

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

3828/82

16/8-82

P4-82-385

И.Ж.Петков, М.В.Стоицов

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА
ЛОКАЛЬНО-МАСШТАБНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ
В ТЕОРИИ ХАРТРИ-ФОКА

Направлено в журнал "Ядерная физика"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод Хартри-Фока /ХФ/ с эффективными силами, зависящими от плотности^{/1/}, стал одним из самых распространенных методов микроскопического описания основного состояния атомных ядер. Введение схематичных сил взаимодействия между нуклонами^{/2/}, и, особенно, сил Сkirма^{/3/}, намного упростило решение самосогласованных ХФ-уравнений для одночастичных волновых функций нуклонов в ядре.

ХФ-вычисления, однако, все еще остаются сложными для систем с большим числом частиц и особенно для описания взаимодействия между ядрами в физике тяжелых ионов. В последнее время все чаще возникает необходимость в вычислениях в рамках зависящего от времени метода ХФ, что снова делает актуальным вопрос о преодолении трудностей при решении стационарной ХФ-задачи.

Имея в виду эффективную природу сил, можно задаться вопросом: как такая трудоемкая процедура решения уравнения ХФ может быть упрощена без значительных нарушений точности полученных в методе ХФ результатов.

Метод Томаса-Ферми /ТФ/ в ядре^{/4/} является давно известной альтернативой методу ХФ, которая выражается в том, что одночастичные волновые функции локально заменяются на плоские волны с периодическими граничными условиями. Существует весьма обширный круг подходов^{/5/}, в которых на базе метода ТФ энергия ядерной системы представляется как функционал от локальной плотности $\rho(\vec{r})$. В каждом из них, однако, хорошее описание основных ядерных характеристик достигается за счет введения феноменологии, и следует подчеркнуть, что эти подходы не позволяют, определив $\rho(\vec{r})$, воспроизвести микроскопические характеристики основного состояния ядерной системы.

В настоящей работе метод локально-масштабного преобразования /МЛМП/^{/6/} применяется в теории ХФ для описания основного состояния А-частичной ядерной системы. Сущность метода/часть 2/ состоит в проведении локально-масштабного преобразования /ЛМП/ подходящим образом выбранной "модельной" многочастичной волновой функции $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$, представляющей детерминант Слеттера из одночастичных волновых функций "модельного" базиса $\{\phi_i\}$. Полученная в результате пробная волновая функция $\Psi_T(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$ превращает среднее значение гамильтониана H рассматриваемой

системы в энергетический функционал $E[f]$, который необходимо минимизировать. Таким образом система из A интегро-дифференциальных уравнений ХФ в МЛМП сводится к решению уравнения для функции ЛМП - $f(\vec{r})$.

В случае сферически-симметричных ядерных систем /часть 3/ $f(\vec{r})$ зависит только от модуля r вектора \vec{r} . При использовании эффективных сил Скирма /7/ для осцилляторной детерминантной орбиты \bar{O} плотность $\delta_f(\vec{r})$ энергетического функционала $E[f]$ становится обыкновенной алгебраической функцией от $f(r)$ и ее производных. Условие стационарности $E[f]$ определяет уравнение Эйлера-Лагранжа, для численного решения которого /часть 4/ применяется одна из модификаций метода стержневых сплайнов /8/, которая дает возможность определить неизвестную функцию $f(r)$ в аналитическом виде.

Полученные результаты для энергии связи, одночастичных энергий, плотностей нуклонов и геометрических характеристик ядер, как видно из части 5, вполне удовлетворительно воспроизводят точные ХФ-результаты. В части 6 коротко обсуждаются результаты и намечаются возможности их практического применения.

2. МЛМП В ТЕОРИИ ХФ

Рассмотрим A -частичную квантово-механическую систему с гамильтонианом H :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A T(\vec{r}_i) + \sum_{i<j}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \quad /1/$$

где одночастичный оператор

$$T(\vec{r}_i) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{r}_i}^2 + v(\vec{r}_i) \quad /2/$$

представляет сумму кинетической энергии и потенциальной энергии во внешнем поле $v(\vec{r})$ i -той частицы; $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ - двухчастичное взаимодействие i -той и j -той частиц. Пусть \mathcal{K} - полное гильбертово пространство динамических состояний рассматриваемой системы.

В МЛМП /8/ рассматривается группа \mathcal{F} ЛМП реального, трехмерного, векторного пространства $\mathbb{R}_3 = \{r = (r, r_0); r \in \mathbb{R}, r_0 \in \Omega\}$ и ее унитарное представление $\mathcal{U}_{\mathcal{F}} = \{U_{\vec{r}}; \vec{r} \in \mathcal{F}\}$ в пространстве \mathcal{K} . Операторы $U_{\vec{r}} \in \mathcal{U}_{\mathcal{F}}$, действующие на всякую функцию $\Psi \in \mathcal{K}$ по правилу:

$$U_{\vec{r}} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = D_1^{1/2} \times D_2^{1/2} \times \dots \times D_A^{1/2} \Psi(\vec{r}(\vec{r}_1), \vec{r}(\vec{r}_2), \dots, \vec{r}(\vec{r}_A)), \quad /3/$$

где $D_i = D(\vec{r}(\vec{r}_i)/r_i)$ - якобиан ЛМП:

$$D(\vec{r}(\vec{r})/r) = \frac{D(f_x, f_y, f_z)}{D(x, y, z)} = \frac{f^2}{r^2} \frac{\partial f}{\partial r}, \quad /4/$$

представляет произведение

$$U_{\vec{r}}(\vec{r}_1^*, \dots, \vec{r}_A^*) = \prod_{i=1}^A U_{\vec{r}}(\vec{r}_i^*) \quad /5/$$

одночастичных, линейных операторов $U_{\vec{r}}(\vec{r}_i^*)$, ($i=1, 2, \dots, A$), каждый из которых реализует ЛМП функции $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \in \mathcal{K}$ соответственно по \vec{r}_i -той координате. Тогда, согласно /6/, описание основного состояния рассматриваемой системы состоит в:

1/ выборе модельной волновой функции $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$, определяющей класс пробных волновых функций как орбиту:

$$\bar{O} = \{U_{\vec{r}} \bar{\Psi}; \vec{r} \in \mathcal{F}\} \quad /6/$$

на пространстве \mathcal{K} относительно группы ЛМП;

2/ построении энергетического функционала $E[f]$ как среднего значения гамильтониана H по состояниям $\Psi_{\vec{r}} \in \bar{O}$:

$$E[f] = \frac{\langle \Psi_{\vec{r}} | H | \Psi_{\vec{r}} \rangle}{\langle \Psi_{\vec{r}} | \Psi_{\vec{r}} \rangle}; \quad /7/$$

3/ решению уравнения для функции ЛМП, полученного из условия стационарности $E[f]$, при произвольных вариациях $f(\vec{r})$:

$$\frac{\delta E[f]}{\delta f(\vec{r})} = 0; \quad \vec{r} \in \mathcal{F}. \quad /8/$$

Пусть "модельная" волновая функция $\bar{\Psi} \in \mathcal{K}$ представляет A -частичный слеттеровский детерминант:

$$\bar{\Psi}(\vec{r}_1^*, \dots, \vec{r}_A^*) = (A!)^{-1/2} \det |\bar{\phi}_i(\vec{r}_j^*)|; \quad (i, j = 1, 2, \dots, A), \quad /9/$$

составленный из ортонормированных "модельных" одночастичных волновых функций $\bar{\phi}_i(\vec{r})$; ($i=1, 2, \dots, A$). Тогда всякая из детерминантных орбит, построенных, согласно /6/, на основе "модельной" волновой функции типа /9/, включает в себя многочастичные волновые функции:

$$\Psi_{\vec{r}}(\vec{r}_1^*, \dots, \vec{r}_A^*) = (A!)^{-1/2} \det |\phi_i(\vec{r}_j^*)|; \quad (i, j = 1, 2, \dots, A). \quad /10/$$

Здесь пробные одночастичные волновые функции:

$$\phi_i(\vec{r}) = U_{\vec{r}}(\vec{r}) \bar{\phi}_i(\vec{r}) = D(\vec{r}(\vec{r})/r) \bar{\phi}_i(\vec{r}) \quad /11/$$

удовлетворяют /поскольку $\vec{r} \in \mathcal{F}$ / условиям ортонормированности:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \langle \bar{\phi}_i | U_{\vec{r}}^{-1} U_{\vec{r}} | \bar{\phi}_j \rangle = \langle \bar{\phi}_i | \bar{\phi}_j \rangle = \delta_{ij}. \quad /12/$$

Имея в виду /5/, эффективный гамильтониан:

$$H[f] = U_{\vec{r}}^{-1}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) H U_{\vec{r}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A), \quad /13/$$

аналогично /1/, принимает вид:

$$H[f] = \sum_{i=1}^A T_f(\vec{r}_i) + \sum_{i < j}^A V_f(\vec{r}_i, \vec{r}_j), \quad /14/$$

где

$$T_f(\vec{r}_i) = U_{\vec{r}}^{-1}(\vec{r}_i) T(\vec{r}_i) U_{\vec{r}}(\vec{r}_i) \quad /14a/$$

и

$$V_f(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = U_{\vec{r}}^{-1}(\vec{r}_i) U_{\vec{r}}^{-1}(\vec{r}_j) V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) U_{\vec{r}}(\vec{r}_j) U_{\vec{r}}(\vec{r}_i) \quad /14b/$$

представляют, соответственно, эффективный одночастичный оператор i -той частицы и эффективное взаимодействие между i -той и j -той частицами системы. Тогда энергетический функционал /7/:

$$E[f] = \langle \bar{\Psi} | H[f] | \bar{\Psi} \rangle. \quad /15/$$

определенный над орбитой \bar{O} , имеет вид:

$$E[f] = \int d\vec{r} \bar{\Psi}^*(\vec{r}) \left[\sum_{i=1}^A T_f(\vec{r}_i) \bar{\rho}(\vec{r}_i, \vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^A \bar{\Psi}^*(\vec{r}_i, \vec{r}_j) V_f(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \bar{\rho}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) - \int \bar{\rho}(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') \right] \bar{\Psi}(\vec{r}). \quad /16/$$

В /16/ вместе с неизвестной функцией $f(\vec{r})$ присутствует еще параметрическая функция и "модельная" одночастичная дираковская матрица плотности:

$$\bar{\rho}(\vec{r}, \vec{r}') = A \int \bar{\Psi}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A = \sum_{i=1}^A \bar{\phi}_i^*(\vec{r}) \bar{\phi}_i(\vec{r}'), \quad /17/$$

диагональные элементы которой определяют "модельную" плотность частиц:

$$\bar{\rho}(\vec{r}) \equiv \bar{\rho}(\vec{r}, \vec{r}' = \vec{r}) = \sum_{i=1}^A |\bar{\phi}_i(\vec{r})|^2. \quad /18/$$

С помощью /16/ легко получить уравнение стационарности /8/, которое определяет вид функции $f(\vec{r})$. Интересно отметить, что вследствие универсальности МЛМП /6/ при варьировании в /16/ по искомой функции $f(\vec{r})$, функции $\bar{\rho}(\vec{r}, \vec{r}')$ и $\bar{\rho}(\vec{r})$ не затрагиваются, что весьма удобно при практических вычислениях.

В методе ХФ среднее значение гамильтониана H минимизируется в рамках подпространства $\mathcal{H}_{ХФ}$ представляющего объединение парно непересекающихся детерминантных орбит $\bar{O} \subset \mathcal{H}_{ХФ}$. Следова-

тельно, метод ХФ определяет точную нижнюю границу $E_{ХФ}$ для энергии E_f основного состояния системы в МЛМП, приложенном к произвольной орбите $\bar{O} \subset \mathcal{H}_{ХФ}$, и имеет место неравенство:

$$\bar{E} \geq E_f \geq E_{ХФ}, \quad /19/$$

где $\bar{E} = E[f = \bar{r}]$ представляет среднее значение H в состоянии, определяемом "модельной" волновой функцией /9/.

В рамках определенной уравнениями /6/ и /9/ орбиты между локальной плотностью $\rho(\vec{r})$ и функцией $f(\vec{r})$ существует взаимно-однозначное соответствие:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{f^2}{r^2} \frac{\partial f}{\partial r} \sum_{i=1}^A |\bar{\phi}_i(\vec{r})|^2. \quad /20/$$

Согласно /20/, даже в случае, когда "модельная" плотность /18/ сферически симметрична, МЛМП дает возможность описания основного состояния системы с деформированной плотностью распределения, поскольку в $\rho(\vec{r})$ могут присутствовать статические деформации, порождаемые деформацией метрики в пространстве \mathbb{R}_3 , подверженном ЛМП.

Дальнейшее практическое использование МЛМП в теории ХФ для конкретных физических систем связано с заданием явного вида гамильтониана /1/ и определением вида "модельного" одночастичного базиса $\{\bar{\phi}_i\}$. Эти два момента тесно связаны между собой, поскольку, согласно /19/, "модельная" функция $\bar{\Psi}$ должна адекватно отражать особенности конкретной физической системы. Так, например, для случая атомных систем одним из возможных выборов "модельного" базиса $\{\bar{\phi}_i\}$ является выбор водородных одночастичных волновых функций /9/. Для ядерных систем самым простым и удобным для применения является осцилляторный базис.

3. СФЕРИЧЕСКИЕ ЯДРА

В настоящей работе МЛМП в теории ХФ используется для описания основного состояния сферических ядер. Одночастичный "модельный" базис состоит из ортонормированных осцилляторных волновых функций /10/:

$$\bar{\phi}_i(\vec{r}) = \phi_{nl}(\vec{r}) Y_{nlj}(\vec{r}_0, \vec{\sigma}) \chi_q(\vec{r}) \quad /21/$$

$$Y_{nlj}(\vec{r}_0, \vec{\sigma}) = \sum_{m_l m_s} \left(l \frac{1}{2} m_l m_s | jm \right) Y_{l m_l}(\vec{r}_0) \chi_{m_s}(\vec{\sigma}) \quad /21a/$$

$$\phi_{nl}(\vec{r}) = \pi^{-3/4} a^{3/2} \left[\frac{2^{\ell-n+3} (2\ell+2n-1)!!}{[(2\ell+1)!!]^2 (n-1)!} \right]^{1/2} (a r)^{1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}(a r)^2\right] \times \quad /21b/$$

$$\times \sum_{k=0}^{n-1} (-2)^k \frac{(n-1)!}{(n-1-k)! k!} \frac{(2\ell+1)!!}{(2\ell+2k+1)!!} (a r)^{2k}.$$

Здесь индекс i включает набор квантовых чисел: заряд q , главное квантовое число n , орбитальный угловой момент ℓ , полный угловой момент j и магнитное квантовое число m , а $\alpha = (\frac{M\omega}{\hbar})^{1/2}$

является радиальным параметром осциллятора. Тогда уравнения /6/, /9/, /21/ определяют осцилляторную детерминантную орбиту \bar{O} , которой принадлежат пробные волновые функции $\Psi_f \in \bar{O}$, определенные равенствами /10/, /11/, /21/.

Для четно-четных сферических ядер спин-угловые функции /21а/ являются решениями уравнений ХФ, которые, согласно /19/, определяют точную нижнюю границу энергии в МЛМП, построенном с детерминантными орбитами в $\mathcal{H}_{ХФ}$. Тогда для \bar{O} в уравнении стационарности /8/ переменные разделяются, и функция $f(\vec{r})$ оказывается зависящей только от величины $r \in \mathbb{R}$ вектора $\vec{r} \in \mathbb{R}_3$. В этом случае якобиан /4/ МЛП пространства \mathbb{R}_3 , которое задается векторными функциями $\vec{f}(\vec{r}) = \vec{r}_0 f(r)$, имеет вид:

$$D \equiv D(f(r)/r) = \frac{f^2(r)}{r^2} \frac{df(r)}{dr} \quad /22/$$

Далее используем силы Скимра /7/ в гамильтониане /1/ /внешнее поле $v(\vec{r}) \equiv 0$ /. Для сил Скимра плотность $\mathcal{E}_f(\vec{r})$ энергетического функционала /16/:

$$E[f] = \int \mathcal{E}_f(\vec{r}) d\vec{r} \quad /23/$$

зависит от локальной плотности $\rho_n(\rho_p)$, спин-плотности $J_n(J_p)$ и плотности кинетической энергии $r_n(r_p)$ нейтронов /протонов/. Эти величины в \bar{O} зависят от "модельного" базиса /21/ и функции $f(r)$ следующим образом:

$$\rho(r) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2 = D \sum_i |\bar{\phi}_i^-(f)|^2, \quad /24/$$

$$J(r) = r^{-1} \sum_i (\phi_i^* \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} \phi_i) = D r^{-1} \sum_i \bar{\phi}_i^*(f) \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} \bar{\phi}_i^-(f), \quad /25/$$

$$r(r) = \sum_i |\vec{\nabla} \phi_i(r)|^2 = \frac{1}{2} \vec{\Delta} \rho - \sum_i \bar{\phi}_i^*(f) \theta_i(f, r) \bar{\phi}_i^-(f), \quad /26/$$

где

$$\theta_i(f, r) = D \left[\frac{1}{2} \frac{f'''}{f'} - \frac{1}{4} \frac{f''^2}{f'^2} + 2 \frac{f''}{f'} - \frac{\ell_i(\ell_i+1)}{r^2} + \frac{1}{2} (f'' + \frac{f'^2}{f'}) \frac{\partial}{\partial f} + f \cdot 2 \frac{\partial^2}{\partial f^2} \right], \quad /26а/$$

а штрихом обозначены производные по r . Суммирование в /24/-/26/ проводится по занятым нейтронным /протонным/ состояниям, зависящим соответственно от функций $\bar{\phi}_i^{(n)}$ ($\bar{\phi}_i^{(p)}$) и функций ЛМП f_n (f_p), что дает нейтронные /протонные/ плотностные величины в явном виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_f(r) = & \frac{\hbar^2}{2M} r + \frac{1}{2} t_0 \left\{ \left(1 + \frac{x_0}{2}\right) \rho^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right\} + \\ & + \frac{1}{4} (t_1 + t_2) \rho r + \frac{1}{8} (t_2 - t_1) (\rho_n r_n + \rho_p r_p) + \frac{1}{4} t_0 \rho_n \rho_p \rho + \\ & + \frac{1}{16} (t_2 - 3t_1) \rho \vec{\Delta} \rho + \frac{1}{32} (3t_1 + t_2) (\rho_n \vec{\Delta} \rho_n + \rho_p \vec{\Delta} \rho_p) + \\ & + \frac{1}{2} W_0 (\rho J' + \rho_n J'_n + \rho_p J'_p) + \mathcal{E}_C(r), \end{aligned} \quad /27/$$

где $\rho = \rho_n + \rho_p$, $J = J_n + J_p$, $r = r_n + r_p$. Символами t_0 , t_1 , t_2 , t_3 , x_0 и W_0 в /27/ обозначены параметры Скимра, а последний член:

$$\mathcal{E}_C(\vec{r}) = \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho_p(\vec{r}) \rho_p(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \quad /27а/$$

представляет плотность кулоновской энергии. Таким образом, при явном выражении /21/ и равенстве /22/-/26/, плотность /27/ энергетического функционала /23/ превращается в обыкновенную алгебраическую функцию от $f(r)$ и ее производных f' , f'' , f''' . Из условия стационарности /8/ получаем уравнения Эйлера-Лагранжа:

$$\sum_{m=0}^3 (-1)^m \frac{d^m}{dr^m} \frac{\partial \mathcal{E}_f(\vec{r})}{\partial f^{(m)}} = 0; \quad (v = f, n), \quad /28/$$

которые определяют функции f_n и f_p . Необходимые для решения уравнений /28/ граничные условия следуют из групповых свойств ЛМП в пространстве \mathbb{R}_3 и из взаимно-однозначной связи, существующей между плотностью $\rho_n(\rho_p)$ и функцией ЛМП $f_n(f_p)$.

Таким образом, описание основного состояния ядерной системы сводится к решению определенной на орбите \bar{O} системы уравнений /28/ для функции ЛМП. Получено значительное упрощение многочастичной задачи, поскольку в методе ХФ приходится решать систему из A связанных интегро-дифференциальных уравнений, каждое из которых по сложности сравнимо с /28/. Разумеется, это значительное упрощение стационарной ХФ-задачи имело бы смысл только при условии, что полученные в МЛМП результаты воспроизводят с удовлетворительной точностью результаты метода ХФ.

4. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МЛМП

В настоящей работе используется модификация метода стержневых сплайнов /8/ для решения полученных в МЛМП уравнений /28/. Метод стержневых сплайнов был предложен для решения задач на

собственные значения линейных дифференциальных уравнений высокого порядка. Однако он является эффективным вычислительным средством и в применении к уравнениям низкого порядка^{/11/}.

Рассмотрим для определенности одно из уравнений /28/. Искомое решение $f(r)$ на конечном интервале $X = [x_H, x_K]$ представляется в аналитическом виде $u(x)$ как произведение:

$$u(x) = S^{(3)}(x)p(x) \quad /29/$$

кубического интерполяционного сплайна:

$$S_n^{(3)} = a_n x^3 + b_n x^2 + c_n x + d_n, \quad /30/$$

где $n=1,2,\dots,N$ / N - число узлов в сетке $\{\bar{x}_n\}$ ^{/8/}, и стержня $p(x)=x$, который представляет решение рассматриваемого уравнения при $\gamma \rightarrow 0$. После того, как будут удовлетворены условия гладкого сшивания u, u', u'' на узлах сетки $\{\bar{x}_n\}$ и граничные условия для $f(r)$ при $\gamma \rightarrow 0$ и $\gamma \rightarrow \infty$, в искомом решении /29/ остаются как независимые только $M(M=N+1)$ из всех $4N$ коэффициентов сплайна /30/. Обозначим через $\{a_m\}$, $m=1,2,\dots,M$ совокупность этих неизвестных коэффициентов.

Согласно^{/8/}, их значения должны были бы определиться из условия, чтобы рассматриваемое дифференциальное уравнение было удовлетворено в точках интерполяционной сетки $\{\bar{x}_m\}$. Имея в виду, однако, что уравнение /28/ получено из условия стационарности энергетического функционала $E[f]$, который имеет сравнительно простую структуру, мы подставляем так дискретизированное решение /29/ прямо в выражения /22/-/27/ для $E[f]$. Тогда коэффициенты $\{a_m\}$ определяются из уравнений:

$$\frac{\partial E[a_1, a_2, \dots, a_M]}{\partial a_m} = 0, \quad (m=1,2,\dots,M). \quad /31/$$

Рассмотренные две схемы дискретизации решения /до и после вариации $E[f]$ / должны давать одинаковые результаты с увеличением числа N сплайнов в интервале X . Согласно вариационному методу Рунца^{/12/}, однако, уравнения /31/ дают возможность правильной физической интерпретации решений даже в случае малого числа M неизвестных коэффициентов $\{a_m\}$. Так, например, в случае $M=1$ и $a_1=b_1=0$ единственный неизвестный коэффициент a_1 совпадает с осцилляторным параметром a в "модельном" базисе /21/. В этом случае решение уравнения /31/ определяет наилучшее значение энергии \bar{E} /см. /19//, полученной в рамках осцилляторной модели оболочек.

В общем случае полученная нелинейная алгебраическая система уравнений /31/, определяющая нейтронную /протонную/ функцию ЛМП $f_n(f_p)$ в аналитическом виде, решается авторегуляризованным

итерационным процессом типа Гаусса-Ньютона^{/13/}. Вычисления проводились на ЭВМ IBM-370/145 в режиме с двойной точностью и на CDC-6500 для широкого круга ядер с параметрами Скирма^{/7/}.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Мы рассчитали энергию связи, одночастичные энергии, плотность нуклонов и геометрические характеристики ядер ^{18}O , ^{40}Ca , ^{90}Zr , ^{208}Pb , что дает ясное представление о возможностях МЛМП при описании основного состояния ядерных систем в приближении ХФ. Точные скирм-хартри-фоковские /СХФ/ результаты, полученные интегрированием уравнений ХФ в координатном пространстве, с которыми мы провели сравнение, приведены в работе^{/14/}. Для сравнения мы показываем также и наилучшие результаты, которые могут быть получены только в "модельной" функции гармонического осциллятора /ГО/.

Таблица 1

Энергия связи и радиусы ядер

	O^{16}			Ca^{40}			Zr^{90}			Pb^{208}		
	ГО	МЛМП	СХФ	ГО	МЛМП	СХФ	ГО	МЛМП	СХФ	ГО	МЛМП	СХФ
R_m	2,57	2,55	2,55	3,34	3,29	3,29	4,24	4,17	4,17	5,54	5,44	5,45
R_n	2,56	2,53	2,53	3,32	3,27	3,27	4,26	4,19	4,19	5,58	5,48	5,49
R_p	2,58	2,56	2,56	3,36	3,31	3,31	4,22	4,14	4,14	5,47	5,38	5,38
R_c	2,70	2,68	2,68	3,46	3,41	3,41	4,30	4,22	4,22	5,53	5,44	5,44
$-E$	128,2	130,9	131,5	331,5	343,6	345,6	740,1	786,1	792,9	1469	1624	1641

В табл.1 даны вычисленные значения среднеквадратичных радиусов /в Фм/ нейтронного (R_n), протонного (R_p), зарядового (R_c) распределения и массовый среднеквадратичный радиус R_m , а также полные энергии связи - E /МэВ/ рассматриваемых ядер. Из таблицы видно, что геометрические характеристики основного состояния в МЛМП воспроизводятся точно. На рис.1 изображена относительная ошибка $\delta_E/\%$, с которой воспроизводится полная энергия в МЛМП и в ГО. С увеличением числа нуклонов в системе увеличивается и ошибка δ_E , с которой воспроизводится $E_{ХФ}$. Но если в ГО эта ошибка с 3% для ^{18}O нарастает /почти линейно/, до 10-11% для $A \sim 208$, то в МЛМП максимальное отклонение

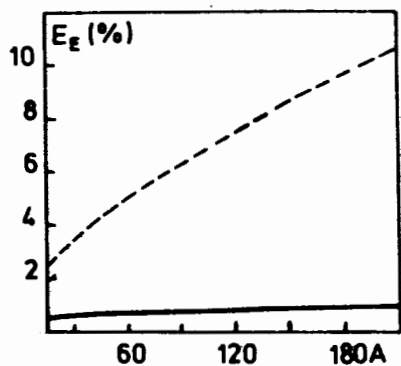


Рис.1. Относительная ошибка в полной энергии связи.

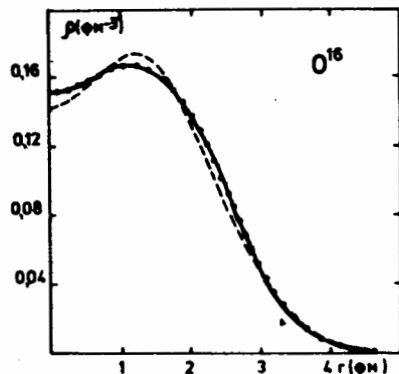


Рис.2. Распределение плотности нуклонов в ядре ^{16}O .

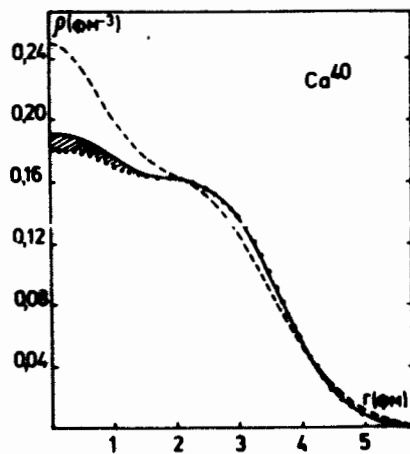


Рис.3. Распределение плотности нуклонов в ядре ^{40}Ca .

от $E_{\text{ХФ}}$, которое наблюдается для ^{208}Pb , равно лишь $\sim 1\%$. Это максимальное отклонение в МЛМП представляет только 17 МэВ, что можно считать абсолютно удовлетворительным совпадением, имея в виду абсолютное значение $-E_{\text{ХФ}}$ в этом случае /1641 МэВ/.

Типичные результаты, которые получаются для распределения плотности нуклонов, показаны на рис.2-4. В области легких

ядер (^{16}O) МЛМП /сплошная линия/ практически точно воспроизводит плотность $\rho_{\text{ХФ}}$ /обозначена точками/. Этот результат неудивителен, поскольку даже Г0 дает хорошее согласие с ХФ-результатами в этой области ядер 14 . Для более тяжелых ядер плотность Г0 /штрихованная линия/ для ядер ^{40}Ca и ^{90}Zr и особенно для тяжелого ^{208}Pb /рис.4/ сильно отличается от плотности, полученной методом ХФ. Тем не менее видно, что МЛМП удовлетворительно воспроизводит точные ХФ-результаты: место и амплитуду оболочечных осцилляций, хвосты плотностных распределений. Самое большое отклонение наблюдается в области $r \rightarrow 0$. Эта область, однако, при определении ядерных характеристик участвует с минимальным геометрическим весом /интегрирование с $r^2 dr$ /. Так, например, при описании экспериментов по рассеянию электронов

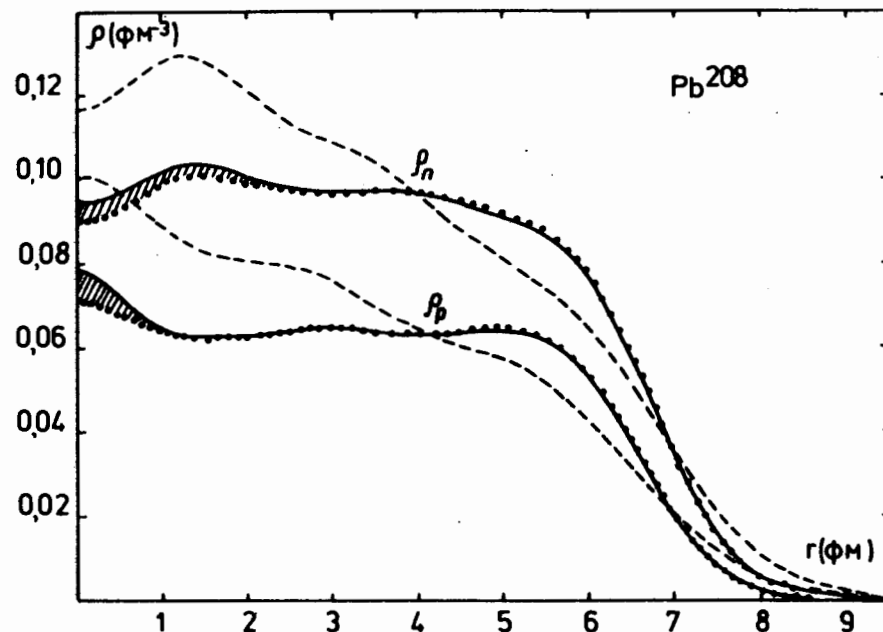


Рис.4. Протонное и нейтронное распределения плотности в ядре ^{208}Pb .

на ядрах заштрихованная область на рис.3 и 4 не дала бы существенного различия между формфакторами, определенными в МЛМП и в методе ХФ /15/.

В МЛМП удовлетворительно воспроизводятся и одночастичные энергии нуклонов в рассмотренных ядерных системах. В табл.2 и 3 показаны результаты /в МэВ/ для одночастичных энергий, занятых протонных и нейтронных состояний. Производит впечатление, что наилучшее согласие с точными ХФ результатами получается для состояний, близких к уровню Ферми. Имея в виду асимптотическое поведение решений /28/, этим фактом можно объяснить точное воспроизведение хвостов плотностных распределений /рис.2, 3 и 4/. Максимальное отклонение от полученных ХФ значений наблюдается в $1s$ и $1p$ -состояниях, которые для ядра ^{208}Pb достигают 1-2 МэВ. Сами экспериментальные данные /16/, однако, для этих состояний определяются с точностью $\pm 7-11$ МэВ, что еще раз показывает взаимную заменяемость результатов МЛМП и результатов метода ХФ.

Таблица 2

Одночастичные энергии протонов

$n l j$	Pb^{208}			Zr^{90}			Ca^{40}			O^{16}		
	ГО	МММ	СХФ	ГО	МММ	СХФ	ГО	МММ	СХФ	ГО	МММ	СХФ
1S 1/2	25,5	34,9	36,6	29,1	35,1	36,3	29,2	32,5	32,8	27,9	28,7	28,8
1P 3/2	27,2	31,8	33,1	28,4	30,2	30,8	23,8	24,2	24,2	16,3	16,7	16,8
4P 1/2	25,5	31,4	32,5	25,4	28,6	29,1	19,1	20,3	20,5	9,4	9,9	9,9
1d 5/2	25,8	27,7	28,4	23,6	23,7	23,9	14,1	14,3	14,4			
2S 1/2	20,2	25,1	24,0	15,2	18,7	17,6	4,6	8,0	7,9			
1d 3/2	23,2	26,6	27,0	18,9	20,0	20,1	7,0	7,2	7,3			
1f 7/2	22,0	22,6	22,9	15,7	15,8	15,9						
2p 3/2	14,4	18,3	17,1	5,7	8,6	7,8						
1f 5/2	18,4	20,1	20,3	9,4	9,3	9,6						
2p 1/2	12,7	16,9	16,0	3,0	6,2	6,1						
1g 9/2	16,2	16,7	16,7									
1g 7/2	11,6	12,2	12,5									
2d 5/2	7,7	10,6	9,7									
3S 1/2	3,2	7,6	6,8									
2d 3/2	5,0	8,0	7,7									
1h 11/2	9,0	9,0	9,9									

На рис. 5 показан типичный вид решений, полученных для функции ЛММ. Пунктирной линией обозначено тождественное преобразование $f(r) \equiv r$, которое генерирует модельную функцию Ψ орбиты $O \text{ с } K_{X\Phi}$. Отчетливо видно поведение $f(r) \sim r$ решений при $r \rightarrow 0$. При $r \rightarrow \infty$ асимптотическое поведение $f(r) \sim r^{1/2}$ воспроизводит правильное экспоненциальное поведение одночастичных волновых функций $\{\phi_j\}$.

Таблица 3

Одночастичные энергии нейтронов

$n l j$	Pb^{208}			Zr^{90}			Ca^{40}			O^{16}		
	ГО	МММ	СХФ	ГО	МММ	СХФ	ГО	МММ	СХФ	ГО	МММ	СХФ
1S 1/2	37,0	42,8	44,6	39,0	44,1	44,7	37,4	40,7	41,0	32,1	32,9	32,9
1P 3/2	36,6	39,5	40,9	35,9	37,7	38,0	31,7	32,1	32,2	20,3	20,8	20,8
1P 1/2	34,7	39,0	40,3	36,3	36,6	36,6	26,8	28,2	28,4	13,1	13,8	13,8
1d 5/2	34,0	35,2	36,2	29,7	30,1	30,3	21,9	22,1	22,2			
2S 1/2	29,6	33,1	32,5	22,7	25,9	25,5	12,5	15,8	15,7			
1d 3/2	31,1	34,1	34,7	25,0	26,6	26,9	14,5	14,8	14,9			
1f 7/2	29,7	30,1	30,6	21,5	21,8	21,9						
2P 3/2	23,9	26,5	25,4	13,7	16,2	15,8						
1f 5/2	25,7	27,7	28,0	14,8	15,4	15,8						
2P 1/2	21,9	25,1	24,2	10,7	13,7	13,7						
1g 9/2	23,9	24,1	24,5	12,1	12,8	12,9						
1g 7/2	17,7	19,9	20,2									
2d 5/2	17,1	19,0	18,1									
3S 1/2	13,4	16,4	15,6									
2d 3/2	14,0	16,4	15,9									
1h 11/2	16,9	17,6	17,7									
1h 9/2	10,6	11,0	11,5									
1i 13/2	9,2	10,3	10,5									
2f 7/2	10,2	11,3	10,6									
2f 5/2	6,1	7,4	7,4									
3p 3/2	6,3	8,0	7,5									
3p 1/2	4,6	6,5	6,4									

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты приложения МЛММ к осцилляторной детерминантной орбите $O \text{ с } K_{X\Phi}$ обнаруживают удивительное согласие с точными ХФ-результатами для основных состояний сферических ядер. При этом вместо системы большого числа интегро-дифференциальных уравнений ХФ решается только уравнение для функ-

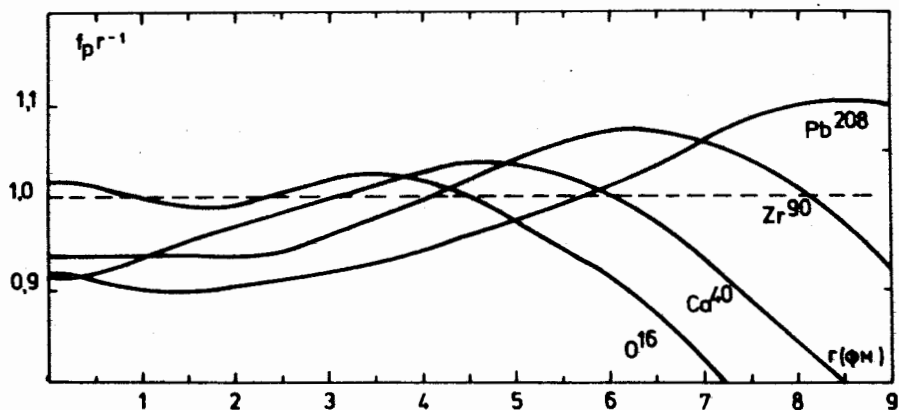


Рис.5. Кривая зависимости функции ЛМП от расстояния до центра ядра.

ции ЛМП. Таким образом для систематического исследования представляются доступными область тяжелых и сверхтяжелых ядер, деление ядер, вопросы физики тяжелых ионов и ряд других /существенно многочастичных/ задач, где исключительно трудно прямое использование результатов метода ХФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Brueckner K.A., Gammel J.L., Weitzner H. Phys.Rev., 1958, 110, p.431; Nemeth J., Vautherin D. Phys.Lett., 1970, 32B, p.561; Negele J.W. Phys.Rev., 1970, C1, p.2160; Banerjee P., Sprung D. Nucl.Phys., 1971, A168, p.273; Campi X., Strung D. Nucl.Phys., 1972, A194, p.401.
2. Brink D., Boeker E. Nucl.Phys., 1967, 91, p.1; Volkov A. Nucl.Phys., 1965, 74, p.33; Saunier G., Pearson J. Phys. Rev., 1970, C1, p.1353; Moszkowski S. Phys.Rev., 1970, C2, p.402.
3. Skyrme T. Phil.Mag., 1956, 1, p.1043; Nucl.Phys., 1959, 615, p.9.
4. Bethe H.A. Phys.Rev., 1968, 167, p.879.
5. Berg R., Willets L. Proc.Phys.Soc., 1955, A68, p.229; Kumar K., Le Couteur K., Roy M. Nucl.Phys., 1963, 42, p.529; Stock H. Nucl.Phys., 1975, A237, p.365; Holzwarth G., Eckart G. Z.Phys., 1977, A281, p.385; Lombard R. Ann. Phys., 1973, 77, p.380; Brueckner K.A. et al. Phys.Rev., 1968, 171, p.1188.

6. Петков И.Ж., Стоицов М.В. Доклады БАН, 1981, 34, с.1657; Петков И.Ж., Стоицов М.В. ОИЯИ, Р4-82-349, Дубна, 1982.
7. Vautherin D., Brink D. Phys.Lett., 1970, 32B, p.149.
8. Александров Л., Караджов Д. ЖВМ и МФ, 1980, 20, с.923.
9. Hall G. Proc.Phys.Soc., 1960, 75, p.575.
10. Айзенберг И., Грайнер В. Микроскопическая теория ядра. Атомиздат, М., 1976.
11. Александров Л., Дренска М., Караджов Д. ОИЯИ, Р5-80-751, Дубна, 1980.
12. Morse P., Feshbach H. Methods of Theoretical Physics. New York, 1953, part II.
13. Александров Л. ЖВМ и МФ, 1971, 11, с.36; ОИЯИ, Р5-7259, Дубна, 1973.
14. Vautherin D., Brink D. Phys.Rev., 1972, C5, p.626.
15. Лукьянов В.К., Поль Ю.С. ЭЧАЯ, 1974, 5, с.955.
16. James A. et al. Nucl.Phys., 1969, A138, p.145.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 мая 1982 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
D17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
D6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
D3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
D13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
D1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
D1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Петков И.Ж., Стойцов М.В. P4-82-385
Применение метода локально-масштабного преобразования в теории Хартри-Фока

Метод локально-масштабного преобразования применяется в теории Скимма-Хартри-Фока для описания основного состояния сферических ядер. Вместо системы большого числа интегро-дифференциальных уравнений для одночастичных волновых функций решается только уравнение для функции локально-масштабного преобразования. Для ряда ядер вычислены энергии связи, одночастичные энергии, плотность нуклонов и геометрические характеристики основного состояния. Полученные результаты вполне удовлетворительно воспроизводят точные хартри-фокские расчеты и могут применяться для систематического исследования в области тяжелых и сверхтяжелых ядер, деления ядер и вопросов физики тяжелых ионов, где исключительно трудно прямое применение результатов метода Хартри-Фока.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Petkov I.Zh., Stoitsov M.V. P4-82-385
The Application of the Local-Scale Transformation Method to the Hartree-Fock Theory

The local-scale transformation method is applied to the Skyrme-Hartree-Fock theory for the description of the ground state of the spherical nuclei. Instead of the system of large number of integro-differential equations for the one-particle wave-functions, we solve just one equation for the function of the local scale transformation. For a number of nuclei the binding energy, the one-particle energies, the nucleon densities and the geometrical characteristics of the ground state are calculated. The results agreeably well reproduce the exact ones from the Hartree-Fock theory. The method may be applied for a systematical investigation in the field of heavy and super-heavy nuclei, nuclear fission and heavy ion physics, where the direct application of the Hartree-Fock method is very difficult.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.