

ФУНКЦИОНАЛ ФАЯНСА: САМОСОГЛАСОВАННОЕ ОПИСАНИЕ ИЗОСПИНОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

© 2020 г. И. Н. Борзов^{1),2)*}, С. В. Толоконников^{1),3)**}

Поступила в редакцию 28.08.2019 г.; после доработки 04.09.2019 г.; принята к публикации 04.09.2019 г.

Энергетический функционал плотности, развитый ранее Фаянсом и др., модифицирован для полностью самосогласованных расчетов изобар-аналоговых резонансов (ИАР) в ядрах со спариванием. Используется квазичастичное приближение случайных фаз с учетом континуума. Из систематического анализа энергий связи изобарических дублетов и энергий переходов изобарических триплетов в зеркальных ядрах получены ограничения на параметры экранировки обменного кулоновского взаимодействия. Сравнение с экспериментом показывает лучшее описание энергий ИАР для нейтронно-избыточных изотопов Sn и Pb с развитым нейтронным спариванием с помощью нового функционала DF3-f, чем в самосогласованных расчетах с релятивистским функционалом DC3* и с функционалом Скирма SAMi. Функционал DF3-f применен к расчетам свойств ИАР в изотопах Ru, Pd, Cd со спариванием как в нейтронной, так и протонной системах, а также в цепочке изотопов с $N = 82$.

DOI: 10.31857/S0044002720010043

Посвящается памяти Э. Е. Саперштейна

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время повышенное внимание уделяется проектам по исследованию различных форм существования и свойств материи на субатомном уровне: от экстремального состояния кварк-глюонной плазмы до атомных ядер. Эксперименты на современных мегаустановках обеспечивают поток новых данных о необычных свойствах кварк-глюонной плазмы, ядерной материи и экзотических атомных ядер.

Структуру атомных ядер — самоподдерживающихся кварк-мезонных систем — в самосогласованном подходе удобнее описывать в терминах эффективных взаимодействий между нуклонами. В настоящее время для этого широко используется метод энергетического функционала плотности (ЭФП) — общий подход к многочастичным системам, развитый первоначально для расчетов электронной структуры молекул [1, 2]. Метод ЭФП успешно применяется в теории конденсированного состояния и в квантовой химии: от моделирования

кристаллических структур с заданными свойствами до фармакологии. В недавней монографии [3] систематизирован опыт применения метода ЭФП в ядерно-структурных расчетах.

Актуален поиск ядерных функционалов, адекватно описывающих структуру ядер, близких к линии стабильности, и особенности эволюции оболочечной структуры ядер с экстремальной нейтрон-протонной асимметрией. Среди таких эффектов: обнаружение новых магических оболочек [4] и аномально резких скачков среднеквадратичных радиусов с ростом избытка нейтронов [5]. Они приводят к заметному увеличению сечений взаимодействия экзотических ядер, в частности, сечений реакций с полутяжелыми ионами, в которых нейтронно-протонный баланс у ядра-мишени, налетающего и улетающего ионов сильно различается.

Оригинальный ЭФП, разработанный в Курчатовском институте С.А. Фаянсом и др. [6–8], основан на методе квазичастичного лагранжиана, предложенном Э.Е. Саперштейном и В.А. Ходелем [9]. Как отмечено в [3], он относится к классу феноменологических функционалов, куда также входят Seattle–Livermore-функционал [10] и Barcelona–Catania–Paris–Madrid-функционал [11]. Все эти ЭФП объединяют общие черты: а) параметризация уравнения состояния ядерной материи с помощью разложения по степеням нуклонной плотности, б) учет поправок, учитывающих и квантовые эффекты конечности размеров ядра, в) учет кулоновских поправок и зависимость парных корреляций от нуклонной плотности. Первые два ЭФП являются типичными ЭФП Кона–Шэма, использующими

¹⁾Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия.

²⁾Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия.

³⁾Физико-технический институт (Государственный университет), Долгопрудный, Россия.

*E-mail: Borzov_IN@nrcki.ru

**E-mail: Tolokonnikov_SV@nrcki.ru

ми оператор кинетической энергии с эффективной массой независимых частиц $m^* = 1$.

В настоящее время к этому классу ЭФП привлечено значительное внимание в литературе. Так, ЭФП Фаянса DF3 [6, 7], FaNDF⁰ [8] рассматриваются сейчас как удачная альтернатива известному ядерному ЭФП Скирма [12]. Функционалы этого семейства отличаются от функционала Скирма более сложной зависимостью от плотности как объемного, так и поверхностного членов; последний учитывает эффекты конечного радиуса взаимодействия и нелокальные эффекты в ядерной среде.

Цель настоящей работы — повысить предсказательную способность ядерно-структурных расчетов с ядерным функционалом Фаянса. Общая задача состоит в модификации ЭФП DF3, FaNDF⁰ для применения к ядерно-структурным расчетам изоспиновых (зарядово-обменных) возбуждений.

Изобарический аналоговый резонанс (ИАР) с квантовыми числами $\Delta L = 0$, $\Delta S = 0$, $\Delta J = 0$, $\Delta T = 0$ ($T = 0 \rightarrow T = 0$ переходы запрещены) — простейшая из зарядово-обменных мод возбуждений, индуцируемая оператором изоспина τ . Измерениям энергий и ширин ИАР в реакциях пезарядки с $\Delta T_z > 0$ и $\Delta T_z < 0$ посвящено множество экспериментальных и теоретических работ. Исследования свойств ИАР позволяют определить степень сохранения квантового числа изоспина в атомных ядрах [13] и дают прямую информацию для уточнения изоспиновых компонент ядерного ЭФП. Здесь оказывается важным знание энергий ИАР относительно основного состояния дочернего ядра, гигантского резонанса Гамова—Теллера (ГТР) и антианалогового резонанса.

Зарядово-нейтральные параметры ЭФП фиксируются из экспериментальных характеристик основных состояний ядер (массы, радиусы, одночастичные энергии). Характеристики зарядово-обменных возбуждений ИАР дают возможность уточнить изоспиновые (нечетные по времени) компоненты различных вариантов ЭФП Фаянса [6–8, 14].

Дополнительная информация извлекается из свойств симметричной ядерной материи (равновесная плотность ρ_0 , энергия симметрии E_{symm} , сжимаемость K_∞), а также из характеристик других коллективных возбуждений ядер (например, из энергий и вероятностей гигантского $E1$ -резонанса). Проблемы, связанные с поиском универсального, изоспин-инвариантного ЭФП и совершенствованием его изоспиновых и спин-изоспиновых компонент, подробно обсуждались в работах [15].

Калибровка зарядово-обменных компонент ядерного ЭФП более сложна, поскольку для моделей, основанных на ЭФП, существенны корреляции упомянутых ядерных характеристик. Так, энергия возбуждения ИАР коррелирует с ядерной энергией симметрии и с ее производной по плотности вблизи равновесной плотности ρ_0 . Это отчетливо проявляется в корреляции энергий ИАР с величиной нейтронной шубы (R_{np}) нейтронно-избыточных изотопов [16], определяемой как разность среднеквадратичных нейтронных и протонных радиусов.

Для полностью самосогласованных расчетов силовых функций изобар-аналоговых резонансов оказывается необходимой модификация ЭФП Фаянса. Надежность такого микроскопического расчета энергии ИАР зависит от корректного учета эффектов, ответственных за нарушение изоспиновой симметрии в ядрах. Основные нарушающие факторы в самосогласованном подходе — это переменная часть кулоновского потенциала и различие ядерных компонент нейтронного и протонного самосогласованных потенциалов за счет энергии симметрии [17]. В ядрах со спариванием принципиально важен выбор формы и параметров спаривательной части ЭФП.

Наиболее сильный (физический) источник нарушения изоспиновой симметрии — это взаимодействие Кулона, ответственное за дальнедействующую поляризацию протонных и нейтронных состояний и оказывающее сильное влияние на энергию ИАР. При “выключенном” кулоновском взаимодействии ИАР должен проявляться при нулевой энергии относительно основного состояния родительского ядра. Прямое и обменное кулоновские взаимодействия (и короткодействующие изоспин-инвариантные силы) приводят к нарушению этого условия. Их некорректный учет может приводить к систематической недооценке энергии ИАР. Особенно важна аппроксимация обменного кулоновского взаимодействия V_{exc} — часто используемое приближение Слэттера нуждается в уточнении.

Следующим (нефизическим) источником нарушения изоспиновой симметрии является приближение среднего поля. В режиме “выключенного” кулоновского взаимодействия волновые функции нейтронов и протонов ядра с $N \neq Z$, рассчитанные с любым изоспин-инвариантным взаимодействием, различаются. Как известно, нарушенная за счет этого изоспиновая симметрия может быть восстановлена в полностью самосогласованном зарядово-обменном RPA [18]. Ограничение базиса одночастичных состояний также нарушает изоспиновую симметрию. Преимуществом используемой в настоящей работе модели континуум- pn QRPA, оперирующей с полным базисом одно-

частичных состояний [19, 20], является отсутствие данного эффекта.

Наконец, несмотря на то что силовая функция ИАР независимых квазичастиц (в приближении Хартри–Фока + БКШ) имеет, как правило, несколько компонент, в последовательно микроскопическом подходе необходимо воспроизвести экспериментальный факт вырождения ИАР. В сечениях зарядово–обменных (p, n)-реакций ИАР проявляется в виде одиночного узкого резонанса, а вклад изобарических сателлитов подавлен.

В работах [20–23] использовались условия частичного согласования по зарядовой плотности. Более последовательный подход, основанный на энергетическом функционале плотности, требует выполнения условий полного самосогласования. В частности, они должны включать двухчастичное спин-орбитальное взаимодействие. В случае зарядово-нейтральных возбуждений в магических ядрах схема полного самосогласования была реализована в работе [24]. В ядрах со спариванием такой подход технически сложен и необходимы приближения.

Самосогласованный RPA-подход применялся к ИАР в недавней работе [25]. В ней учтен вклад двухчастичного спин-орбитального взаимодействия в форме, найденной в работе [26], а вклад обменного кулоновского взаимодействия вычисляется по теории возмущений для одночастичных энергий. В работе [25] также предлагалось анализировать данные по разности энергий антианалогового резонанса и ИАР для установления ограничений на параметры ЭФП, извлекаемые из коррелирующих величин L и (R_{np}) .

В работе [18] в полностью самосогласованном релятивистском RPA-подходе с функционалами РК01–3 было показано восстановление вырождения ИАР для случая магических ядер. Для полумагических изотопов Sn с развитым нейтронным спариванием этот эффект был также продемонстрирован в самосогласованном RHB + pn QRPA [16] с функционалом DD-ME1, включающем взаимодействие Гони D1S [27] в канале частица–частица. Аналогичные расчеты проводились для изотопов Ca, Ni, Sn с функционалами РК01, DD-ME2 и D1S с использованием квазичастичного разложения по базису Дирака–Вудса–Саксона.

В настоящей работе уточнен новый функционал DF3-f, найденный в [28] и являющийся версией ЭФП DF3 [7], DF3-a [14] и FaNDF⁰ [8], предложенных Фаянсом и др. В функционале DF3-f изменены параметры двухчастичного спин-орбитального взаимодействия и уточнены параметры экранировки обменного кулоновского взаимодействия V_{exc} [8, 29] короткодействующими кулон-ядерными корреляциями. Дополнительно

использованы новые экспериментальные данные по энергиям связи изобарических дублетов и энергиям переходов изобарических триплетов в зеркальных ядрах. Проведенный анализ позволяет более надежно определить степень экранировки V_{exc} и оценить ее влияние на характеристики ИАР.

Для расчетов характеристик ИАР используется самосогласованное квазичастичное приближение случайных фаз с учетом континуума, позволяющее адекватно определить escape-ширину ИАР. Зависящее от плотности эффективное взаимодействие в каналах частица–дырка и частица–частица получено из того же энергетического функционала плотности DF3-f, который использован для расчета основных состояний.

Структура работы: во Введении обсуждены проблемы самосогласованного описания ИАР. В разд. 2 развит полностью самосогласованный подход к ИАР в ядрах со спариванием. Описан полученный новый функционал DF3-f. В разд. 3 представлены результаты новых расчетов силовых функций возбуждений $J^\pi = 0^+$ в “эталонных” изотопах ^{42–48}Ca, ^{110–132}Sn, ²⁰⁸Pb. Впервые проведены расчеты энергий ИАР для длинных изотопических цепочек, содержащих ядра, в которых спаривание одновременно существует и в протонной и нейтронной системах. В Заключении кратко суммированы результаты работы.

2. САМОСОГЛАСОВАННЫЙ ПОДХОД К ИАР

Отклик ядра со спариванием на внешнее зарядово-обменное поле $V_0 = \hat{Q} \exp(-i\omega t)$ (+ эрмитово сопряженный оператор) описывается уравнением для эффективного поля ТКФС \hat{V} , которое в суперматричном представлении имеет вид

$$\hat{V}(\omega) = \hat{e}_q \hat{V}_0(\omega) + \hat{\mathcal{F}} \hat{A}(\omega) \hat{V}(\omega), \quad (1)$$

где

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V \\ d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{V}_0 = \begin{pmatrix} e_q V_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$\hat{\mathcal{F}} = \begin{pmatrix} \mathcal{F} & \mathcal{F}^{\omega\xi} & \mathcal{F}^{\omega\xi} \\ \mathcal{F}^{\xi\omega} & \mathcal{F}^\xi & 0 \\ \mathcal{F}^{\xi\omega} & 0 & \mathcal{F}^\xi \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Здесь внешнее зарядово-обменное поле — $V_0 = \hat{Q} \exp(-i\omega t)$ (+ эрмитово сопряженный оператор), где \hat{Q} — одночастичный оператор ($\hat{Q} = \tau_\alpha, \sigma_\alpha \tau_\beta, \mathbf{q} \tau_\alpha, \mathbf{P} \tau_\alpha$).

В такой записи суперматрица пропагаторов \hat{A} состоит из 3×3 интегралов по энергии ϵ от произведений различных комбинаций функции Грина $G(\epsilon)$ и двух функций Горькова $F^{(1)}(\epsilon)$ и $F^{(2)}(\epsilon)$. Их явный вид можно найти в [30, 31].

Используя обозначения ТКФС (1)–(3), для силовой функции получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} S(\omega, \mathbf{q}) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \mathcal{P}(\omega, \mathbf{q}) = \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}(e_q \hat{V}_0 \hat{A}(\omega) \hat{V}(\omega, \mathbf{q})). \end{aligned} \quad (4)$$

3. ФУНКЦИОНАЛ ПЛОТНОСТИ DF3-f ДЛЯ РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК ИАР

В полностью самосогласованном подходе теории энергетического функционала плотности элементы матрицы эффективных взаимодействий (3) являются различными вторыми вариационными производными от ЭФП, зависящего от нормальной ρ и аномальной ν плотностей:

$$E_0 = \int \mathcal{E}[\rho(\mathbf{r}), \nu(\mathbf{r})] d^3r, \quad (5)$$

а именно:

$$\mathcal{F} = \frac{\delta^2 \mathcal{E}}{\delta \rho^2}; \quad \mathcal{F}^{\omega\xi} = \mathcal{F}^{\xi\omega} = \frac{\delta^2 \mathcal{E}}{\delta \rho \delta \nu}; \quad \mathcal{F}^\xi = \frac{\delta^2 \mathcal{E}}{\delta \nu^2}. \quad (6)$$

Здесь \mathcal{F} — введенная выше “нормальная” компонента амплитуды взаимодействия самосогласованной ТКФС, а \mathcal{F}^ξ — ее аномальная компонента, или, другими словами, эффективное спаривательное взаимодействие, которое входит в уравнение для щели. Обратим внимание на то, что в (6) входит и смешанная производная $\mathcal{F}^{\omega\xi}$, которая отвечает за зависимость спаривательного энергетического функционала от нормальной плотности. Изотопические индексы в соотношениях (1)–(6) для краткости опущены.

Отметим, что \mathcal{F} в (6) — это скалярная и изоспиновая компоненты полной обобщенной амплитуды Ландау–Мигдала \hat{F} , которая входит в (1), если внешнее поле V_0 не зависит от спина. Для изоспиновых возбуждений в зарядово-обменном канале, к которым относится ИАР, в уравнения для эффективного поля входит амплитуда \mathcal{F}^- , которая определяется второй вариационной производной ЭФП:

$$\mathcal{F}^- = \frac{\delta^2 \mathcal{E}}{(\delta \rho_-)^2}, \quad (7)$$

где $\rho_- = \rho_n - \rho_p$. Подробное описание ЭФП Фаянса можно найти в [6] или в [28]. Ниже остановимся лишь на тех его ингредиентах, которые особо важны для описания ИАР.

Плотность энергии имеет вид [2]

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\rho(\mathbf{r}), \nu(\mathbf{r})] &= \tau + \varepsilon_v + \varepsilon_s + \\ &+ \varepsilon_{\text{Coul}} + \varepsilon_{sl} + \varepsilon_{ss} + \varepsilon_{\text{pair}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Плотность объемной энергии

$$\begin{aligned} \varepsilon_v(\mathbf{r}) &= C_0 \rho_0^2 \left[a_+^v \frac{1 - h_{1+}^v x_+^\sigma}{1 + h_{2+}^v x_+^\sigma} x_+^2 + \right. \\ &\left. + a_-^v \frac{1 - h_{1-}^v x_-^\sigma}{1 + h_{2-}^v x_-^\sigma} x_-^2 \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $x_\pm(\mathbf{r}) = (\rho_n(\mathbf{r}) \pm \rho_p(\mathbf{r}))/2\rho_0$, ρ_0 — равновесная плотность одного сорта частиц в симметричной ядерной материи, $r_0 = (3/8\pi\rho_0)^{1/3}$. Нормировочный множитель C_0 — обратная плотность состояний на поверхности Ферми в точке равновесия

$$C_0 = \left(\frac{dn}{d\epsilon_F} \right)^{-1} = \frac{2\epsilon_{0F}}{3\rho_0} = \frac{\pi^2}{\rho_F m^*}.$$

Кулоновская энергия содержит модифицированный слэттеровский член:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{Coul}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \rho_{ch}(\mathbf{r}) \iiint d^3\mathbf{r}' \frac{\rho_{ch}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \\ &- \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} e^2 \rho_p^{4/3} (1 - h_{\text{Coul}} x_+^\sigma). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь константы h_{Coul} и σ — параметры экранировки обменного взаимодействия, позволяющие устранить аномалию Нолен–Шиффера [32]. В отличие от [28], где предполагалась полная экранировка, в данном расчете принято значение $h_{\text{Coul}} = 0.8$ (см. разд. 3.1).

Спин-орбитальная часть функционала ε_{sl} содержит двухчастичную амплитуду спин-орбитального взаимодействия и первую скоростную гармонику спин-спиновой амплитуды взаимодействия Ландау–Мигдала. С помощью этих двух простых по форме членов (см. [6, 28]), содержащих зависимость от импульсов, удобно параметризовать двухчастичное спин-орбитальное взаимодействие и эффективно учесть тензорные спин-скоростные силы.

Плотность энергии спаривания $\varepsilon_{\text{pair}}$ имеет следующую форму:

$$\varepsilon_{\text{pair}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\tau=n,p} \mathcal{F}^{\xi,\tau}(\rho_+(\mathbf{r})) |\nu_\tau(\mathbf{r})|^2.$$

При учете вклада в энергию взаимодействия многочастичных сил и корреляций возникает зависимость амплитуды \mathcal{F} от нормальной плотности

$$\mathcal{F}^{\xi,\tau} \mathcal{F}^{p,p} = \mathcal{F}^{n,n} = C_0 f^\xi(x_+).$$

В общем случае параметризация f^ξ имеет вид

$$f^\xi(x_+(\mathbf{r})) = f_{ex}^\xi + h^\xi(x_+)^q(\mathbf{r}) + f_{\nabla}^\xi r_0^2 (\nabla x_+(\mathbf{r}))^2.$$

Найденный в рамках описанного выше самосогласованного подхода новый энергетический функционал плотности DF3-f является модификацией ЭФП DF3 [6, 7], DF3-a [14] и FaNDF⁰ [8]. В новом функционале DF3-f значения параметров двухчастичного спин-орбитального взаимодействия выбраны такими же, как в FaNDF⁰: т.е. $\kappa^+ = 0.38$, $\kappa^- = 0$ ($\kappa_{pp} = \kappa_{np} = 0.19$). В общем случае спаривательная часть функционала зависит как от нормальной плотности, так и от ее градиента. Отметим, что, хотя в настоящей работе уравнение ТКФС для обобщенного эффективного поля полностью согласовано с основным состоянием ядра, рассчитанным с ЭФП DF3-f, градиентное спаривание не учитывалось. Более детальное исследование влияния формы спаривания и его силовых параметров на энергии ИАР предполагается в следующей работе. Значения используемых спаривательных констант: $f_{pp}^\xi = f_{nn}^\xi = f_{np}^\xi = f_{np}^\xi x + h^\xi(\rho^+/2\rho_0)$, где $f_{ex}^\xi = -1.05$, $h^\xi = 0.94$ для Pb; $h^\xi = 0.92$ для Sn; $h^\xi = 0.88$ для области Ca-Ni.

3.1. Расчеты энергий связи ряда зеркальных ядер

В обменном кулоновском взаимодействии учитывались кулон-ядерные корреляции, приводящие к его ослаблению согласно формуле (10). Для оценки степени эффективной экранировки в приближении среднего поля в [28] нами были проведены расчеты энергий связи ряда зеркальных ядер с новым ЭФП DF3-f для оценки значения параметра h_{Coul} . На рис. 1 приведены соответственно разности энергий связи (величина кулоновского расщепления) зеркальных дублетов (рис. 1а) и триплетов (рис. 1б) в сравнении с экспериментальными данными из [33, 34].

Среднеарифметическое отклонение теории от эксперимента составляет 21 кэВ для дублетов. Двойная разность для триплетов составляет -29 кэВ, т.е. -15 кэВ/нуклон. С помощью уравнения для обобщенного эффективного поля ТКФС, эквивалентного уравнению $pnQRPA$, нами были рассчитаны также частоты переходов ω_{IAR}^- и ω_{IAR}^+ между компонентами зеркальных триплетов (рис. 1в). Среднеарифметическое отклонение (с превышением) теории от эксперимента составляет +60 кэВ.

В предыдущей работе [28] из методических соображений использовались значения $h_{Coul} = 1$ ($\sigma = 1$), отвечающие максимальной экранировке обменной части кулоновского взаимодействия,

что позволило практически устранить аномалию Нолен-Шиффера [32]. Полученные в настоящей работе величины расщепления компонент зеркальных ядер, рассчитанного без обменного кулоновского взаимодействия, систематически превышают эксперимент. Проведенный анализ показывает, что обменную часть кулоновского взаимодействия необходимо экранировать не полностью, а на 80–90%, что также улучшает описание “эталонных” энергий ИАР в нашем расчете.

4. РАСЧЕТЫ ХАРАКТЕРИСТИК ИАР В ЯДРАХ СО СПАРИВАНИЕМ

Для нахождения характеристик ИАР решались уравнения модели континуум- $pnQRPA$ (3) на полном базисе одночастичных состояний [19, 21]. Эффективное NN -взаимодействие получено из энергетического функционала плотности DF3-f. Для изоспиновых возбуждений оно состоит из изовекторного взаимодействия в канале частица-дырка и изовекторного протон-нейтронного взаимодействия в канале частица-частица ($S = 0$, $T = 1$ динамическое спаривание).

4.1. Расчеты свойств ИАР в изотопах Ca, Sn и Pb

Для полноты изложения кратко обсудим точность нового расчета энергий ИАР ω (относительно основных состояний родительских ядер) в цепочках четно-четных изотопов Ca, Sn и Pb (см. рис. 2) по сравнению с [28]. Для этих полумагических изотопов со спариванием только по нейтронам и для ²⁰⁸Pb имеются достаточно полные экспериментальные данные.

Отклонение рассчитанных энергий возбуждения ИАР от экспериментальных энергий в ⁴²Ca–⁴⁸Ca сравнительно невелико — оно находится в пределах экспериментальных погрешностей. Характер зависимости от массового числа энергий ИАР, отсчитанных от основных состояний родительских ядер, достаточно плавный (рис. 2а). Обратим внимание на предсказываемое резкое понижение энергии ИАР при достижении нового магического числа нейтронов $N = 34$.

Систематические данные об энергиях ИАР получены в (³He, t)-реакции для изотопов олова с $A = 112–124$ [36]. Максимальное отклонение от экспериментальных значений составляет +200 кэВ. При этом энергии ИАР несколько завышены в сравнении с экспериментом, тогда как другие самосогласованные расчеты [16] и [37], напротив, недооценивают энергии ИАР (максимальные отклонения от эксперимента -200 и -600 кэВ соответственно).

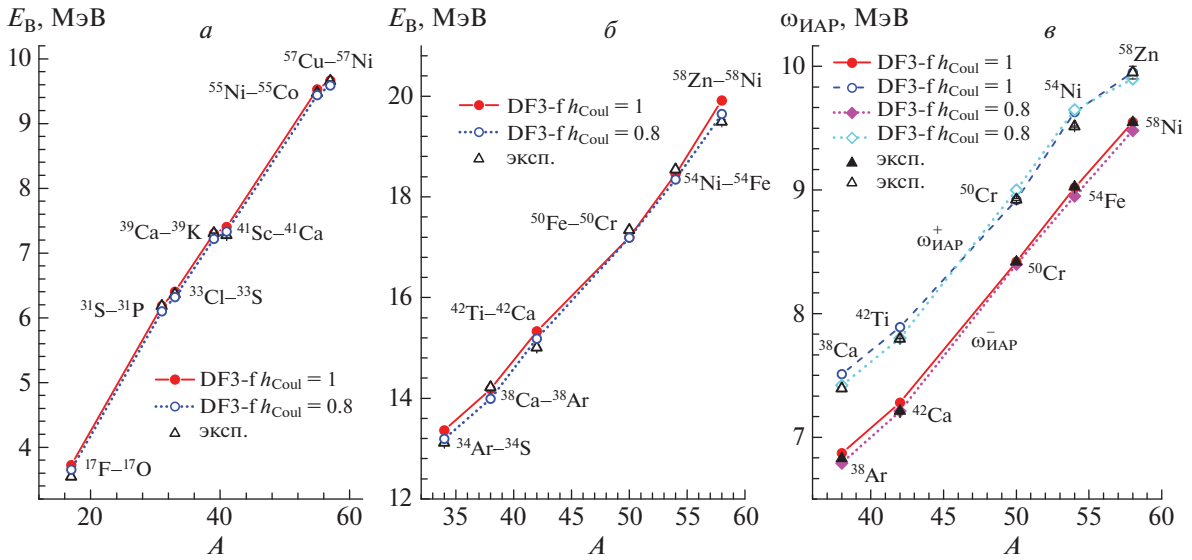


Рис. 1. *a* — Разность энергий связи зеркальных ядер (кулоновское расщепление) — дублетов; *б* — двойная разность энергий связи зеркальных ядер — триплетов; *в* — энергии возбуждения ИАР ω^+ (β^+ -канал) и ω^- (β^- -канал) для зеркальных ядер — триплетов.

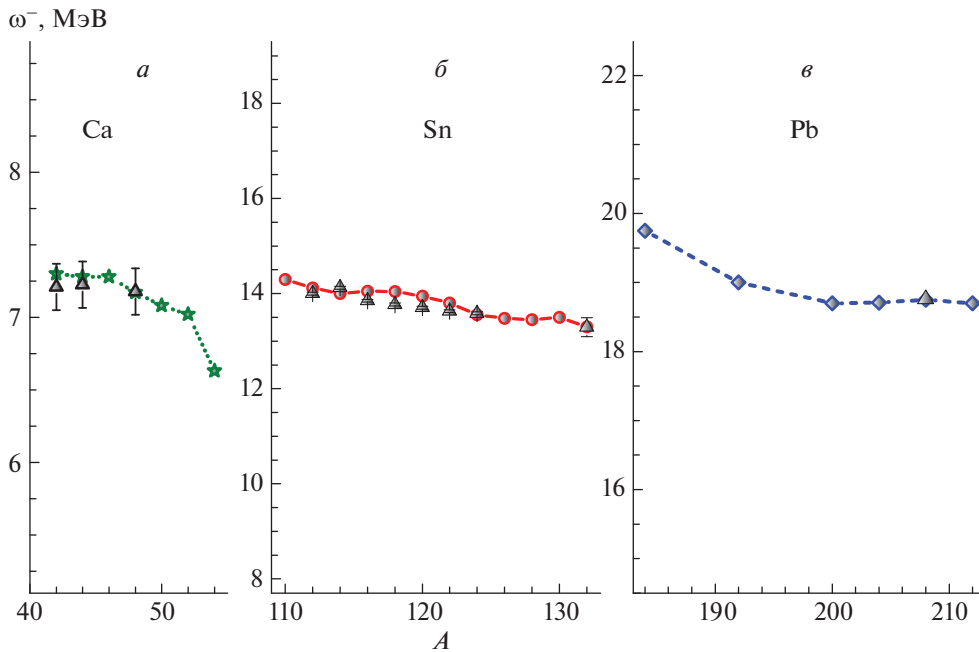


Рис. 2. Энергия возбуждения ИАР ω для цепочек изотопов (открытые символы — наша теория, черные треугольники — экспериментальные данные для Ca [35], Sn [36], Pb [38]).

Из рис. 2б видно, что для $A = 116-122, 130$ имеется незначительное отклонение от регулярного поведения $\omega(A)$, тогда как в работах [16, 37] наблюдается более плавная зависимость. Это, по-видимому, результат использования в нашем расчете контактного спаривания нуклонов в основном состоянии (описываемого одним силовым параметром, зависящим от A) и эффективного pn -

взаимодействия в канале частица-частица с силовым параметром, не зависящим от A . В работах [16, 37] использовалось спаривание конечного радиуса, состоящее из двух гауссиан. Вопрос о влиянии формы спаривания и эффективного взаимодействия в канале частица-частица на возможное нарушение зарядовой симметрии и на характеристики ИАР заслуживает дальнейшего изучения.

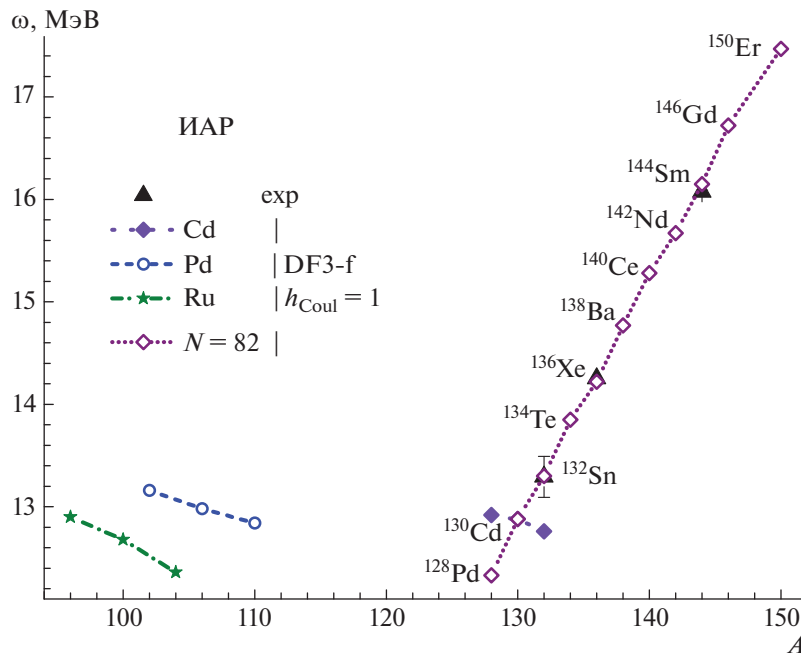


Рис. 3. Энергия возбуждения ИАР ω для цепочки изотонов с $N = 82$ и цепочек немагических изотопов Ru, Pd, Cd.

Для изотопа ²⁰⁸Pb рассчитанная энергия ($E_{th} = 15.09$ МэВ) хорошо согласуется с экспериментальной $E_x = 15.1$ МэВ [38] (рис. 2в). При этом вклад в энергию ИАР от корреляционной кулоновской энергии составляет $\Delta E_{Cc} \leq 350$ кэВ по сравнению со сдвигом около 100 кэВ, полученным за счет феноменологической поправки протонных энергий в работе [25]. В то же время энергия ИАР в ²⁰⁸Pb при вариации параметров в самосогласованном расчете [25] оказывается ниже экспериментальной от 200 до 900 кэВ. Для сравнения, в другом самосогласованном расчете [37] энергия ИАР также оказывается ниже экспериментальной на 300–600 кэВ. Заметим, что, хотя непосредственный вклад в энергию ИАР от двухчастичного спин-орбитального взаимодействия в функционале DF3-f отсутствует, тем не менее для выполнения условий согласования его учет необходим.

Результаты самосогласованных расчетов в изотопах Ca, Sn, Pb систематизированы на рис. 2а–2в. Отклонение энергий ИАР от экспериментальных данных в изотопах Sn от –30 до 200 кэВ и –10 кэВ в ²⁰⁸Pb. В рассмотренных изотопах исчерпывается 97–98% правила сумм для матричных элементов $S_- - S_+ = N - Z$.

4.2. Ядра со спариванием по нейтронам и протонам

Существующие самосогласованные расчеты [16, 18, 22, 37] ограничены в основном немагическими ядрами с нейтронным спариванием.

Развитый формализм дает возможность рассмотреть нейтронно-избыточные ядра со спариванием как в нейтронной, так и протонной системах. На рис. 3 представлены результаты DF3-f + CQRPA-расчета энергий ω для $J^\pi = 0^+$ возбуждений в нейтронно-избыточных изотопах с числом нейтронов $N = 82$. Расчет хорошо описывает экспериментальные энергии ИАР в дважды-магическом ядре ¹³²Sn [39], а также в ядрах с протонным спариванием ¹³⁶Xe [40], ¹⁴⁴Sm [41].

Как видно из рис. 3, для изотопических цепочек Ru, Pd, Cd массовая зависимость энергий ИАР ω носит вполне регулярный характер. Такая же регулярная массовая зависимость энергий ω отмечается для цепочки изотонов с $N = 82$. Представляли бы несомненный интерес измерения энергий ИАР в нестабильных изотопах Cd и в изотопах $N = 82$ и анализ корреляции энергий ИАР с величиной “нейтронной шубы” в этих нейтронно-избыточных ядрах. Согласие с экспериментом для ¹⁴⁴Sm, ¹³⁴Xe и ¹³²Sn отличное.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках обобщенной теории конечных ферми-систем развит полностью самосогласованный подход DF3-f + pnCQRPA-подход к описанию спиновых резонансов в нейтронно-избыточных ядрах с развитым спариванием как в нейтронной, так и протонной системах. Как отмечалось в нашей предыдущей работе [28], во всех рассмотренных изотопах в самосогласованном DF3-f + pnCQRPA-расчетах наблюдается вырождение

энергий ИАР и его изобарических партнеров. Полученное хорошее описание имеющихся экспериментальных силовых функций ИАР в изотопах Ca, Sn, Pb свидетельствует об эффективном восстановлении изоспиновой симметрии, нарушенной в приближении HF + BCS. Сравнение с результатами предыдущих самосогласованных расчетов свойств ИАР в изотопах Ca, Sn и Pb [37] показывает надежность развитой модели, основанной на новом ЭФП Фаянса DF3-f.

Проведенные полностью самосогласованные расчеты характеристик ИАР являются чувствительным тестом восстановления изоспиновой симметрии в ядрах со спариванием. Основным источником нарушения изоспиновой симметрии в ядрах со спариванием остается взаимодействие Кулона. Оценен вклад короткодействующих ядерных корреляций [8, 29] в обменную компоненту кулоновского взаимодействия. Ограничения на параметры экранировки V_{exc} , полученные из разностей энергий связи ΔE_B , повышают надежность расчетов ИАР. В целом использование нового варианта ЭФП DF3-f эффективно увеличивает энергию ИАР в рассмотренных изотопических цепочках, в значительной степени компенсируя ее недооценку в самосогласованных расчетах [16, 22, 37].

В настоящей работе не рассматривался вопрос о полной ширине ИАР, аномально малой в ядерном масштабе. Она складывается из ширины прямой эмиссии (escape width Γ_{\uparrow}) и спредовой ширины (spreading width Γ_{\downarrow}). Escape-ширина ИАР в основном определяется прямой эмиссией протонов в континуум, и поэтому составляет всего несколько десятков кэВ. Расчет escape-ширины ИАР требует адекватной модели — *pnQRPA* с учетом континуума одночастичных состояний [21].

Вклад в ширину ИАР, возникающий за счет смешивания со сложными конфигурациями, невелик — это показано в микроскопической модели, учитывающей квазичастично-фононное взаимодействие [22], и в частично-дырочной дисперсионной оптической модели [42]. Заслуживает внимания анализ влияния сложных конфигураций на энергию ИАР в рамках модели, учитывающей квазичастично-фононное взаимодействие [43].

Нетривиальным фактом является то, что в самосогласованном подходе, основанном на ЭФП Фаянса, наряду с характеристиками ядерной материи с хорошей точностью описываются ядерные массы и радиусы [30]. Более того, в этом подходе воспроизводятся экспериментальные данные по зарядовой плотности, полученные в (e, e')-экспериментах [44]. По этой причине в настоящих расчетах не наблюдается существенных противоречий между оценками энергий ИАР и величины

“нейтронной шубы”, а также и энергии симметрии E_{symm} , часто возникающих для многих параметризаций функционала Скирма.

В заключение отметим важность самосогласованности ядерно-структурных и астрофизических расчетов. Энергия симметрии влияет не только на свойства основных и возбужденных состояний нейтроно-избыточных ядер, но и на уравнения состояния симметричной ядерной и нейтронной материи. Величина E_{symm} — необходимый ингредиент моделирования γ -процесса нуклеосинтеза, происходящего при слиянии нейтронных звезд. Таким образом, эта важная характеристика взаимодействия в масштабе нескольких фемтометров, тесно связанная с энергией ИАР, непосредственно отражается в свойствах компактных (макроскопических) объектов — нейтронных звезд.

Один из дней Международного симпозиума “Бесконечная и конечная ядерная материя” (INFINUM) в ЛТФ ОИЯИ, Дубна, 20–22 марта 2019 г. был посвящен памяти проф. Э.Е. Саперштейна. Благодарим организаторов и всех участников за обсуждения вопросов, тесно связанных с его работами. Мы с теплотой и признательностью вспоминаем Эдуарда Евсеевича Саперштейна — соавтора и друга, с которым нас объединяло многолетнее сотрудничество и общение.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ 18-02-00670).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
2. W. Kohn and L. G. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
3. *Energy Density Functional Methods for Atomic Nuclei*, Ed. by N. Shunck (IOP Publ. Ltd, 2019).
4. D. Steppenbeck, S. Takeuchi, N. Aoi, P. Doornenbal, M. Matsushita, H. Wang, H. Baba, N. Fukuda, S. Go, M. Honma, J. Lee, K. Matsui, S. Michimasa, T. Motobayashi, D. Nishimura, T. Otsuka, *et al.*, *Nature* **502**, 207 (2013).
5. R. F. Garcia-Ruiz, M. L. Bissell, K. Blaum, A. Ekström, N. Frömmgen, G. Hagen, M. Hammen, K. Hebeler, J. D. Holt, G. R. Jansen, M. Kowalska, K. Kreim, W. Nazarewicz, R. Neugart, G. Neyens, W. Nörtershäuser, *et al.*, *Nature Physics* **12**, 594 (2016).
6. S. A. Fayans, S. V. Tolokonnikov, E. L. Trykov, and D. Zawischa, *Nucl. Phys. A* **676**, 49 (2000).
7. I. N. Borzov, S. A. Fayans, E. Krömer, and D. Zawischa, *Z. Phys. A* **355**, 117 (1996).
8. С. А. Фаянс, Письма в ЖЭТФ **68**, 161 (1998) [*JETP Lett.* **68**, 169 (1998)].
9. V. A. Khodel and E. E. Saperstein, *Phys. Rept.* **92**, 183 (1982).

10. A. Bulgac, M. McNeil Forbes, Shi Jin, R. Navarro Perez, and N. Schunck, *Phys. Rev. C* **97**, 044313 (2018).
11. M. Baldo, L. M. Robledo, P. Schuck, and X. Vinas, *Phys. Rev. C* **95**, 014318 (2017).
12. P.-G. Reinhard and W. Nazarewicz, *Phys. Rev. C* **95**, 064328 (2017).
13. N. Auerbach, *Phys. Rept.* **98**, 273 (1983).
14. Э. Е. Саперштейн, С. В. Толоконников, *ЯФ* **74**, 1306 (2011) [*Phys. At. Nucl.* **74**, 1277 (2011)].
15. S. G. Rohoziński, J. Dobaczewski, and W. Nazarewicz, *Phys. Rev. C* **81**, 014313 (2010).
16. N. Paar, T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev.* **69**, 054303 (2004).
17. B. L. Birbrair, *Nucl. Phys. A* **108**, 449 (1968).
18. H. Liang, N. Van Giai, and J. Meng, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 122502 (2008).
19. И. Н. Борзов, С. А. Фаянс, Препринт-ФЭИ-1129 (1980).
20. Н. И. Пятов, С. А. Фаянс, *ЭЧАЯ* **14**, 953 (1983).
21. И. Н. Борзов, Е. Л. Трыков, С. А. Фаянс, *ЯФ* **52**, 985 (1990) [*Sov. J. Nucl. Phys.* **52**, 627 (1990)].
22. G. Colò, H. Sagawa, N. Van Giai, P. F. Bortignon, and T. Suzuki, *Phys. Rev. C* **57**, 3049 (1998).
23. В. А. Родин, М. Г. Урин, *ЯФ* **66**, 2178 (2003) [*Phys. At. Nucl.* **66**, 2128 (2003)].
24. S. A. Fayans, E. L. Trykov, and D. Zawischa, *Nucl. Phys. A* **568**, 523 (1994).
25. X. Roca-Maza, L.-G. Cao, G. Colò, and H. Sagawa, *Phys. Rev. C* **94**, 044313 (2016).
26. P.-G. Reinhard and H. Flocard, *Nucl. Phys. A* **584**, 467 (1995).
27. J. F. Berger, M. Girod, and D. Gogny, *Nucl. Phys. A* **428**, 25 (1984).
28. И. Н. Борзов, С. В. Толоконников, *ЯФ* **82**, 471 (2019).
29. A. Bulgac and V. R. Shaginyan, *Nucl. Phys. A* **601**, 103 (1996).
30. Э. Е. Саперштейн, С. В. Толоконников, *ЯФ* **79**, 703 (2016) [*Phys. At. Nucl.* **79**, 1030 (2016)].
31. А. Б. Мигдал, *Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер* (Наука, Москва, 1983).
32. J. A. Nolen, Jr. and J. P. Schiffer, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **19**, 471 (1969).
33. <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2>
34. M. Wang, G. Audi, A. H. Wapstra, F. G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu, and B. Pfeiffer, *Chin. Phys. C* **36**, 1603 (2012).
35. K. Yako, M. Sasano, K. Miki, H. Sakai, M. Dozono, D. Frekers, M. B. Greenfield, K. Hatanaka, E. Ihara, M. Kato, T. Kawabata, H. Kuboki, Y. Maeda, H. Matsubara, K. Muto, and S. Noji, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 012503 (2009).
36. R. Pham, J. Jänecke, D. A. Roberts, M. N. Harakeh, G. P. A. Berg, S. Chang, J. Liu, E. J. Stephenson, B. F. Davis, H. Akimune, and M. Fujiwara, *Phys. Rev. C* **51**, 526 (1995).
37. Z. M. Niu, Y. F. Niu, H. Z. Liang, W. H. Long, and J. Meng, *Phys. Rev. C* **95**, 044301 (2017).
38. D. J. Horen, C. D. Goodman, C. C. Foster, C. A. Goulding, M. B. Greenfield, J. Rapaport, D. E. Bainum, E. Sugarbaker, T. G. Masterson, F. Petrovich, and W. G. Love, *Phys. Rev. Lett. B* **95**, 27 (1980); **67**, 055802 (2003).
39. Y. Yasuda *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 132501 (2018).
40. P. Puppe, D. Frekers, T. Adachi, H. Akimune, N. Aoi, B. Bilgier, H. Ejiri, H. Fujita, Y. Fujita, M. Fujiwara, E. Ganioglu, M. N. Harakeh, K. Hatanaka, M. Holl, H. C. Kozer, J. Lee, *et al.*, *Phys. Rev. C* **84**, 051305(R) (2011).
41. J. Jänecke, F. D. Becchetti, W. S. Gray, R. S. Tickle, and E. R. Sugarbacker, *Nucl. Phys. A* **402**, 262 (1983).
42. G. V. Kolomiitsev, M. L. Gorelik, and M. H. Urin, *Eur. Phys. J. A* **54**, 228 (2018).
43. A. P. Severyukhin, V. V. Voronov, I. N. Borzov, N. N. Arsenyev, and N. Van Giai, *Phys. Rev. C* **90**, 044320 (2014).
44. J. Heisenberg, J. Lichtenstadt, C. N. Papanicolas, and J. S. McCarthy, *Phys. Rev. C* **25**, 2292 (1982).

FAYANS FUNCTIONAL: SELF-CONSISTENT DESCRIPTION OF ISOSPIN EXCITATIONS

I. N. Borzov^{1),2)}, S. V. Tolokonnikov^{1),3)}

¹⁾ National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

²⁾ Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³⁾ Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Dolgoprudny, Russia

Energy density functional DF3 developed previously by Fayans et al. is modified in order to fully self-consistently describe the isobaric analog resonances (IAR) in the nuclei with pairing. The use is made of the continuum quasiparticle random-phase approximation (CQRPA). Systematic analysis of the binding energies of isobaric doublets and transition energies of the isobaric triplets in the mirror nuclei makes it possible to constrain the screening parameters of the Coulomb exchange interaction. Comparison with experiment shows a better description of the IAR energies for the reference neutron-rich Sn and Pb isotopes with developed neutron pairing using the newly designed DF3-f functional than in self-consistent calculations with the relativistic functional DC3* and SAMi Skyrme functional. The DF3-f functional was applied for the first time to calculations of the IAR properties in Ru, Pd, Cd isotopes with pairing in both neutron and proton systems, as well as in the isotonic chain with $N = 82$.