

2172-05

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

5517/83

P4-83-547

Н.Богданова, А.А.Широкова, К.В.Шитикова

**ОБ АППРОКСИМАЦИИ ПЛОТНОСТЕЙ
ОСНОВНЫХ И ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ
ЛЕГКИХ ЯДЕР**

1983

§1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время появилось значительное число теоретических исследований /1, 2/, в которых строится потенциал взаимодействия тяжелых ядерных частиц. Это направление активно развивается в связи с тем, что такой потенциал используется в описании угловых распределений в упругом и неупругом столкновениях тяжелых ионов /3/.

В работе /4/ исследован потенциал двукратной свертки с силами Скирма для совокупности более легких, чем кислород, частиц. При этом использованы плотности распределения ядерного вещества, полученные в методе гиперсферических функций /5/ и оттестированные по совокупности экспериментальных данных для основных и возбужденных состояний легких ядер.

Для построения потенциала столкновения тяжелых ионов с силами конечного радиуса необходимо иметь плотности ядерного вещества в аналитическом виде. В связи с этим возникла задача аппроксимации численных плотностей, полученных в методе гиперсферических функций как для основных, так и для возбужденных состояний ядер. Такие плотности можно использовать при построении ядерного потенциала для неупругих сечений реакций с тяжелыми ионами /6/.

В этой работе проведена аппроксимация численных плотностей, полученных в методе гиперсферических функций, несколькими аналитическими выражениями. Первый параграф носит вводный характер, во втором параграфе кратко изложен формализм метода гиперсферических функций и способ получения плотностей ядер в численном виде, в третьем - предложены алгоритмы аппроксимаций плотностей метода гиперсферических функций, в заключении обсуждаются результаты расчета и перспективы их применения в различных физических задачах.

§2. ФОРМАЛИЗМ МЕТОДА ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

В методе гиперсферических функций волновая функция ядра ищется в виде разложения по стандартным гиперсферическим гармоническим полиномам:

$$\psi(1, 2, \dots, A) = \rho^{-\frac{3A-4}{2}} \sum_{k, \gamma} X_{k, \gamma}(\rho) Y_{k, \gamma}(\theta_i).$$

/1/

$$\int X_{k, \gamma}^2(\rho) d\rho = 1.$$

и система уравнений для нахождения собственных функций и собственных значений записывается следующим образом:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{L_k(L_k+1)}{\rho^2} - \frac{2m}{h^2} (E + W_{k\gamma}^{k\gamma}(\rho)) \right\} \chi_{k\gamma}(\rho) =$$

$$= \frac{2m}{h^2} \sum_{k'\gamma' \neq k\gamma} W_{k'\gamma'}^{k'\gamma'}(\rho) \chi_{k'\gamma'}(\rho), \quad /2/$$

где $W_{k\gamma}^{k\gamma}(\rho)$ - матричные элементы потенциальной энергии нуклон-нуклонного взаимодействия:

$$V = \sum_{i < j}^A V(r_{ij}), \quad V(r_{ij}) = f(r_{ij}) W_{\sigma\tau}.$$

После решения системы /2/ находят собственные функции и собственные значения. Далее эти функции используются для построения необходимых матричных элементов.

В этом случае плотность распределения частиц для ядер с $A = 4 \div 16$ имеет следующий вид:

$$n_{ij}(r) = \frac{16 \Gamma(\frac{5A-11}{2})}{\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{5A-14}{2})} \int_0^{\infty} \frac{(\rho^2 - r^2)^{\frac{5A-16}{2}}}{\rho^{5A-13}} \chi_i(\rho) \chi_j(\rho) d\rho +$$

$$+ \frac{8(A-4)}{\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{5A-16}{2})} \int_0^{\infty} \frac{r^2 (\rho^2 - r^2)^{\frac{5A-16}{2}}}{\rho^{5A-13}}, \quad /3/$$

и средний квадратичный радиус записывается как

$$\bar{R}_{ii}^2 = \langle r_{ii}^2 \rangle = \frac{\int n_{ii}(r) r^4 dr}{\int n_{ii}(r) r^2 dr}, \quad /4/$$

при этом плотность нормирована следующим образом:

$$4\pi \int n(r) r^2 dr = A.$$

В такой схеме расчета в работе /5/ были получены плотности распределения вещества для ряда легких ядер в численном виде. Ниже излагаются алгоритмы аппроксимации этих плотностей различными аналитическими выражениями.

§3. МЕТОД АППРОКСИМАЦИИ ПЛОТНОСТЕЙ

а/ В качестве одного из способов аппроксимации был выбран метод наименьших квадратов с применением ортонормированных полиномов на конечном множестве с индивидуальными весами. Алгоритм программ разработан в /7/ на основе работы Форсайта /8/, в которой содержится доказательство рекуррентного соотношения между полиномами j -, $j-1$ -, $j+1$ -го порядка. В работах /7/ эти утверждения расширены на случай произвольных положительных весов при стандартизации набора полиномов к единичным нормам и дополнительном доказательстве теорем о конечности и полноте системы.

Несмотря на давнюю известность основных положений метода и некоторые программные реализации, до сих пор не было сведений об использовании его в практике решения физических задач. В работах /7/ показаны достоинства этой аппроксимации по отношению к наиболее распространенному фитированию обычными полиномами, а также делается вывод о том, что этот подход расширяет класс решаемых задач на ЭВМ и является существенным условием нахождения решения.

Мы искали плотности основных и возбужденных состояний в виде

$$\rho(r) = e^{-\frac{r^2}{2}} \left(\sum_{i=0}^n c_i P_i(r) \right) = e^{-\frac{r^2}{2}} \left(\sum_{i=1}^n a_i r^i \right), \quad /5/$$

где c_i - коэффициенты в ортогональном разложении, a_i - коэффициенты в обычном разложении.

По сравнению с широко применяемой формулой гармонического осциллятора

$$\rho(r) = \sum_{i=0}^n a_i e^{-\frac{r^2}{2}} \frac{r^{2i}}{b^{2i}} \quad /6/$$

в формуле /5/ содержатся члены с нечетными степенями r , что открывает новые степени свободы. Веса

$$W_i = \frac{1}{[F(r_i, a_0, \dots, a_n) - F_{T1}]^2}, \quad /7/$$

определяющие ортонормированность

$$\sum P_{j\ell}(r_\ell) W_i(r_\ell) P_k(r_\ell) = \delta_{jk}, \quad /8/$$

были подобраны с учетом поведения аппроксимированной функции в середине и на конце интервала.

Таблица 1

Параметры a_i плотностей для основных состояний ядер ^{12}C и ^{16}O , рассчитанных по формуле /5/

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9
^{12}C										
$n=4$	0,3345	-0,1418	-0,3239	0,4353	0,3933					
$n=5$	0,3349	-0,1552	-0,3280	0,4954	0,3978	-0,0521				
$n=6$	0,3263	-0,1631	-0,1542	0,5308	-0,1031	-0,0828	0,3557			
$n=7$	0,3271	-0,1953	-0,1691	0,8110	-0,0620	-0,679	0,3252	0,3563		
$n=8$	0,3268	-0,1956	-0,1599	0,8139	-0,1109	-0,685	0,4073	0,3599	-0,0426	
$n=9$	0,3267	-0,1923	-0,1579	0,7674	-0,1218	-0,508	0,4255	0,1156	-0,0520	0,1119
^{16}O										
$n=4$	0,4215	-0,2941	-0,5356	0,3452	0,2308					
$n=5$	0,4258	-0,4329	-0,5775	0,9693	0,2778	-0,5409				
$n=6$	0,4215	-0,4369	-0,4902	0,9871	0,0251	-0,5563	0,1787			
$n=7$	0,4222	-0,4662	-0,5039	0,1243	0,0645	-0,1100-10	0,1509	0,3252		
$n=8$	0,4205	-0,4684	-0,4431	0,1262	-0,2591	-0,1140-10	0,6940	0,3491	-0,2816	
$n=9$	0,4205	-0,4702	-0,4442	0,1288	-0,2530	-0,1239-10	0,6838	0,4861	-0,2763	-0,0627

Таблица 2

Параметры a_i плотностей для возбужденных состояний ядер ^{12}C и ^{16}O , рассчитанных по формуле /5/

f_{22}	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9
$n=4$	0,4383	-16,27	-42,01	75,45	106,5					
$n=5$	0,8891-10	15,37	-32,46	-66,82	95,76	123,3				
$n=6$	0,1891	12,43	32,45	-53,60	92,17	111,9	132,9			
$n=7$	0,4645	0,3575	26,87	51,43	-76,00	-111,5	121,5	133,5		
$n=8$	0,1255-10	0,1340	-0,7248	42,88	71,04	-93,29	-125,3	122,7	127,9	
$n=4$	0,5685	0,7814	-0,6363	0,0485	0,3423					
$n=5$	0,5671	0,1245	-0,6233	-0,1453	0,3277	0,1680				
$n=6$	0,5683	0,1256	-0,6461	-0,1499	0,3938	0,1720	-0,0467			
$n=7$	0,5669	0,1864	-0,6180	-0,6795	0,3123	0,1298-10	0,0109	-0,6733		
$n=8$	0,5701	0,1904	-0,7309	-0,7145	0,9137	0,1872-10	-0,9985	-0,7178	0,5233	
$n=9$	0,5697	0,2158	-0,7151	-0,1075	0,8297	0,2789-10	-0,8574	-0,2612-10	0,4502	0,8677

б/ В качестве другого вида аппроксимации плотностей была выбрана формула

$$\rho(r) = \sum_{i=0}^3 a_i \frac{r^{2i}}{b_i^{2i}}, \quad /9/$$

введенная по аналогии с аналитическим выражением для плотности в модели гармонического осциллятора /6/, но в отличие от нее в формулу /9/ входят различные осцилляторные параметры, а также члены с более высокими степенями r . На языке оболочечной модели это означало бы учет примеси более сложных конфигураций. Алгоритм программы FUMILI для расчета плотности по формуле /9/ основан на методе наименьших квадратов. В качестве начальных данных были использованы параметры из работы /9/. Веса

$$W_i = \frac{1}{[F(r_i, b_{hi}, a_i) - F_{Ti}]^2} = \frac{1}{0,01 \sqrt{F_{Ti}}} \quad /10/$$

подбирались таким образом, чтобы отклонения от численных плотностей, полученных в методе гиперсферических функций, не влияли на значение среднего квадратичного радиуса ядра.

54. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Мы провели расчеты плотностей легких ядер ${}^4\text{He}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{12}\text{C}$ и ${}^{16}\text{O}$. Изучались плотности как основных, так и возбужденных состояний ядер, а также переходные плотности.

На рисунке показаны плотности ядер ${}^{12}\text{C}$ и ${}^{16}\text{O}$ в методе гиперсферических функций /5/, которые мы аппроксимировали в этой работе.

В табл.1 и 2 даны параметры a_i плотности для основных и возбужденных состояний ядер ${}^{12}\text{C}$ и ${}^{16}\text{O}$, рассчитанной по формуле /5/. Численные оценки показали, что эта формула дает хорошую аппроксимацию для $4 \leq n \leq 11$. Очень удобными оказались веса

$$W_i = \frac{1}{\xi_i^2} = (r_n^2 + 1 - i)^{-1}, \quad /11/$$

где $|\xi_i|$ - ошибки. Таким образом, коридор ошибок уменьшается линейно с увеличением номера точки.

Для сравнения с численными плотностями приведена табл.3, в которой даны относительные погрешности расчетов начиная с 40-й точки. Можно отметить, что:

1/ для $n = 4$ или $n = 5$ относительная погрешность в большинстве случаев меньше 3%;

2/ для $n = 9$ относительная погрешность меняется в интервале $0,01\% < \delta < 1,73\%$;

Таблица 3
Относительные погрешности расчетов /R = 8 фм/ в %
начиная с 40-й точки

№ точ.	$\rho^{16}\text{O}$		$\rho^{12}\text{C}$	
	ρ_{11} $n=5$	ρ_{22} $n=9$	ρ_{11} $n=4$	ρ_{22} $n=9$
40	0,38	0,16	1,82	0,43
41	2,88	0,12	1,91	0,32
42	1,42	0,04	1,81	0,09
43	0,44	0,07	0,16	0,18
44	2,45	0,17	1,19	0,41
45	4,27	0,21	0,71	0,50
46	5,48	0,15	0,23	0,36
47	5,59	0,09	2,54	1,65
48	3,92	0,21	0,68	0,47
49	0,46	0,26	1,04	0,57
50	0,80	0,20	1,34	0,43
			3,76	0,09
			8,79	0,89
			6,40	0,04
			14,90	0,02
			19,20	0,07
			20,30	0,09
			18,7	0,07
			14,7	0,01
			7,9	0,06
			2,0	0,08
			16,0	0,37
			9,75	0,09
			1,73	0,09
			1,29	0,89
			0,60	0,04
			0,12	0,02
			0,63	0,07
			0,80	0,09
			0,59	0,07
			0,12	0,01
			0,35	0,06
			0,45	0,08
			0,23	0,37

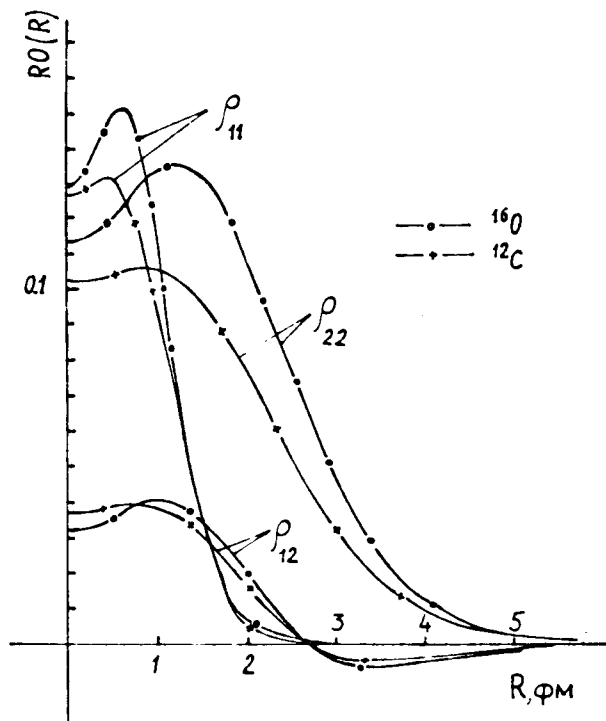
Параметры a_i и b_i плотности основных, возбужденных и переходных состояний ядер ${}^4\text{He}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{12}\text{C}$, ${}^{16}\text{O}$, рассчитанной по формуле [9]

A	a_0	b_0	a_1	b_1	a_2	b_2	a_3	b_3
ρ_{11}	4	0,2560	1,3990	0,31137	0,8500			
	6	0,1333	1,9800	0,6014	1,3800			
	12	0,1270	2,0436	8,3435	1,7462			
	16	0,1293	1,9915	13,6032	1,7553			
ρ_{22}	4	0,0527	1,4574	-1,8936	1,1624	-0,4072	0,4998	0,9380
	6	0,0608	3,1054	-5,2532	2,6661	-9,7852	1,0582	-1,0183
	12	0,1026	2,4160	3,5118	2,1030	1,7105	0,7399	0,9628
	16	0,1127	2,3430	9,0819	1,9188	1,6572	0,7429	0,8957
ρ_{12}	4	0,1122	1,9190	7,8232	0,8653	-1,4145	0,5181	-0,3207
	6	0,0527	2,8205	14,3012	1,2326	-2,0896	0,7323	-0,7558
	12	0,0373	3,9338	1,5133	1,4238	-1,9665	0,7663	-1,8757
	16	0,0320	4,5300	7,0310	1,4500	-1,8198	0,7510	-5,8530

Таблица 5

Относительные погрешности расчетов начная с 40-й точки
/R = 8 Фм/ в %

№ точ.	$\delta\rho_{11}$		$\delta\rho_{12}$		$\delta\rho_{22}$	
	${}^{12}\text{C}$	${}^{16}\text{O}$	${}^{6}\text{Li}$	${}^{12}\text{C}$	${}^{16}\text{O}$	${}^{6}\text{Li}$
40	3,0	6,2	10,2	8,4	7,9	12,3
41	3,4	7,4	17,4	11,3	10,4	15,1
42	3,2	8,3	23,1	15,8	14,6	19,6
43	2,1	9,5	27,5	18,2	18,3	24,2
44	0,2	11,2	32,0	24,0	23,5	28,5
45	2,6	16,8	36,4	28,1	27,8	32,1
46	6,6	19,1	40,1	32,3	31,2	36,3
47	12,5	20,5	45,4	37,5	36,9	39,7
48	20,6	31,4	49,2	41,2	42,4	43,2
49	30,5	42,6	52,0	46,7	47,1	49,6
50	44,5	51,2	54,0	50,1	51,4	53,1
						9,7
						12,5
						17,2
						21,3
						25,8
						30,4
						34,2
						37,6
						41,1
						45,8
						50,2
						7,2
						9,4
						12,5
						15,7
						19,8
						24,3
						29,2
						34,6
						38,1
						43,8
						48,2



Рассчитанные в методе гиперсферических функций плотности ядер ^{12}C и ^{16}O , которые мы аппроксимировали.

3/ выбранные нами веса, зависящие линейно от номера точки по формуле /11/, могут успешно использоваться, так как не замечается увеличения относительной погрешности к концу интервала.

Таким образом, формула /5/ с хорошей точностью описывает плотность ядра при $p \geq 4$.

В табл.4 даны параметры a_i и b_i плотности основных, возбужденных, а также переходных состояний ядер ^4He , ^6Li , ^{12}C и ^{16}O , рассчитанной по формуле /9/. Сравнение с численными плотностями из работы /5/ приведено в табл.5.

Для радиусов величиной от 0 до 8 фм относительные погрешности плотности малы /порядка 1-5%/. Однако начиная с точки $R = 8$ фм до 10 фм погрешности возрастают до 30-50%. Абсолютные значения плотности в этих точках порядка 10^{-5} и 10^{-10} соответственно. При проведении расчетов различных физических величин, таких, как средний квадратичный радиус, например, или потенциалы двойной свертки, плотность входит в расчет интегралов с весовым множителем R^2 . В связи с этим в точках $R = 8$ и 10 фм значения плотностей отличаются на 4 порядка /порядки 10^4 и 10^8 соответ-

венно/, так что вклад периферических частей для тех значений R , где ошибки велики, крайне мал. В качестве примера в табл.6 приведены значения среднего квадратичного радиуса для двух наборов параметров плотностей ядра ^4He :

- а/ параметров, приведенных в табл.4,
- б/ параметров с другим весовым множителем,

$$W_i = \frac{1}{r_i^4 \sqrt{F_{T_i}}},$$

дающим низкие погрешности /~5%/ на конце интервала 8 ± 10 фм. Из таблицы видно, что улучшение плотности на интервале от 8 до 10 фм приводит к заметному сдвигу кривой радиальной зависимости плотности на интервале от 0 до 8 фм, что влечет за собой изменение среднего квадратичного радиуса ядра во втором знаке.

Таблица 6

\bar{R}	\bar{R}_1	\bar{R}_2
1,728	1,740	1,980
	а/	б/

Полученные нами результаты для ряда легких ядер могут быть использованы в дальнейшем при расчетах различных физических величин, таких, как упругие и неупругие формфакторы рассеяния электронов, ядерные потенциалы столкновения тяжелых ионов, и ряда других.

Авторы считают своим приятным долгом выразить глубокую благодарность д-ру физико-математических наук В.В.Пашкевичу за полезные советы и помощь в разработке алгоритмов программ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Brink D.M., Satchler G.R. J.Phys.G: Nucl.Phys., 1981, 7, p.43-52.
2. Sinha B., Moskovski S.A. Phys.Lett., 1979, 81B, p.288-194; Bshaza B., Panda K.S., Satpathy R.K. Phys.Rev., 1979, 20C, p.685-692.
3. Sinha B. Phys.Rev.Lett., 1980, 44, p.1207-1210.

4. Dymarz R., Molina J.L., Shitikova K.V. J.Phys., 1981, A299, p.245-249.
5. Буров В.Д. и др. ОИЯИ, P4-12758, Дубна, 1979.
6. Youngbloud D.H. et al. Phys.Rev., 1981, 23C, p.1997-2007; Lebrun D. et al. Phys.Lett., 1980, 97B, p.358-362.
7. Гаджоков В., Богданова Н. ОИЯИ, P11-12860, Дубна, 1979; Гаджоков В., Богданова Н. ОИЯИ, P11-80-122, Дубна, 1980; Гаджоков В., Богданова Н. ОИЯИ, P11-80-781, Дубна, 1980.
8. Forsythe G.E. J.Soc.Industr.Appl.Math., 1957, 5, p.74-78.
9. Satchler G.R., Love W.G. Phys.Lett., 1976, vol.65B, p.415-418.

Богданова Н., Широкова А.А., Шитикова К.В. P4-83-547
 Об аппроксимации плотностей основных и возбужденных состояний
 легких ядер

С целью построения потенциала столкновения тяжелых ионов с силами конечного радиуса аппроксимировались численные плотности ядерного вещества, полученные в методе гиперсферических функций. Предложены различные алгоритмы аппроксимаций плотностей легких ядер, проводимых по методу наименьших квадратов. Найдены параметры плотностей для основных и возбужденных состояний ядер ${}^4\text{He}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{12}\text{C}$ и ${}^{16}\text{O}$. Они могут быть использованы в расчетах упругих и неупругих формфакторов рассеяния электронов, ядерных потенциалов столкновения тяжелых ионов.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Bogdanova N., Shirokova A.A., Shitikova K.V. P4-83-547
 On Density Approximation of Ground and Excited States
 of Light Nuclei

For constructing the folding potentials and finite-range effective nucleon-nucleon forces the nuclear matter distribution obtained in the method of hyperspherical functions is approximated. Different algorithms of nuclear matter approximation are proposed which are calculated by the least-square method. The parameters are found of nuclear matter for ground and excited states of nuclei: ${}^4\text{He}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{12}\text{C}$ and ${}^{16}\text{O}$. These may be used for calculation, e.g., of the binding energy, rms radii, elastic and inelastic form factors, folding potentials in a system of interacting heavy ions.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой

Рукопись поступила в издательский отдел
 27 июля 1983 года.