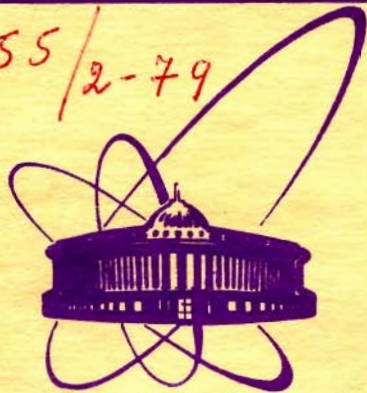


5455/2-79



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

C-876

29/12-79

P4 - 12678

В.М.Струтинский, Ф.А.Иванюк, В.В.Пашкевич

ТОЧНОСТЬ РАСЧЕТОВ
ОБОЛОЧЕЧНЫХ ПОПРАВOK

1979

Р4 - 12678

В.М.Струтинский*, Ф.А.Иванюк*, В.В.Пашкевич

ТОЧНОСТЬ РАСЧЕТОВ
ОБОЛОЧЕЧНЫХ ПОПРАВOK

Направлено в ЯФ

*Институт ядерных исследований АН УССР, Киев

Струтинский В.М., Иванюк Ф.А., Пашкевич В.В. P4 - 12678

Точность расчетов оболочечных поправок

Формулируются условия, определяющие точность метода оболочечных поправок при его практическом использовании в сочетании с феноменологическими моделями для расчета энергии деформации и масс ядер. Анализируются данные работ ^{1,2/}, послужившие основанием для критических замечаний о точности вычисления оболочечных энергий.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1979

Strutinsky V.M., Ivanyuk F.A., Pashkevich V.V. P4 - 12678

The Accuracy of the Shell-Correction Calculations

The conditions that determine the accuracy of the shell correction method used in conjunction with the phenomenological models for calculating the deformation energy and nuclear masses are formulated. The data of refs. ^{1,2/} on which the critical comments concerning accuracy of the calculated shell energies have been based are analyzed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

Обоснованию метода оболочечных поправок /МОП/ посвящено значительное число работ, анализирующих на основании различных теоретических моделей и приближений подход, предложенный в [3-5]. В некоторых работах объектом замечаний стала однозначность процедуры выделения осциллирующей /оболочечной/ части энергии. В [1,2] сомнению подвергается также достаточно быстрая сходимость разложения для энергии. В большинстве случаев источником отрицательных выводов явилось использование неадекватных приемов расчетов и пренебрежение некоторыми требованиями, которые определяют точность МОП при его практическом использовании в сочетании с феноменологическими моделями для энергий деформации или масс ядер и феноменологическим нуклонным потенциалом ядерной модели оболочек.

Основной особенностью МОП является использование в качестве исходных данных величин, статистически усредненных или сглаженных в том или ином смысле. Это выдвигает своеобразные условия, которые можно кратко сформулировать следующим образом:

а/ Оболочечный потенциал должен быть определенным образом связан с микроскопическими величинами. Выдвигается условие статистического согласования микроскопической матрицы плотности и матрицы плотности, генерирующей несамосогласованный потенциал модели оболочек при любой форме ядра.

б/ Определение гладкой компоненты одночастичной энергии должно быть согласовано с практическим определением капельной энергии. Например, сглаживание в МОП должно соответствовать подгонке по методу наименьших квадратов /МНК/, если так определяются параметры капельной модели по массам ядер.

в/ Численная процедура расчета оболочечных энергий должна соответствовать конкретным условиям расчета. Так, при усреднении распределения, заданного на конечном интервале, нужно использовать сглаживающие функции, определенные для такого интервала.

Условие /а/ приходится учитывать при анализе сходимости и оценке членов более высокого порядка в разложении для энергии в МОП. Так как обычные потенциалы модели оболочек удовлетворяют этому условию лишь приближенно, то при оценке членов второго и более высоких порядков нужно учитывать

соответствующие поправки. Условие /б/ является основой для определения процедуры усреднения, которая используется в МОП для численного нахождения оболочечной энергии. Сформулированное здесь в общей форме условие /в/ необходимо, в частности, для того, чтобы ответить на вопрос, нужно ли, и если нужно, то в какой форме, учитывать состояния сплошного спектра в расчетах с потенциалами конечной глубины. Все эти условия полностью игнорируются в работах /1,2/, что и явилось главным источником полученных там отрицательных результатов.

1. СХОДИМОСТЬ РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ЭНЕРГИИ

То, что точность приближения МОП зависит от качества используемого потенциала модели оболочек, вполне естественно. Формально это выражается в присутствии соответствующих членов во втором и более высоких членах разложения для энергии. В общем случае поправка второго порядка $\delta^2 E$, которая обычно предполагается малой и не учитывается в расчетах, содержит слагаемые

$$\frac{1}{2} \text{tr}(\rho_s - \tilde{\rho}_s) \Gamma (\rho_s - \tilde{\rho}_s) \quad /1/$$

и

$$\text{tr}(\tilde{\rho}_s - \bar{\rho}) \Gamma (\rho_s - \tilde{\rho}_s). \quad /2/$$

Здесь ρ_s - одночастичная матрица плотности модели оболочек с потенциалом \bar{V} , $\tilde{\rho}_s$ - статистически усредненная величина, а $\bar{\rho}$ - некоторая плотность, предположительно генерирующая потенциал

$$\bar{V}(1) = \text{tr}_2 v(1,2) \bar{\rho}(2).$$

v - нуклонное взаимодействие. /Данный результат был получен /8/ в приближении Хартри-Фока, но может быть обобщен в приближении ферми-жидкости/. Амплитуда эффективного взаимодействия Γ определяется из уравнения

$$\Gamma = v + vA\Gamma, \quad /3/$$

где A - поляризованный оператор. /В теории Мигдала v заменяется феноменологической амплитудой Γ^ω /. Условие /а/ требует равенства

$$\bar{\rho}_s = \bar{\rho}.$$

/4/

Качественно соотношение /4/ вполне оправданно, так как потенциал модели оболочек определяется по усредненным свойствам ряда ядер и вполне очевидно, что при условии заполнения нижних уровней в яме плотность нуклонов приблизительно соответствует оболочечному потенциалу \bar{V} при любой его форме, т.е. разность $\bar{\rho}_s - \bar{\rho}$ мала. Однако практически используемые потенциалы удовлетворяют /4/ в различной степени, и при оценке члена второго порядка в разложении для энергии необходимо учитывать также и слагаемое /2/. В^{6/} отмечалось, что поправка /2/ к плотности, связанная с отклонением от условия статистического согласования одночастичного потенциала, может иметь такую же величину, что и поправка /1/, рассмотренная в^{1,7/}. Однако в работе^{7/}, где впервые анализировались поправки более высокого порядка, предполагалось, что условие /4/ выполняется точно на основании приведенных качественных соображений, и поправка /2/ не рассматривалась. То же самое предполагается и в последовавших за ней работах^{1,2/}, и поправки типа /2/ там не учитываются. Это обстоятельство обесценивает расчеты поправок второго порядка согласно /1/ в^{1,2,7/} с эмпирическим потенциалом модели оболочек, и их можно рассматривать лишь как грубые оценки масштаба величины.

Приведенные в^{1,2,7/} оценки $\delta^2 E$ не являются достоверными также и по той причине, что, как показала проверка, численные значения $\delta^2 E$ весьма чувствительны к обрезанию одночастичного спектра, которое, как обычно в теории конечных ферми-систем, использовалось в указанных работах при вычислении амплитуды путем решения интегрального уравнения /3/. Искусственное ограничение спектра узкой полоской около границы Ферми, порядка одной - двух оболочек, вероятно, является причиной обнаруженной в работах^{1,2,7/} резкой зависимости $\delta^2 E$ от числа нуклонов. При расширении спектра над границей Ферми значения $\delta^2 E$ уменьшаются по абсолютной величине и более плавно изменяются в зависимости от числа нуклонов, см. таблицу /как и в^{1,2,7/}, расчеты проводились только для сферических ядер/.

Подчеркнем, что условие согласования /4/ должно выполняться в широкой области изменения внешних параметров N, Z или параметров формы ядра. Именно это позволяет связать абстрактное гладкое распределение, вводимое в общей теории МП, с такими феноменологическими величинами, как нуклонный потенциал модели оболочек, капельная аппроксимация для энергии и др. В противном случае вспомогательное распреде-

Таблица

N	116	118	120	122	124	126	128	130	132
А	-	-	1.80	1.15	0.79	0.51	0.42	0.59	-
Б	0.86	0.70	0.39	0.21	0.20	0.39	0.37	0.39	0.52

А: Значения $\delta^2 E$ /в МэВ/ - расчет Бунатяна /1/ для $Z=82$ и потенциала Вудса-Саксона; Б - контрольный расчет $\delta^2 E$ с расширенным одночастичным спектром в интегральном уравнении /3/.

ление не определено и не имеет смысла обсуждать поправки к такой неопределенной величине, как это делается в /1,2,7,8/. Записанное в форме равенства приращений

$$\Delta \tilde{\rho}_s = \Delta \bar{\rho} \quad /5/$$

условие сохранения статистического согласования при изменении формы ядра является нетривиальным и играет роль, аналогичную роли секулярного уравнения в методе самосогласования поля /9/. Выполнение этого условия осуществляется благодаря перераспределению заполненных и свободных состояний при деформации /"сильное возмущение"/ в отличие от обычных микроскопических теорий, где предполагается, что согласование потенциала и плотности достигается при когерентном малом возмущении волновых функций заполненных состояний /так называемое частично-дырочное взаимодействие/, см. /6/.

Полный анализ поправки второго порядка был проведен в рамках теории Хартри-Фока с эффективным взаимодействием /10/. Было показано, что статистическое самосогласование оболочечного потенциала приводит к заметному уменьшению величины $\delta^2 E$, которое становится также более плавной функцией формы потенциала и чисел нуклонов N и Z . Величина члена первого порядка $\delta^1 E$, который практически используется для расчетов оболочечных поправок, изменяется мало. Таким образом подтверждается весьма быстрая сходимость МОП при согласованном определении основных величин.

2. ВЫБОР ПРОЦЕДУРЫ УСРЕДНЕНИЯ

Поправка первого порядка к энергии определяется в общем случае как вариация

$$\delta^1 E = E_s - \tilde{E}_s \quad /6/$$

полной одночастичной энергии E_s относительно некоторого сглаженного значения \tilde{E}_s . Условие согласования с капельной моделью для энергии деформации определяет весовую функцию, которая используется в МОП для численного расчета сглаженных величин по методу подвижного среднего. При усреднении /в фазовом пространстве или по числу нуклонов/ должна воспроизводиться "гладкая" /"капельная"/ часть энергии, поэтому среднее от $\delta^1 E$ при усреднении должно обращаться в нуль. Предположив, что гладкая часть соответствует полиному невысокой степени M , получаем условие, что усреднение должно тождественно воспроизводить такой полином. Это условие однозначно определяет искомую сглаживающую функцию для каждого заданного типа усреднения /на конечном и бесконечном интервале, по непрерывной или дискретной переменной/ и заданной весовой функции $w(x, x')$. В настоящее время предложено несколько различных способов определения $\delta^1 E$: экстраполяцией к температуре $T=0$ феноменологического значения энергии для большой температуры; по асимптотическому значению одночастичной энергии для очень большого значения числа частиц N ; через сглаженные числа заполнения \tilde{n}_λ ; как наилучшее приближение полиномами невысокой степени по методу наименьших квадратов; путем расчета полной одночастичной энергии в так называемом улучшенном приближении Томаса-Ферми. Наличие нескольких различных определений естественно, так как отсутствует однозначное формальное определение феноменологической гладкой капельной компоненты энергии, с которым оно должно быть согласовано. Здесь представляет интерес сравнить основное определение, которое используется наиболее часто, с использованным в /1,2/ вариантом определения $\delta^1 E$ через $\tilde{n}_\lambda^{1/5}$, см. /17/ и /18/ ниже.

Обычное определение $\delta^1 E$ отвечает отождествлению капельной энергии с приближениями типа улучшенного приближения Томаса-Ферми и требует введения величин, усредненных по энергии. В соответствии с этим вводится сглаженная плотность одночастичных уровней $\tilde{g}(e)$, а гладкая одночастичная энергия выражается как

$$\tilde{E}_s^{(g)}(N) = \int \tilde{\mu} e \tilde{g}(e) de,$$

/ 7 /

где $\tilde{\mu}$ определяется из условия сохранения числа частиц,

$$N = \int \tilde{\mu} \tilde{g}(e) de. \quad /8/$$

Величину $\tilde{g}(e)$ находят из заданного распределения одночастичных уровней при помощи сглаживающей функции $\zeta_M(e, e')$, которая задается условием, чтобы величина $\pi(e)$, являющаяся гладкой /то есть полином степени, не более высокой чем M , от аргумента или его простой функции/, воспроизводилась тождественно,

$$\pi(e) = \int \zeta_M(e, e') \pi(e') de'. \quad /9/$$

Альтернативное определение \tilde{E} опирается на понятие сглаженных чисел заполнения нуклонов $\tilde{n}(e, \mu)$. Для их определения можно использовать следующее условие:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \pi(e) \tilde{n}(e, \mu) de = \int \pi(e) n_0(e, \mu) de, \quad /10/$$

где

$$n_0(e, \mu) = \begin{cases} 1, & e \leq \mu, \\ 0, & e > \mu. \end{cases} \quad /11/$$

Два определения оболочечной поправки первого порядка /6/ возникают, если в качестве \tilde{E}_s воспользоваться величиной /7/, либо если подставить в /6/

$$\tilde{E}_s^{(n)}(N) = \int e g_0(e) \tilde{n}(e, \tilde{\mu}) de = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} \tilde{n}(\epsilon_{\lambda}, \tilde{\mu}). \quad /12/$$

Здесь ϵ_{λ} - одночастичные энергии,

$$g_0(e) = \sum_{\lambda} \delta(e - \epsilon_{\lambda}), \quad /13/$$

а $\tilde{\mu}$ определено условием

$$\int g_0(e) \tilde{n}(e, \tilde{\mu}) de = N. \quad /14/$$

Плотность уровней \tilde{g} и распределение чисел заполнения \tilde{n} определяются через сглаживающую функцию $\zeta_M(e, e')$,

$$\tilde{g}(e) = \int_{-\infty}^{\infty} \zeta_M(e, e') g_0(e') de', \quad /15/$$

$$\tilde{n}(e, \mu) = \gamma \int_{(e-\gamma)/\gamma}^{\infty} \zeta_M(e, e') de' \quad /16/$$

В соответствии с /6/, /7/ и /12/ имеем два определения оболочечных поправок:

$$\delta_n^1 E = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} \delta n_{\lambda}, \quad /17/$$

и

$$\delta_g^1 E = \int (e-\tilde{\mu}) \delta \tilde{g}(e) de, \quad /18/$$

где

$$\delta g(e) = g_0(e) - \tilde{g}(e), \quad /19/$$

$$\delta n_{\lambda} = n_0(\epsilon_{\lambda}, \mu) - \tilde{n}(\epsilon_{\lambda}, \tilde{\mu}). \quad /20/$$

Сглаживающая функция $\zeta_M(x, x')$ выражается через систему полиномов $p_K(x)$, ортогональных и нормированных на непрерывном или дискретном интервале $x_1 \leq x \leq x_2$ с весом $w(x, x')$, см. /7/ /Приложение/ и /11/,

$$\zeta_M(x, x') = K_M(x, x') w(x, x'), \quad /21/$$

где

$$K_M(x, x') = \sum_{K=0}^M p_K(x) p_K(x') \quad /22/$$

есть так называемое ядро в теории ортогональных полиномов. Первоначальная и обычно используемая форма /3-5/ сглаживающей функции соответствует непрерывному бесконечному ($x_1 = -\infty, x_2 = +\infty$) интервалу усреднения и однородному гауссовскому весу

$$w(e, e') = \exp\left[-\left(\frac{e-e'}{\gamma}\right)^2\right], \quad /23/$$

когда $p_K(x)$ - нормированные полиномы Эрмита. В МОП $K_M(x, x')$ /22/ - это так называемая поправка на кривизну распределения. Здесь и ниже γ - интервал усреднения по энергии, который выбирается порядка или больше характерного расстояния между оболочками

$$\hbar\Omega \approx \mu A^{-1/3} \approx 5-7 \text{ МэВ} , \quad /24/$$

A - атомный номер, $\mu \approx 50$ МэВ - энергия Ферми.

Отмечалось ^{1,12/}, что /17/ и /18/ являются эквивалентными в тех случаях, когда возможно достаточно точное выделение так называемой области плато, где величина \bar{E}_s слабо зависит от γ при существенной вариации этого параметра. Действительно, между величинами /17/, /18/ существует соотношение, а именно ^{12/}:

$$\delta_n^1 E = \delta_g^1 E - \gamma \partial(\delta_g^1 E) / \partial \gamma, \quad /25/$$

из которого очевидно следует сказанное. Однако в расчетах с ядерным потенциалом конечной глубины, использующих простейшее определение $\zeta_M(e, e')$, предполагающее наличие заданного в бесконечном интервале спектра ϵ_λ , второе слагаемое в /25/ имеет конечную величину. Различными оказываются и характеризующие "качество" плато длины интервалов, где зависимость \bar{E}_s от γ несущественна, а $\delta^1 E$ определяется однозначно. Ясно, что утверждение ^{17/} о том, что различием между двумя определениями \bar{E}_s можно пренебречь, не относится к таким расчетам. Между тем именно на этом основании в ^{1,2/} рассматривается одно лишь определение /17/ и выводы без оговорок распространяются на другие расчеты, где, как правило, используется определение /18/. Ниже приведены некоторые результаты расчетов, которые показывают, что формула /17/, действительно, дает значения, совпадающие с /18/ или близкие к ним в области корректного определения $\tilde{n}(e, \tilde{\mu})$, но область плато значительно уже. Это, естественно, затрудняет однозначное определение оболочечной поправки /17/. По той причине в расчетах /за исключением ^{1,2/} / используется альтернативное определение /18/ и таким образом получают устойчивые результаты.

Сравнение расчетов оболочечной поправки при помощи определений /17/ и /18/ дано на рис. 1. В верхней части A рисунка спектр вудс-саксоновских уровней дополнен фиктивными дискретными уровнями, расположенными в тех местах, где имеются резонансы. Именно с таким спектром выполнены расчеты в ^{1,2/}. На четырех нижних рисунках искусственно увеличена глубина потенциальной ямы для того, чтобы получить большее число связанных состояний над уровнем Ферми. Результаты численного расчета подтверждают сказанное выше. В тех случаях, когда имеется достаточно хорошее плато в зависимости от параметра γ , значения оболочечной поправки, полученные

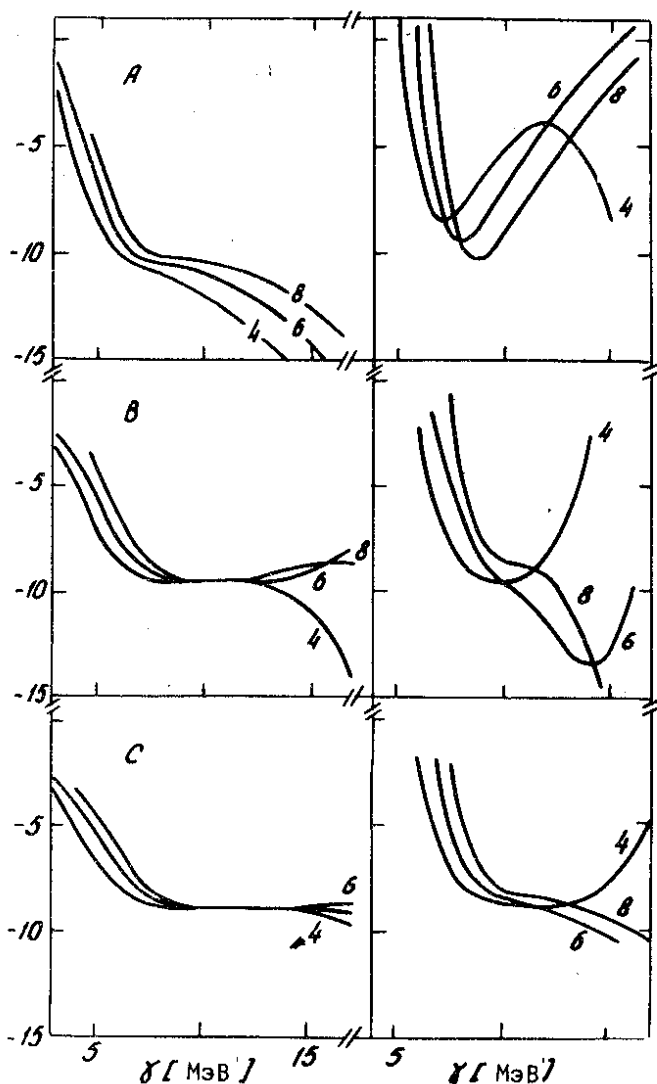


Рис.1. Слева: оболочечные поправки первого порядка $\delta^1 E$ в 7 МэВ для нейтронов с $N=126$, рассчитанные при помощи /18/ через вариацию плотности уровней $\delta g(\epsilon)$. Справа: те же величины, рассчитанные согласно /17/ через δn_λ , как в /1,2/. Рисунок А соответствует обычному вудс-саксоновскому потенциалу свинца - 208 с заменой сплошного спектра дискретными уровнями - резонансами с шириной $\Gamma=0$ до энергии 30 МэВ в соответствии с /1/. Рисунок В - учитываются только уровни в яме, но глубина потенциала увеличена на 30 МэВ ($V_0=75 \text{ МэВ}$). Рисунок С - то же самое для $V_0=95 \text{ МэВ}$. Около кривых указана степень корректировочного полинома M .

с определениями /17/ и /18/, совпадают, однако использованное в /1,2/ определение /17/ дает значительно менее устойчивые результаты.

Отметим также, что достоверность численного определения оболочечных энергий обычно легко проверяется сравнением с результатами, полученными другими методами расчета. Такое сравнение проводилось неоднократно различными авторами, и при этом не было обнаружено существенного различия. /Исключение составляют расчеты с усреднением по числу нуклонов N , которые соответствуют другому определению капельной модели и где обнаруживается общий сдвиг, обусловленный симметрией гамильтониана /13,14/. Простейшей проверкой является сравнение с расчетом для потенциальной ямы с углубленным дном. Как видно из рис. 1, углубление ямы расширяет спектр уровней около энергии Ферми в достаточной степени для того, чтобы определить $\delta^1 E$ с приемлемой точностью. При этом значение $\delta^1 E$ практически не зависит от глубины ямы при изменении ее в значительных пределах /сравните вставку А со вставками В и С на рис. 1/.

На рис. 2 показаны результаты сравнения двух определений в расчетах со спектром, экстраполированным в область положительных энергий при помощи диагонализации с ограниченным базисом /5,15,16/. Такой спектр обычно используется в расчетах оболочечных поправок для потенциала конечной глубины. Преимущества определения $\delta^1 E$ в форме $\delta_g^1 E$ /см. /18// очевидны и в этом случае. Кроме того, видно, что качество плато получается гораздо лучше, чем в аналогичных расчетах с уровнями - резонансами в сплошном спектре /1,2/ /сравните вставку А на рис. 1 с расчетом для $N=126$ в нижней части рис. 2/. В рассмотренных на рис. 2 случаях численная точность определения $\delta^1 E$ по формуле /18/ составляет около 0,1 МэВ и определение плато не составляет труда.

Полезный прием уточнения значения $\delta^1 E$ в условиях работы с традиционным определением $\delta_g^1 E$ был предложен в /12/, согласно которому $\delta_g^1 E$ находится из условия максимальной стационарности значения $\delta_g^1 E$ при вариации обоих параметров γ и M . Такой прием соответствует рекомендации общей теории аппроксимации конечного числа дискретных данных гладкими /полиномиальными/ функциями /17/.

Таким образом, вывод /1/ о недостаточной численной точности определения $\delta^1 E$ относится исключительно к самой работе /1/, где используется неподходящее выражение /17/ величины $\delta^1 E$. а выводы без оговорок распространяются на расчеты других авторов, в которых используется определение /18/.

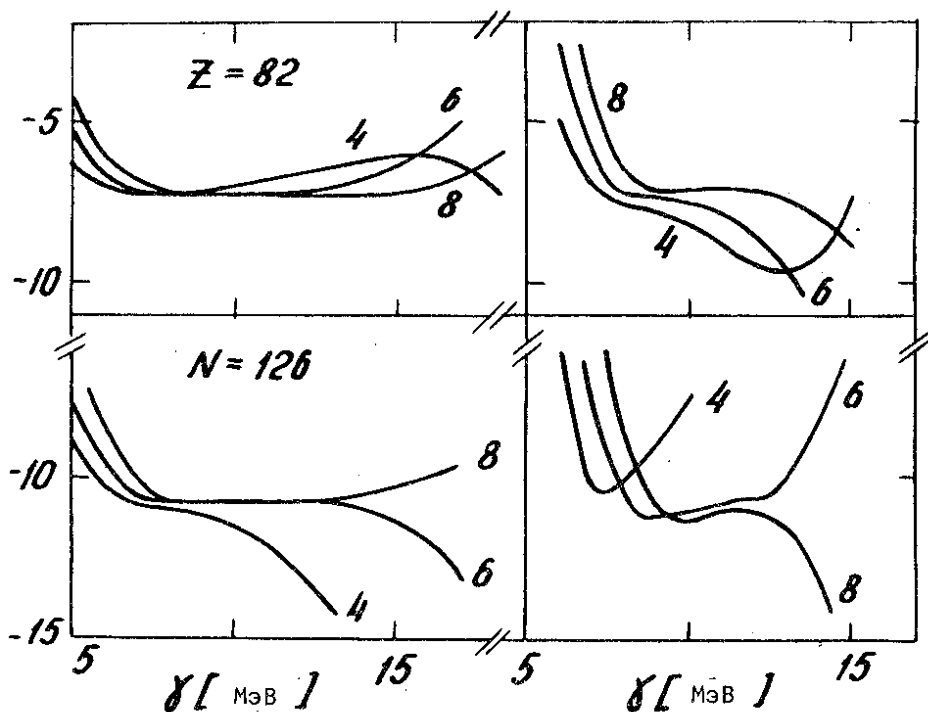


Рис. 2. Оболочечные поправки для нейтронов и протонов в вудс-саксоновской яме свинца - 208, полученные при помощи определения δ_g^1E /слева/ и δ_d^1E /справа, как на рис. 1/ с дискретным спектром, расширенным в область положительных энергий при помощи диагонализации с конечным базисом. Остальные обозначения - как на рис. 1.

3. ЭКСТРАПОЛЯЦИЯ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА

Сглаженные величины, вводимые в МОП, соответствуют усреднению по реальным связанным состояниям ядер, и вопрос о свойствах или учете состояний континуума не имеет прямого отношения к основным положениям метода. При усреднении одночастичных энергий ядер пришлось бы иметь дело со связанными состояниями ($\epsilon_\lambda < 0$), если бы для каждого значения числа нуклонов учитывалось изменение объема потенциальной ямы. Однако по понятным причинам расчеты проводятся с фиксированным одночастичным потенциалом. При этом некоторые уровни, отвечающие связанным состояниям в более тяжелом ядре, могут

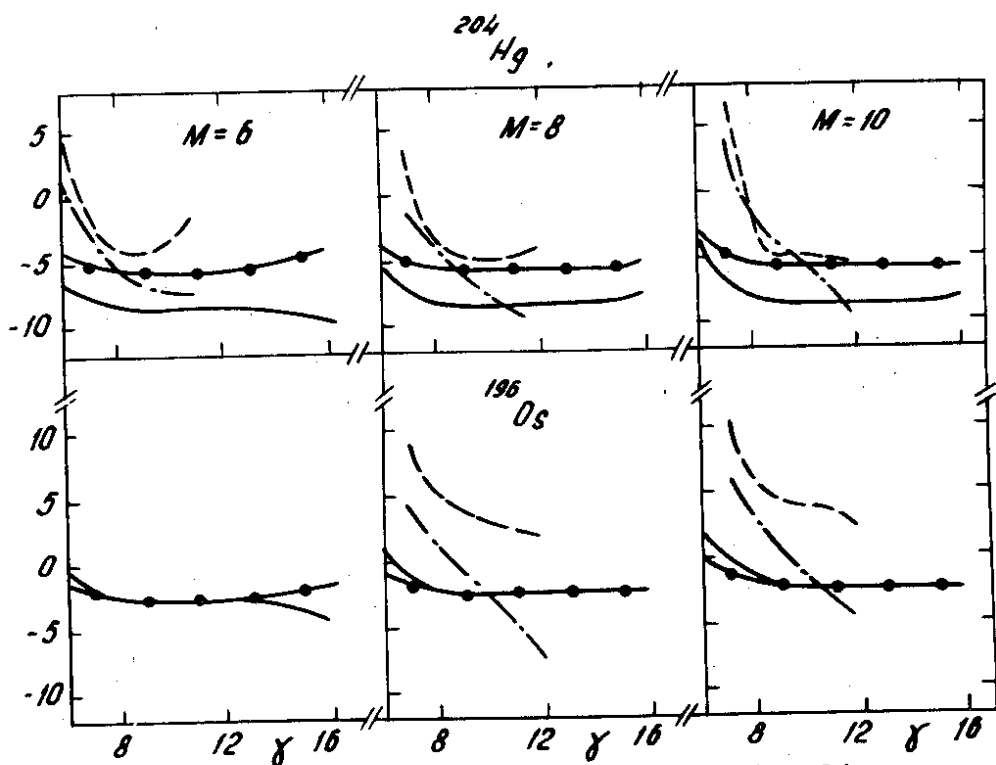


Рис. 3. Сплошные линии - оболочечные поправки /в МэВ/, рассчитанные согласно /18/ для нейтронов и протонов /линии с точками/ для ядер ^{204}Hg и ^{196}Os . Расчет выполнен в рамках традиционного МОП с потенциалом Вудса-Саксона и спектром, расширенным в область положительных энергий при диагонализации с параметром базиса $\hbar\omega_0 = 55A^{-1/3}$. Пунктирные и штрихпунктирные кривые - аналогичные результаты Бунатяна /1/. На рисунках указаны степени корректировочного полинома M , по оси абсцисс - параметр усреднения γ в МэВ.

отсутствовать в яме конечной глубины для меньшего числа нуклонов, и для корректного определения средних их приходится заменять некоторым дискретным спектром в области положительных энергий. Такая процедура была обоснована в /11/, см. также /14/. При замене усреднения одночастичной энергии в яме с меняющимся объемом усреднением в фиксированной яме возникает сравнительно малая погрешность порядка среднего расстояния между одночастичными уровнями. Отсюда сле-

дует, что с точки зрения МОР корректный учет континуума заключается в использовании таких уровней выше энергии Ферми, которые являются гладкой экстраполяцией связанных уровней в широких ямах, отвечающих более тяжелым ядрам. На первый план выдвигается условие гладкости расширенного спектра, причем экстраполированные уровни не обязательно должны точно соответствовать реальным резонансам или состояниям в фиксированной яме, близким к краю ямы. Простейший способ расширения спектра состоит в использовании диагонализации одночастичного гамильтониана с конечным потенциалом на осцилляторном базисе с ограниченным числом оболочек. Параметр базиса $\hbar\omega_0$ выбирается так, чтобы среднеквадратичный радиус $\langle r^2 \rangle$ для базиса вблизи края осцилляторного базиса /вблизи границы Ферми/ совпал со средним квадратом радиуса для приближенно прямоугольной вудс-саксоновской ямы /5.15/. Такое условие приводит к

$$\hbar\omega_0 = (51-55)/A^{1/3} \text{ МэВ.} \quad /26/$$

Это значение отличается от традиционной для модели Нильссона величины

$$\hbar\omega_0 = 41/A^{1/3} \text{ МэВ,} \quad /27/$$

которую находят /без достаточных к тому оснований/ из условия равенства среднеквадратичных радиусов для всех частиц в потенциальной яме. Различие возникает из-за существенного изменения размеров осцилляторной ямы с увеличением энергии уровня в яме. Большее значение $\hbar\omega_0$ приводит к лучшему согласию моментов инерции ядер, рассчитанным при помощи вудс-саксоновской и нильссоновской одночастичных моделей, что объясняется как результат лучшего сопряжения размеров ям. Из-за своей практической простоты метод диагонализации с ограниченным базисом получил всеобщее распространение.

На рис. 3 такие традиционные расчеты с экстраполированным в континуум спектром сравниваются с результатами /1/. Числа нуклонов на этом рисунке соответствуют именно тем случаям, когда согласно /1/ в расчетах по МОР якобы отсутствует какое бы то ни было плато в зависимости δ^{1E} от γ и численное определение оболочечной энергии невозможно. Видно, что такое утверждение относится только к расчетам /1/. Используя адекватное определение δ^{1E} и спектры одночастичных уровней, получают численное значение δ^{1E} с достаточной точностью. В приведенных на рис. 3 примерах плато определяется с точностью порядка сотни кэВ в широкой области изменения γ -в прямой противоположности с утверждением /1,2/.

Использование расширенного спектра в расчетах с традиционной процедурой М0П и потенциалами конечной глубины иногда обосновывается /18,19/ необходимостью учета плотности истинных состояний континуума, которая, как известно /20/, определяется через фазы рассеяния

$$g^{(+)}(e) = \frac{1}{\pi} \sum_l j_l (2j+1) \delta \delta_{l_j}(e) / \partial e. \quad /28/$$

В некоторых работах, в частности в /1,2/, в качестве приближения к /28/ сплошной спектр заменяется дискретными уровнями, расположенными при энергиях, отвечающих резонансам рассеяния. Производные фазы в /28/ заменяются суммами дельта - функций/.

Постановка вопроса о так называемом последовательном учете континуума не имеет отношения к делу, так как расчет оболочечных энергий никак не связан с задачей рассеяния. Более того, дополнение дискретного спектра полностью /28/ не может в принципе привести к однозначному определению сглаженной энергии, так как плотность состояний в континууме не является аналитическим продолжением плотности уровней в яме. Убедиться в этом можно, рассматривая квазиклассическое приближение для фазы рассеяния /21/.

Такое приближение соответствует главному члену томас-фермиевского приближения для плотности уровней в яме. Квазиклассическая плотность состояний в континууме

$$g^{(+)}(e) = \frac{4m}{\pi h^3} \int_0^{\infty} r^2 \frac{dr}{(\sqrt{2m(e-V(r))} - \sqrt{2me})} \quad /29/$$

имеет сингулярность при $e=0$ /точка ветвления/. В качестве примера приведем выражение для $\tilde{g}^{(+)}(e)$ для сферической ямы с резким краем:

$$g^{(+)}(e) = \frac{1}{3\pi} \left(\frac{2mR^2}{h^2} \right)^{3/2} \frac{1}{(\sqrt{e-V_0} - \sqrt{e})}. \quad /30/$$

Здесь m - масса нуклона, R - радиус, а V_0 - глубина ямы. В /29/ первое слагаемое является аналитическим продолжением томас-фермиевской плотности уровней, а второе - сингулярно при $e=+0$. Такая же сингулярность возникает в том случае, когда потенциал $V(r)$ плавно обращается в нуль на бесконечности. Как и в точной квантовой фазе, сингулярность при $e=0$ связана с особенностью фазы для нулевого момента

($\ell = 0$): В потенциале, который плавно обращается в нуль при $\gamma \rightarrow \infty$, например, в потенциале Вудса-Саксона, сингулярна также и томас-фермиевская плотность уровней связанных состояний в яме при $e = -0$.

Из-за сингулярности при $e = 0$ плотность состояний при сглаживании не воспроизводится с необходимой точностью, если точка $e = 0$ оказывается в существенной для усреднения по энергии области порядка $(2-3)\gamma$ около энергии Ферми. В результате в сглаженной энергии возникает компонента, которая существенно зависит от γ и возрастает по мере приближения энергии Ферми к краю ямы. Более детальный анализ этого явления будет проведен отдельно. Таким образом объясняются результаты численных расчетов Росса и Бхадури ^{/19/}, которые показали, что при учете континуума для получения плато даже весьма умеренного качества приходится учитывать энергию вплоть до $e = 60$ МэВ и состояния с угловыми моментами $\ell \leq 10$, причем качество плато не становится лучше при дальнейшем увеличении граничной энергии до 100 МэВ и $\ell \leq 20$. Эти результаты резко отличаются от того, что известно из расчетов с протяженным спектром в яме, различие легко объяснить наличием указанной сингулярности.

Расчет фаз рассеяния, необходимых для "последовательного учета континуума", является не только весьма сложной технической задачей, но вообще неоднозначен в случае деформированных ядер из-за зависимости фаз от ориентации ядра. Практически это означает невозможность расчетов оболочечных энергий в деформированных ядрах с так называемым полным учетом континуума. Замена же состояний континуума рядом отдельных резонансов, как в ^{/1,2/}, есть неоправданное приближение, которое не является ни аппроксимацией плотности континуума ^{/28/}, ни гладкой экстраполяцией дискретного спектра. Неудивительно, что при этом получается и худшее плато ^{/1/}. Подчеркнем, что проблема экстраполяции спектра вообще не возникает, если использовать определение процедуры сглаживания, адекватное условию расчетов с ямой конечной глубины ^{/11,14/}. Таким образом удастся найти значение $\delta^1 E$ с точностью порядка 0,5 МэВ даже в условиях, когда энергия Ферми всегда на несколько МэВ ниже края ямы, не используя в какой-либо форме спектр континуума. Эти независимые результаты также подтвердили достаточную точность традиционных расчетов энергии деформации тяжелых ядер.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что оболочечные энергии в методе оболочечных поправок вычисляются с точностью, достаточной для приложений метода. Выводы работ Бунатяна^{1,2/} о неудовлетворительной точности МОП являются следствием использования неадекватных методов расчета.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бунатян Г.Г. ЯФ, 1978, 28, с. 72; ОИЯИ, Р4-1151, Дубна, 1978.
2. Бунатян Г.Г. ЯФ, 1979, 29, с. 38; ОИЯИ, Р4-11301, Дубна, 1978.
3. Струтинский В.М. ЯФ, 1966, 3, с. 614.
4. Strutinsky V.M. Nucl.Phys., 1967; A95, p. 420; 1968, A122, p. 1.
5. Brack M. et al. Rev.Mod.Phys., 1972, 44, p. 320.
6. Strutinsky V.M. Nucl.Phys., 1975, A254, p. 197.
7. Bunatian G.G., Kolomietz V.M., Strutinsky V.M. Nucl. Phys., 1972, A188, p. 225.
8. Бунатян Г.Г. ЯФ, 1973, 17, с. 28.
9. Соловьев В.Г. Теория сложных ядер. "Наука", 1971.
10. Brack M., Quentin P. Phys.Lett., 1975, 56B, p. 421.
11. Strutinsky V.M., Ivanyuk F.A. Nucl.Phys., 1975, A255, p. 405.
12. Brack M., Pauli H.C. Nucl.Phys., 1973, A207, p. 401.
13. Ivanyuk F.A., Strutinsky V.M. Z.f.Phys., 1978, A286, p. 291; 1979, A290, p. 107.
14. Strutinsky V.M. 4th IAEA Symposium on Fission (Invited talk SM/241-C12), Jülich, FRG, 1979.
15. Damgaard J. et al. Nucl.Phys., 1969, A135, p. 432.
16. Boisterli M. et al. Phys.Rev., 1972, C5, p. 1050.
17. Худсон Д. Статистика для физиков. "Мир", 1970.
18. Lin W.F. Phys.Rev., 1970, C2, p. 871.
19. Ross C.K., Bhaduri R.K. Nucl.Phys., 1972, A188, p. 566.
20. Beth E., Uhlenbeck G.E. Physica, 1937, 4, p. 915.
21. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. "Физматгиз", 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 июля 1979 года.