сравним с импулса на Ферми  $k_F \approx 250 \text{ MeV}/c$ , е много добро. Значително влияние на късодействащите корелации може да се очаква при по-високи импулси  $p_m$ . За коректното описание на експерименталните данни в тези области е необходимо да се използва реалистична едночастична матрица на плътността и да се отчита правилно асимптотиката на протонните функции на припокриване.

### 5.3.2 $y$ -скейлинг

Импулсното разпределение на нуклоните е една от основните едночастични характеристики на ядрената структура, която дава възможност за изследване на ефектите на късодействащите корелации и ясно очертаване на границите на приложимост на метода на независимите частици. Един от най-често използваните методи за експериментално и теоретично изучаване на импулсното разпределение при разсейване на електрони от ядра е свързан с така нареченият  $y$ -скейлинг. Той е предложен от *Г. Вест* [294] и развит по-нататък в работи [233–235].

В Плосковълновото импулсно приближение квазиеластичното сечението на разсейване на електрони от ядро с  $Z$  на брой протони и  $N$  на брой неутрони се задава във вида:

$$\sigma = (Z\bar{\sigma}_{ep} + N\bar{\sigma}_{en}) \left| \frac{\partial \omega}{k \partial \cos \alpha} \right|^{-1} F(q, y) , \quad (5.35)$$

където  $\bar{\sigma}_{ep}$  и  $\bar{\sigma}_{en}$  са съответно релятивистките електрон-протонно и електрон-неутронно сечения на разсейване на електрон от свободен нуклон с импулс  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{q}$  е предаденият импулс,  $\omega$  – предадената енергия,  $\cos \alpha = (\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})/qk$  и  $\left| \frac{\partial \omega}{k \partial \cos \alpha} \right|^{-1}$  е кинематичен фактор. Структурната функция  $F(q, y)$  се изразява чрез спектралната функция  $P(k, E) = S(k, k, E)$ , ур. (5.2, по формулата:

$$F(q, y) = 2\pi \int_{E_{min}}^{E_{max}(q, y)} dE \int_{k_{min}(q, y, E)}^{k_{max}(q, y, E)} dk k P(k, E) . \quad (5.36)$$

В горния израз променливата  $y$  е дефинирана по следния начин:

$$y \equiv (\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})/q = \frac{M}{q} \left( \omega - \frac{q^2}{2M} \right) , \quad (5.37)$$

където  $M$  е масата на нуклона. Във израза (5.36) границите на интегриране са определени от закона за запазване на енергията [235].

Спектралната функция  $P(k, E)$  може да се представи като сума от две части:

$$P(k, E) = \sum_f \left| \left\langle \Psi_f^{(A-1)} \mid a(\mathbf{k}) \mid \Psi_0^{(A)} \right\rangle \right|^2 \delta \left[ E - (E_f^{(A-1)} - E_A) \right] \quad (5.38)$$

$$= P_{gr}(k, E) + P_{ex}(k, E) . \quad (5.39)$$

Първата част представлява вероятността в изходния канал остатъчното ядро да бъде в основно състояние, а втората - във възбудено. Това разложение дава възможност и импулсното разпределение на нуклоните в ядрото-мишена да се изрази

като сума от два члена:

$$\begin{aligned} n(k) &= \left\langle \Psi_0^{(A)} \left| a^+(\mathbf{k})a(\mathbf{k}) \right| \Psi_0^{(A)} \right\rangle = \sum_f \left| \left\langle \Psi_f^{(A-1)} \left| a(\mathbf{k}) \right| \Psi_0^{(A)} \right\rangle \right|^2 \\ &= \left| \left\langle \Psi_0^{(A-1)} \left| a(\mathbf{k}) \right| \Psi_0^{(A)} \right\rangle \right|^2 + \sum_{f \neq 0} \left| \left\langle \Psi_f^{(A-1)} \left| a(\mathbf{k}) \right| \Psi_0^{(A)} \right\rangle \right|^2 . \end{aligned} \quad (5.40)$$

Замествайки уравнение (5.38) в ур. (5.36) и използвайки разложението (5.40) за структурната функция  $F(q, y)$  се получава:

$$F(q, y) = 2\pi \int_{|y|}^{\infty} n_{gr}(k) k dk + 2\pi \int_{E_{min}}^{\infty} dE \int_{|y-(E-E_{min})|}^{\infty} P_{ex}(k, E) k dk . \quad (5.41)$$

След очевидни преобразувания така наречената скейлингова функция  $F(y) \equiv F(q \rightarrow \infty, y)$  се записва във вида:

$$F(y) = f(y) - B(y) , \quad (5.42)$$

където

$$f(y) = 2\pi \int_{|y|}^{\infty} n_{gr}(k) k dk \quad (5.43)$$

зависи от импулсното разпределение на остатъчното ядро в основно състояние, а

$$B(y) = 2\pi \int_{E_{min}}^{\infty} dE \int_{|y|}^{|y-(E-E_{min})|} P_{ex}(k, E) k dk \quad (5.44)$$

отчита приноса на преходите към възбудени състояния.

Импулсното разпределение  $n(k)$ , ур. (5.41), може да се получи като производна от скейлинговата функция  $F(y)$  по променливата  $y$ :

$$n(k) = -\frac{1}{2\pi y} \left[ \frac{dF(y)}{dy} + \frac{dB(y)}{dy} \right] , \quad |k| = y . \quad (5.45)$$

Както се вижда от ур.(5.45), при  $y$ -скейлинговия анализа импулсното разпределение изисква познаването и на двете функции  $F(y)$  и  $B(y)$ . Скейлинговата функция  $F(y)$  се получава от асимптотичното поведение на експерименталните данни за структурната функция  $F(q, y)$  [233]:

$$F_1^{exp}(q, y) = \frac{\sigma^{exp}(q, \omega)}{(Z \bar{\sigma}_{ep} + N \bar{\sigma}_{en})} \left| \frac{\partial \omega}{k \partial \cos \alpha} \right| . \quad (5.46)$$

В работа [235] е предложен приближен подход за пресмятане на функцията  $B(y)$ . В него спектралната функция  $P_{ex}(k, E)$  в ур. (5.44) се изразява чрез усред-

нената енергия на възбуждане на остатъчното ядро  $\bar{E}_{ex}$ :

$$P_{ex}(k, E) \simeq n_{ex}(k) \delta(E - \bar{E}_{ex}) . \quad (5.47)$$

Тя от своя страна се получава от следното правило на сумите [296, 297]:

$$\frac{E_A}{A} = \frac{1}{2} \left[ \langle E \rangle - \langle T \rangle \frac{(A-2)}{(A-1)} \right] , \quad (5.48)$$

където  $E_A/A$  е енергията на връзка на нуклон,  $\langle T \rangle$  е средната кинетична енергия:

$$\langle T \rangle = \int \frac{k^2}{2M} P_{ex}(k, E) d\mathbf{k} dE = \int \frac{k^2}{2M} n(k) d\mathbf{k} , \quad (5.49)$$

а  $\langle E \rangle$  е средната енергия на отделяне:

$$\langle E \rangle = \int E P_{ex}(k, E) d\mathbf{k} dE = E_{min} S_{gr} + \bar{E}_{ex} S_{ex} . \quad (5.50)$$

Вероятностите остатъчното ядро да засели съответно основно или възбудено състояние се пресмятат по формулите:

$$S_{gr} = 4\pi \int n_{gr} k^2 dk , \quad S_{ex} = 4\pi \int n_{ex} k^2 dk . \quad (5.51)$$

Уравнения (5.47-5.51) напълно определят функцията  $B(y)$  в термини на  $n_{gr}$  и  $n_{ex}$ .

Познаването на  $F(y)$ , заедно с използването на реалистични оценки за функцията  $B(y)$ , са основа за изучаване на импулсното разпределение в ядрената материя и в ядрата  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^{12}\text{C}$  и  $^{56}\text{Fe}$ , [233, 235]. Резултатите от тези изследвания показват, че в областта на малките импулси (до  $1 \div 2 \text{ fm}^{-1}$ ) импулсното разпределение на нуклоните може да се опише в рамките на модела на независимите частици. При високи стойности на импулсите  $n(k)$  има универсално поведение, почти независимо от атомния номер на ядрото, което е свързано с късодействащите и тензорни нуклон-нуклонни корелации.

Фактът, че отчитането на нуклон-нуклонните корелации оказват пряко въздействие върху формата на теоретичното импулсно разпределение в ядрата, и възможността да се получат "експериментални" данни за тази величина от у-скейлинговия анализ на сеченията на разсейване от ядра, са мотивите за приложението на импулсното разпределение, получено в Приближението от нисък порядък на метода на *Ястров* (част (4.2)), за пресмятане на функциите  $F(y)$  и  $B(y)$ . Резултатите от тези изследвания са представени в работи [A5, A7, B9]. Те се основават на представянето на едночастичната матрица на плътността (4.2.3), а оттам и на импулсното разпределение на нуклоните, като сума от две части:

$$n(k) = n_1(k) + n_2(k) . \quad (5.52)$$

Първият член от сумата е свързан с приноса на дупчестите едночастични състояния, заемани от нуклоните. Той възпроизвежда с добра точност експерименталните данни за импулсното разпределение за малки стойности на импулсите ( $k \leq 2\text{fm}^{-1}$ ). Втората част се свързва с високоимпулсните компоненти на разпределението ( $k \geq 2\text{fm}^{-1}$ ) и отчита влиянието на състоянията над *Ферми* нивото. Очевидна е аналогията при дефиниране на двете части на импулсното разпределение в изразите (5.45) и (5.52). Все пак асоциирането на  $n_1(k)$  с  $n_{gr}(k)$  и на  $n_2(k)$  с  $n_{ex}(k)$  е до известна степен формално, защото декомпозицията на едночастичната матрица на плътността (4.49), от която следва ур. (5.52), не се основава на разделението на преходи към основното и към възбудените състояния на  $(A - 1)$ -нуклонната система.

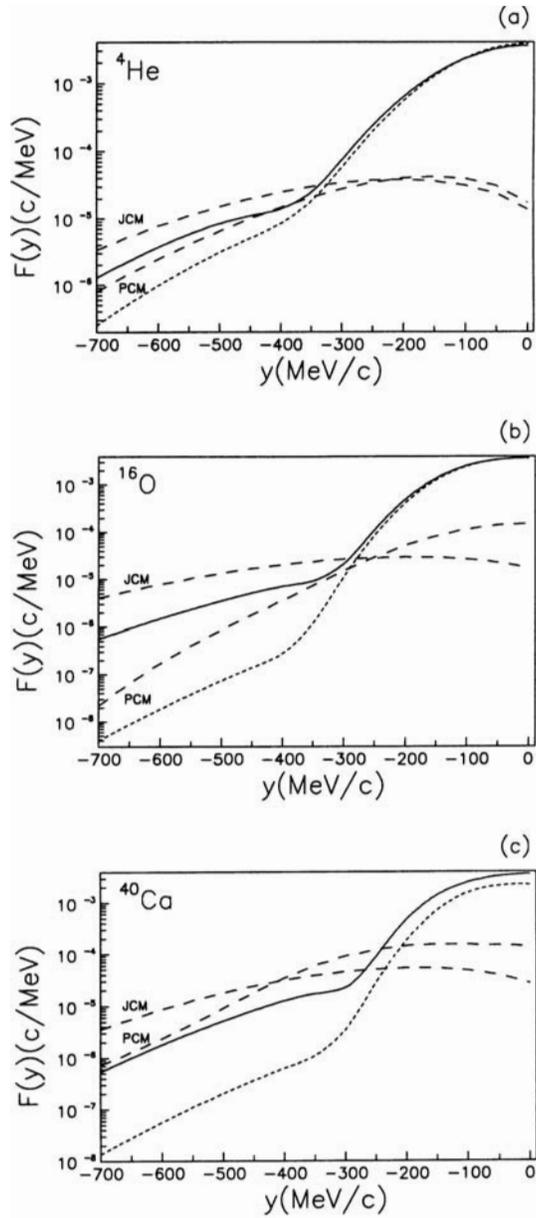
Подобно разложение на импулсното разпределение на две части е представено и в работи [298, 299]. В тях е предложен феноменологичен модел за отчитане на късодействащите и тензорните корелации, който дава възможност да се изразят поотделно импулсното разпределение на нуклоните в ядрото, свързано с прехода към основно и съответно възбудените състояния на  $(A - 1)$ -нуклонната система.

Резултатите от приложението на  $y$ -скейлинг метода за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$  са показани на фигура (5.3). В областта на малките стойности на  $|y| < 300\text{ MeV}/c$  формата на  $F(y)$  се определя изключително от първия член в израза (5.41) и зависи само от  $n_{gr}$ . Това обяснява факта, че импулсното разпределение, отчитащо само приноса на едночастичните състояния под нивото на *Ферми* в разглеждания в част (4.1) аналитичен модел, води до добро съгласие с получените резултати във феноменологичния корелационен модел [298, 299].

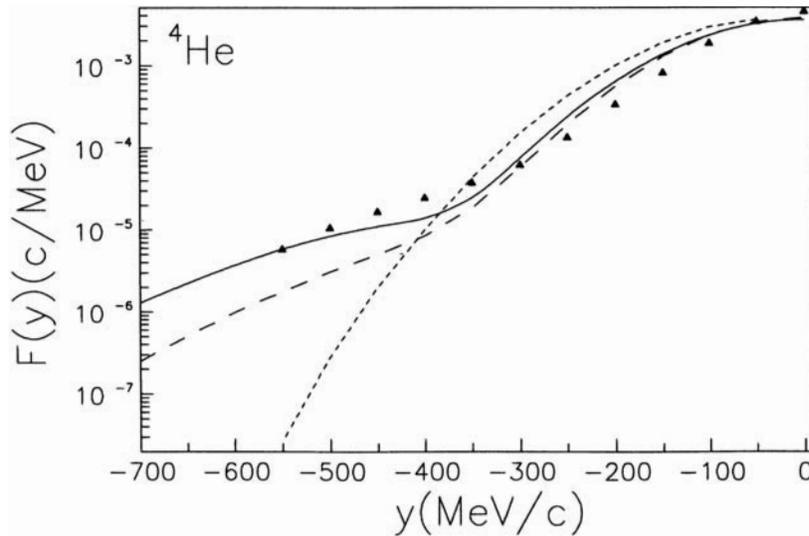
При високите стойности на  $|y| > 350\text{ MeV}/c$  скейлинговата функция  $F(y)$  се определя от високоимпулсните компоненти на спектралната функция и късодействащите корелации имат в този случай решаващо значение. Различният начин на отчитане на корелациите в двата подхода води до значителни разлики в поведението на функцията  $F(y)$ . Това означава, че ако съществуват експериментални данни за  $F(y)$  при големи стойности на  $y$ , то това би било решаващ тест за качеството на корелационните модели.

За сравнение на фигура (5.3) е показана и функцията  $B(y)$ . Тя зависи по-слабо от  $y$  и очевидно е трудно от нея да се извлече информация за ядрената структура.

На фигура (5.4) е представено сравнение на експерименталните данни с резултатите за скейлинговата функция  $F(y)$ , получени в рамките на споменатите по-горе корелационни подходи и метода на *Хартри-Фок* за ядрото  ${}^4\text{He}$ . Вижда се, че при



Фигура 5.3: Скейлинг-функция  $F(y)$  за ядрата  ${}^4\text{He}$  (а),  ${}^{16}\text{O}$  (б) и  ${}^{40}\text{Ca}$  (в), пресметнати в аналитичния модел в метода на Ястров (JCM) (плътна линия) и във феноменологичния корелационен модел (PCM) [298, 299] (къса пунктирна линия). С дълга пунктирна линия е означена функцията  $B(y)$ .



Фигура 5.4: Скейлингова функция  $F(y)$  за ядрото  ${}^4\text{He}$ . С плътна линия е отбелязан резултатът, получен в аналитичния модел в метода на *Ястров*, с къса пунктирна линия - резултатът от феноменологичния корелационен модел [298, 299], с дълга пунктирна линия - *Хартри-Фоковите* резултати [233] Експерименталните данни са заимствани от работа [235].

$|y| < 300 \text{ MeV/c}$ , където  $F(y)$  се определя от дупчестите едночастични състояния, заселвани от нуклоните в ядрата, и трите подхода водят до сходни резултати. В областта на големите стойности на  $y$  обаче само отчитането на късодействащите корелации води до реалистично поведение на скейлинг-функцията.

### 5.3.3 $(p, d)$ реакции

В част (4.2.1) беше показано, че късодействащите нуклон-нуклонни корелации оказват съществено влияние върху едночастичните характеристики както на дупчестите, така и на частичните нива в ядрата. Тяхното отчитане води до изпразване на морето на *Ферми* и заселване на състояния над *Ферми* нивото. Сравнението между едночастичните вълнови функции, получени в модела на независимите частици, естествените орбитали и функциите на припокриване, дискутирано в част (5.1) показва, че те се различават съществено помежду си, особено в периферната област на ядрото.

Приложимостта на получените в част (5.2) едночастични функции на припокриване при описание на преки реакции с избиване на един нуклон е изследвана в работа [A12, A13, B7], като са получени сеченията на реакциите  ${}^{16}\text{O}(p, d)$  при енергия на налитания протон  $E_p = 45.34 \text{ MeV}$  до основното  $J^\pi = 1/2^-$  и до възбуденото  $J^\pi = 5/2^+$  състояния в остатъчното ядро  ${}^{15}\text{O}$ , както и на реакциите  ${}^{40}\text{Ca}(p, d)$  за

две стойности на енергията на налитания протон  $E_p = 65 \text{ MeV}$  и  $E_p = 27.5 \text{ MeV}$ , водещи до основно състояние  $J^\pi = 3/2^+$  в  $^{39}\text{Ca}$ .

Използвана е програмата DWUCK4 [303], която в рамките на Приближението на Борн за смутените вълни (Distorted Wave Born Approximation (DWBA)) пресмята различни характеристики на преки ядрени процеси, включително и сечението на  $(p, d)$  реакцията.

Нека предположим, че реакцията протича чрез избиване на един неутрон от ядрото-мишена. Диференциалното сечение на реакцията се получава по формулата:

$$\frac{d\sigma_{pd}^{lj}(\theta)}{d\Omega} = \frac{3}{2} \frac{S_{lj}}{(2j+1)} \frac{D_0^2}{10^4} \sigma_{DW}^{lj}(\theta) , \quad (5.53)$$

където  $\{lj\}$  са квантовите числа на крайното състояние на остатъчното ядро,  $S_{lj}$  е спектроскопичният фактор на прехода,  $D_0^2 = 1.5 \times 10^4$  и  $\sigma_{DW}^{lj}(\theta)$  е сечението, получено от DWUCK4 [303].

При пресмятанята се използва едночастична вълнова функция на избивания неутрон, която е собствена функция на уравнението на Шрьодингер с потенциал на Уудс-Саксън. Съществува възможност параметрите на потенциала да се определят по два начина:

- чрез фитиране на енергията на отделяне (Separation Energy Prescription), която е означена по-нататък като (SEP): в този случай функцията на припокриване се заменя с решение на едночастичното уравнение на Шрьодингер с потенциал на Уудс-Саксън, чиято дълбочина се определя от условието, получената едночастична вълнова функция да има асимптотично поведение, съответстващо на зададената енергия на отделяне;
- чрез фитиране на ефективната енергия на връзка (Effective Binding Energy Prescription), означена с (ЕВЕР): аналогично на предишния случай, дълбочината на потенциала се определя така, че едночастична вълнова функция на захванатия нуклон да има в потенциалната яма зададената енергия на връзка;

Ще отбележим, че (SEP)-процедурата може да се използва при описание на процеси, при които се избива частица както от дупчести нива, така и от частични, докато (ЕВЕР) дефиницията има смисъл само за дупчести състояния.

Геометричните параметри на потенциала – радиус  $r_0$  и дифузност  $a$ , не се варират, а са зададени както следва: за  $^{16}\text{O}$   $r_0 = 1.16 \text{ fm}$ ,  $a = 0.69 \text{ fm}$  и за  $^{40}\text{Ca}$   $r_0 = 1.27 \text{ fm}$ ,  $a = 0.70 \text{ fm}$ .

За описание на налитащата и излитащата частици в полето на ядрото се използва оптичен потенциал, дефиниран чрез формулата:

$$V_{opt} = -Vf(x_0) - i \left[ W - 4W_D \frac{d}{dx_D} \right] f(x_D) - \left( \frac{\hbar}{m_{\pi}c} \right)^2 V_{SO}(L \cdot \sigma) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(x_{SO}) + V_C , \quad (5.54)$$

където

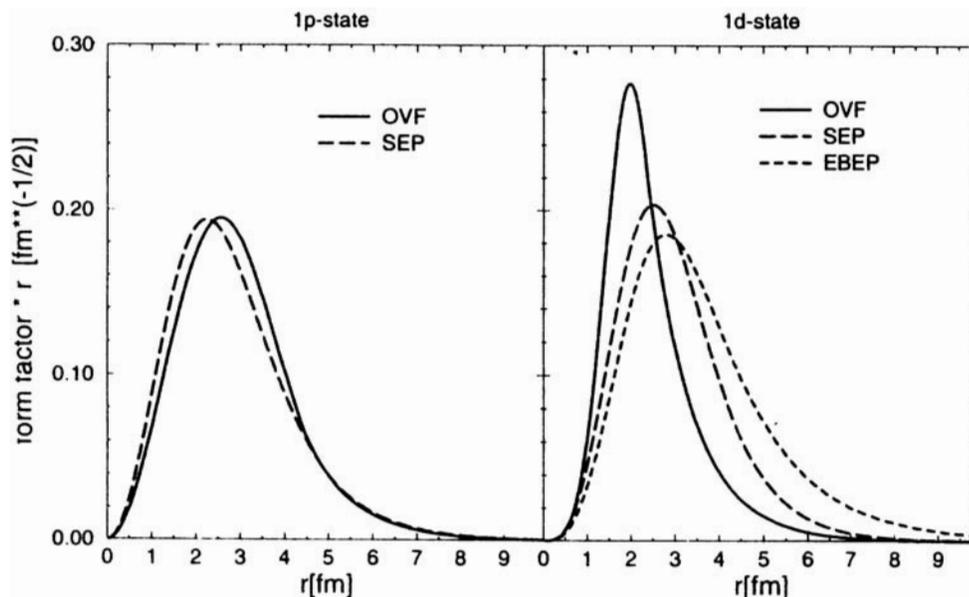
$$f(x_i) = [1 + \exp(x_i)]^{-1} , \quad x_i = (r - r_i A^{1/3})/a . \quad (5.55)$$

$V_C$  е Кулоновият потенциал на равномерно заредена сфера с радиус  $R_C = r_C A^{1/3}$ . В конкретните пресмятания са използвани параметрите на оптичния потенциал за протони, получени съответно в работите: за  $^{16}\text{O}$  – [304], за  $^{40}\text{Ca}$  при  $E_p = 65 \text{ MeV}$  – [307], а при  $E_p = 27.5 \text{ MeV}$  – [308]. Определянето на параметрите на оптичния потенциал за деутрони е проблем, интензивно обсъждан през седемдесетте години на миналия век, но той не е обект на настоящите изследвания. За реакциите на  $^{16}\text{O}$  и на  $^{40}\text{Ca}$  при енергия на налитащата частица  $E_p = 27.5 \text{ MeV}$  е използван адиабатичният потенциал, предложен в статията [309], а в случая на  $^{40}\text{Ca}$  при  $E_p = 65 \text{ MeV}$  – потенциалът [310], получен от фитиране на данните по еластично разсейване на деутрони.

В обичайната процедура спектроскопичният фактор  $S_{ij}$  във формула (5.53) се получава от сравняване на експерименталните данни с теоретичните резултати за сечението на реакцията. За нашите цели стандартната функция на припокриване в програмата DWUCK4 се заменя с тази, определена от корелираната едночастична матрица на плътността, описана в част (5.2). В този случай  $S_{ij} = 1$ , защото самата функция на припокриване е нормирана на спектроскопичния фактор.

На фигура (5.5) е представено сравнение на функцията на припокриване в ядрото  $^{16}\text{O}$  за дупчестото състояние  $1p$  и за частичното състояние  $1d$  с едночастичната вълнова функция, генерирана от програмата DWUCK4. Нека разгледаме първо дупчестото състояние  $1p$ , представено в левия панел на фигурата. Очевидно, максимумът на функцията на припокриване е локализиран на по-голямо разстояние от центъра на ядрото, в сравнение с *Уудс-Саксъновата* функция. Това е положителна тенденция, която води до по-добро описание на експерименталните данни. Подобен ефект е търсен и постигнат в модела, предложен в работи [311, 312]. В него остатъчното взаимодействие на налитащата частица и ядрото-мишена е моделирано чрез добавяне на член, пропорционален на производната по координатата на потенциала на *Уудс-Саксън*. В случая на частичното състояние  $1d$ , представен в десния панел на фигурата, е тъкмо обратно – съответната функция на припо-

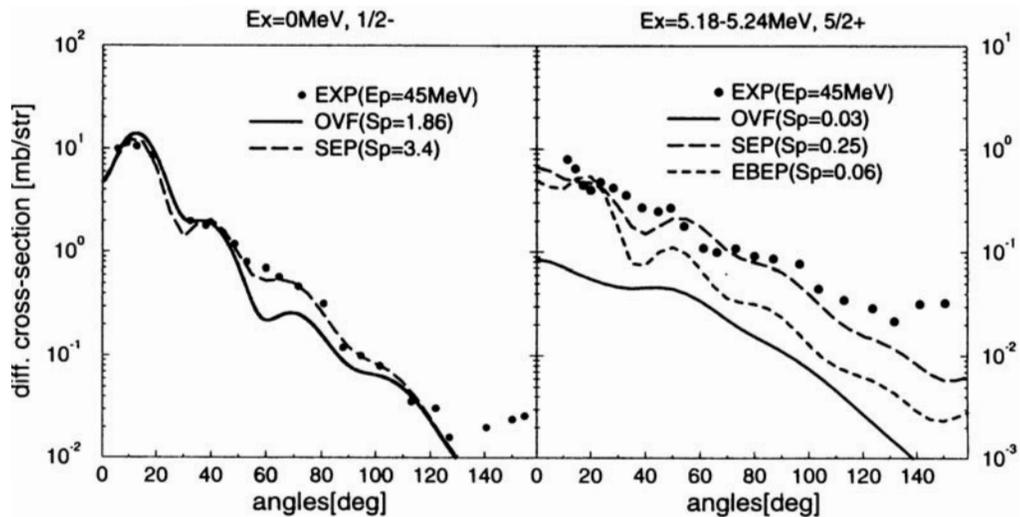
криване е силно пикирана в обема на ядрото, докато двете едночастични функции, които могат да се получат с DWUCK4, имат значителни стойности в повърхностната област. Подобна е картината и за функциите на припокриване при реакцията  $^{40}\text{Ca}(p, d)$ .



Фигура 5.5: Функции на припокриване (пътна линия) и едночастични вълнови функции, използвани от програмата DWUCK4, (SEP) (дълга пунктирна линия) и (EBEP) (пунктирна линия) за преходи към основното състояние  $1/2^-$  (ляв панел) и за възбуденото ниво  $5/2^+$  (десен панел) в ядрото  $^{15}\text{O}$ .

Пресметнатите с различни едночастични функции диференциални сечения на реакцията  $^{16}\text{O}(p, d)^{15}\text{O}$  при енергия на налитания протон  $E_p = 45.34 \text{ MeV}$  за две крайни състояния на остатъчното ядро са представени и сравнени с експерименталните данни [304, 305] на фигура (5.6).

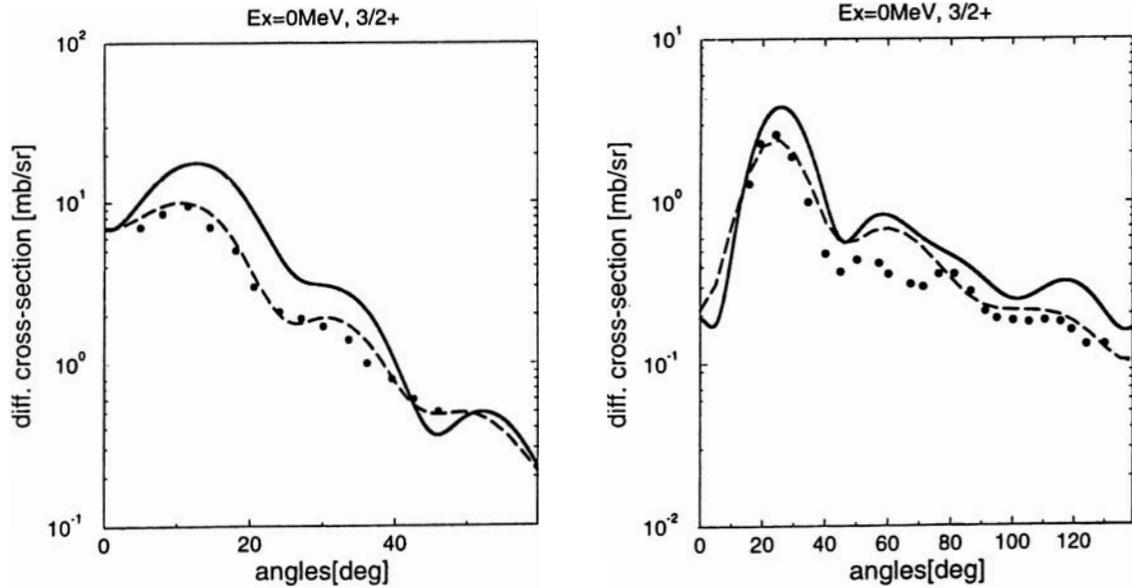
Във всички разгледани случаи формата на сеченията е възпроизведена със задоволителна точност. Резултатите за прехода към основното състояние на  $^{15}\text{O}$ , получени с пресметната в част 5.2 функция на припокриване, възпроизвеждат с добра точност и абсолютната стойност на експерименталните данни. Това означава, че получената функция на припокриване и спектроскопичните фактори отговарят на физическата реалност и следователно остатъчното взаимодействие в ядрото-мишена е коректно отразено в едночастичната матрица на плътността. Тук трябва още веднъж да подчертаем, че сечението, пресметнато с функцията на припокриване, е получено такова, каквото е представено на фигурата, докато кривата, означена с SEP, е фитирана към експерименталните данни, при което е определен спектроскопичният фактор на реакцията.



Фигура 5.6: Диференциални сечения на реакцията  $^{16}\text{O}(p, d)$  при енергия на налитация протон  $E_p = 45.34$  MeV за преходи към основното състояние  $1/2^-$  (ляв панел) и за възбуденото ниво  $5/2^+$  (десен панел) в ядрото  $^{15}\text{O}$ . Резултатите, получени с функцията на припокриване, са означени с (OVF). Експерименталните данни [304, 305] са представени с кръгчета.

На фигура (5.7) са сравнени диференциалните сечения за реакцията  $^{40}\text{Ca}(p, d)$  с преход към основно състояние на остатъчното ядра при две енергии на налитация протон. Трябва да се отбележи, че при стандартната процедура фитирането на сеченията в тези случаи води до зависимост на спектроскопичните фактори от енергията налитащата частица, за което няма физични основания. Този съществен недостатък може да се преодолее чрез използване на функциите на припокриване, получени от корелирана едночастична матрица на плътността. Както се вижда от фигурата, независимо от енергията на налитащата частица налице е от една страна задоволително описание на формата на сеченията, от друга – реалистична стойност на спектроскопичния фактор.

Разглеждайки прехода към възбуденото състояние на остатъчното ядро, което отговаря на избиване на неутрон от частичното състояние  $1d$  в  $^{16}\text{O}$ , трябва да кажем, че амплитудата на пресметнатото сечението не е достатъчна за възпроизвеждане на експеримента. Следователно, заселването на частичните състояния не се дължи единствено на централните късодействащи корелации от *Ястровски* тип, които се отчитат в едночастичната матрица на плътността в аналитичния модел, представен в част (4.1). Както е отбелязано в [64], съществена роля при формиране на спектроскопичните фактори играе и куплирането на едночастичните нива с колективните модове на ядрото мишена, което води до допълнително заселване на състоянията над *Ферми* нивото. Не трябва да се забравя и проблемът, свързан



Фигура 5.7: Диференциални сечения на реакцията  $^{40}\text{Ca}(p, d)$  при енергия на налитания протон  $E_p = 65$  MeV (ляв панел) и  $E_p = 27.5$  MeV (десен панел) за преход към основното състояние  $3/2^+$ . Резултатите, получени с функцията на припокриване, са означени с пълтна линия, а тези от стандартната процедура - с пунктирна. Експерименталните данни, съответно от работи [308, 315] са представени с кръгчета.

с нереалистичната асимптотика на функциите на припокриване, дължаща се на хармоничния базис, използван при пресмятането на едночастичната матрица на плътността.

Показаните в таблица (5.2) стойности дават възможност да се анализират спектроскопичните фактори за преходи към основното и първото едночастично възбудено състояние на ядрата  $^{15}\text{O}$  и  $^{39}\text{Ca}$ .

Нека да разгледаме спектроскопичния фактор, получен от прехода към основно състояние на ядрото  $^{15}\text{O}$ . По дефиниция той не може да бъде по-голям от съответното израждане на нивото. В случая  $\Omega_{1p} = 2$ , т.е. трябва да е изпълнено неравенството  $S_{1p} \leq 2$ . Очевидно, това неравенство е изпълнено, когато за пресмятането на сечението е използвана функцията на припокриване, но не и при (SEP)-процедурата. Това е проблем, известен отдавна и дискутиран в литературата [305, 306]. В пресмятанята в Приближението на Борн за смутените вълни се използват параметри на оптичния модел, получени така, че да се възпроизведат сеченията на еластично разсейване във входния и изходен канал на реакцията. С тези параметри не може да се опише адекватно диференциалното сечение на  $(p, d)$  реакцията. Задоволителни резултати за формата на сечението могат да се получат, ако се използва адиабатичен оптичен модел за разсейването на деутрона. В този

Таблица 5.2: Спектроскопични фактори, получени от анализа на експерименталните данни за диференциалните сечения на  $(p, d)$  реакциите към основното и едно възбудено състояние на ядрата  $^{15}\text{O}$  и  $^{39}\text{Ca}$ .

|                                | $^{15}\text{O}$ |         | $^{39}\text{Ca}$                 |         |      |
|--------------------------------|-----------------|---------|----------------------------------|---------|------|
|                                | $1/2^-$         | $5/2^+$ | $3/2^+$                          | $7/2^-$ |      |
| OVF                            | 1.86            | 0.03    | OVF                              | 3.60    | 0.08 |
| SEP ( $E_p = 45 \text{ MeV}$ ) | 3.40            | 0.25    | SEP ( $E_p = 27.5 \text{ MeV}$ ) | 2.30    | 0.32 |
| EBEP( $E_p = 45 \text{ MeV}$ ) |                 | 0.06    | EBEP( $E_p = 27.5 \text{ MeV}$ ) |         | 0.16 |
|                                |                 |         | SEP ( $E_p = 65 \text{ MeV}$ )   | 3.70    | 0.18 |
|                                |                 |         | EBEP( $E_p = 65 \text{ MeV}$ )   |         | 0.08 |

случай обаче, се получава стойност за спектроскопичния параметър  $S_{1p} = 3.4$ , която надхвърля израждането на едночастичното ниво. Друг съществен недостатък на стандартната процедура за определяне на  $S_{ij}$  е зависимостта на получаваните стойности от енергията на налитащата частица. Тъй като спектроскопичният фактор по дефиниция (ур. (5.15)) зависи само от структурата на ядрото-мишена и на остатъчното ядро, но не и от характеристиките на налитащата частица, очевидно подобни резултати не са реалистични. В таблица (5.2) са представени стойностите на спектроскопичния фактор за две състояния в остатъчното ядро за две стойности на енергията на налитащия протон. Въпреки че в този случай условието  $S \leq \Omega$  е изпълнено, двата резултата за основното състояние на  $^{39}\text{Ca}$  са твърде различни. Приближението на Борн за смутените вълни не дава надеждна информация и за спектроскопичните фактори на възбудените нива на остатъчните ядра. Техните стойности зависят не само от енергията на налитащата частица, но и от процедурата, възприета за пресмятане на едночастичните функции на захванатия неутрон. Проблемите с описанието на частиците във входния и изходен канал на реакцията, когато в нея участват нуклони или леки ядра, не позволяват тези реакции да бъдат използвани за извличане на реалистични данни за спектроскопичните фактори.

Тук трябва да подчертаем, че спектроскопичните фактори, получени от едночастичната матрица на плътността на ядрото-мишена, са абсолютни в смисъл, че не са получени при фитиране на експерименталните данни, а следват от предположения за структурата на ядрата. Резултати, особено тези, отнасящи се до избиване или захват на нуклон от частични състояния в ядрото-мишена, не са винаги в достатъчно добро съгласие с получените в други реакции и с други модели. Това се дължи от една страна на комплексността на задачата за описание на реакциите с нуклони (този проблем ще бъде разгледан в следващата част), от друга – на не достатъчно богатата структура на едночастична матрица на плътността в разглеждания аналитичен модел. Затова използването на реалистична матри-

ца на плътността, например тази от Вариационния метод на *Монте Карло* [208], е необходимо условие за получаване на реалистични стойности за абсолютните спектроскопични фактори.

**Обобщавайки** ще кажем, че описаният подход дава възможност за отчитане на нуклон-нуклонните корелации чрез включването им в реалистична едночастична матрица на плътността, от която могат да бъдат получени на единна основа функции на припокриване и спектроскопични фактори. Той се различава принципно от стандартните методи за изследване на преки реакции, в които вместо функции на припокриване се използват едночастични вълнови функции, получени в модела на независимите частици, а нуклон-нуклонните корелации се отчитат чрез модифициране на параметрите на средното поле.

### 5.3.4 $(n, d)$ реакции

Тук ще разгледаме друг съществен фактор за реалистичното описание на ядрените реакции, който наред с коректното отчитане на ядрената структура, играе съществена роля при изучаване на нуклонните системи, а именно – механизма на реакциите. Тези изследвания са представени в работи [A14, B11].

Интересът към реакциите, индуцирани от неутрони, се дължи най-вече на необходимостта от познаване на радиационните загуби в първи контур на ядрените реактори. Експерименталните изследвания са насочени главно към измерване на пълното сечение на реакциите на неутрони при ниски енергии до  $E_n \leq 20$  MeV върху среднотежки ядра ( $A = 10 - 100$ ) [313, 314].

Възможност за изучаване на различните механизми на реакции предоставят  $(n, d)$  процесите. Без да влизаме в подробности, ще разгледаме три възможни начина за формиране на деутрон в изходния канал на реакция, породена от налитащ неутрон.

#### Образуване на съставно ядро

Този процес предполага, че налитащата частица и ядрото-мишена образуват съставно ядро, което се намира във възбудено и се връща в основно състояние като се отделя деутрон.

Идеята за образуване на съставно ядро е изказана още през 1936г. от *Н. Бор* [316] и възниква при изследване на реакциите с неутрони, провеждани от *Ферми*, *Амалди* и др. Хипотезата на *Бор* е развита по-късно в статистическата теория на *Вайскопф-Евинг* за спектъра на частиците, изпарени от съставното ядро при преходи към състояния в континуума. *Хаузер* и *Фешбах* предлагат начин за отчитане на закона за запазване на импулса в този тип реакции и процедура за

пресмятане на сеченията на преходите от съставното ядро към дискретно състояние на остатъчното ядро. Тези теории предсказват *Максуелово* разпределение по енергия на изпарените частици и симетрично около  $\theta = 90^\circ$  ъглово разпределение в системата на центъра на масите.

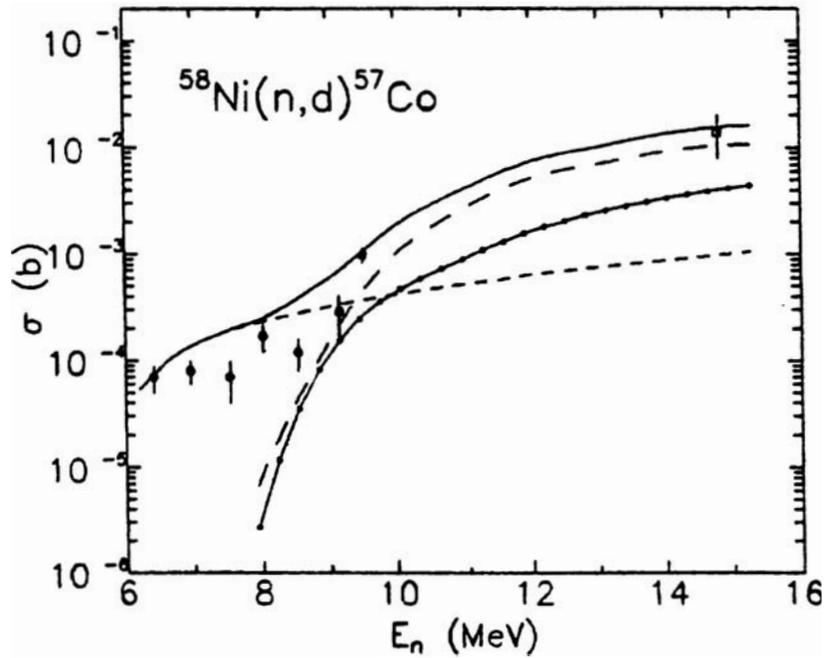
Без да описваме детайлите на пресмятанята, изложени подробно в работа [A14], ще споменем само, че за пресмятане на сеченията на  $(n, d)$  реакцията е използван компютърният код STAPRE-H95 [317]. Сечението на процеса на образуване на съставно ядро и последващо изпарение на деутрон е показано с плътна линия с точки на фигура (5.8) и (5.9) за реакциите  $^{58}\text{Ni}(n, d)^{57}\text{Co}$  и  $^{65}\text{Cu}(n, d)^{64}\text{Ni}$ . Експерименталните данни за сеченията на реакции при различни стойности на енергията на налитания неутрон са представени в [318]. Както би следвало да се очаква, при стойности на енергията  $E_n$ , които са само с няколко MeV над праговата енергия, приносят на този механизъм на реакция към пълното сечение е сравнително малък. Получените резултати потвърждават изводите, направени в работа [319].

### Захват на протон

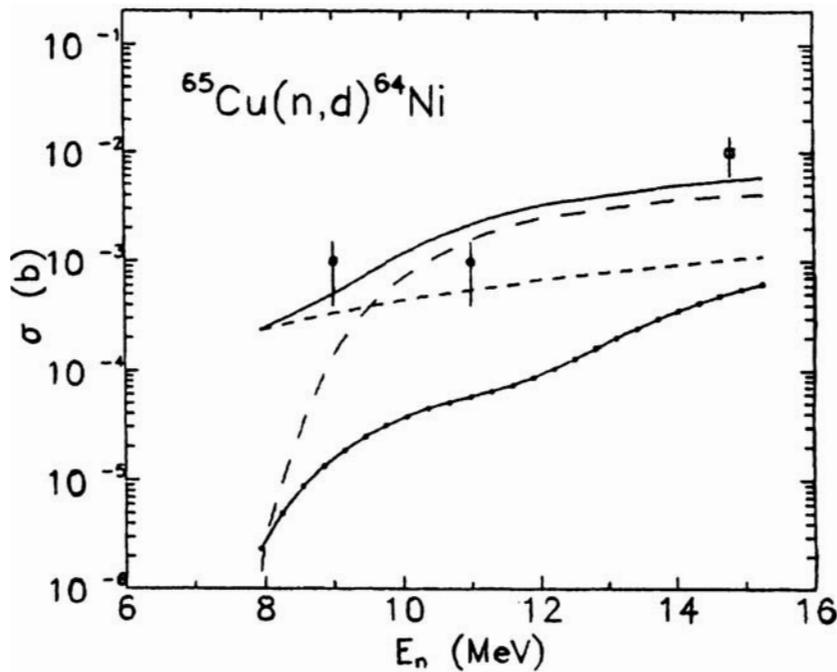
Друг възможен механизъм за осъществяване на  $(n, d)$  реакцията е захват на протон от ядрото-мишена от налитания неутрон и разсейването на деутрон в изходния канал. Пълното сечение на реакцията се получава след интегриране по ъгъла на разсейване на диференциалното сечение  $\frac{d\sigma_{nd}^{ij}(\theta)}{d\Omega}$ .

Процедурата за пресмятане на диференциалното сечение на  $(n, d)$  реакцията при този механизъм е подобна на описаната в част (5.3.3). Нека разгледаме първо реакцията  $^{58}\text{Ni}(n, d)^{57}\text{Co}$ . С помощта на програмата DWUCK4 [303] са пресметнати диференциалните сечения за два прехода в остатъчното ядро - прехода към основното  $7/2^-$  и към възбуденото  $3/2^-$  състояния. Съответните спектроскопични фактори са заимствани от работа [320], в която са получени чрез фитиране на експерименталните данни за диференциалните сечения на реакцията  $^{58}\text{Ni}(n, d)$  при енергия на налитания неутрон  $E_n = 14$  MeV. Те са равни на 6.47 за състоянието  $7/2^-$  и 0.96 за състоянието  $3/2^-$ . Липсващата сила може да се припише на възбуждане на състояния в континуума и спектроскопичните фактори да се нормират така, че сумата им да е равна на 8. По подобен начин са пресметнати диференциалните сеченията за преходи към основното и първото възбудено състояние за остатъчното ядро  $^{64}\text{Ni}$  в реакцията  $^{65}\text{Cu}(n, d)$ .

На фигура (5.8, 5.9) приносят на процеса захват на протон в реакцията  $(n, d)$  е показан с дълга пунктирна линия. Очевидно захватът на протон е механизъм, който доминира пълното сечение при по-високи стойности на енергията на налитащата частица.



Фигура 5.8: Пълно сечение на реакцията  $^{58}\text{Ni}(n,d)^{57}\text{Co}$  като функция на енергията на налитания неутрон. С плътна линия с точки е отбелязано сечението на реакцията, при която се образува съставно ядро  $\sigma_{\text{compound}}^d$ , с къса пунктирна линия - приносът на реакцията с избиване на deuteron  $\sigma_{\text{knock-out}}^d$ , с дълга пунктирна линия - приносът на реакцията със захват на протон  $\sigma_{\text{pick-up}}^d$ , с плътна линия - пълното сечение  $\sigma_{\text{total}}^d = \sigma_{\text{compound}}^d + \sigma_{\text{knock-out}}^d + \sigma_{\text{pick-up}}^d$ . Експерименталните данни са публикувани в работа [318].



Фигура 5.9: Същото като на горната фигура за реакцията  $^{65}\text{Cu}(n,d)^{64}\text{Ni}$ .

## Избиване на деутрон

Третият допустим механизъм на  $(n, d)$  реакцията е избиване от налитащия неутрон на деутрон от ядрото-мишена и захващането му в остатъчното ядро. Това предполага, че в ядрото-мишена с определена вероятност има предварително формиран деутрон. В този случай е съществено отчитането на принципа на Паули, което води до ограничаване на фазовото пространство, в което могат да се намират двата нуклона, образуващи деутрона. Методът за отчитане на Паули-блокинг ефектите при  $(n, d)$  реакциите е описан подробно в работа [A14] и е разработен по аналогия с модела за описание на  $(n, \alpha)$  процесите [321]. Тук няма да описваме детайлите на процедурата за пресмятане на сечението на реакцията, защото той не е цел на настоящата дисертация.

Зависимостта на пълното сечение на реакцията  $(n, d)$  реакцията е избиване на деутрон от енергията на налитащата частица е показана на фигура (5.8, 5.9) с къса пунктирна линия. В разгледаните случаи е твърде слаба, като пълното сечение расте бавно с повишаване на  $E_n$ .

Сравнявайки приносите на трите разгледани механизма за реакцията  $(n, d)$  следва да се направят следните изводи: 1) доминиращият механизъм е захватът на протон; 2) частта на сечението, свързана с образуването на съставно ядро, е малка, особено за реакцията върху  $^{65}\text{Cu}$ ; 3) избиването на деутрон също има малък принос към пълното сечение, но дава възможност за по-добро описание на експерименталните данни, особено в областта на малките стойности на енергията на налитащия неутрон.

Описанията в тази част от дисертацията изследвания показват, че получаването на достоверна информация за ядрената структура от експерименталните данни за характеристиките на ядрените реакции е изключително сложен проблем. Той изисква реалистично описание както на процесите на разсейване, така и адекватни модели за структурата на ядрата. Примерът с екстрахиране на някои спектроскопични фактори, дискутиран подробно в част (5.3.3), показва, че реалистични стойности могат да се получат само в случаите, когато

1. сечението на  $(p, d)$  реакцията е доминирано от захвата на неутрон и приносът на останалите възможни механизми е пренебрежимо малък;
2. едночастичната матрица съдържа информация за всички съществени нуклон-нуклонни корелации;

Посочените проблеми поставят нови изисквания и в двете направления на теоретичната ядрена физика - изучаване на ядрената структура и на ядрените реакции.

## 5.4 Двучастични функции на припокриване и спектроскопични фактори

В част (5.2) от дисертацията беше показано, че едночастичните функции на припокриване и съответните спектроскопични фактори за остатъчното ядро могат да бъде получена от едночастичната матрица на плътността на  $A$ -нуклонната система на ядрото-мишена при реакции с избиване на една частица. Възможно е аналогична процедура да бъде разработена и за двучастичните функции на припокриване.

Интересът към теоретичното изследване на двучастичните функции на припокриване е обусловен от интензивните експерименти по нееластично разсейване на електрони и  $\gamma$ -кванти с избиване на два нуклона. Оказва се, че този канал, наред с избиването на един нуклон, са основните процеси, които определят сеченията на  $(e, e')$  реакциите [322] над квазиеластичния пик.

Изучавани са на реакциите  $(e, e'pp)$  и  $(e, e'np)$  върху  $^{12}\text{C}$  и  $^{16}\text{O}$  [276, 322–325],  $^4\text{He}(e, e'd)d$  [281], както и на фотоядрени процеси [273, 326, 327]. Специално внимание във всичките тези работи е отделено на влиянието на късодействащите корелации върху характеристиките на ядрените реакции. В [325] е показано, че най-чувствителна към тях е надлъжната структурна функция в суперпаралелна кинематика. Късодействащите корелации играят по-съществена роля в  $(e, e'pp)$  реакции, отколкото в  $(e, e'np)$  процесите [323, 328].

Както беше дискутирано в част (5.1), информация за структурата на ядрото-мишена и на остатъчното ядро при всеки ядрен процес се носи от спектралната функция. Тя е сложен математически обект, който трябва да отчита както дългодействащите, така и късодействащите корелации между нуклоните. Първият опит за получаване на спектрална функция е представен в работа [329]. В нея е пресметната спектралната функция за ядрото  $^{16}\text{O}$ , като дългодействащите корелации са отчетени в метода на случайните фази, а късодействащите - чрез корелационна функция, получена като решение на уравнението на *Бете-Голдстоун*.

При систематичните анализи на експерименталните данни спектралната функция се представя в първо приближение като произведение от функция на припокриване и спектроскопичен фактор. В работа [276] например, двучастичната функция на припокриване е построена чрез едночастични функции, получени в метода на средното поле, и прост корелационен фактор от *Ястровски* тип [276], а съответният спектроскопичен фактор се определя от сравнението на експерименталното и теоретично сечение на реакцията по избиване на два нуклона.

Последователен метод за получаване на двучастичната функция на припокриване от двучастичната матрица на плътността за основното състояние на ядрото-мишена, е представена в работа [A17].

Нека първо приведем дефиницията за двучастичната функция на припокриване:

$$\phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \Psi_\alpha^{(A-2)} | \mathbf{a}(\mathbf{r}_1) \mathbf{a}(\mathbf{r}_2) | \Psi^{(A)} \rangle . \quad (5.56)$$

Нормата на  $\phi_\alpha$  задава вероятността за преход от основното състояние на  $A$ -частичната система до състояние  $\alpha$  на  $(A-2)$ -нуклонната система и представлява спектроскопичния фактор на прехода:

$$S_\alpha^{(2)} = \langle \phi_\alpha | \phi_\alpha \rangle \quad (5.57)$$

Ако в израза за двучастичната матрица на плътността на  $A$ -частичната система вмъкнем пълен базис от собствени вълнови функции на  $(A-2)$ -нуклонната система, ще получим израз, който дефинира двучастичната матрица на плътността чрез функциите на припокриване  $\phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  (5.56):

$$\begin{aligned} \rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2) = & \quad (5.58) \\ \sum_\alpha \langle \Phi^{(A)} | a^+(\mathbf{r}_1) a^+(\mathbf{r}_2) | \Phi_\alpha^{(A-2)} \rangle \langle \Phi_\alpha^{(A-2)} | a(\mathbf{r}'_1) a(\mathbf{r}'_2) | \Phi^{(A)} \rangle = & \\ \sum_\alpha \phi_\alpha^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_\alpha(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = \sum_\alpha S_\alpha^{(2)} \tilde{\phi}_\alpha^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tilde{\phi}_\alpha(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) . & \end{aligned}$$

По аналогия с естествените орбитали и естествените числа на запълване, обсъждани в част (4.2.2), могат да се дефинират двучастични функции  $\psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , наречени естествени джеминали, които диагонализират двучастичната матрица на плътността [330]:

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2) = \sum_\alpha n_\alpha^{(2)} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_\alpha(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) . \quad (5.59)$$

Положително определените собствени стойности на джеминалите изпълняват неравенствата:

$$\begin{aligned} 0 & \leq n_\alpha^{(2)} \leq A/2 & \text{за всяко } A \text{ четно} \\ 0 & \leq n_\alpha^{(2)} \leq (A-1)/2 & \text{за всяко } A \text{ нечетно} \end{aligned} \quad (5.60)$$

Както и в едночастичния случай, двучастичният спектроскопичен фактор не може да надхвърля естествените числа на запълване, съответстващи на джеминалите:  $S_\alpha^{(2)} \leq n_\alpha^{(2)}$ .

Процедурата за получаване на двучастичната функция на припокриване от двучастичната матрица на плътността се основава на асимптотичното поведение на

$\psi^\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . В работа [331] е показано, че тя удовлетворява двучастичното уравнение на Шрьодингер:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_2^2 + v_{12} + \epsilon_\alpha^{(2)} \right) \phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5.61)$$

където  $\epsilon_\alpha^{(2)} = E_0^{(A-2)} - E_\alpha^{(A)}$ ,  $v_{12}$  е взаимодействието между двата нуклона, а  $\sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  - нелокалното взаимодействие между двойката частици и остатъчното ядро.

Условията за получаване на асимптотичното решение на ур. (5.61) са изложени подробно в работи [331–333]. В [332] е разгледана система от три неутрални безспинови частици. Изследвани са асимптотичните вълнови функции на системата за състояния от дискретния спектър, като са конкретизирани условията, които трябва да удовлетворява двучастичното взаимодействие. Работи [331, 333] представляват продължение и обобщение на тези резултати, като са получени различни видове функции на припокриване, необходими при описанието на преки реакции с избиване на две частици.

Ако се разглежда едновременно избиване на два еднакви по изоспин нуклона (два неутрона или два протона), т.е. реакции от типа  $^{18}\text{O} - 2n \longrightarrow ^{16}\text{O}$  или  $^{16}\text{O} - 2p \longrightarrow ^{14}\text{C}$ , асимптотичното поведение в координатното пространство на двучастичната функция на припокриване се представя чрез хиперсферична функция:

$$\Phi(r, R) \longrightarrow N \exp \left\{ -\sqrt{\frac{4m|E|}{\hbar^2}} \left( R^2 + \frac{1}{4}r^2 \right) \right\} \left( R^2 + \frac{1}{4}r^2 \right)^{-5/2}, \quad (5.62)$$

където  $r$  и  $R$  са големините на векторите на относителната координата  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  и координатата на центъра на масите  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ , съответно,  $m$  е масата на нуклона, а  $E = E^{(A)} - E^{(A-2)}$  е енергията на отделяне на два нуклона.

В случая, когато пълният ъглов момент и четност на ядрото-мишена са  $J^\pi = 0^+$ , двучастичната функция на припокриване от ур. (5.56) може да се представи във вида:

$$\Phi_{\nu JM}(x_1, x_2) = \sum_{LS} \{ \Phi_{\nu JLS}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \otimes \chi_S(\sigma_1, \sigma_2) \}_{JM}, \quad (5.63)$$

където  $\nu$  е обозначението на номера на състоянието на остатъчното ядро с определен пълен момент  $J$ . В горното уравнение спиновата функция  $\chi_{SM_S}(\sigma_1, \sigma_2)$  се задава чрез равенството:

$$\begin{aligned}\chi_{SM_S}(\sigma_1, \sigma_2) &= \left\{ \chi_{\frac{1}{2}}(\sigma_1) \otimes \chi_{\frac{1}{2}}(\sigma_2) \right\}_{SM_S} = \\ &= \sum_{m_{s_1} m_{s_2}} \left( \frac{1}{2} m_{s_1} \frac{1}{2} m_{s_2} | SM_S \right) \chi_{\frac{1}{2} m_{s_1}}(\sigma_1) \chi_{\frac{1}{2} m_{s_2}}(\sigma_2) ,\end{aligned}\quad (5.64)$$

а  $\Phi_{\nu JLSM_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  е пространствената частта на функцията на припокриване.

Ако въведем ъглови моменти  $\mathbf{l} = \mathbf{l}_r$  и  $\mathbf{L}_R$  ( $\mathbf{L} = \mathbf{l} + \mathbf{L}_R$ ), съответстващи на относителната координата  $\mathbf{r}$  и на координатата на центъра на масите  $\mathbf{R}$  на двойка нуклони, за  $\Phi_{\nu JLSM_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  получаваме:

$$\Phi_{\nu JSLM_L}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{lL_R} \Phi_{\nu JSLlL_R}(r, R) \left\{ Y_{L_R}(\hat{R}) \otimes Y_l(\hat{r}) \right\}_{LM_L} . \quad (5.65)$$

Замествайки формули (5.63) -(5.65) в израза (5.58), двучастичната матрица на плътността се записва във вида:

$$\begin{aligned}\rho^{(2)}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) &= \sum_{JM} \sum_{LS} \sum_{lL_R} \rho_{S'L'V'L'_R}^{(2)}(r, R; r', R') \\ &\quad \times A_{SLL_R}^{JM*}(\sigma_1, \sigma_2; \hat{r}, \hat{R}) A_{S'L'V'L'_R}^{JM}(\sigma'_1, \sigma'_2; \hat{r}', \hat{R}') ,\end{aligned}\quad (5.66)$$

където радиалната част на матрицата на плътността е:

$$\rho_{S'L'V'L'_R}^{(2)}(r, R; r', R') = \sum_{\nu} \Phi_{\nu JSLlL_R}^* (r, R) \Phi_{\nu JS'L'V'L'_R} (r', R') , \quad (5.67)$$

а спин-ъгловата функция има вида:

$$A_{SLL_R}^{JM}(\sigma_1, \sigma_2; \hat{r}, \hat{R}) = \left\{ \left\{ Y_{L_R}(\hat{R}) \otimes Y_l(\hat{r}) \right\}_{LM_L} \otimes \chi_{SM_S}(\sigma_1, \sigma_2) \right\}_{JM} . \quad (5.68)$$

Нека се върнем към асимптотиката на функцията на припокриване ур. (5.62). Очевидно състоянията с по-голяма енергия на отделяне на два нуклона имат по-бърз експоненциален спад на големи разстояние. Следователно при някакви достатъчно големи стойности на координатите на двойката частици  $r' = a$  и  $R' = b$  в израза за диагоналния елемент на радиалната част на двучастичната матрица на плътността ще доминира членът с  $\nu_0$ , съответстващ на най-малката двучастична енергия на отделяне. Тогава двучастичната функция на припокриване  $\Phi_{\nu_0 JSLlL_R}(r, R)$  може да се представи чрез двучастичната матрица на плътността

на ядрото-мишена по следния начин:

$$\begin{aligned} \Phi_{\nu_0 JSLlL_R}(r, R) &= \frac{\rho_{JSLlL_R}^{(2)}(r, R; a, b)}{\Phi_{\nu_0 JSLlL_R}(a, b)} = \\ &= \frac{\rho_{JSLlL_R}^{(2)}(r, R; a, b)}{N \exp \left\{ -k \sqrt{\left(b^2 + \frac{1}{4}a^2\right)} \right\} \left(b^2 + \frac{1}{4}a^2\right)^{-5/2}}, \quad (5.69) \end{aligned}$$

където  $k = (4m|E|/\hbar^2)^{1/2}$  е свързана с експерименталните стойности, получени за енергията на отделяне на два нуклона  $E$ . Ако се знае  $\rho^{(2)}$ ,  $k$  може да се намери от наклона на приноса на дадено състояние към диагоналния елемент на радиалната част на матрицата  $\rho_{JSLlL_R}^{(2)}(r, R; a, b)$  при големи стойности на  $a$  и  $b$ . Нормировъчната константа  $N$ , която представлява спектроскопичния фактор на прехода от основно състояние на ядрото-мишена към състояние с квантови числа  $\{\nu JSLlL_R\}$  на остатъчното ядро, се определя от асимптотиката на  $\rho_{\nu JSLlL_R}^{(2)}(a, b; a, b)$ .

Процедурата, представена дотук, е приложена за пресмятане на двучастичните функции на припокриване за ядрото  $^{16}\text{O}$  при преход към основно  $0^+$  и възбудено  $1^+$  ( $E_{ex} = 11.3 \text{ MeV}$ ) състояния на ядрото  $^{14}\text{C}$  в работа [334]. Като основа е използвана корелираната двучастичната матрица на плътността, подробно разгледана в част 4.3. Получените функции на припокриване са приложени за пресмятане на сеченията на реакцията  $^{16}\text{O}(e, e'pp)^{14}\text{C}$ . Те показват доминиращата роля на състоянието  $^1S_0$  на двойка протони при малки стойности на импулса на откат (до  $\simeq 150 - 200 \text{ MeV}/c$ ), докато приносът на състоянието  $^3P_1$  е съществен за високоимпулсната част на сеченията при импулси  $p_B \geq 200 \text{ MeV}/c$ . Основният извод, направен в работа [334], е, че методът за извличане на двучастични функции на припокриване от двучастичната матрица на плътността е приложим и използването му заедно с двучастични матрици на плътността, отчитащи по-широк клас от нуклон-нуклонни корелации, би довело до реалистични функции на припокриване.

## Основни приноси на дисертацията

Обект на изследване в дисертацията са някои от най-важните типове нуклон-нуклонни корелации и влиянието, което те оказват, върху основни характеристики на ядрена структура и преките ядрени реакции. За изучаване на **корелациите на сдвояване** между нуклоните в ядрото е предложено обобщение на модела на *Ричардсън-Годан* за алгебрата от втори ранг  $SO(5)$ . То дава възможност за описание на изовекторното сдвояване на фермиони.

- 1.1 Стандартният модел на *Ричардсън-Годан* се обобщава за алгебри от втори ранк;
- 1.2 Допуска се и нарушаване на изоспиновата симетрия;
- 1.3 При тези условия е получена система от нелинейни алгебрични уравнения за двата типа спектрални параметри в модела;
- 1.4 Разглеждайки като пример ядрото  $^{64}\text{Ge}$  в  $fp + g_{9/2}$  слоя, са анализирани решенията на уравненията *Ричардсън-Годан*. Специално внимание е отделено на зависимостта на спектралните параметри, енергията на системата и числата на запълване на едночастичните нива като функция на константата на сдвояване;

Този цикъл работи показва, че свойствата на системи с голям брой частици, между които действат сили на сдвояване, описвани от алгебрата  $SO(5)$ , могат да се изучават в рамките на точнорешаем модел. Това е изключително важно както за изучаване на ядрената структура, така и за изследване на високотемпературната свръхпроводимост във физиката на твърдото тяло.

В дисертацията е представен първото приложение на Метода на ренормализиращата група на матрицата на плътността за описание на ядрената структура. Целта е да се предложи подход за приближено отчитане на **дългодействащите корелации**, което би позволило да се разшири областта на съвременните пресмятания в рамките на слоестия модел.

- 2.1 При моделни пресмятания за две системи от фермиони в един  $j$ -слой и

квадрупол–квадруполно взаимодействие плюс взаимодействие на сдвояване са изследвани възможностите за оптимизиране на метода;

- 2.2 Показано е, че Методът на ренормализиращата група на матрицата на плътността дава възможност за систематично отчитане на приноса на всички елементи на конфигурационното пространство към многочастичната вълнова функция на системата, като се запазва сравнително малък размерът на матриците, които трябва да бъдат диагонализирани;
- 2.3 Приложението на метода за реалистични ядрени системи като  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{48}\text{Cr}$  показва, че за достигане на нивото на грешка при описание на енергетичния спектър на ядрата, характерен за стандартните пресмятания в рамките на слоестия модел, е необходимо да се въведат наред с големината на собствените стойности на редуцираните матрици на плътността и допълнителни критерии за подбор на елементите от *Хилбертовото* пространство;

**Късodeйстващите корелации** между нуклоните в атомните ядра са изследвани в Приближението от нисък порядък на метода на *Ястров*.

- 3.1 Получени са аналитични изрази за корелираната едночастична матрица на плътността за двойномагическите ядра в *sd*- слоая;
- 3.2 Изведени са формули за основните едночастични характеристики: локална плътност, импулсно разпределение, еластичен формфактор;
- 3.3 Параметрите на модела са определени феноменологично от сравнение на експерименталните данни за еластичния формфактор на ядрата с теоретичните резултати;
- 3.4 анализиран е приносът на късodeйстващите корелации върху едночастичните характеристики на ядрата;
  - Получените резултати са в съгласие с експерименталните данни и с изводите, направени в други теоретични подходи;
- 3.5 Изследването на влиянието на късodeйстващите корелации в представяне на естествени орбитали на едночастичната матрица на плътността;
- 3.6 Естествените орбитали на дупчестите нива са много близки до едночастичните вълнови функции в метода на *Хартри-Фок* както в координатното, така и в импулсното пространство. Числата на запълване на тези нива са близки, но все пак по-малки от единица. Това води до изпразване на морето на *Ферми* от порядъка на няколко процента за разглежданите ядра;

- 3.7 Естествените орбитали на частичните нива са силно локализиращи в обема на ядрото, за разлика от *Хартри-Фоковите* едночастични вълнови функции. Те имат високоимпулсни компоненти и числа на запълване, различни от нула.
- 3.8 Последните две характеристики на частичните нива разкриват механизма на формиране на високите ”опашки” на пълното импулсно разпределение на ядрата. Те почти изцяло се дължат на заселването на състояния над *Ферми* нивото;
- 3.9 Приближението от нисък порядък в метода на *Ястров* нарушава *A*-представимостта на едночастичната матрица на плътността;
- 3.10 Изразът за корелираната едночастична матрица на плътността може да се представи като сума от две части: първата определя поведението на едночастичните характеристики на ядрата, чувствителни към малките импулси; чрез втората се отчита влиянието на късодействащите корелации, най-вече в областта на големите импулси;
- 3.11 Предложената декомпозиция на едночастичната матрица на плътността дава възможност за възстановяване на *A*-представимостта;
- 3.12 Тя служи за основа на феноменологичен подход за получаване на едночастичната матрица на плътността, който дава възможност за отчитане на влиянието на късодействащите нуклон-нуклонни корелации както върху диагоналните, така и върху недиагоналните матрични елементи. Като следствие се получава описание в рамките на един и същи модел на локалната плътност и на импулсното разпределение на ядрата за широк диапазон от импулси;
- 3.13 Представени са аналитични изрази за двучастичната матрица на плътността и за някои основни двучастични характеристики на ядрената структура като локалното разпределение на центъра на масата на двойка частици, относителното локално разпределение, импулсното разпределение на центъра на масата и относителното импулсно разпределение за два нуклона за ядрата със запълнени нива в  $s - d$  слоя;

Характеристиките на ядрената структура, отчитащи влиянието на късодействащите корелации, са използвани при описание на някои типове **преки реакции**.

- 4.1 Демонстрирана е възможността за получаване на функции на припокриване и спектроскопични фактори на  $(A - 1)$ -нуклонна система на базата на едночастичната матрица на плътността на ядрото с масово число  $A$ ;

- 4.2 В рамките на  $y$ -скейлинговия анализ е показано, че при  $|y| < 300\text{MeV}/c$ , скейлинговата функция се определя от дупчестите едночастични състояния, заселени от нуклоните в ядрата. В областта на големите стойности на  $y$  обаче само отчитането на късодействащите корелации води до коректно описание на експерименталните данни;
- 4.3 Използването на функции на припокриване и спектроскопични фактори, получени в рамките на единна процедура от едночастичната матрица на плътността на ядрото-мишена, води до реалистично описание на  $(e, e'p)$  и  $(p, d)$  реакции. Този подход се различава принципно от стандартните методи за изследване на преки реакции, в които вместо функции на припокриване се използват едночастични вълнови функции, получени в модела на независимите частици, а нуклон-нуклонните корелации се отчитат чрез модифициране на параметрите на средното поле;
- 4.4 Разработена е процедура за получаване на двучастични функции на припокриване на основата на корелираната двучастична матрица на плътността;

## Приложение 1: Матрични елементи на операторите в ph-DMRG метода

Тук ще представим формулите, по които се пресмятат матричните елементи на операторите, необходими за получаване на матрицата на хамилтониана в супер-блока (3.68) в phDMRG.

В част (3.3.3) беше показано, че всяко двукратно изродено аксиално деформирано ниво  $\{\alpha, m\}$  се намира в едно от следните четири състояния. То може да е:

1. празно;
2. на него да има един нуклон с проекция на ъгловия момент върху оста на симетрия  $|m\rangle$ ;
3. да е заето от един нуклон с проекция на ъгловия момент върху оста на симетрия  $-|m\rangle$ ;
4. на него да има два нуклона с проекции на ъгловия момент съответно  $|m\rangle$  и  $-|m\rangle$ ;

Ако запазим номерацията на горните състояния, то в подпространството, съдържащо само едно ниво, дупчесто или частично, всички матрични елементи на операторите  $a$ ,  $aa$ ,  $a^\dagger a$ ,  $a^\dagger a^\dagger a$  и  $a^\dagger a^\dagger aa$  са равни на нула, с изключение на приведените в таблиците:

Таблица 3: Ненулеви матрични елементи на оператора  $a$

| дупчести състояния                    | частично състояние                    |
|---------------------------------------|---------------------------------------|
| $\langle 2   a_{-m}   1 \rangle = -1$ | $\langle 1   a_{-m}   3 \rangle = 1$  |
| $\langle 4   a_{-m}   3 \rangle = 1$  | $\langle 2   a_{-m}   4 \rangle = -1$ |
| $\langle 3   a_m   1 \rangle = 1$     | $\langle 1   a_m   2 \rangle = 1$     |
| $\langle 4   a_m   2 \rangle = 1$     | $\langle 3   a_m   4 \rangle = 1$     |

Таблица 4: Ненулеви матрични елементи на оператора  $aa$

| дупчести състояния                        | частично състояние                        |
|---|---|
| $\langle 4   a_m a_{-m}   1 \rangle = -1$ | $\langle 1   a_m a_{-m}   4 \rangle = -1$ |
| $\langle 4   a_{-m} a_m   1 \rangle = 1$  | $\langle 1   a_{-m} a_m   4 \rangle = 1$  |

Таблица 5: Ненулеви матрични елементи на оператора  $a^\dagger a$

| дупчести състояния                                  | частично състояние                                  |
|---|---|
| $\langle 1   a_m^\dagger a_m   1 \rangle = 1$       | $\langle 2   a_m^\dagger a_m   2 \rangle = 1$       |
| $\langle 2   a_m^\dagger a_m   2 \rangle = 1$       | $\langle 4   a_m^\dagger a_m   4 \rangle = 1$       |
| $\langle 1   a_{-m}^\dagger a_{-m}   1 \rangle = 1$ | $\langle 3   a_{-m}^\dagger a_{-m}   3 \rangle = 1$ |
| $\langle 3   a_{-m}^\dagger a_{-m}   3 \rangle = 1$ | $\langle 4   a_{-m}^\dagger a_{-m}   4 \rangle = 1$ |
| $\langle 2   a_m^\dagger a_{-m}   3 \rangle = 1$    | $\langle 2   a_m^\dagger a_{-m}   3 \rangle = 1$    |
| $\langle 3   a_{-m}^\dagger a_m   2 \rangle = 1$    | $\langle 3   a_{-m}^\dagger a_m   2 \rangle = 1$    |

Таблица 6: Ненулеви матрични елементи на оператора  $a^\dagger a^\dagger a$

| дупчести състояния   | частично състояние  |
|--|---|
| $\langle 1   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_{-m}   3 \rangle = 1$  | $\langle 4   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_{-m}   3 \rangle = 1$ |
| $\langle 1   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_{-m}   3 \rangle = -1$ | $\langle 4   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_{-m}   3 \rangle = 1$ |
| $\langle 1   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_m   2 \rangle = 1$     | $\langle 2   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_m   2 \rangle = 1$    |
| $\langle 1   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_m   2 \rangle = -1$    | $\langle 4   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_m   2 \rangle = 1$    |

Таблица 7: Ненулеви матрични елементи на оператора  $a^\dagger a^\dagger aa$

| дупчести състояния   | частично състояние   |
|--|--|
| $\langle 1   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_m a_{-m}   1 \rangle = -1$ | $\langle 4   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_{-m} a_m   4 \rangle = -1$ |
| $\langle 1   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_m a_{-m}   1 \rangle = 1$  | $\langle 4   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_m a_{-m}   4 \rangle = 1$  |
| $\langle 1   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_{-m} a_m   1 \rangle = 1$  | $\langle 4   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_{-m} a_m   4 \rangle = 1$  |
| $\langle 1   a_{-m}^\dagger a_m^\dagger a_{-m} a_m   1 \rangle = -1$ | $\langle 4   a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_{-m} a_m   4 \rangle = -1$ |

За пресмятане на матричните елементи на операторите (3.66) в разширеното пространство са необходими матричните елементи на оператора в пространството от предишната итерация  $\langle i|A|j\rangle, j = 1, \dots, p$  и в добавяното подпространство  $\langle k|A|l\rangle, k, l = 1, \dots, 4$ , приведени в таблиците по-горе. В част (3.3.3) равенство (3.67) задава формулата, по която се пресмятат матричните елементи на оператора  $a$  в разширеното пространство. Ще приведем и формулите, необходими за получаване на матричните елементи на операторите  $a^\dagger a$ ,  $a^\dagger a^\dagger a$  и  $a^\dagger a^\dagger a a$  (използвано е съкращението  $n \equiv \{\alpha_n m_n\}$ ):

$$\begin{aligned}\langle i, k | a_1^\dagger a_2 | j, l \rangle &= \langle k | \langle i | a_1^\dagger a_2 | j \rangle | l \rangle \\ &= \langle i | a_1^\dagger a_2 | j \rangle \delta_{kl} + \langle k | a_1^\dagger a_2 | l \rangle \delta_{ij} \\ &+ (-1)^{n_j} \langle i | a_1^\dagger | j \rangle \langle k | a_2 | l \rangle - (-1)^{n_l} \langle k | a_1^\dagger | l \rangle \langle i | a_2 | j \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle i, k | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 | j, l \rangle &= \langle k | \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 | j \rangle | l \rangle \\ &= \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 | j \rangle \delta_{kl} + (-1)^{n_j} \langle k | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 | l \rangle \delta_{ij} \\ &+ (-1)^{n_j} \langle i | a_2^\dagger a_3 | j \rangle \langle k | a_1^\dagger | l \rangle - (-1)^{n_j} \langle i | a_1^\dagger a_3 | j \rangle \langle k | a_2^\dagger | l \rangle \\ &- \langle i | a_3 | j \rangle \langle k | a_1^\dagger a_2^\dagger | l \rangle + (-1)^{n_j} \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger | j \rangle \langle k | a_3 | l \rangle \\ &- \langle i | a_2^\dagger | j \rangle \langle k | a_1^\dagger a_3 | l \rangle + \langle i | a_1^\dagger | j \rangle \langle k | a_2^\dagger a_3 | l \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle i, k | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 | j, l \rangle &= \langle k | \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 | j \rangle | l \rangle \\ &= \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 | j \rangle \delta_{kl} + \langle k | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 | l \rangle \delta_{ij} \\ &+ (-1)^{n_j} \langle i | a_2^\dagger a_3 a_4 | j \rangle \langle k | a_1^\dagger | l \rangle - (-1)^{n_j} \langle i | a_1^\dagger a_3 a_4 | j \rangle \langle k | a_2^\dagger | l \rangle \\ &+ (-1)^{n_j} \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 | j \rangle \langle k | a_3 | l \rangle - (-1)^{n_j} \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 | j \rangle \langle k | a_4 | l \rangle \\ &+ \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger | j \rangle \langle k | a_3 a_4 | l \rangle - \langle i | a_1^\dagger a_3 | j \rangle \langle k | a_2^\dagger a_4 | l \rangle \\ &+ \langle i | a_2^\dagger a_3 | j \rangle \langle k | a_1^\dagger a_4 | l \rangle + \langle i | a_1^\dagger a_4 | j \rangle \langle k | a_1^\dagger a_3 | l \rangle \\ &+ \langle i | a_1^\dagger a_2^\dagger | j \rangle \langle k | a_3 a_4 | l \rangle - \langle i | a_1^\dagger a_3 | j \rangle \langle k | a_2^\dagger a_4 | l \rangle \\ &+ (-1)^{n_j} \langle i | a_4 | j \rangle \langle k | a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 | l \rangle - (-1)^{n_j} \langle i | a_3 | j \rangle \langle k | a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 | l \rangle \\ &+ (-1)^{n_j} \langle i | a_2^\dagger | j \rangle \langle k | a_1^\dagger a_3 a_4 | l \rangle - (-1)^{n_j} \langle i | a_1^\dagger | j \rangle \langle k | a_2^\dagger a_3 a_4 | l \rangle\end{aligned}$$

В конкретните пресмятания вместо матричните елементи на операторите  $a_1^\dagger a_2^\dagger a_3$  и  $a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4$  се запазват матричните елементи на операторите:

$$\mathcal{O}_k^1 = \sum_{ijl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l \quad \text{и} \quad \mathcal{O}_k^0 = \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k .$$

## Приложение 2: Полиноми, участващи в израза за едночастичната матрица на плътността

Полиномите  $\mathcal{A}(z, z')$ ,  $\mathcal{B}(z, z')$ ,  $\mathcal{C}(z, z')$  и  $\mathcal{D}(z, z')$  в израза (4.9) за едночастичната матрица на плътността могат да се представят в един и същ вид за двойномагическите ядра в  $sd$ -слоя:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(z, z', \cos \theta) &= \mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2(z^2 + z'^2) + \mathcal{A}_3 z^2 z'^2 \\ &+ \mathcal{A}_4 z z' \cos \theta + \mathcal{A}_5 z^2 z'^2 \cos^2 \theta\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{B}(z, z', \cos \theta) &= \mathcal{B}_1(y) + [\mathcal{B}_2(y) + \mathcal{B}_3(y) z^2 + \mathcal{B}_4(y) z^4] z^2 \\ &+ \mathcal{B}_5(y) z'^2 + [\mathcal{B}_6(y) + \mathcal{B}_7(y) z^2 + \mathcal{B}_8(y) z^4] z^2 z'^2 \\ &+ [\mathcal{B}_9(y) + \mathcal{B}_{10}(y) z^2 + \mathcal{B}_{11}(y) z^4] z z' \cos \theta \\ &+ [\mathcal{B}_{12}(y) + \mathcal{B}_{13}(y) z^2 + \mathcal{B}_{14}(y) z^4] z^2 z'^2 \cos^2 \theta\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{C}(z, z', \cos \theta) &= \mathcal{C}_1(y) + \mathcal{C}_2(y)(z^2 + z'^2) + \mathcal{C}_3(y) (z^4 + z'^4) \\ &+ \mathcal{C}_4(y) (z^6 + z'^6) + \mathcal{C}_5(y) (z^8 + z'^8) \\ &+ [\mathcal{C}_6(y) + \mathcal{C}_7(y)(z^2 + z'^2) + \mathcal{C}_8(y) (z^4 + z'^4)] z^2 z'^2 \\ &+ \mathcal{C}_9(y) z^4 z'^4 + [\mathcal{C}_{10}(y) + \mathcal{C}_{11}(y)(z^2 + z'^2) + \mathcal{C}_{12}(y) (z^4 + z'^4) \\ &+ \mathcal{C}_{13}(y)(z^6 + z'^6) + (\mathcal{C}_{14}(y) + \mathcal{C}_{15}(y)(z^2 + z'^2)) z^2 z'^2] z z' \cos \theta \\ &+ [\mathcal{C}_{16}(y) + \mathcal{C}_{17}(y)(z^2 + z'^2) + \mathcal{C}_{18}(y) (z^4 + z'^4) \\ &+ \mathcal{C}_{19}(y) z^2 z'^2] z^2 z'^2 \cos^2 \theta + [\mathcal{C}_{20}(y) + \mathcal{C}_{21}(y)(z^2 + z'^2)] z^3 z'^3 \cos^3 \theta \\ &+ \mathcal{C}_{22}(y) z^4 z'^4 \cos^4\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(z, z', \cos \theta) &= \mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2(z^2 + z'^2) + \mathcal{D}_3 z^2 z'^2 \\ &+ \mathcal{D}_4 z z' \cos \theta + \mathcal{D}_5 z^2 z'^2 \cos^2 \theta\end{aligned}$$

От своя страна функциите  $\mathcal{B}_i(y)$ ,  $\mathcal{C}_i(y)$  и  $\mathcal{D}_i(y)$  са полиноми по отношение на

параметъра  $y$ . Те се представят чрез формулите:

$$\mathcal{B}_i(y) = \sum_{n=0}^4 b_i^{(n)} y^n (1+y)^{-11/2}$$

$$\mathcal{C}_i(y) = \sum_{n=0}^4 c_i^{(n)} y^n (1+2y)^{-11/2}$$

$$\mathcal{D}_i(y) = \sum_{n=0}^4 d_i^{(n)} y^n [(1+2y)^{-11/2} - 2^{n+1} (1+4y)^{-11/2}]$$

Стойностите на ненулевите коефициенти  $b_i^{(n)}$ ,  $c_i^{(n)}$  и  $d_i^{(n)}$  за ядрата  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{16}\text{O}$ ,  ${}^{36}\text{Ar}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ , както и на  $\mathcal{A}_i$  са представени в следните таблици:

Таблица 8: Коефициенти  $\mathcal{A}_i$

|                    | i=1 | i=2 | i=3  | i=4 | i=5 |
|--------------------|-----|-----|------|-----|-----|
| ${}^4\text{He}$    | 1   | 0   | 0    | 0   | 0   |
| ${}^{16}\text{O}$  | 1   | 0   | 0    | 2   | 0   |
| ${}^{36}\text{Ar}$ | 1   | 0   | -2/3 | 2   | 2   |
| ${}^{40}\text{Ca}$ | 5/2 | -1  | 0    | 2   | 2   |

Таблица 9: Ненулеви коефициенти  $b_i^{(n)}$

|                    | $n=0$ | $n=1$ | $n=2$ | $n=3$  | $n=4$ |
|--------------------|-------|-------|-------|--------|-------|
| ${}^4\text{He}$    |       |       |       |        |       |
| $i=1$              | -3    | -12   | -18   | -12    | -3    |
| ${}^{16}\text{O}$  |       |       |       |        |       |
| $i=1$              | -15   | -48   | -54   | -24    | -3    |
| $i=2$              | 0     | 2     | -2    | -10    | -6    |
| $i=9$              | -30   | -96   | -108  | -48    | -6    |
| $i=10$             | 0     | 0     | -12   | -24    | -12   |
| ${}^{36}\text{Ar}$ |       |       |       |        |       |
| $i=1$              | -35   | -88   | -74   | -24    | -3    |
| $i=2$              | 0     | 2     | -86/3 | -110/3 | -6    |
| $i=3$              | 0     | 2     | 4/3   | 8/3    | -4    |
| $i=6$              | 70/3  | 176/3 | 148/3 | 16     | 2     |
| $i=7$              | 0     | 0     | 64/3  | 76/3   | 4     |
| $i=8$              | 0     | 0     | 0     | 0      | 8/3   |
| $i=9$              | -70   | -176  | 148   | -48    | -6    |
| $i=10$             | 0     | 8/3   | -60   | -224/3 | -12   |
| $i=11$             | 0     | 0     | 0     | 8/3    | -8    |
| $i=12$             | -70   | -176  | -148  | -48    | -6    |

|                  |          |      |         |     |        |
|------------------|----------|------|---------|-----|--------|
| $i = 13$         | 0        | 0    | -64     | 76  | -12    |
| $i = 14$         | 0        | 0    | 0       | 0   | -8     |
| $^{40}\text{Ca}$ |          |      |         |     |        |
| $i = 1$          | $-390/4$ | -88  | -74     | -24 | -3     |
| $i = 2$          | 39       | 97   | $-21/2$ | -61 | $15/2$ |
| $i = 3$          | 0        | 0    | 38      |     | -15    |
| $i = 4$          | 0        | 0    | 0       | 0   | 6      |
| $i = 5$          | 39       | 97   | $169/2$ | 34  | 15     |
| $i = 6$          | 0        | 0    | 39      | 39  | 0      |
| $i = 7$          | 0        | 0    | 0       | -2  | 6      |
| $i = 9$          | -78      | -194 | -169    | -68 | -15    |
| $i = 10$         | 0        | 4    | -70     | -74 | 0      |
| $i = 11$         | 0        | 0    | 0       | 4   | -12    |
| $i = 12$         | -78      | -192 | -172    | -73 | -15    |
| $i = 13$         | 0        | 0    | -72     | -70 | 0      |
| $i = 14$         | 0        | 0    | 0       | 0   | -12    |

Таблица 10: Ненулеви коефициенти  $c_i^{(n)}$

|                  | $n = 0$ | $n = 1$  | $n = 2$  | $n = 3$  | $n = 4$  |
|------------------|---------|----------|----------|----------|----------|
| $^4\text{He}$    |         |          |          |          |          |
| $i = 1$          | 3       | 3        | 72       | 96       | 48       |
| $^{16}\text{O}$  |         |          |          |          |          |
| $i = 1$          | 15      | 96       | 216      | 192      | 48       |
| $i = 8$          | 0       | -2       | -4       | 8        | 16       |
| $i = 6$          | 0       | 0        | -4       | -16      | -16      |
| $i = 10$         | 30      | 192      | 448      | 448      | 60       |
| $i = 11$         | 0       | 0        | 12       | 48       | 48       |
| $i = 16$         | 0       | 0        | 28       | 112      | 112      |
| $^{36}\text{Ar}$ |         |          |          |          |          |
| $i = 1$          | 35      | 176      | 296      | 192      | 48       |
| $i = 2$          | 0       | -2       | $68/3$   | $184/3$  | 16       |
| $i = 3$          | 0       | 0        | $-4/3$   | $-16/3$  | 0        |
| $i = 6$          | $-70/3$ | $-352/3$ | $-608/3$ | $-448/3$ | $-128/3$ |
| $i = 7$          | 0       | 0        | $-64/3$  | $-164/3$ | $-24/3$  |
| $i = 8$          | 0       | 0        | 0        | 0        | $-8/3$   |
| $i = 9$          | 0       | 0        | 0        | 0        | $-28/3$  |
| $i = 10$         | 70      | 325      | $1984/3$ | $1664/3$ | 160      |
| $i = 11$         | 0       | $-8/3$   | 52       | $400/3$  | 1763     |
| $i = 12$         | 0       | 0        | 0        | $-8/3$   | 16       |
| $i = 14$         | 0       | 0        | $-136/3$ | -120     | $-112/3$ |
| $i = 15$         | 0       | 0        | 0        | 0        | -16      |

|                  |       |      |        |        |       |
|------------------|-------|------|--------|--------|-------|
| $i = 16$         | 70    | 325  | 2193/3 | 2176/3 | 736/3 |
| $i = 17$         | 0     | 0    | 64     | 452    | 88    |
| $i = 18$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 8     |
| $i = 19$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 8     |
| $i = 20$         | 0     | 0    | 392/3  | 952/3  | 464/3 |
| $i = 21$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 112/3 |
| $i = 22$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 116/3 |
| $^{40}\text{Ca}$ |       |      |        |        |       |
| $i = 1$          | 195/2 | 480  | 825    | 660    | 300   |
| $i = 2$          | -39   | -194 | -248   | -102   | -140  |
| $i = 3$          | 0     | 0    | -38    | -86    | -1    |
| $i = 4$          | 0     | 0    | 0      | 0      | -6    |
| $i = 6$          | 0     | 0    | -80    | -160   | 38    |
| $i = 7$          | 0     | 0    | 0      | 0      | -22   |
| $i = 9$          | 0     | 0    | 0      | 0      | -4    |
| $i = 10$         | 78    | 388  | 876    | 964    | 280   |
| $i = 11$         | 0     | -4   | -12    | -24    | 44    |
| $i = 12$         | 0     | 0    | 0      | -4     | -16   |
| $i = 14$         | 0     | 0    | -8     | -16    | -24   |
| $i = 15$         | 0     | 0    | 0      | 0      | -8    |
| $i = 16$         | 78    | 384  | 840    | 908    | 356   |
| $i = 17$         | 0     | 0    | 72     | 136    | 28    |
| $i = 18$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 12    |
| $i = 19$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 16    |
| $i = 20$         | 0     | 0    | 152    | 296    | 56    |
| $i = 21$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 56    |
| $i = 22$         | 0     | 0    | 0      | 0      | 60    |

Таблица 11: Ненулеви коефициенти  $d_i^{(n)}$

|                  | $n = 0$ | $n = 1$ | $n = 2$ | $n = 3$ | $n = 4$ |
|------------------|---------|---------|---------|---------|---------|
| $^4\text{He}$    |         |         |         |         |         |
| $i = 1$          | 6       | 48      | 144     | 192     | 96      |
| $^{16}\text{O}$  |         |         |         |         |         |
| $i = 1$          | 30      | 210     | 540     | 600     | 240     |
| $i = 2$          | 60      | 372     | 852     | 864     | 336     |
| $^{36}\text{Ar}$ |         |         |         |         |         |
| $i = 1$          | 70      | 450     | 1050    | 1040    | 360     |
| $i = 3$          | -140/3  | -632/3  | -436    | -1316/3 | -156    |
| $i = 4$          | 140     | 2276/3  | 4876/3  | 1644    | 616     |
| $i = 5$          | 140     | 632     | 1308    | 1316    | 468     |

$^{40}\text{Ca}$

|         |     |      |          |          |          |
|---------|-----|------|----------|----------|----------|
| $i = 1$ | 195 | 1260 | $6585/2$ | $6585/2$ | $4335/4$ |
| $i = 2$ | -78 | -428 | -1131    | -1114    | $705/2$  |
| $i = 3$ | 0   | 0    | 74       | 58       | 9        |
| $i = 4$ | 156 | 836  | 1812     | 1858     | 660      |
| $i = 5$ | 156 | 696  | 1460     | 1444     | 498      |

---

---

## Приложение 3: Полиноми, дефиниращи основни двучастични характеристики

### .1 Полиноми, дефиниращи двучастичната матрица на плътността

Изрази за полиномите  $\{P\}$  в равенства (4.100,4.106), които определят двучастичната матрица на плътността за ядрата:

<sup>4</sup>He

$$P_{I_1} = P_{I_2} = (1 + 2y)^{-3/2}$$

$$P_{I_3} = P_{I_4} = (1 + y)^{-3/2}$$

$$P_{Y_2}(y) = P_{Z_2}(y) = P_{Y_3}(y) = (1 + 2y)^{-3/2}$$

<sup>16</sup>O

$$P_{I_1}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(1+y)^{7/2}} [4 + 5y + y^2 (1 + 2x^2)]$$

$$P_{I_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{2}{(1+2y)^{7/2}} [2 + 5y + y^2 (2 + x_1^2 + x_2^2 + 2x_{12})]$$

$$P_{I_3}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = \frac{1}{(1+y)^{7/2}} [1 + 2x_{23} + 2y (1 + x_{12} + x_{13} + x_{23}) + y^2 (1 + 2x_{12} + 2x_{13} + 4x_{12}x_{13})]$$

$$P_{I_4}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4) = \frac{1}{(1+2y)^{7/2}} [1 + 2x_{34} + 2y (2 + x_{13} + x_{14} + x_{23} + x_{24} + 2x_{34}) + 4y^2 (+x_{13} + x_{14} + x_{23} + x_{24} + x_{23} + x_{13}x_{14} + x_{14}x_{23} + x_{13}x_{24}x_{24})]$$

$$P_{Y_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; y) = \frac{1}{(1+2y)^{7/2}} [4 + 8x_{12} + y(13 + 18x_{12}) + y^2(10 + 14x_{12})]$$

$$P_{Z_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; y) = \frac{1}{(1+2y)^{7/2}} [1 + 2x_{12} + y(7 + 6x_{12}) + y^2(10 + 14x_{12})]$$

$$P_{Y_3}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4; y) = \frac{1}{(1+2y)^{7/2}} [1 + 2x_{12} + 2x_{34} + 4x_{12}x_{34} +$$

$$2y(2 + 3x_{12} + x_{13} + x_{14} + x_{23} + x_{24} + 3x_{34} + 4x_{12}x_{34})$$

$$+ 4y^2(1 + x_{12} + x_{13} + x_{14} + x_{23} + x_{24} + x_{34} + x_{14}x_{23} +$$

$$x_{13}x_{24} + x_{12}x_{34})]$$

## .2 Полиноми, дефиниращи локалните плътности и импулсни разпределения на двойка частици

The expressions for  $\{\eta_i\}$ ,  $\{\mu_i\}$ ,  $\{\gamma_i\}$  and  $\{\theta_i\}$ , which determine the two-body density and momentum distributions eqs.(4.107-4.112) are:

<sup>4</sup>He

$$\eta_1(R) = 12\sqrt{2} \quad \eta_2(R; y) = -\frac{4\sqrt{2}}{(1+2y)^{3/2}} \quad \eta_3(R) = \frac{32}{(2+3y)^{3/2}} \quad \eta_4(R) = -\frac{4\sqrt{2}}{(1+3y)^{3/2}}$$

$$\mu_1(s) = \frac{3}{\sqrt{2}} \quad \mu_2(s; y) = \frac{15}{\sqrt{2}(1+2y)^{3/2}} \quad \mu_3(s; y) = \frac{24}{(2+3y)^{3/2}}$$

$$\gamma_1(K) = \frac{1}{2} \quad \gamma_2(K, y) = \frac{2}{(1+2y)^{3/2}} \quad \gamma_3(K) = -\frac{8\sqrt{2}}{(2+5y)^{3/2}} \quad \gamma_4(K) = \frac{2}{(1+y)^{3/2}(1+4y)^{3/2}}$$

$$\theta_1(k) = 4 \quad \theta_2(k; y) = \frac{20}{(1+y)^{3/2}} \quad \theta_3(k) = \frac{8}{(1+4y)^{3/2}}$$

$$\theta_4(k) = -\frac{64\sqrt{2}}{(2+5y)^{3/2}} \quad \theta_5(k) = \frac{4}{(1+4y)^3} \quad \theta_6(k) = \frac{16}{(1+y)^{3/2}(1+4y)^{3/2}}$$

$$\eta_1(R) = 2\sqrt{2} (117 + 104 R^2 + 48 R^4)$$

$$\begin{aligned} \eta_2(R; y) &= \frac{\sqrt{2}}{(1+2y)^{7/2}} [48 R^4 (28 + 60 y + 35 y^2) \\ &\quad + 8 R^2 (364 + 848 y + 555 y^2) + 3 (1092 + 2780 y + 1837 y^2)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_3(R) &= -\frac{128}{(2+3y)^{15/2}} \left[ 1536 R^6 y^2 (1 + 3 y + 2 y^2)^2 \right. \\ &\quad + 192 R^4 (28 + 224 y + 749 y^2 + 1352 y^3 + 1419 y^4 + 843 y^5 + 225 y^6) \\ &\quad + 8 R^2 (2 + 3 y)^2 (364 + 1762 y + 3489 y^2 + 3105 y^3 + 990 y^4) \\ &\quad \left. + 9 (2 + 3 y)^3 (182 + 563 y + 588 y^2 + 212 y^3) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_4(R) &= \frac{4\sqrt{2}}{(1+3y)^{15/2}} \left[ 384 R^6 y^2 (1 + 6 y + 8 y^2)^2 \right. \\ &\quad + 48 R^4 (7 + 112 y + 749 y^2 + 2704 y^3 + 5676 y^4 + 6744 y^5 + 3600 y^6) \\ &\quad + 8 R^2 (1 + 3 y)^2 (91 + 881 y + 3489 y^2 + 6210 y^3 + 3960 y^4) \\ &\quad \left. + 9 (1 + 3 y)^3 (91 + 563 y + 1176 y^2 + 848 y^3) \right] \end{aligned}$$

$$\mu_1(s) = \frac{1}{4\sqrt{2}} (93 + 34 s^2 + 3 s^4)$$

$$\begin{aligned} \mu_2(s; y) &= \frac{1}{4\sqrt{2}(1+2y)^{7/2}} [2697 + 6540 y + 4047 y^2 \\ &\quad + 2 s^2 (493 + 1214 y + 831 y^2) + 3 s^4 (29 + 64 y + 39 y^2)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu_3(s; y) &= \frac{8}{(2+3y)^{15/2}} \left[ 3 (2 + 3 y)^3 (434 + 1245 y + 1158 y^2 + 348 y^3) \right. \\ &\quad + 2 s^2 (2 + 3 y)^2 (476 + 2370 y + 4713 y^2 + 4215 y^3 + 1386 y^4) \\ &\quad + 12 s^4 (28 + 232 y + 813 y^2 + 1554 y^3 + 1733 y^4 + 1083 y^5 + 297 y^6) \\ &\quad \left. + 24 s^6 y^2 (1 + 3 y + 2 y^2)^2 \right] \end{aligned}$$

$$\gamma_1(K) = \frac{1}{480} (117 + 26 K^2 + 3 K^4)$$

$$\begin{aligned} \gamma_2(K; y) &= \frac{1}{480(1+2y)^{7/2}} [3 K^4 (28 + 60 y + 35 y^2) \\ &\quad + 2 K^2 (364 + 872 y + 603 y^2) + 3 (1092 + 2732 y + 1741 y^2)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_3(K) &= \frac{2\sqrt{2}}{15(2+5y)^{15/2}} [24 K^6 y^2 (1 + 2 y)^2 (1 + 4 y + 3 y^2) \\ &\quad - 12 K^4 (28 + 344 y + 1705 y^2 + 4340 y^3 + 5933 y^4 + 4087 y^5 + 1105 y^6) \\ &\quad - 2 K^2 (2 + 5 y)^2 (364 + 2870 y + 8263 y^2 + 10185 y^3 + 4680 y^4) \\ &\quad - 3 (2 + 5 y)^3 (546 + 3251 y + 6160 y^2 + 3770 y^3)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_4(K) &= \frac{1}{120(1+y)^{11/2}(1+4y)^{7/2}} [3 K^4 (7 + 46 y + 72 y^2) \\ &\quad + 2 K^2 (91 + 707 y + 2250 y^2 + 3238 y^3 + 1604 y^4) \\ &\quad + 3 (1 + y)^2 (273 + 1886 y + 5060 y^2 + 6424 y^3 + 3472 y^4)] \end{aligned}$$

$$\theta_1(k) = \frac{1}{60} (117 + 104 k^2 + 48 k^4)$$

$$\begin{aligned} \theta_2(k; y) &= \frac{1}{60(1+2y)^{7/2}} [48 k^4 (29 + 64 y + 39 y^2) \\ &\quad + 8 k^2 (493 + 1202 y + 807 y^2) + 3 (899 + 2204 y + 1397 y^2)] \end{aligned}$$

$$\theta_3(k) = - \frac{1}{30(1+4y)^{7/2}} [48 k^4 + 8 k^2 (17 + 80 y + 24 y^2) + 3 (31 + 224 y + 400 y^2)]$$

$$\begin{aligned} \theta_4(k) &= \frac{16\sqrt{2}}{15(2+5y)^{5/2}} [1536 k^6 y^2 (1 + 2y)^2 (1 + 4y + 3y^2) \\ &\quad - 3 (2 + 5y)^3 (434 + 2571 y + 4800 y^2 + 2870 y^3) \\ &\quad - 8 k^2 (2 + 5y)^2 (476 + 3774 y + 11043 y^2 + 14075 y^3 + 6780 y^4) \\ &\quad - 192 k^4 (28 + 344 y + 1697 y^2 + 4268 y^3 + 5691 y^4 + 3727 y^5 + 905 y^6)] \end{aligned}$$

$$\theta_5(k) = \frac{1}{60(1+4y)^7} [48 k^4 + 8 k^2 (17 + 160 y + 368 y^2) + 3 (1 + 4y)^2 (31 + 200 y + 496 y^2)]$$

$$\begin{aligned} \theta_6(k) &= \frac{1}{15(1+y)^{11/2} (1+4y)^{7/2}} [48 k^4 (7 + 46 y + 72 y^2) \\ &\quad + 8 k^2 (119 + 935 y + 2862 y^2 + 3890 y^3 + 1844 y^4) \\ &\quad + 3 (1 + y)^2 (217 + 1486 y + 4236 y^2 + 5944 y^3 + 3472 y^4)] \end{aligned}$$

## Библиография

- [1] J. Chadwick, *Proc. Roy. Soc. A* **136**, 692 (1932).
- [2] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **77**, 1 (1932).
- [3] D. Ivanenko, *Nature* **129**, 798 (1932).
- [4] R. Jastrow, *Phys. Rev.* **81**, 165 (1951).
- [5] J. L. Friar, G. L. Payne, V. G.J. Stokes and J. J. de Swart, *Phys. Lett.* **B311**, 4 (1993).
- [6] V. R. Pandharipande, *Nucl. Phys.* **A553**, 191c (1993).
- [7] B. S. Pudliner, V. R. Pandharipande, J. Carlson and R. B. Wiringa *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4369 (1995).
- [8] H. M. Hofmann and G. M. Hale, *nucl-th/0512065* (2005).
- [9] R. Machleidt and I. Slaus, *J. Phys.* **G27**, R68 (2001).
- [10] B. D. Serot and J. D. Walechka, *Adv. Nucl. Phys.* **16**, 1 (1986).
- [11] R. Brockmann and R. Machleidt, *Phys. Rev.* **C42**, 1965 (1990).
- [12] W. H. Dickhoff and H. Müther, *Rep. Prog. Phys.* **55**, 1947 (1992).
- [13] V. R. Pandharipande, I. Sick, P. K. A. deWitt Huberts *Rev. Mod. Phys.* **69**, 981 (1997).
- [14] H. Heisenberg and V. R. Pandharipande, *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **50**, 481 (2000).
- [15] M. Lutz, B. Friman and C. Appel, *Phys. Lett.* **B474**, 7 (2000)
- [16] N. Keizer, S. Fritsch and W. Weise, *Nucl. Phys.* **A700**, 343 (2002)
- [17] P. Navrátil, J. P. Vary and B. R. Barrett, *Phys. Rev.* **C62**, 054311 (2000)
- [18] C. Forssén, P. Navrátil, W. E. Ormand and E. Caurier, *Phys. Rev.* **C71**, 044312 (2005)

- [19] W. D. Myers and W. J. Swiatecki, *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **32**, 309 (1982)
- [20] V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys.* **A95**, 420 (1967)
- [21] P. Moller, J. R. Nix and K.-L. Kratz, *At. Data Nucl. Data Tables* **66**, 131 (1995)
- [22] O. Haxel, J. Jensen and H. Suess, *Phys. Rev.* **75**, 1766 (1949).
- [23] M. Mayer, *Phys. Rev.* **75**, 1969 (1949).
- [24] H. Weidenmüller, *Nucl. Phys.* **A507**, 5c (1990).
- [25] B. A. Brown, C. Bronk and P. E. Hodgson, *Jour. Phys.* **G10** 1683 (1984).
- [26] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer Verlag, New York – Heidelberg, (1980).
- [27] Борислав Славов, *Увод в теоретичната ядрена физика*, Университетско издателство "Св. Кл. Охридски", София (1992).
- [28] W. F. Hornyak, *Nuclear Structure*, Academic, New York (1975).
- [29] P. O. Löwdin, *Phys. Rev.* **97**, 1474 (1955).
- [30] D. R. Hartree, *Proc. Cam. Phil. Soc.* **24**, 89 (1929).
- [31] V. A. Fock, *Z. Phys.* **61**, 126 (1930).
- [32] Д. Таулес, *Квантовая механика систем многих частиц*, Мир, Москва (1975).
- [33] Б. И. Барц, Ю. Л. Болотин, Е. В. Инопин, В. Ю. Гончар, *Метод Хартри–Фока в теории ядра*, Наукова думка, Киев (1982).
- [34] M. Bender, P. H. Heenen and P. G. Reinhard, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 121 (2003).
- [35] K. A. Brueckner, *Phys. Rev.* **97**, 1353 (1955).
- [36] А. Мессиа, *Квантовая механика*, т.2, Наука, Москва (1979).
- [37] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т.3, *Квантовая механика – нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
- [38] Г. Бете, *Теория ядерной материи*, Мир, Москва (1974).
- [39] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **167**, 879 (1955).
- [40] J. W. Negele, *Phys. Rev. C* **1**, 1260 (1970).

- [41] X. Campi and D. W. Sprung, *Nucl. Phys. A***194**, 401 (1972).
- [42] D. Brink and E. Boecker, *Nucl. Phys.* **91**, 1 (1967).
- [43] I. Zh. Petkov and M. V. Stoitsov, *Nuclear Density Functional Theory*, Clarendon, Oxford (1991).
- [44] C. Speicher, R. M. Dreizler and E. Engel, *Ann. Phys. (N.Y.)* **213**, 312 (1991).
- [45] C. Speicher, E. Engel and R. M. Dreizler, *Nucl. Phys. A* **562**, 569 (1993).
- [46] T. H. R. Skirm, *Philos. Mag.* **1**, 1043 (1956).
- [47] T. H. R. Skirm, *Nucl. Phys.* **9**, 615 (1959); *Nucl. Phys.* **9**, 635 (1959).
- [48] J. W. Negele and D. Vautherin, *Phys. Rev. C***5**, 1472 (1972); *Phys. Rev. C***11**, 1031 (1975);
- [49] D. Vautherin and M. Vénéroni, *Phys. Lett.* **B29**, 203 (1969).
- [50] D. Vautherin and D. Brink, *Phys. Rev. C***5**, 626 (1972).
- [51] D. Gogni, in *Proceedings of the International Conference on Nuclear Physics*, Munich, edited by J. de Boer and H. J. Mang, North-Holland, Amsterdam (1973).
- [52] J. D. Walecka, *Ann. Phys. (N.Y.)* **83**, 491 (1974).
- [53] J. Boguta and A. R. Bodmer, *Nucl. Phys. A***292**, 413 (1977).
- [54] *Extended Density Functional in Nuclear Structure*, edited by G. A. Lalazissis, P. Ring and D. Vretenar, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York (2004)
- [55] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz and P. Borycki, *nucl-th/0601040*, *Int. J. of Mass Spectrometry*, in press
- [56] J. R. Stone and P.-G. Reinhard, *nucl-th/0607002*, *Prog.Part.Nucl.Phys*, in press
- [57] O. Bohigas, and S. Stringari *Phys. Lett.* **B95**, 9 (1980).
- [58] H. Clement, P. Grabmayr, H. Röhm and G. J. Wagner, *Phys. Lett.* **B183**, 127 (1987).
- [59] E. N. M. Quint et al, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1088 (1987).
- [60] M. Jaminon, C. Mahaux and H. Ngô *Phys. Lett.* **B158**, 103 (1985).
- [61] M. Jaminon, C. Mahaux and H. Ngô *Nucl. Phys. A***473**, 509 (1987).
- [62] D. H. Kobe, *J. Chem. Phys.* **50**, 5183 (1969).

- [63] J. Cavedon et al., *Phys. Rev. Lett.* **49**, 978 (1982); *Phys. Lett. B* **118**, 311 (1982).
- [64] C. Mahaux and R. Sartot, *Adv. Nucl. Phys.* **20**, 1 (1991).
- [65] G. J. Kramer, *PhD thesis*, University of Amsterdam (1990).
- [66] K. Allaarat et al., *NIKHEF-K Report NR:91-E19*, (1991).
- [67] A. N. Antonov, P. E. Hodgson and I. Zh. Petkov, *Nucleon Correlations in Nuclei*, Springer Verlag, Berlin–Heidelberg–New York (1993).
- [68] M. G. Mayer, *Phys. Rev.* **79**, 22 (1950).
- [69] J. P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite System*, MIT, Cambridge, MA (1985).
- [70] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [71] K. Dietrich, H. J. Mang and J. H. Pradal, *Phys. Rev. B* **135**, 22 (1964).
- [72] J. P. Elliot, *Proc. Roy. Soc. London A* **245**, 128 (1958); **245**, 562 (1958).
- [73] B. H. Flowers, *Proc. Roy. Soc. London A* **212**, 248 (1952).
- [74] R. W. Richardson, *Phys. Lett.* **3** 277 (1963); *Phys. Lett.* **5** 82(1963); *Nucl. Phys.* **B52** 221 (1964); *J. Math. Phys.* **6** 1034 (1965); *Phys. Rev.* **141** 949 (1966); *Phys. Rev.* **144** 874 (1966); *Phys. Rev.* **159** 792 (1967); *J. Math. Phys.* **9** 1327 (1968).
- [75] M. Gaudin, *J. Physique* **37** 1087 (1976); *La Fonction d'onde de Bethe*, Collection du Commissariat a l'énergie atomique, Masson, Paris (1983).
- [76] J. Dukelsky and G. Sierra, *Phys. Rev. Lett.* **83** 172 (1999).
- [77] G. Sierra, J. Dukelsky, G. G. Dussel, J. von Delft and F. Brown, *Phys. Rev. B* **61** 11890 (2000).
- [78] J. Dukelsky, C. Esebbag and P. Schuck, *Phys. Rev. Lett.* **87** 066403 (2001).
- [79] J. Dukelsky and S. Pittel, *Phys. Rev. Lett.* **86** 4791 (2001).
- [80] R. W. Richardson and N. Sherman, *Nucl. Phys.* **B52** 221 (1964).
- [81] M. C. Cambiaggio, A. M. F. Rivas and M. Saraceno and N. Sherman, *Nucl. Phys.* **A624** 157 (1997).
- [82] J. Dukelsky, S. Pittel and G. Sierra, *Rev. Mod. Phys.* **76** 643 (2004).

- [83] J. Dukelsky, V. G. Gueorguiev and P. Van Isacker, (2004) *nucl-th/0406001*.
- [84] M. Asorey, F. Falceto and G. Sierra, *Nucl. Phys. B***622**, 593 (2002).
- [85] A. D. Ushveridize, *Quasi-exactly solvable models in quantum mechanics*, Institute of Physics, Bristol and Philadelphia, (1994).
- [86] M. Metcalf, W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 90*, vol. 2, Cambridge University Press, New York, (1999).
- [87] L.-A. Wu, M. Guidry, Y. Sun and C.-L. Wu, *Phys. Rev. B***67**, 014515 (2003).
- [88] E. Demler, W. Hanke and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **76** 909 (2004).
- [89] J. Dobaczewski, J. Dudek, S. G. Rohozinski and T. R. Werner, *Phys. Rev. C***62**, 014310 (2000); *Phys. Rev. C***62**, 014311 (2000).
- [90] A. Bulgac, *Preprint FT-194-1980*, Central Institute of Physics, Bucharest, 1980; *nucl-th/9907088*.
- [91] J. Dobaczewski, H. Flocard and J. Treiner, *Nucl. Phys. A***422**, 103 (1984).
- [92] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, T.R. Werner, J.-F. Berger, C. R. Chinn, and J. Dechargé, *Phys. Rev. C* **53**, 2809( 1996).
- [93] J. Terasaki, P.-H. Heenen, H. Flocard and P. Bonche, *Nucl. Phys. A***600**, 371 (1996).
- [94] M. V. Stoitsov, W. Nazarewicz and S. Pittel, *Phys. Rev. C***58**, 2092 (1998).
- [95] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, P. Ring and S. Pittel, *Phys. Rev. C***61** 034311 (2000).
- [96] I. Zh. Petkov and M. V. Stoitsov, *Compt. Rend. Bulg. Acad. Sci.* **34**, 1651 (1981); *Theor. Math. Phys.* **55**, 584 (1983); *Sov. J. Nucl. Phys.* **37**, 692 (1983).
- [97] M. V. Stoitsov and I. Zh. Petkov, *Ann. Phys.* **184**, 121 (1988).
- [98] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev. A***140**, 1133 (1965).
- [99] Y. M. Engel, D. M. Brink, K. Goeke, S. J. Krieger and D. Vautherin, *Nucl. Phys. A* **249**, 215 (1975).
- [100] E. Perlinska, S. G. Rohozinski, J. Dobaczewski and W. Nazarewicz, *Phys. Rev. C* **69**, 014316 (2004).

- [101] J. Dechargé and D. Gogni, *Phys. Rev. C* **21**, 1568 (1980).
- [102] J.-F. Berger, M. Girod and D. Gogni, *Nucl. Phys. A* **428**, 23c (1984).
- [103] J.-F. Berger, M. Girod and D. Gogni, *Comput. Phys. Commun.* **63**, 365 (1991).
- [104] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, P. Borycki, *nucl-th/0601040*
- [105] F. Tondeur, *Nucl. Phys. A* **315**, 353 (1979)
- [106] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz and M. V. Stoitsov, *Eur. Phys. J. A* **15**, 21 (2002).
- [107] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz and P. Ring, *Nucl. Phys. A* **693**, 361 (2001).
- [108] A. Bulgac and Y. Yu, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 042504 (2002).
- [109] A. Bulgac, *Phys. Rev. C* **65**, 051305(R) (2002).
- [110] Y. Yu and A. Bulgac, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 222501 (2003).
- [111] A. Bulgac and Y. Yu, *Int. J. Mod. Phys. E* **13**, 147 (2004).
- [112] P. Borycki, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz and M. V. Stoitsov, *nucl-th/0601054*
- [113] V. G. Soloviev, *Theory of Atomic Nuclei: Quasiparticles and Phonons*, Institute of Physics, Bristol and Philadelphia, (1992).
- [114] D. L. Hill and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **89**, 1102 (1953).
- [115] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **108**, 311 (1957).
- [116] P. G. Reinhard and K. Goeke, *Rep. Prog. Phys.* **50**, 1 (1987).
- [117] A. N. Antonov, V. A. Nikolaev and I. Zh. Petkov, *Bulg. J. Phys.* **6**, 151 (1979).
- [118] A. N. Antonov, V. A. Nikolaev and I. Zh. Petkov, *Z. Phys. A* **297**, 257 (1980).
- [119] M. V. Ivanov, A. N. Antonov, M. K. Gaidarov, *Intern. Journ. of Modern Phys. E* **9** 339 (2000).
- [120] M. V. Ivanov, M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, C. Giusti, *Phys. Rev. C* **64** 014605 (2001).
- [121] M. V. Ivanov, M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, C. Giusti, *Nucl. Phys. A* **699** 336 (2002).
- [122] A. Valor, P.-H. Heenen, P. Bonche, *Nucl. Phys. A* **671**, 145 (2000).

- [123] P.-H. Heenen, A. Valor, M. Bender, P. Bonche and H. Flocard, *Eur. Phys. J. A* **11**, 393 (2001).
- [124] M. Bender, P.-H. Heenen, *Nucl. Phys. A* **713**, 390 (2003).
- [125] M. Bender, H. Flocard and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. C* **68** 044321 (2003).
- [126] M. Bender, G. F. Bertsch and P.-H. Heenen, *Phys. Rev. C* **69** 034340 (2004).
- [127] B. A. Brown, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **47**, 517 (2001).
- [128] S. Cohen and D. Kurath, *Nucl. Phys. A* **73**, 1, (1965); *Nucl. Phys. A* **101**,1, (1967).
- [129] E. K. Warburton, B. A. Brown and D. J. Miller, *Phys. Lett. B* **293**,7 (1992).
- [130] T. Otsuka, M. Honma and T. Mizusaki, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1588(1998).
- [131] J. P. Elliott and T. H. R. Skyrme, *Proc. R. Soc. London Ser A* **232**, 561 (1955).
- [132] S. Gartenhaus and C. Schwartz, *Phys. Rev.* **108**, 482 (1957).
- [133] J. B. French, E. C. Halbert, J. B. McGrory and S. S. M. Wong, *Adv. Nucl. Phys.* **3**, 193 (1969).
- [134] R. R. Whitehead, A. Watt, B. J. Cole and I. Morrison, *Adv. Nucl. Phys.* **9**, 123 (1977).
- [135] B. A. Brown, A. Etchegoyen, W. D. M. Rae, N. S. Godwin, W. A. Richter, C. H. Zimmerman, W. E. Ormand and J. S. Winfield, *MSU-NSCL Report* **524** (1985).
- [136] E. Caurier et al., *shell-model code ANTOINE*, CRN, Strasbourg, (1989).
- [137] C. A. Ur et al., *Phys. Rev. C* **58**, 3163 (1998).
- [138] A. Schmidt et al., *Phys. Rev. C* **62**, 044319 (2000).
- [139] T. Mizusaki, *RIKEN Accel. Prof. Rep.* **33**, 15 (2000).
- [140] D. Zwarts, *Comp. Phys. Comm.* **38**, 365 (1985).
- [141] E. Caurier et al., *shell-model code NATHAN*, unpublished.
- [142] B. A. Brown, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5300 (2000).
- [143] S. Cohen and D. Kurath, *Nucl. Phys. A* **101**, 1 (1967).
- [144] T. Sebe and J. Nachamkin, *Ann. Phys.* **51**, 100 (1969).

- [145] M. Hjorth-Jensen, T. T. S. Kuo and E. Osnes, *Phys. Rep.* **261**, 125 (1995).
- [146] B. H. Wildenthal, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **11**, 5 (1984).
- [147] B. A. Brown and B. H. Wildenthal, *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **38**, 292 (1988).
- [148] S. E. Koonin, D. J. Dean and K. Langanke, *Phys. Rep.* **577**, 1 (1997); *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **47**, 463 (1997).
- [149] J. Hubbard, *Phys. Lett.* **3**, 77 (1959).
- [150] R. D. Sraonovich, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **115**, 1907 (1957).
- [151] T. Otsuka, M. Honma, T. Mizusaki, N. Shimizu and Y. Utsuno, *Rep. Prog. Phys.* **47**, 319 (2001).
- [152] T. Mizusaki, T. Otsuka, Y. Utsoni, M. Honma and T. Sebe, *Phys. Rev. C* **59**, R1846 (1999).
- [153] M. Horoi, A. Volya and V. Zelevinsky, *Phys. Rev. C* **50**, 2064 (1999).
- [154] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [155] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863 (1992).
- [156] S. R. White, *Phys. Rev. B* **48** 10345 (1993).
- [157] S. R. White and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **48** 3844 (1993).
- [158] S. R. White, R. M. Noak and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 886 (1994).
- [159] S. R. White and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54**, 9862 (1996).
- [160] S. R. White, *Phys. Rev. B* **53**, 52 (1999).
- [161] S. Ramasesha, S. K. Pati, H. R. Krishnamurthy, Z. Shuai and J. L. Brédas, *Phys. Rev. B* **54**, 7598 (1996).
- [162] S. R. White, I. Affleck and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **65**, 165122 (2002).
- [163] H.-J. Mikeska, U. Neugebauer and U. Schollwöck, *Phys. Rev. B* **55** 2955 (1997).
- [164] M.-B. Lepetit and G. M. Pastor, *Phys. Rev. B* **56**, 4447 (1997).
- [165] M. Boman and R. J. Bursill, *Phys. Rev. B* **57**, 15167 (1998).
- [166] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3633 (1996).

- [167] S. R. White and D. J. Scalapino, *Phys. Rev.* **B55**, 6504 (1997).
- [168] T. Xiang, *Phys. Rev.* **B53** 10445 (1996).
- [169] S. R. White and R. L. Martin, *J. Chem. Phys.* **110**, 4127 (1999).
- [170] S. Daul, I. Ciofini, C. Daul and S. R. White; *Int. J. Quantum Chem.* **79**, 331 (2000).
- [171] G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 147902 (2003); *Phys. Rev. Lett.* **93**, 040502 (2004).
- [172] Ö. Legeza, J. R.öder and B. A. Hess, *Phys. Rev.* **B67**, 125114 (2003).
- [173] Ö. Legeza and J. Sólyom, *Phys. Rev.* **B68**, 195116 (2003).
- [174] A. J. Daley, C. Kollath, U. Schollwöck and G. Vidal, *J. Stat. Mech.* P04005 (2004).
- [175] S. R. White and A. E. Feiguin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 076401 (2004).
- [176] A. E. Feiguin and S. R. White, *Phys. Rev.* **B72**, 020404 (2005).
- [177] M. Henkel and U. Schollwöck, *J. Phys. A* **34**, 3333 (2001).
- [178] M. A. Cazalilla and J. B. Marston, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 256403 (2002).
- [179] G. T. Barkema and E. Carlton, *Phys. Rev.* **E68**, 036113 (2003).
- [180] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke and K. Hallberg (Eds.) *Density Matrix Renormalization: A New Numerical Method in Physics, Lectures Notes in Physics* Springer Verlag, Berlin (1999).
- [181] J. Dukelsky and S. Pittel, *Rep. Prog. Phys.* **67**, 513, (2004).
- [182] U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77** 259 (2005).
- [183] G. De Chiara, M. Rizzi, D. Rossini, S. Montangero, *cond-mat/0603842*
- [184] J. Dukelsky and G. Sierra, *Phys. Rev.* **B61** 12302 (2000).
- [185] M. Shimizu, T. Otsuka, T. Mizusaki and M. Honma, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1171 (2001).
- [186] J. Dukelsky and S. Pittel, *Phys. Rev.* **C63**, 061303(R), (2001).
- [187] A. Poves, *частно съобщение*
- [188] T. T. S. Kuo and G. E. Brown, *Nucl. Phys. A* **114**, 241 (1968).

- [189] A. Poves and A. P. Zuker, *Phys. Rep.* **70**, 235 (1980).
- [190] E. Caurier and A. P. Zuker, *Phys. Rev.* **c50**, 225 (1994).
- [191] S. Pittel and N. Sandulescu, *Phys.Rev.* **C73**, 014301 (2006).
- [192] T. Papenbrock and D. J. Dean, *J.Phys.* **G31** S1377 (2005).
- [193] R. Jastrow, *Phys. Rev.* **98**, 1479 (1955).
- [194] M. Gaudin, J. Gillespie and G. Ripka *Nucl. Phys.* **A176**, 237 (1971).
- [195] P. M. .Lam, J. W. Clark and M.L.Ristig, *Phys. Rev.* **B16**, 222 (1977).
- [196] S. Fantoni, *Nuovo Cim.* **A44**, 191 (1978).
- [197] M. Dal Rì, S. Stringari and O. Bohigas, *Nucl. Phys.* **A376**, 81 (1982).
- [198] M. F. Flinn, J. W. Clark, R. M. Panoff, O. Bohigas and S. Stringari, *Nucl. Phys.* **A427**, 253 (1984).
- [199] J. W. Clark and P. Westhaus, *Phys. Rev.* **141**, 833 (1966).
- [200] A. Bijl, *Physica* **7**, 869 (1940).
- [201] R. B. Dingle, *Phil. Mag.* **40**, 573 (1949).
- [202] J. Carlson and M. H.Kalos, *Phys. Rev.* **C32**, 2105 (1985).
- [203] V. R. Pandharipande, *NATO ASI Series B359*: "Correlations and Clustering Phenomena in Subatomic Physics", ed. by M. N. Harakeh, J. H. Koch and O. Scholten, Plenum Press, New York and London, 1 (1997).
- [204] B. S. Pudliner, V. R. Pandharipande, J. Carlson, S. C. Pieper and R. B. Wiringa, *Phys. Rev.* **C56**, 1720 (1997).
- [205] R. B. Wiringa, S. C. PieperJ. Carlson, and V. R. Pandharipande, *Phys. Rev.* **C62**, 014001 (2000).
- [206] S. C. Pieper, K. Verga and R. B. Wiringa, *Phys. Rev.* **C66**, 044310 (2002).
- [207] S. C. Pieper, R. B. Wiringa, and V. R. Pandharipande, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 364 (1990).
- [208] S. C. Pieper, R. B. Wiringa, and V. R. Pandharipande, *Phys. Rev.* **C46** , 1741 (1992).

- [209] R. B. Wiringa, R. A. Smith and T. L. Ainsworth, *Phys. Rev. C***29**, 1207 (1984).
- [210] R. Schiavilla, V. R. Pandharipande and R. B. Wiringa, *Nucl. Phys. A***449**, 219 (1986).
- [211] I. E. Lagaris and V. R. Pandharipande, *Nucl. Phys. A***359**, 349 (1981).
- [212] M. Viviani, E. Buendía, A. Fabrocini and S. Rosati, *Nuovo Cimento D***8**, 561 (1986).
- [213] A. Fabrocini, V. R. Pandharipande and Q. N. Usmani, *Nuovo Cimento D***5**, 469 (1992).
- [214] S. Fantoni and S. Rosati, *Nucl. Phys. A***328**, 478 (1979).
- [215] S. Fantoni and S. Rosati, *Phys. Lett. B***84**, 23 (1979).
- [216] R. B. Wiringa, V. Ficks and A. Fabrocini, *Phys. Rev. C***38**, 1010 (1988).
- [217] G. Co', A. Fabrocini, S. Fantoni and I. E. Lagaris, *Nucl. Phys. A***549**, 439 (1992).
- [218] G. Co', A. Fabrocini and S. Fantoni, *Nucl. Phys. A***568**, 73 (1994).
- [219] A. Kievsky, M. Viviany and S. Rosati, *Nucl. Phys. A***551**, 241 (1993); **577**, 511 (1994).
- [220] F. Arias de Saavedra, G. Co', A. Fabrocini and S. Fantoni, *Nucl. Phys. A***605**, 359 (1996).
- [221] V. R. Pandharipande and R. B. Wiringa, *Mod. Rev. Phys. C***51**, 821 (1979).
- [222] A. Fabrocini, F. Arias de Saavedra, G. Co', and P. Folgarait, *Phys. Rev. C***57**, 1668 (1998).
- [223] A. Fabrocini, F. Arias de Saavedra and G. Co', *Phys. Rev. C***61**, 044302 (2000).
- [224] A. Fabrocini and G. Co', *Phys. Rev. C***63**, 044302 (2001).
- [225] G. Co', *Proceedings of the XXI International workshop on Nuclear Theory*, Rila Mountains, Bulgaria, June 10-15 2002, ed. by V. Nikolaev, Heron Press Ltd., Sofia, 92 (2002).
- [226] G. Co', *Nuovo Cimento A***108**, 623 (1995).
- [227] F. Arias de Saavedra, G. Co', and M. M. Renis, *Phys. Rev. C***55**, 673 (1997).
- [228] C. Bisconti, F. Arias de Saavedra, G. Co' and A. Fabrocini, *nucl-th/0601081*

- [229] I. Lagaris and V. R. Pandharipande, *Nucl. Phys.* **359**, 331 (1981);
- [230] I. Lagaris and V. R. Pandharipande, *Nucl. Phys.* **359**, 349 (1981);
- [231] G. Audi and A. H. Wapstra, *Nucl. Phys.* **565**, 1 (1993);
- [232] M. Anguiano and G. Co', *J. Phys. G***27**, 2109 (2001)
- [233] C. Ciofi degli Atti, E. pace and G. Salmè, *Phys. Rev. C***39**, 259 (1989); *Nucl. Phys.* **A497**, 361c (1989);
- [234] C. Ciofi degli Atti, E. pace and G. Salmè, *Nucl. Phys.* **A508**, 349c (1990);
- [235] C. Ciofi degli Atti, E. pace and G. Salmè, *Phys. Rev. C***43**, 1155 (1991).
- [236] P. K. A. de Witt Huberts, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **16**, 507 (1990).
- [237] D. B. Day, J. S. McCarthy, T. W. Donnelly and I. Sick, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci* **40**, 507 (1990).
- [238] M. Leuschner et al., *Phys. Rev. C***49**, 2684 (1994).
- [239] I. Bobeldijk et al., *Phys. Rev. Lett.***73**, 2684 (1994).
- [240] P. G. Hansen and J. A. Tostevin, *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **53**, 219 (2003).
- [241] И. Айзенберг и В. Граинер, *Микроскопическая теория ядра*, Атомиздат, стр.179 (1976).
- [242] R. F. Frosh et al., *Phys. Rev* **160**, 874 (1967).
- [243] R. G. Arnold et al., *Phys. Rev. Lett* **40**, 1429 (1970).
- [244] I. Sick and J. S. McCarty, *Nucl. Phys.* **A150**, 631 (1970).
- [245] H. De Vries, C. W. De Jaeger and C. De Vries, *At. Data Nucl. Data Tables* **36**, 495 (1987).
- [246] J. G. Zabolitzky and W. Ey, *Phys. Lett.* **B76**,527 (1978).
- [247] S. Frullani and J. Maugey, *Adv. Nucl. Phys.* **14**, 1 1984.
- [248] A. E. L. Dieperink and P. K. A. de Witt Huberts, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **40**, 230 (1990).
- [249] D. S. Leward, V. R. Pandaripande and S. C. Piper, *Phys. Rev.* **B37** 4950 (1988).
- [250] S. Boffi and F. Pacati *Nucl. Phys.* **A204**, 485 (1973).

- [251] F. Malaguti, A. Uguzzoni, E. Verondini and P. E. Hodgson, *Riv. Nuovo Cimento* **5**, 3 (1982).
- [252] M. Brack, C. Guet and H.-B. Håkansson, *Phys. Rep.* **123**, 275 (1985).
- [253] *Computational Nuclear Physics*, ed. by K. Langanke, J. A. Maruhn and S. E. Koonin, Springer Verlag, Berlin, (1990).
- [254] C. F. Fischer, *The hartree-Fock method for atoms*, Wiley, New York (1977).
- [255] E. S. Kryachko and E. V. Ludena, *Energy density functional theory in quantum chemistry*, Dordrecht, Reidel (1990).
- [256] A. J. Coleman, *Rev. Mod. Phys.* **35**, 668 (1963).
- [257] D. W. Smith, in *Reduced Density Matrices with applications to physical and chemical systems*, ed. by A. J. Coleman and R. M. Erdahl, Kingston, Ontario Queen's University (1968).
- [258] K. Ypsilantis and M. Grypeos, *Nuovo Cimento A* **23** 93 (1984).
- [259] M. Grypeos and K. Ypsilantis, *J. Phys. G* **15** 1397 (1989).
- [260] K. Ypsilantis and M. Grypeos, *J. Phys. G* **21** 1701 (1995).
- [261] A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, L. Marinova, M. Grypeos, G. Lalazissis and K. Ypsilantis, *Phys. Rev. C* **50**, 1936 (1994).
- [262] R. F. Frosch, J. S. McCarthy, R. E. Rand and M. R. Yearian, *Phys. Rev.* **160**, 874 (1967).
- [263] J. B. Belicard et al., *Phys. Rev. Lett.* **19**, 527 (1967).
- [264] I. Sick, *Phys. Lett. B* **53**, 15 (1974).
- [265] S. R. Gadre and R. D. Bendale, *Current Sci.* **5**, 970 (1985).
- [266] S. R. Gadre and R. D. Bendale, *Phys. Rev. A* **36**, 1932 (1987).
- [267] P. Morse, *Phys. Rev.* **34**, 57 (1929).
- [268] D. Ter Haar, *Phys. Rev.* **70**, 222 (1946).
- [269] S. Frügge, *Practical Quantum Mechanics I*, Springer, Berlin (1971).
- [270] S. Radhakant, S. Khadkikar and B. Banerjee, *Nucl. Phys. A* **142**, 81 (1971).

- [271] H. Chandra and S. Sauer, *Phys. Rev. C* **13**, 245 (1976).
- [272] C. Ciofi degli Atti, *Nucl. Phys. A* **497**, 361C (1989).
- [273] J. Ryckebusch, *Phys. Lett. B* **383**, 1 (1996).
- [274] C. Guisti and F. D. Pacati, *Nucl. Phys. A* **641**, 297 (1998).
- [275] J. Ryckebusch, V. Van der Sluys, K. Heyde, H. Holvoet, W. Van Nespen, M. Waroquier, M. Vanderhaeghen, *Nucl. Phys. A* **624**, 581 (1997).
- [276] C. Guisti and F. D. Pacati, *Nucl. Phys. A* **615**, 373 (1997).
- [277] C. J. Onderwater et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4893 (1997).
- [278] S. Boffi, C. Guisti, F. Pacati and M. Radici, *Electromagnetic Response of Atomic Nuclei*, Oxford Studies in Nuclear Physics, Clarendon Press, Oxford, 1996.
- [279] W. J. W. Geurts, K. Allaart, W. H. Dickhoff and H. Müther, *Phys. Rev. C* **54**, 1144 (1996).
- [280] C. Guisti and F. D. Pacati, *Nucl. Phys. A* **535**, 573 (1991).
- [281] G. Orlandini and L. Sarra, invited talk at the Second Workshop on *Electromagnetically Induced Two-Nucleon Emission*, Belgium, May 17-20, 1995.
- [282] E. Mavrommatis, M. Petraki and J. W. Clark, *Phys. Rev. C* **51**, 1849 (1995).
- [283] A. N. Antonov, P. E. Hodgson and I. Zh. Petkov, *Nucleon Momentum and Density Distributions in Nuclei*, Clarendon Press, Oxford, 1988.
- [284] L. Carlson, *Phys. Rev. C* **38**, 1879 (1988).
- [285] J. R. Oppenheimer and M. Phillips, *Phys. Rev.* **48**, 500 (1935).
- [286] R. Serber, *Phys. Rev.* **72**, 108 (1947); *Phys. Rev.* **72**, 1114 (1947).
- [287] G. R. Satchler, *Direct nuclear reactions*, Oxford University Press, New York (1983).
- [288] E. Gadioli and P. E. Hodgson, *Pre-equilibrium nuclear reactions*, Clarendon Press, Oxford (1983).
- [289] D. Van Neck, M. Waroquier and K. Heyde, *Phys. Lett. B* **314**, 255 (1993).
- [290] A. Bohr and B. Mottelson, *Nuclear structure*, vol. 1, Benjamin, New York (1969)

- [291] G. J. Kramer, H. P. Block, J. F. A. van Hienen, S. Brandenbur, M. N. Harakeh, S. Y. van der Werf, P. W. M. Glaudemans and A. A. Wolters, *Nucl. Phys. A***477**, 55 (1988).
- [292] H. Kümmel, K. H. Lührmann and J. G. Zabolitzky, *Phys. Rep.* **C36**, 1 (1978).
- [293] R. B. Wiringa, *Phys. Rev.* **C43**, 1585 (1991).
- [294] G. B. West, *Phys. Rep.***18**, 263 (1975).
- [295] T. de Forest Jr., *Nucl. Phys.* **A392**, 232 (1983).
- [296] S. Boffi, *Lett. Nuovo Cimento* **1**, 931 (1971).
- [297] D. S. Koltun, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 182 (1972).
- [298] F. Dellagiocoma, G. Orlandini and M. Traini, *Nucl. Phys.* **A393**, 95 (1983).
- [299] M. Traini and G. Orlandini, *Z. Phys.* **A321**, 479 (1985).
- [300] R. Abegg et al., *Phys. Rev.* **C39**, 65 (1989).
- [301] M. Matoba, *Phys. Rev.* **C48**, 95 (1993).
- [302] L. Lapikas, *Nucl. Phys.* **A553**, 297c (1993).
- [303] K. Langanke, J. A. Maruhn and S. E. Kooning *Computational Nuclear Physics*, vol. 2, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 88 (1993).
- [304] J. L. Snelgrove and E. Kashy, *Phys. Rev.* **187**, 1246 (1969).
- [305] B. M. Preedom, J. L. Snelgrove and E. Kashy, *Phys. Rev.* **C1**, 1132 (1970).
- [306] G. M. McAllen, B. M. Preedom and G. R. Satchler, *Particle and Nuclei* **1**, 412 (1970-71).
- [307] J. J. H. Menet, E. E. Gross, J. J. Melanify, and A. Zucker, *Phys. Rev. C* **4**, 1114 (1971).
- [308] C. Glashausser, M. Kondo, M. E. Rickey and E. Rost, *Phys. Lett.* **14**, 113 (1965).
- [309] F. D. Bacchetti and G. W. Greenless, *Phys. Rev.* **182**, 1190 (1969).
- [310] C. M. Perey and F. G. Perey, *Phys. Rev.* **132**, 175 (1964).
- [311] N. Austin, *Nucl. Phys.* **A292**, 190 (1977).

- [312] J. S. Winfield, N. A. Jelley, W. D. M. Rae and C. L. Woods, *Nucl. Phys. A***437**, 65 (1985).
- [313] S. M. Grimes et al., *Phys. Rev. C***19**, 2127 (1979).
- [314] R. C. Haight et al., *Phys. Rev. C***23**, 700 (1981).
- [315] M. Matoba et al., *Phys. Rev. C* **48**, 95 (1993).
- [316] N. Bohr, *Nature* **137**, 144 (1936).
- [317] M. Uhl and B. Strohmayer, *Institut für Radiumforschung und Kernphysik Report IRK 76/01*, Viena (1976); M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, *Institute of Physics and Nuclear Engineering Report NP-86-1995*, Bucharest (1995);
- [318] V. McLane, Ch. L. Dunderf and P. F. Rose, *Neutron Cross Sections*, vol. 2., Academic, Boston, (1988).
- [319] S. M. Qaim and R. Wolfle, *Phys. Rev. C* **32**, 305 (1985).
- [320] W. D. Wang and E. J. Winhold, *Phys. Rev.* **140**, B882 (1965).
- [321] M. Avrigeanu and V. Avrigeanu, A. N. Antonov, M. B. Chadwick, P. E. Hodgson and M. V. Stoitsov, *J. Phys. G***21**, 838 (1995).
- [322] J. Ryckebusch, V. Van der Sluys, K. Heyde, H. Holvoet, W. Van Nespen, M. Waroquier and M. Vanderhaeghen, *Nucl. Phys. A***624**, 581 (1997).
- [323] J. Ryckebusch, M. Vanderhaeghen, K. Heyde and M. Waroquier, *Phys. Lett. B***350**, 1 (1995).
- [324] C. J. Onderwater et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4893 (1997).
- [325] C. Giusti, F. D. Pacati, K. Allaart, W. J. W. Geurts, W. H. Dickhoff and H. Müther, *Phys. Rev. C***57**, 1691 (1998).
- [326] J. Ryckebusch, M. Vanderhaeghen, L. Machenil and M. Waroquier, *Nucl. Phys. A***568**, 828 (1994).
- [327] J. Ryckebusch, L. Machenil, M. Vanderhaeghen, V. Van der Sluys and M. Waroquier, *Phys. Rev. C***49**, 2704 (1994).
- [328] D. Van Neck, L. Van Daele, Y. Dewulf and M. Waroquier, *Phys. Rev. C***56**, 1398 (1997).

- [329] W. J. W. Geurts, K. Allaart, W. H. Dickhoff and H. Mütter, *Phys. Rev. C* **54**, 1144 (1996).
- [330] F. D. Peat, *Phys. Chem. XIA*, 429 (1975).
- [331] J. M. Bang, F. A. Gareev, W. T. Pinkston and J. S. Vaagen, *Phys. Rep.* **125**, 253 (1985).
- [332] S. P. Merkuriev, *Sov. J. Nucl. Phys.* **19**, 447 (1974).
- [333] J. Bang, *Phys. Scr.* **22**, 324 (1980).
- [334] D. N. Kadrev, M. V. Ivanov, A. N. Antonov, C. Giusti and F. D. Pacati, *Phys. Rev. C* **68**, 014617 (2003).

## Списък на публикациите, върху които е написана дисертацията

### А. СТАТИИ В НАУЧНИ СПИСАНИЯ

- [A1] M. V. Stoitsov, A. N. Antonov and S. S. Dimitrova, *Bulg. J. Phys.*, **20** 18 (1993).
- [A2] M. V. Stoitsov, A. N. Antonov and S. S. Dimitrova, *Z. Phys.* **A345** 359 (1993).
- [A3] M. V. Stoitsov, A. N. Antonov and S. S. Dimitrova, *Phys. Rev.* **C47** R455 (1993).
- [A4] M. V. Stoitsov, A. N. Antonov and S. S. Dimitrova, *Phys. Rev.* **C48** 74 (1993).
- [A5] M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, S. S. Dimitrova and M. V. Stoitsov, *JINR Rapid Communications* 3[66]-94, Dubna, 37 (1994).
- [A6] A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, M. K. Gaidarov, S. S. Dimitrova and P. E. Hodgson, *JINR Rapid Comm.* 2[70]-95, Dubna, 11 (1995).
- [A7] M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, S. S. Dimitrova and M. V. Stoitsov, *Int. J. of Modern Phys.* **E4** 801 (1995).
- [A8] A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, M. K. Gaidarov, S. S. Dimitrova and P. E. Hodgson, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **21** 1333 (1995).
- [A9] A. N. Antonov, S. S. Dimitrova, M. K. Gaidarov, M. V. Stoitsov, M. E. Grypeos, S. E. Massen and K. N. Ypsilantis, *Nucl. Phys.* **A597** 163 (1996).
- [A10] M. V. Stoitsov, S. S. Dimitrova, A. N. Antonov, *Phys. Rev. C* **53** 1254 (1996).
- [A11] D. N. Kadrev, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, S. S. Dimitrova, *Int. J. Mod. Phys.* **E5** 717 (1996).
- [A12] S. S. Dimitrova, M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, P. E. Hodgson, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlenaya and G. Z. Krumova, *JINR Rapid Communications* 6[80]-96, Dubna, 31 (1996).

- [A13] S. S. Dimitrova, M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, P. E. Hodgson, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya and G. Z. Krumova, *J. Phys. G23* 1685 (1997).
- [A14] S. S. Dimitrova, G. Z. Krumova, P. E. Hodgson, V. Avrigeanu and A. N. Antonov, *J. Phys. G23* 961 (1997).
- [A15] K. Ypsilantis, S. S. Dimitrova, C. Koutroulos, M. Grypeos and A. N. Antonov, *J. Phys. G23*, 1607 (1997).
- [A16] G. A. Lalazissis, S. A. Massen, C. P. Panos and S. S. Dimitrova, *Int. J. Mod. Phys. E7* 485 (1998).
- [A17] A. N. Antonov, S. S. Dimitrova, M. V. Stoitsov, D. Van Neck and P. Jeleva, *Phys. Rev. C59* 722 (1999).
- [A18] S. S. Dimitrova, D. N. Kadrev, A. N. Antonov and M. V. Stoitsov, *E. J. Phys. A7* 335 (2000).
- [A19] J. Dukelsky, S. Pittel, S. S. Dimitrova and M. V. Stoitsov, *Phys. Rev. C65*, 054319 (2002)
- [A20] J. Dukelsky, V. G. Gueorguiev, P. Van Isacker, S. S. Dimitrova, B. Errea and S. Lerma H., *Phys. Rev. Lett. 96*, 072503 (2006).

## **В. ДОКЛАДИ НА МЕЖДУНАРОДНИ КОНФЕРЕНЦИИ**

- [B1] M. V. Stoitsov, A. N. Antonov, S. S. Dimitrova, in *Proc. of 6-th Workshop on Perspectives in Nuclear Physics at Intermediate Energies*, ICTP, Trieste, May 1993, World Scientific Publishing, Singapore, 367, (1993).
- [B2] M. V. Stoitsov, A. N. Antonov, S. S. Dimitrova, D. N. Kadrev, M. K. Gaidarov, P. E. Hodgson, in *Proc. of the 7-th International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms*, Varenna, Italy, June 6-11, 1994, ed. by E. Gadioli, Milano. 411 (1994).
- [B3] A. N. Antonov, S. S. Dimitrova, M. K. Gaidarov, M. V. Stoitsov, M. E. Grypeos, S. E. Massen, K. N. Ypsilantis, in *Proc. of the 7-th Workshop on Perspectives in Nuclear Physics at Intermediate Energies*, ICTP, Trieste, 8-12 May 1995, ed. S. Boffi, C. Ciofi degli Atti, M.M. Giannini, World Scientific Publishing, Singapore, 382 (1995).

- [B4] M. V. Stoitsov, S. S. Dimitrova, A. N. Antonov, in *Proc. of the 7-th Workshop on Perspectives in Nuclear Physics at Intermediate energies*, ICTP, Trieste, 8- 12 May 1995, ed. S. Boffi, C. Ciofi degli Atti, M.M. Giannini, World Scientific Publishing, Singapore, 367, (1995).
- [B5] K. Ypsilantis, S. S. Dimitrova, C. Koutroulos, M. Grypeos, A. N. Antonov, in *Fifth Hellenic Symposium in Nuclear Physics*, 1995.
- [B6] K. Ypsilantis, S. S. Dimitrova, C. Koutroulos, M. Grypeos, A. N. Antonov, in *Sixth Hellenic Symposium in Nuclear Physics*, ed. by Ch. Panos, Makedonian Publikations, Athens, 87 (1996).
- [B7] S. S. Dimitrova, M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, P. E. Hodgson, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya, G. Z. Krumova, in *Proc. of the International Meeting "Relativistic Nuclear Physics -from hundred MeV to TeV"*, Bulgaria, Sozopol, 30.September.-5.October.1996, v.1, Dubna, 140 (1997).
- [B8] D. N. Kadrev, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, S. S. Dimitrova, in *Proceedings of the 12th International Seminar on High Energy Physics Problems "Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics"*, Dubna, Russia, September 12-17, 1994, ed. by A.M.Baldin and V.V.Burov, v.2, 267, JINR,E1,2-97-79, Dubna, (1997).
- [B9] M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, S. S. Dimitrova, M. V. Stoitsov, in *Proc. of the 12th International Seminar on High Energy Physics Problems "Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics"*, Dubna, Russia, September 12-17, 1994, ed. by A.M.Baldin and V.V.Burov, v.2, 276 JINR, E1,2-97-79, Dubna, (1997).
- [B10] S. S. Dimitrova, M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, P. E. Hodgson, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya, G. Z. Krumova, in *Proc. of the 8th International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms* (Varenna, Italy, June 9-14, 1997), ed. by E.Gadioli, Ricerca Scientifica ed Educazione Permanente, Suppl. No.111, Milano, 561 (1997).
- [B11] S. S. Dimitrova, G. Z. Krumova, P. E. Hodgson, V. Avrigeanu, A. N. Antonov, in *Conf. Proc. Vol. 59 "Nuclear Data for Science and Technology"*(Trieste, May 1997), ed. by G. Reffo, A. Ventura and C. Grandi, SIF, Bologna, 305 (1997).
- [B12] S. S. Dimitrova, M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, P. E. Hodgson, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya, G. Z. Krumova, in *Proc. of the European Conference on Advances in Nuclear Physics and Related Areas* (Thessaloniki, Greece, July 8-12, 1997), ed. By D.M. Brink, M.E. Grypeos and S.E. Massen, Thessaloniki, 253 (1999).

- [B13] S. S. Dimitrova, D. N. Kadrev, A. N. Antonov, M. V. Stoitsov, in *13th School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Nuclear Energy*, September 27-October 3 1999, Varna, Bulgaria, *BGNS Transactions*, vol.2, No.1, 175 (2000).
- [B14] S. S. Dimitrova, S. Pittel, J. Dukelsky and M. V. Stoitsov, in *Proc. XX. International Workshop on Nuclear Theory*, Rila, Bulgaria, June 11-16, 2001, Notre-Dame, Indiana, 81, (2001).
- [B15] S. S. Dimitrova, S. Pittel, J. Dukelsky and M. V. Stoitsov, in *Proc. XXI. Workshop on Nuclear Theory*, 10.-14. June 2002, Rila, Bulgaria; *nucl-th/0207025*
- [B16] S. Pittel, J. Dukelsky, S. Dimitrova and M. Stoitsov, *XXVI Symposium on Nuclear Physics*, 6-9 January 2003, Taxco, Mexico; *Rev. Mex. Fisica* **49**, Suppl. 4 (2003); *nucl-th/0302005*
- [B17] J. Dukelsky, S. Pittel, G. Sierra, S. Dimitrova and M. Stoitsov, in *Proc. of the International Workshop XXXI on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations*, Hirschfeld, Austria, January 12-18, 2003, ed. by H. Feldmeier et al., Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, 44,(2003);
- [B18] S. S. Dimitrova, J. Dukelsky, V. G. Gueorguiev and P. Van Isacker, *Proceedings of the XXIV International workshop on Nuclear Theory*, Rila Mountains, Bulgaria, June 20-25, 2005, ed. by S. S. Dimitrova, Heron Press Ltd., Sofia, (2006).