

УДК 539.142.3.+539.143.4

К ТЕОРИИ ОБОЛОЧЕЧНОЙ СТРУКТУРЫ ЯДЕР. I

В. М. Коломиец,
Б. Д. Константинов
В. М. Струтинский,
В. И. Хворостьянов
Институт ядерных исследований
АН УССР, Киев

Формулируется модель оболочечных поправок для описания осцилляций масс ядер и других явлений, связанных с нуклонными оболочками. Малым параметром в теории является отклонение истинного распределения нуклонов от статистически усредненного распределения. Показана связь оболочечных осцилляций масс ядер с оболочечными эффектами в пространственном распределении нуклонов.

A shell correction model is formulated in order to describe oscillations of nuclear masses and other phenomena related to nucleon shells. In the theory, deviation of the actual nucleon distribution from statistically averaged one plays a role of a small parameter. Connection between the shell oscillations of nuclear masses and shell structure effects in the spatial density distribution of nucleons is discussed.

1. ВВЕДЕНИЕ

Обнаружение оболочечной структуры ядер имело важное значение в развитии ядерной физики, и вполне естественно, что это явление привлекало большое внимание. Однако до последнего времени количественная теория оболочечной структуры практически не была развита. Собственно, отсутствовало даже достаточно ясное качественное определение оболочечной структуры в ядрах и само понятие оболочки использовалось для обозначения весьма разных явлений от отдельных одночастичных состояний до больших выделенных групп таких состояний, с существованием которых связано явление магичности ядер. Чаще всего нуклонными оболочками называют вырожденные j -уровни в сферическом среднем поле ядра [1].

В отличие от этого будем понимать под оболочкой большую выделенную группу нуклонных уровней (большая оболочка). Расстояние между центрами тяжести таких групп в спектре

одночастичных состояний характеризуется энергетическими интервалами порядка $\hbar\Omega = E_F/A^{1/3} = 6 - 8 \text{ Мэв}$ (E_F — энергия Ферми). Соответственно максимальное число нуклонов в каждой группе $A^{2/3} = \hbar\Omega\bar{g}(E_F)$, где \bar{g} — средняя плотность одночастичных состояний:

$$\bar{g}(E_F) \approx A/E_F, \quad (1)$$

равная $5-6 \text{ Мэв}^{-1}$ в тяжелом ядре. В дальнейшем в первую очередь будем интересоваться явлениями, связанными с большими оболочками. Эффекты, связанные с j -уровнями в сферических ядрах или другой подобной структурой более мелкого масштаба, также учитываются, хотя имеют второстепенное значение.

С оболочками в ядрах связано много важных явлений, таких, как существование деформированных ядер, осцилляции энергии связи (масс) ядер и др. Высказывались предположения о возможном влиянии оболочек на ядерные процессы, связанные со значительными деформациями ядер (деление) [2], но количественная теория этих явлений, как и строгие качественные определения, отсутствовали. Теория таких явлений ограничивалась результатами, полученными с помощью мало обоснованного метода суммирования одночастичных энергий в деформированном среднем потенциале [3, 4], полуколичественными моделями, акцентирующими роль остаточного взаимодействия [5], или чисто феноменологическими моделями. Последние особенно использовались для описания масс ядер и в теории деления [6—9].

Среди феноменологических моделей следует отметить модель Святецкого и Майерса [6, 7], в которой осцилляции масс и энергий деформации ядер отождествляются с осциллирующей частью суммы одночастичных энергий, и формула Вайцзеккера дополняется соответствующими поправочными членами, феноменологически учитывающими это явление.

Несмотря на успех в описании известных масс ядер при меньшем числе параметров, такая феноменологическая модель не решает задачу. Кроме того, как и другие модели, основанные на рассмотрении тех или иных особенностей одночастичного спектра, эта модель также не дает ответа на вопрос о значении оболочечных флуктуаций энергии взаимодействия нуклонов, которые являются величиной того же порядка, как и вариация энергии одночастичных уровней.

Возможный путь построения количественной теории оболочечных явлений наметился в так называемом методе оболочечных поправок. Этот подход основан на предположении о том, что оболочечные осцилляции энергии связи ядер и одночастичного спектра связаны с осцилляциями пространственной плотности нуклонов. Возможность своеобразной теории возмущений ляд энергии ядра, в которой отклонения пространственного распре-

ления нуклонов δr от гладкого феноменологического фона имеют значения малого размера, была отмечена в работах [10—12]. Оказывается, что в первом приближении по δr осцилляции энергии связи ядер действительно совпадают с осциллирующей частью суммы одночастичных энергий модели оболочек, причем в этом приближении результат не зависит от конкретного взаимодействия между нуклонами [10].

Парное взаимодействие нуклонов существенно лишь для членов второго порядка по δr , которые, согласно формальным оценкам, приводимым ниже, в $A^{1/3}$ раз меньше основного члена, т. е. оболочечной поправки. Спаривание нуклонов также имеет второстепенное значение. Устраняя вторичные эффекты типа вырождения j -уровней, спаривание лишь подчеркивает эффект оболочечной структуры. В количественных расчетах спаривание нуклонов учитывается обычным образом.

Как будет показано, с оболочечными эффектами связана лишь часть флуктуаций плотности, обязанная конечности размеров ядра. Такие осцилляции, по-видимому, соответствуют периодическим классическим траекториям частицы в потенциальной яме ядра. В системе невзаимодействующих частиц возможны также и другие осцилляции плотности, и естественно возникает вопрос об однозначном разделении этих эффектов. Вопрос о природе осцилляций плотности нуклонов в ядрах имеет большое значение для расчетов оболочечной структуры, и ему будет уделено максимальное внимание.

Основные предположения, на которых основываются расчеты оболочечных поправок, не зависят от формы среднего поля ядра, и все те общие результаты, которые описываются ниже, в равной мере относятся также и к деформированным ядрам. В настоящей статье даются расчеты для сферических ядер, в которых используется вудс-саксоновский потенциал модели оболочек, а во второй части статьи будет рассмотрен случай деформированных ядер и применения к теории деления. Часть результатов, изложенных в настоящей статье, была получена во время пребывания одного из авторов В. М. Струтинского в Институте им. Нильса Бора в Копенгагене и включена в обзорную статью [13].

2. МОДЕЛЬ ОБОЛОЧЕК И САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ

Начнем рассмотрение с описания аргументов, основанных на приближении Хартри — Фока. В рамках этого простого приближения формулируются основные понятия, связанные с оболочечной структурой ядер, вводятся статистически усредненные величины и получены уравнения для величин, характеризующих отклонения истинных значений от средних. Получен-

ные результаты обобщаются в теории конечных ферми-систем. Этому посвящена отдельная статья [14], в которой детально изучены различные усовершенствования теории, в том числе предложенное Бете [15] обобщение модели оболочечных поправок на случай приближения типа Хартри — Фока с феноменологическим взаимодействием, зависящим от локальной плотности нуклонов [16]. Такие уточнения не существенны для главного члена приближения модели оболочечных поправок, которое и будет здесь рассмотрено.

В приближении Хартри — Фока полная энергия системы имеет вид

$$\mathcal{E}^c = \sum_{\lambda} n_{\lambda} E_{\lambda}^c - \frac{1}{2} \text{Sp} (\rho^c v (1 - \mathcal{P}) \rho^c), \quad (2)$$

где \mathcal{P} — обменный оператор; n_{λ} — числа заполнения; E_{λ}^c и Φ_{λ}^c — одночастичные энергии и функции; $\rho^c (1, 2)$ — матрица плотности; v — парное взаимодействие нуклонов. Волновые функции Φ_{λ}^c удовлетворяют уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi_{\lambda}^c(x) + V_L^c(x) \Phi_{\lambda}^c(x) - \int V_{NL}^c(x, x') \Phi_{\lambda}^c(x') dx' = E_{\lambda}^c \Phi_{\lambda}^c(x), \quad (3)$$

где локальный потенциал

$$V_L^c(x) = \int dx' v(x, x') \rho^c(x', x'); \quad (4)$$

нелокальный потенциал

$$V_{NL}^c(x, x') = v(x, x') \rho^c(x', x'); \quad (5)$$

матрица плотности

$$\rho^c(x, x') = \sum_{\lambda} n_{\lambda} \Phi_{\lambda}^{c*}(x) \Phi_{\lambda}^c(x'). \quad (6)$$

Последующие выводы справедливы также, если двухчастичное взаимодействие разное в прямом и обратном членах. Индекс c означает, что соответствующая величина является самосогласованной.

В системе конечных размеров, какой является ядро, все самосогласованные величины, входящие в уравнения (2)–(6) ($\sum_{\lambda} E_{\lambda} n_{\lambda}$, $\rho^c(x, x')$, V^c), наряду с монотонным изменением содержат компоненту, осциллирующую от ядра к ядру, или при изменении формы ядра. Понятие формы ядра определяется в разд. 5, а также в работе [13]. Наша цель состоит в том, чтобы отделить осциллирующие куски от превосходящего во много раз гладкого фона. Для этого введем плавно изменяющуюся величину $\bar{\rho} (1, 2)$, которую можно определить как статистическое среднее значение $\rho^c (1, 2)$ по многим ядрам или по многим состояниям одного и того

же ядра. Рассмотрим среднее поле $\bar{V} = \bar{V}_L + \bar{V}_{NL}$, определяемое с помощью $\bar{\rho}$ теми же соотношениями, что и самосогласованное поле:

$$\bar{V} = \int dxv(x, x') \bar{\rho}(x', x') - [v(x, x') \rho(x', x')]_{\text{нелок}}. \tag{7}$$

Очевидно, что \bar{V} также является гладкой величиной. Это позволяет, хотя бы в принципе, отождествить \bar{V} с феноменологическим потенциалом модели оболочек \bar{V}^s , который так же, как и \bar{V} , не является самосогласованной величиной и, согласно основному предположению модели оболочек, плавно изменяется от ядра к ядру. Нерегулярные изменения, характерные для истинного самосогласованного среднего поля, полностью игнорируются в V^s так же, как и в \bar{V} .

Заметим, что в традиционной модели оболочек вместо $\bar{\rho}$ сразу вводится феноменологическое среднее поле V^s . Это обстоятельство не меняет существа дела, так как можно считать, что в V^s учтены все члены, возникающие в \bar{V} , например обменная часть. В дальнейшем такое несовершенство практической модели оболочек не имеет большого значения, ибо все результаты определяются сравнительно узкой полосой около энергии Ферми, где поправки несущественны.

Решая одночастичную задачу оболочечной модели со средним полем \bar{V} , найдем одночастичные состояния модели оболочек $\Phi_\lambda^s, E_\lambda^s$. Такие величины, естественно, отличаются от самосогласованных Φ_λ^c и E_λ^c . Условно их связь можно изобразить в следующем виде:

$$\rho(x, x') \rightarrow \bar{V}(x, x') \rightarrow E_\lambda^s, \Phi_\lambda^s \rightarrow \rho^s(x, x') \tag{8}$$

для модели оболочек и

$$\left[\begin{array}{c} \rightarrow \rho^c(x, x') \rightarrow V^c(x, x') \rightarrow E_\lambda^c, \Phi_\lambda^c \rightarrow \\ \leftarrow \end{array} \right] \tag{9}$$

для самосогласованных величин. Ясно, что матрица плотности модели оболочек

$$\rho^s(x, x') = \sum_\lambda n_\lambda \Phi_\lambda^{s*}(x) \Phi_\lambda^s(x') \tag{10}$$

не совпадает ни с $\bar{\rho}$, ни с ρ^c . Как и ρ^c , ρ^s не является гладкой величиной. Предположим теперь, что $\bar{\rho}$ мало отличается от ρ^c :

$$\rho^c = \bar{\rho} + \delta\rho, \tag{11}$$

где

$$|\delta\rho| \ll |\bar{\rho}|, |\rho^c|.$$

Разница между самосогласованным и средним потенциалами

$$\delta V = V^c - \bar{V}$$

выражается через $\delta\rho$ с помощью уравнения (7). Рассматривая величину δV как малое внешнее возмущение, можно представить разницу между самосогласованными величинами и решениями задачи с гладким, но несамосогласованным потенциалом в виде ряда теории возмущений:

$$\mathcal{E}_\lambda^c = \mathcal{E}_\lambda^s + \int d1 \Phi_\lambda^{s*} \delta V \Phi_\lambda^s + \sum_{\lambda' \neq \lambda} |(\delta V)_{\lambda\lambda'}|^2 / (E_\lambda - E_{\lambda'}), \quad (12)$$

$$\rho^c = \rho^s + \delta_{1\rho}, \quad (13)$$

где

$$\delta_{1\rho} = \sum_{\lambda\mu} \frac{n_\lambda - n_\mu}{E_\lambda - E_\mu} (\delta V)_{\lambda\mu} \Phi_\lambda^*(1) \Phi_\mu(2). \quad (14)$$

Подставив выражения (12) и (14) в формулу (2) для полной энергии и воспользовавшись соотношением (13), найдем, что с точностью до членов третьего порядка по $\delta\rho$

$$\mathcal{E}^c = \mathcal{E}_0 + I, \quad (15)$$

где I содержит члены не ниже второго порядка по $\delta\rho$, а

$$\mathcal{E}_0 = \sum_\lambda E_\lambda^s n_\lambda - \frac{1}{2} \text{Sp} [\bar{\rho} v (1 - \mathcal{F}) \bar{\rho}]. \quad (16)$$

Член второго порядка в (15)

$$I = -\frac{1}{2} \int \int d1 d2 v(1, 2) [\delta_{1\rho}(1) \delta\rho(2) - \delta_{1\rho}(1, 2) \delta\rho(1, 2)] + \frac{1}{2} \int \int d1 d2 v(1, 2) [\delta\rho(1) \delta\rho(2) - |\delta\rho(1, 2)|^2], \quad (17)$$

здесь и дальше

$$\rho(1) \equiv \rho(1, 1).$$

Заметим теперь, что, согласно определению $\bar{\rho}^c$ и \bar{V} , среднее значение

$$\overline{\delta V} = 0. \quad (18)$$

Отсюда следует, что с точностью до величины второго порядка по $\delta\rho$

$$\bar{\rho}^c = \bar{\rho}^s. \quad (19)$$

Из этого равенства и (13) получаем

$$\delta\rho = \rho^c - \bar{\rho}^c \approx \delta\rho^s + \delta_{1\rho}, \quad (20)$$

где $\delta\rho^s = \rho^s - \bar{\rho}^s$. В представлении собственных функций модели оболочек соотношение (20) имеет вид

$$\delta\rho_{\lambda\lambda'} = \delta\rho_{\lambda\lambda'}^s + \frac{n_\lambda - n_{\lambda'}}{E_\lambda - E_{\lambda'}} (\delta V)_{\lambda\lambda'}. \quad (21)$$

Так как δV и $\delta\rho$ связаны линейно друг с другом, последнее выражение можно рассматривать как интегральное уравнение для $\delta\rho$:

$$\delta\rho_{\lambda\lambda'} = \delta\rho_{\lambda\lambda'}^s + \frac{n_\lambda - n_{\lambda'}}{E_\lambda - E_{\lambda'}} \sum_{\alpha\beta} \langle \lambda\lambda' | v (1 - \mathcal{F}) | \alpha\beta \rangle \delta\rho_{\alpha\beta}. \quad (22)$$

Введем теперь амплитуду рассеяния в среде Γ , удовлетворяющую уравнению [17]

$$\begin{aligned} \langle \lambda\mu | \Gamma | \lambda'\mu' \rangle &= \langle \lambda\mu | v (1 - \mathcal{F}) | \lambda'\mu' \rangle + \\ &+ \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \lambda\alpha | v (1 - \mathcal{F}) | \lambda'\alpha' \rangle \frac{n_\alpha - n_{\alpha'}}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \langle \alpha\mu | \Gamma | \alpha'\mu' \rangle. \end{aligned} \quad (23)$$

С помощью Γ можно выразить $\delta\rho$ непосредственно через $\delta\rho^s$:

$$\delta\rho_{\lambda\lambda'} = \delta\rho_{\lambda\lambda'}^s + \sum_{\alpha\beta} \frac{n_\lambda - n_{\lambda'}}{E_\lambda - E_{\lambda'}} \langle \lambda\lambda' | \Gamma | \alpha\beta \rangle \delta\rho_{\alpha\beta}^s. \quad (24)$$

Воспользовавшись этим, запишем

$$\begin{aligned} I &= 1/2 \int \int d1 d2 \delta\rho^s \Gamma \delta\rho^s = \\ &= 1/2 \sum_{\lambda\mu\lambda'\mu'} \langle \lambda\mu | \Gamma | \lambda'\mu' \rangle \delta\rho_{\lambda\lambda'}^s \delta\rho_{\mu\mu'}^s. \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, разница между точным выражением (2) для самосогласованной энергии и приближенным выражением (16) второго порядка по $\delta\rho$, и с такой точностью можно воспользоваться вторым, гораздо более простым выражением для энергии, которое не требует решения самосогласованной задачи.

Как будет показано ниже, средняя амплитуда оболочечных осцилляций $\delta\rho$ действительно очень мала, порядка $A^{-2/3}$ или меньше, и поэтому уже первое приближение в уравнении (16) обладало бы сравнительно хорошей точностью. Однако для того, чтобы практически его использовать, необходимо было бы очень точно определить и вычислить входящие туда величины. Это едва ли возможно: каждая из компонент выражения (16) есть

величина порядка 10^3 *Мэв*, и ясно, что даже небольшая физическая или численная несогласованность привела бы к слишком большой погрешности. Поэтому расчет энергии с помощью приближенной формулы (16) почти так же труден, как и отыскание самосогласованного решения, причем сохраняются все недостатки исходного приближения Хартри — Фока.

В дальнейшем нас будет интересовать только осциллирующая часть энергии связи ядра, и в таком случае выражение (16) имеет значительные преимущества. В отличие от выражения (2), в котором осциллируют оба слагаемых, в (16) оболочечные осцилляции полностью перенесены в сравнительно простой первый член, а именно, они содержатся в сумме одночастичных энергий, рассчитанных для гладкого несамосогласованного потенциала модели оболочек. Второе слагаемое в (16), по определению, является плавной величиной. Таким образом, в первом приближении по $\delta\rho$ оболочечные вариации энергии связи совпадают с вариацией одной только одночастичной энергии.

Конкретный способ выделения осцилляций одночастичной энергии описан в следующей главе. Оказывается, что осцилляции энергии определяются главным образом некоторыми особенностями энергетического распределения одночастичных уровней около энергии Ферми, в интервале достаточно широком, но в то же время малом по сравнению с величиной энергии Ферми. Это обстоятельство имеет большое значение, так как известно, что приближение независимых частиц с относительно слабым остаточным взаимодействием действительно пригодно в данном случае [17]. Более глубокие состояния дают вклад в гладкие куски. Но такие члены заменяются феноменологическим выражением: формулой Вайцекера или капельной моделью. В результате, приближение независимых частиц (или квазичастиц) используется только для вычисления осцилляций энергии, которые определяются областью около энергии Ферми, где такое приближение оправдано.

Результат первого приближения модели оболочечных поправок можно улучшить, учитывая члены второго порядка в уравнение (15). Эти поправки зависят от остаточного взаимодействия. Их обобщение в модели ферми-жидкости не составляет труда. Фактически уравнения (23)—(25) являются характерными уравнениями теории ферми-жидкости. Как будет показано ниже, главный член оболочечной поправки также можно записать в виде, характерном для теории ферми-жидкости.

Нормировка энергии к феноменологической формуле Вайцекера требует определенной согласованности с капельной моделью: выделенные осциллирующие куски не должны содержать членов, уже включенных в капельную модель, таких, как, например, объемная или поверхностная энергия. И ответ не дол-

жен зависеть от параметров, которые приходится вводить при вычислении средних значений.

Требование однозначности не следует понимать слишком буквально. Некоторая неопределенность в нахождении гладких величин может приводить к тому, что выделенные осцилляции также содержат небольшую гладкую компоненту. Ясно, что присутствие компоненты, плавно изменяющейся на несколько мегаэлектронвольт при существенном различии атомного веса или формы ядра, не имеет значения на данной стадии и не влияет на сравнение с опытом. Однако требование даже такой точности выдвигает нетривиальные условия. Ниже этот вопрос будет рассмотрен подробнее.

В заключение заметим, что уравнение (16) в какой-то мере оправдывает предложенный Моттельсоном и Нильссоном [3] метод расчета равновесных деформаций ядер как минимумов суммы одночастичных энергий, определенных для оболочечного потенциала модели Нильссона. Как известно, такой метод вполне успешно применяется для расчета квадрупольных моментов ядер в основных состояниях, что можно объяснить тем, что при небольших квадрупольных деформациях изменение плавной части энергии (16) почти не влияет на положение минимума энергии деформации. Метод Моттельсона — Нильссона, однако, совершенно непригоден для более сложных или больших квадрупольных деформаций, что также можно легко объяснить с помощью уравнения (16). Метод Моттельсона — Нильссона часто критиковался за то, что в нем якобы не учитывались вариации в средней энергии взаимодействия нуклонов, амплитуда которых сравнима с вариациями одночастичной энергии. Эта критика основывалась на выражении (2) для полной энергии, которое имело мало отношения к тому, что фактически делалось. Действительно, в подобных расчетах всегда рассматривалась сумма одночастичных энергий, найденных для гладкого оболочечного потенциала, что соответствует уравнению (16), а не самосогласованных одночастичных энергий, как в уравнении (2). Между такими двумя наборами энергий имеется некоторая разница, которая становится существенной при суммировании по многим нуклонным состояниям. Заметим, что по этой же самой причине не вполне оправдан способ определения параметров оболочечного потенциала как эффективной потенциальной ямы для многих ядер из сравнения с экспериментально наблюдаемыми энергиями одночастичных уровней в каком-то выделенном ядре. Найденный таким образом феноменологический потенциал был бы пригоден для описания определенной ситуации в конкретном ядре, между тем как по смыслу оболочечной модели требуется найти эффективный сглаженный потенциал, являющийся наилучшим приближением для многих ядер.

3. ОСЦИЛЛЯЦИИ ПОЛНОЙ ОДНОЧАСТИЧНОЙ ЭНЕРГИИ

Как видно из уравнения (15), для того чтобы выделить осцилляции энергии связи ядра в первом приближении по $\delta\rho$ достаточно рассматривать полную сумму одночастичных энергий E_λ^s , рассчитанных для подходящего гладкого потенциала \bar{V} :

$$\mathcal{U} = 2\Sigma_\lambda n_\lambda E_\lambda. \quad (26)$$

Здесь и ниже введен множитель, возникающий из-за суммирования по спину, и опущен индекс s у величин, относящихся к модели оболочек. Обозначив $\bar{\mathcal{U}}$ гладкую компоненту величины \mathcal{U} , запишем осциллирующую часть в виде

$$\delta\mathcal{U} = \mathcal{U} - \bar{\mathcal{U}}. \quad (27)$$

Энергия системы

$$\mathcal{E} \approx \mathcal{E}_0 + 0 [(\delta\rho)^2] \approx \bar{\mathcal{E}} + \delta\mathcal{U}, \quad (28)$$

где

$$\bar{\mathcal{E}} = \bar{\mathcal{U}} - \frac{1}{2} \text{Sp} (\bar{\rho}v (1 - \mathcal{F}) \bar{\rho}). \quad (29)$$

Эта величина является аналогом выражения для полной энергии в статистических моделях, основанных на приближении Томаса — Ферми. Ее можно заменить феноменологическим капельным выражением для массы ядра, которое является наилучшей гладкой аппроксимацией для масс ядер (формула Вайцекера). Таким образом, масса ядра представлена в виде

$$M(N, Z, \text{форма}) = M_{\text{к.м}} + \Sigma_{p, n} (\delta\mathcal{U} + P), \quad (30)$$

где $M_{\text{к.м}}$ — обычное капельное выражение для массы; сумма берется по протонам и нейтронам. В уравнении (30) добавлен также член P , соответствующий энергии парных корреляций. В этом члене учитываются, в частности, значительные вариации энергии спаривания, связанные с изменением плотности одночастичных состояний около энергии Ферми, т. е. с энергетическими оболочками. Четно-нечетные вариации энергии спаривания включаются обычно в феноменологическую капельную часть.

В качестве внешних параметров в выражении (30) указана также деформация ядра, поскольку все величины в уравнении (30) определяются для заданной формы поверхности ядра. Представление энергии в виде (30) особенно удобно, так как именно оно принято при феноменологическом описании масс ядер. Следовательно, рассчитанная величина оболочечной поправки может непосредственно сравниваться с экспериментальной величиной отклонений масс ядер от наилучшего гладкого капельного приближения. Рассматривая изменение энергии в зависимости от формы

ядра, получаем энергию деформации, причем второе слагаемое в уравнении (30) представляет оболочечные вариации энергии деформации относительно среднего капельного значения. Экстремумы энергии деформации соответствуют стационарным формам поверхности ядра, минимумы — устойчивым состояниям, максимумы или седловые точки — порогами энергии деформации. Таким образом, можно рассчитать форму ядра в основном состоянии (самый низкий минимум), после чего можно вычислить поправку к энергии связи основного состояния (см. разд. 6).

Рассматриваемые как функции атомного номера оболочечные осцилляции масс ядер характеризуются периодом порядка $A^{2/3}$. Поэтому сглаженную одночастичную энергию можно получить, если рассматривать величины, которые усреднены по одночастичному спектру на интервале порядка *

$$\tilde{\gamma} \approx h\Omega = E_F/A^{1/3} \approx 5 - 10 \text{ Мэв},$$

содержащем $A^{2/3}$ или большее число частиц. При выделении оболочечных осцилляций энергии основное значение имеет усредненная по интервалу γ плотность одночастичных состояний

$$\tilde{g}(E) = g_{\tilde{\gamma}}(E),$$

где $g_{\tilde{\gamma}}$ определяется следующим выражением:

$$g_{\tilde{\gamma}}(E) = 1/\gamma \Sigma_{\lambda} f[(E_{\lambda} - E)/\gamma]. \quad (31)$$

Весовая функция $f(x)$ порядка единицы, если $|x| \leq 1$, и обращается в нуль вне этого интервала. Удобно выбрать эту функцию в следующем виде:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) P_{2m}(x). \quad (32)$$

Это выражение содержит произвольный весовой множитель P_{2m} , который допускается, поскольку одно только условие гладкости еще не определяет однозначно функцию $\tilde{g}(E)$. Конкретный вид P_{2m} следует из дополнительных физических условий. Заметим здесь только, что корректировочная функция (полином) $P_{2m}(x)$ также должна быть порядка единицы при $|x| \leq 1$. Сглаженная одночастичная энергия \tilde{U} в уравнении (27) определяется плотностью $\tilde{g}(E)$ соотношением

$$\tilde{U} = 2 \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} E g(E) dE, \quad (33)$$

* В тех уравнениях, где учитывается абсолютное значение энергии Ферми, имеется в виду значение E_F , отсчитанное от дна ямы, т. е. средняя кинетическая энергия нуклонов.

где граничная энергия для однородного распределения \tilde{E}_F находится из условия сохранения числа частиц:

$$N = 2 \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} g(E) dE. \quad (34)$$

Таким образом, главный член оболочечной поправки

$$\delta \mathcal{U} = 2 \sum_{\lambda} n_{\lambda} E_{\lambda} - 2 \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} E g(E) dE. \quad (35)$$

Оболочечная поправка $\delta \mathcal{U}$ полностью определяется одночастичным энергетическим спектром модели оболочек и легко вычисляется с помощью соотношений (34) и (35) для любого заданного распределения одночастичных уровней. Амплитуда $\delta \mathcal{U}$ определяется отклонением реального распределения уровней от гладкого, которое характеризуется средней плотностью \tilde{g} . Для качественных рассмотрений удобно наряду со средней плотностью \tilde{g} ввести также некоторую локальную плотность одночастичных состояний $g_s(E)$, которую также можно определить соотношением (31), взяв в качестве интервала усреднения $\tilde{\gamma} = \gamma_s$, малое по сравнению с $\tilde{\gamma}$. Величина

$$\delta g(E) = g_s(E) - \tilde{g}(E) \quad (36)$$

представляет отклонение локальной плотности уровней от среднего значения для энергии E , полученного усреднением по широкому интервалу $\tilde{\gamma}$. Используя g_s , можно записать $\delta \mathcal{U}$ в виде

$$\delta \mathcal{U} \approx 2 \left\{ \int_{-\infty}^{E_F} E g_s(E) dE - \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} E \tilde{g}(E) dE \right\} \approx \quad (37)$$

$$\approx 2 \int_{-\infty}^{E_F} (E - E_F) \delta g(E) dE. \quad (38)$$

Это выражение стационарно относительно малых вариаций граничной энергии, следовательно, обе энергии Ферми здесь взяты одинаковыми. Другое полезное выражение для оболочечной поправки через числа заполнения будет получено ниже.

Выражение (38) для оболочечной поправки устанавливает связь между вариациями масс ядер и оболочками в одночастичном спектре. Его можно использовать для конкретных вычислений. При этом параметр γ_s берется равным 1—2 *Мэв*. Согласно квазиклассической оценке, такой интервал содержит в среднем 5—6

уровней, и, на первый взгляд, локальная плотность $g_s(E)$ также должна быть гладкой функцией одночастичной энергии и мало отличаться от $\bar{g}(E)$. В действительности, g_s сильно осциллирует около среднего значения, равного \bar{g} , причем то же самое имеет

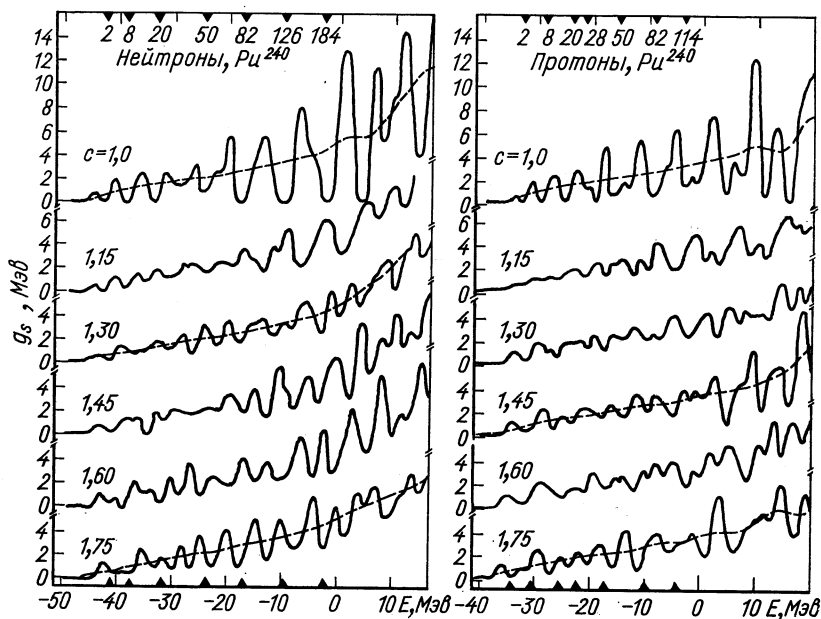


Рис. 1. Плотность одночастичных уровней в сферическом и деформированном потенциале Вудса — Саксона ядра Pu^{240} :

— — — локальная плотность, полученная при усреднении с $\gamma^s = 1,5$ Мэв; — — — — — сглаженная плотность уровней ($\gamma = 8$ Мэв). Форма потенциальной ямы приближенно соответствует последовательности форм ядра в процессе деления; у кривых указаны значения параметра деформации ямы равного отношению большей полуоси ядра к радиусу равновеликой сферы [13].

место также и в деформированных ядрах. Минимумы g_s соответствуют магическим областям разреженных уровней в одночастичном спектре («заполненные оболочки»), здесь $\delta g < 0$. Практически в любой одночастичной модели и независимо от формы ядра величина g_s меняется в несколько раз при переходе от середины оболочки к заполненной оболочке (рис. 1). Необходимо подчеркнуть, что в присутствии оболочечных группировок уровней для g_s не существует какого-либо однозначного значения, даже несмотря на то, что интервал γ_s содержит достаточно много уровней. Такое обстоятельство не имеет большого значения, поскольку смысл имеют только интегралы от g_s , для которых существуют предель-

ные значения даже при $\gamma_s \rightarrow 0$, равные точным суммам по одночастичному спектру.

Более существенным и гораздо менее тривиальным является условие независимости $\tilde{g}(E)$ от конкретного значения параметра $\tilde{\gamma}$. В конечном счете согласно (33) это условие и определяет однозначность выделения осцилляций энергии. Сглаженная одночастичная энергия $\tilde{\mathcal{U}}$, а вместе с ней и $\delta\mathcal{U}$ как функции $\tilde{\gamma}$ должны иметь достаточно широкие плато, причем в области плато должно оставаться постоянным с точностью порядка 10^{-4} , если идет речь о вычислении оболочечных поправок с точностью порядка нескольких сотен килоэлектронвольт.

Между тем простая интуитивная процедура вычисления среднего значения плотности уровней — считается число уровней на интервале и их количество делится на величину интервала при конечном γ — неоднозначна. Возникающая неопределенность порядка $E_F \gamma^2 (d^2 \tilde{g}/dE^2) \approx (\gamma/E_F)$ невелика, но имеет исключительно важное значение для вычисления $\delta\mathcal{U}$. Напомним, что именно такой порядок малости имеют поправки к \mathcal{U} , соответствующие одночастичной поверхностной энергии [12]. Поэтому возникает условие и для определения сглаженных величин, которое заключается в том, что оболочечная поправка $\delta\mathcal{U}$ не должна содержать гладких зависимостей от внешних параметров, подобных уже включенным в капельную часть феноменологической формулы Вайцекера, таких, как объемная и поверхностная энергии. Иначе такие члены учитывались бы дважды и вся процедура, описанная выше, потеряла бы смысл. Для того чтобы $\delta\mathcal{U}$ не содержало компонент, подобных главным членам капельной энергии, необходимо при усреднении сохранять гладкие члены в сглаженной одночастичной энергии $\tilde{\mathcal{U}}$ такими же, как и в сумме оболочечных одночастичных энергий, т. е. они должны исчезать в разности этих величин в уравнении (27). Это условие фактически совпадает с требованием того, чтобы усредненная величина совпадала с точным локальным значением плотности в случае равномерного распределения. Отсюда находим весовую функцию P_{2m} в (32), которая пока оставалась неопределенной. Потребуем, чтобы усредненная по конечному интервалу γ величина совпадала с точным локальным значением в точке E при равномерном распределении уровней, которое можно описать полиномом степени не выше $2m$.

Из этого условия находим P_{2m} в виде полинома степени $2m$ от $x = (E - E')/\gamma$, причем коэффициенты этого полинома определенным образом связаны с четными производными \tilde{g} возрастающих порядков, и можно показать, что имеет место разложение по малому параметру $(\gamma/E_F)^2$ [12]. Было замечено [18, 29], что при использовании гауссовой весовой функции в (31) корректи-

ровочный полином является суммой первых m членов разложения δ -функции в ряд по полиномам Эрмита. Это позволяет получить следующее общее выражение для корректировочного полинома степени $2m$:

$$P_{2m} = \sum_{k=0, 2, \dots, 2m} \alpha_k H_k(x). \quad (39)$$

Коэффициенты α_k определяются из рекуррентных соотношений

$$\alpha_k = -\frac{1}{2k} \alpha_{k-2}, \quad \alpha_0 = 1. \quad (40)$$

Степень корректировочного полинома выбирается из условия: для всех усредняемых величин в зависимости от параметра $\tilde{\gamma}$ область плато получилась максимально широкой. Но степень корректировочного полинома не должна быть слишком высокой, иначе будет нарушено условие плавности сглаженной величины. Это условие дает для $2m$ максимальное значение порядка $\bar{E}_F/\tilde{\gamma} \approx \approx A^{1/3}$. Проверка правильности выбора корректировочной функции состоит в том, что в области плато величина $\delta\mathcal{U}$ должна оставаться постоянной при изменении степени корректировочного полинома. Обычно используется $2m = 4$ или 6 .

Многочисленные конкретные расчеты [12, 13, 18] подтвердили, что таким образом можно добиться выполнения всех перечисленных выше условий. Исключение из $\delta\mathcal{U}$ компоненты, пропорциональной поверхности, подтверждается тем, что рассчитанные оболочечные поправки осциллируют около нулевого значения как при рассмотрении зависимости от размеров ядра (так и атомного номера) при заданной форме, или при изменении формы ядра.

Условие существования плато и однозначности результатов при различном выборе корректировочного полинома лучше всего выполняется в тех случаях, когда уровни распределяются достаточно равномерно, как, например, в гармоническом осцилляторе, и известны одночастичные состояния в достаточно большом интервале около энергии Ферми, порядка $2-4\hbar\Omega$. В расчетах с потенциалом конечной глубины (модель Вудса — Саксона) возникает естественная трудность, связанная с тем, что энергия Ферми расположена слишком близко к краю потенциальной ямы и число дискретных состояний выше энергии Ферми недостаточно для процедуры усреднения с большим $\tilde{\gamma}$. В этом случае область плато можно выделить, проводя расчеты с потенциальной ямой большего радиуса, так чтобы энергия Ферми опустилась достаточно низко. Вычисленную таким образом величину $\delta\mathcal{U}$ можно затем экстраполировать к «правильному» радиусу ямы. Контрольные расчеты показывают, что правильные значения $\delta\mathcal{U}$ можно получить в расчетах также и с обычным потенциалом модели Вудса — Саксона, если брать не слишком большое $\tilde{\gamma} = 5 - 6 M\bar{e}v$, даже

в тех случаях, когда при дальнейшем увеличении $\tilde{\gamma}$ плато не получается.

Примеры насыщения δU в зависимости от $\tilde{\gamma}$, относящиеся к модели Вудса — Саксона, модели Нильссона и сферическому гармоническому осциллятору, даны на рис. 2. В потенциале Вудса — Саксона учитывались только уровни дискретного спектра,

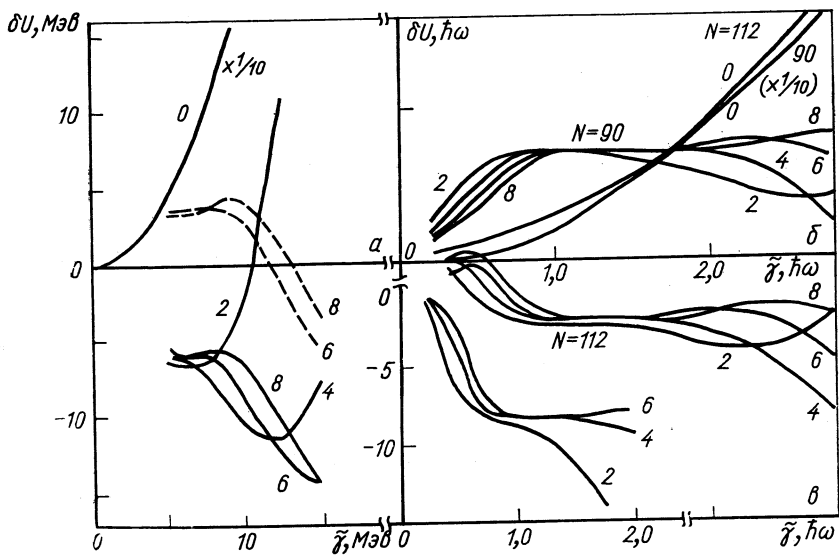


Рис. 2. Зависимость оболочечной поправки δU от параметра $\tilde{\gamma}$ для модели Вудса — Саксона (а), сферического гармонического осциллятора (б) и модели Нильссона (в):
 а — — — — $N = 126$, — — — — $N = 114$, около каждой кривой указана также степень корректировочного полинома $2m$. Данные для модели Нильссона взяты из работы [18].

а радиус взят несколько больше нормального значения. Кривые приведены для различных степеней скорректированного полинома $2m$. Отчетливо видна область плато. Без корректировочного полинома получается бессмысленный результат, который соответствует «нагреванию» ядра до «температуры» порядка γ .

Специфические трудности в расчетах с потенциалом Вудса — Саксона можно исключить также в том случае, если использовать все уровни выше энергии Ферми, которые получены диагонализацией гамильтониана на ограниченном базисе с пространственными размерами, приблизительно равными размерам ядра [19]. Такая диагонализация наряду с истинными дискретными состояниями дает состояния с положительными энергиями, которые вполне можно применять для экстраполяции одночастичного

спектра. При определенных условиях эти состояния близки к соответствующим квазистационарным одночастичным уровням. Для размазывания спектра совсем не обязательно применять точные квазистационарные уровни непрерывного спектра. При усреднении высокие состояния необходимы в той мере, в какой они аппроксимируют дискретный спектр более тяжелых ядер в области атомных весов порядка $A^{2/3}$. Поэтому отрицательные результаты, найденные Лином [20] с весьма ограниченным количеством дискретных уровней около энергии Ферми и точных резонансов сплошного спектра, не отвечают действительности. Заметим, однако, что и в расчетах Лина при $\tilde{\gamma} = 5 - 6$ Мэв получают значения оболочечных поправок, близкие к тому, что дает модель Нильссона или потенциал Вудса — Саксона.

Вопрос о вкладе различных состояний в оболочечные флуктуации, о величине минимального интервала, дающего насыщение для оболочечных поправок, будет рассмотрен в части II, а также см. работу [13].

Приведем еще одно наглядное и удобное для практических расчетов представление для оболочечных поправок. С его помощью можно показать, что существенный вклад в $\delta\mathcal{U}$ действительно дает лишь относительно узкий слой одночастичных состояний порядка $\tilde{\gamma}$ около энергии Ферми. Для этого воспользуемся конкретной функцией $\tilde{g}(E)$ в виде суммы по одночастичному спектру (31), а также выражением (32) для корректировочной функции $P_{2m}(x)$. После интегрирования по энергии в уравнении (35) получим для оболочечной поправки в виде суммы по одночастичному спектру следующее выражение:

$$\delta\mathcal{U} = 2\sum_{\lambda} E_{\lambda} \delta n_{\lambda} + \gamma^2 g^*(E_F). \quad (41)$$

Здесь

$$\delta n_{\lambda} = n_{\lambda} - \tilde{n}_{\lambda} \quad (42)$$

разность двух распределений чисел заполнения; n_{λ} — распределение основного состояния ядра; \tilde{n}_{λ} — некоторое распределение, размытое около энергии Ферми на величину $\tilde{\gamma}$:

$$\tilde{n}_{\lambda} = n(\epsilon_{\lambda}) = \int_{\epsilon_{\lambda}}^{\infty} f(x) dx, \quad (43)$$

где

$$\epsilon_{\lambda} = (E_{\lambda} - \tilde{E}_F) / \tilde{\gamma}.$$

В уравнении (41) $g^*(F)$ соответствует некоторой эффективной плотности уравнений около энергии Ферми, которая вычисляется с другой весовой функцией, чем в случае плотности \tilde{g} , и поэтому

отличается от последней:

$$g^*(E) = \frac{1}{\gamma} \Sigma_{\lambda} f^* [(E_{\lambda} - E)/\tilde{\gamma}], \quad (44)$$

где

$$f^*(x) = \alpha_{2m} H_{2m}(x) \exp(-x^2)/\sqrt{\pi}. \quad (45)$$

Обе плотности совпадают, если корректировочный полином отсутствует ($2m = 0$). Для $n(x)$ удобно следующее выражение:

$$n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \left[\Pi(x) + \sum_{k=2,4,\dots}^{2m} \alpha_k H_{k-1}(x) \right]. \quad (46)$$

Для функции

$$\Pi(x) = \exp(+x^2) \left[\sqrt{\pi} - \int_{-\infty}^x \exp(-t^2) dt \right]$$

при $x \geq 0$ можно воспользоваться численной аппроксимацией:

$$\Pi(x) = \sum_{i=1}^5 b_i t^i,$$

где

$$\begin{aligned} t &= 1/(1 + px); \\ b_1 &= 0,22583684; & b_4 &= -1,28782245; \\ b_2 &= 0,25212867; & b_5 &= 0,94064607; \\ b_3 &= 1,25969513; & p &= 0,32759112. \end{aligned}$$

Для $x \leq 0$ можно воспользоваться тождеством:

$$n(x) = 1 - n(-x).$$

Энергия Ферми для размытого распределения определяется из условия сохранения числа частиц:

$$\delta N = 2 \Sigma_{\lambda} \delta n_{\lambda} = 0. \quad (47)$$

При этом предполагается, что энергия Ферми E_F для реального распределения известна. В модели независимых частиц

$$n_{\lambda} = 1 - \theta(E_{\lambda} - E_F) = \begin{cases} 1, & E_{\lambda} < E_F; \\ 0, & E_{\lambda} \geq E_F. \end{cases}$$

В этом случае в качестве E_F^0 удобно взять

$$E_F^0 = \frac{1}{2} (E_{\lambda <} + E_{\lambda >}),$$

где $E_{\lambda <}$ и $E_{\lambda >}$ — энергия последнего заполненного и первого свободного уровней, и использовать ее как начальное значение

в численной процедуре поиска \tilde{E}_F . Форма распределения δn дана на рис. 3, причем для простоты обе граничные энергии E_F и \tilde{E}_F

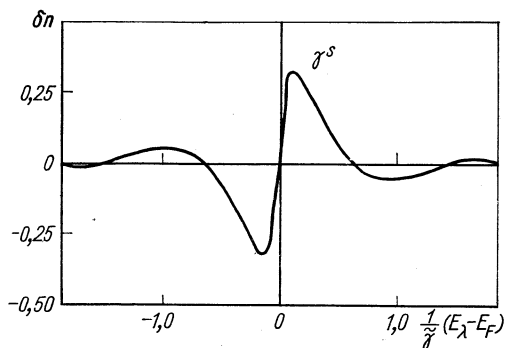


Рис. 3. Зависимость распределения δn_λ для корректировочного полинома $2m = 4$ от энергии уровня E_λ .

считаются одинаковыми. Величина δn слегка осциллирует при больших значениях аргумента. Это отражается в необычном

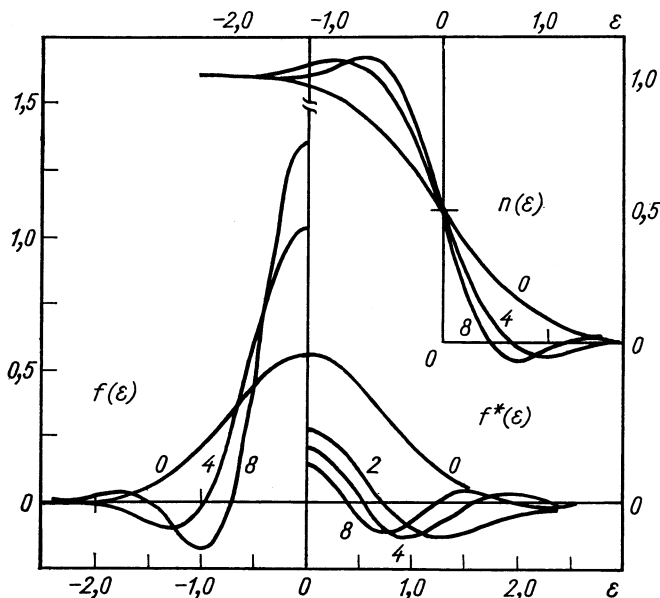


Рис. 4. Три универсальные функции для расчетов оболочечных поправок для разных значений степени корректировочного полинома $2m$ в зависимости от безразмерного аргумента ϵ .

поведении сглаженного распределения чисел заполнения \tilde{n} , которое иногда оказывается больше единицы или меньше нуля (рис. 4).

Уравнения (41) и (43) в явном виде показывают, что для оболочечных поправок существенное значение имеет только ограниченный интервал порядка $\gamma \approx E_F/A^{1/3}$ около энергии Ферми. Состояния, удаленные от E_F больше чем на $2-3\gamma$, в расчетах можно вовсе не учитывать. Они, однако, необходимы для определения энергии Ферми реального распределения E_F , если положение E_F среди верхних одночастичных уровней не известно из каких-либо других соображений или непосредственно из экспериментальных данных. Этот вопрос не имеет отношения к самому методу оболочечных поправок. Как отмечалось выше, чтобы рассчитать оболочечные поправки, необходимы лишь одночастичные состояния в относительно узком интервале около энергии Ферми. Существенно так же и то, что оболочечные поправки определяются оболочечными неоднородностями большого масштаба, на которые остаточное взаимодействие влияет относительно мало. Это не мешает учитывать остаточное взаимодействие в количественных расчетах, что можно сделать при существующих микроскопических теориях. При этом следует учесть, что некоторые из проявлений остаточного взаимодействия исключаются, будучи включенными в гладкие члены.

Выражение (41) для оболочечной поправки интересно также и в том отношении, что оно подсказывает простую интерпретацию результата, полезную для обобщения в теории ферми-жидкости. Как будет показано в разд. 4, δn_λ совпадают с матричными элементами $\delta r^s(r)$. Таким образом, главный член оболочечной поправки также выражается через эту величину, характеризующую оболочечные вариации пространственного распределения нуклонов.

Заметим, что второй член в формуле (41) обращается в нуль, если распределение одночастичных уровней достаточно гладкое и его можно описать полиномом степени не выше $2m - 1$. В этом можно убедиться, если заменить в формуле (44) сумму по одночастичному спектру на интеграл по энергии и учесть ортогональность полиномов Эрмита. Формальная оценка для члена

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}^2 g^*(E_F) &\approx \frac{\tilde{\gamma}^{2(m+1)}}{\sqrt{\pi} (2m)!} \alpha_{2m} g^{(2m)}(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^{2m} H_{2m} e^{-\varepsilon^2} d\varepsilon \approx \\ &\approx \frac{(2m-1)!!}{2^m} \tilde{\gamma}^2 \tilde{g}(E_F) (\tilde{\gamma}/(E_F))^{2m}, \end{aligned} \quad (48)$$

где $\tilde{g}^{(2m)} - 2m$ производная сглаженной плотности уровней. В численных расчетах величина $\gamma^2 g^*(E_F)$ резко уменьшается в области плато на рис. 2, принимая пренебрежимо малые значения. Таким образом, для оболочечной поправки можно использовать простое выражение

$$\delta \mathcal{U} = \sum_{\lambda} (\mathcal{E}_{\lambda} - E_F) \delta n_{\lambda}, \quad (49)$$

где δn_λ даются формулами (42) и (43). Это соответствует сглаженной одночастичной энергии

$$\tilde{\mathcal{U}} = 2 \sum_\lambda E_\lambda \tilde{n}_\lambda,$$

которое совпадает с выражением (33) при правильном выборе величины параметра $\tilde{\gamma}$, обеспечивающем достаточную гладкость $\tilde{g}(E)$ вблизи энергии Ферми. Подбор $\tilde{\gamma}$ удобно контролировать по величине $\gamma^2 \tilde{g}^{(2m)}$. Размазанное распределение чисел заполнения \tilde{n}_λ модели оболочечных поправок обладает тем важным свойством, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(E) \tilde{n}(E) dE = \int_{-\infty}^{\tilde{E}_F} F(E) dE,$$

если $F(E)$ — гладкая функция энергии в указанном выше смысле. В частности, при $F(E) = E \tilde{g}(E)$ последнее равенство означает, что при нашем определении \tilde{n} модельное ядро, от энергии которого отсчитываются оболочечные поправки, остается в ненагретом состоянии, несмотря на то, что распределение \tilde{n} размыто на широком интервале энергии. Поэтому лишена смысла кажущаяся на первый взгляд правдоподобной интерпретация выражения (41) для $\delta \mathcal{U}$ как взятой с обратным знаком энергии возбуждения ядра, нагретого до температуры $\tilde{\gamma}$, из которой затем вычтено среднее значение энергии нагревания равно $\tilde{\gamma}^2 \tilde{g}(E_F)$. Такая интерпретация действительно возможна при $2m = 0$, но при этом получаются бессмысленные результаты.

Величина $\delta \mathcal{U}$ остается приближенно одинаковой также и для разных аппроксимаций оболочечного потенциала. Разумеется, при этом речь идет о хороших моделях: приближение модели оболочечных поправок требует, чтобы отклонение среднего потенциала от истинного было минимальным.

Оболочечные поправки к энергии и связанные с ними величины выражаются через три универсальные безразмерные функции $f(x)$, $n(x)$ и $f^*(x)$, определенные соответственно формулами (32), (39), (45) и (46). Эти функции для некоторых значений степени корректировочного полинома $2m$ приведены на рис. 4.

4. ОБОБЩЕННЫЕ СИЛЫ, СВЯЗАННЫЕ С ОБОЛОЧКАМИ

Как видно из предыдущего, приближение первого порядка в методе оболочечных поправок оказывается особенно простым и заключается в анализе вариации полной одночастичной энергии, рассчитанной для среднего потенциала модели оболочек.

Это приближение не зависит явно ни от парного взаимодействия между нуклонами, ни от вариаций плотности $\delta\rho$. Приближение второго порядка явно содержит эти величины [см. разд. 2, уравнение (17)]. Однако легко убедиться в том, что и первое приближение для оболочечной поправки определенным образом связано с оболочечными вариациями плотности частиц. Рассмотрим производную $\delta\mathcal{U}$ по некоторому внешнему параметру β , от которого она зависит, так как он входит в определение среднего поля \bar{V} . Таким параметром может быть, например, параметр деформации поверхности ядра или радиуса ядра R_0 . Взятая с обратным знаком эта производная есть не что иное, как обобщенная сила, действующая в направлении переменной β , если последнюю рассматривать как некоторую обобщенную коллективную координату:

$$\delta F_\beta = -\partial\delta\mathcal{U}/\partial\beta. \tag{50}$$

Пусть $\Delta\bar{V}$ — изменение среднего поля, вызванное небольшим изменением β :

$$\Delta\bar{V} = \frac{\partial\bar{V}}{\partial\beta} \Delta\beta. \tag{51}$$

В первом порядке теории возмущений изменение одночастичной энергии

$$\Delta E_\lambda = \int dv \Delta\bar{V} |\Phi_\lambda|^2. \tag{52}$$

Варьируя выражением (31) для плотности уровней, найдем изменение сглаженной плотности

$$\Delta\tilde{g}(E) = -\frac{1}{\gamma} \sum_\lambda (\Delta E_\lambda) \frac{\partial}{\partial E} f [(E_\lambda - E)/\tilde{\gamma}]. \tag{53}$$

При этом заменили дифференцирование по E_λ дифференцированием по E , что с точностью до знака дает такой же результат. Заметим, что условие малости возмущения в разложении (52) состоит в том, что изменение энергии уровня должно быть мало по сравнению с интервалом усреднения $\tilde{\gamma}$. Изменение плотности уровней можно записать также как

$$\Delta g_\gamma(E) = -\int dv (\Delta\bar{V}) \frac{\partial}{\partial E} \rho_\gamma(\mathbf{r}, E). \tag{54}$$

Здесь введена новая величина

$$\rho_\gamma(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{\gamma} \sum_\lambda |\Phi_\lambda(\mathbf{r})|^2 f [(E_\lambda - E)/\gamma], \tag{55}$$

которую можно интерпретировать как усредненную по интервалу γ около энергии E плотность нуклонов в фазовом пространстве, Интеграл по объему от $\rho_\lambda(\mathbf{r}, E)$ равен плотности уровней

$$g_\gamma(E) = \int dv \rho_\gamma(\mathbf{r}, E), \tag{56}$$

а усредненная по энергетическому распределению пространственная плотность нуклонов

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = 2 \int_{-\infty}^{E_F} dE \rho_{\nu}(\mathbf{r}, E) = 2 \Sigma_{\lambda} |\Phi_{\lambda}(\mathbf{r})|^2 \tilde{n}_{\lambda}. \quad (57)$$

Воспользовавшись выражением (41) для оболочечной поправки, найдем

$$\Delta(\delta \mathcal{U}) = \int dv \Delta \bar{V} \delta \rho^s(\mathbf{r}), \quad (58)$$

где

$$\delta \rho^s(\mathbf{r}) = 2 \Sigma_{\lambda} |\bar{\Phi}_{\lambda}(\mathbf{r})|^2 \delta n_{\lambda}. \quad (59)$$

Отсюда получаем

$$\partial(\delta \mathcal{U})/\partial \beta = \int \frac{\partial \bar{V}}{\partial \beta} \delta \rho^s(\mathbf{r}) dv. \quad (60)$$

Это выражение показывает, что производная $\delta \mathcal{U}$ связана с величиной $\delta \rho^s$, которая представляет осцилляции пространственной плотности нуклонов, вызванные неоднородным распределением одночастичных уровней около энергии Ферми, т. е. энергетическими оболочками.

Формулу (60) можно также записать в виде

$$\frac{\partial(\delta \mathcal{U})}{\partial \beta} = 2 \Sigma_{\lambda} \langle \lambda | \frac{\partial \bar{V}}{\partial \beta} | \lambda \rangle \delta n_{\lambda}. \quad (61)$$

Замечая, что [21]

$$\langle \lambda | \frac{\partial \bar{V}}{\partial \beta} | \lambda \rangle = \partial E_{\lambda} / \partial \beta,$$

найдем

$$\frac{\partial \delta \mathcal{U}}{\partial \beta} = 2 \Sigma_{\lambda} (\partial E_{\lambda} / \partial \beta) \delta n_{\lambda}. \quad (62)$$

Производная

$$-F_{p\lambda} = \partial E_{\lambda} / \partial \beta$$

характеризует наклон одночастичного λ -уровня в диаграмме, представляющей одночастичный спектр в зависимости от величины параметра среднего потенциала β , например наклон уровня в диаграмме Нильссона при деформации, равной β ($F_{p\lambda}$ — парциальная сила уровня). Учитывая вид распределения δn_{λ} (см. рис. 3), можно записать

$$\delta F = F_{p>} - F_{p<},$$

где

$$F_{p>} \cong 2 \Sigma_{E_{\lambda} \geq E_F} F_{p\lambda} \delta n_{\lambda} \quad (63)$$

суммарная сила уровней, расположенных соответственно выше и ниже энергии Ферми в интервале порядка $\tilde{\gamma}$. Таким образом, деформирующая оболочечная сила является разностным эффектом и связана с неоднородностью распределения около энергии Ферми.

В дополнение к δF_β необходимо учесть также и классические силы, соответствующие капельной части полного выражения для энергии связи ядра (30), такие, как силы поверхностного натяжения и кулоновские силы. Полная сила

$$F = F_{\text{кул}} + F_{\text{пов}} + \delta F_\beta. \quad (64)$$

В частности, условие равновесия формы состоит в том, что равнодействующая сил, действующих на форму поверхности, должна равняться нулю:

$$F_{\text{кул}} + F_{\text{пов}} + \delta F_\beta = 0. \quad (65)$$

Поскольку в обычных условиях капельные члены значительно превосходят оболочечную поправку $\delta \mathcal{U}$, то и оболочечная сила мала по сравнению с $F_{\text{кул}}$ и $F_{\text{пов}}$. Оболочечная поправка δF_β в условии равновесия (65) оказывается существенной только вблизи точек равновесия капельной модели, где

$$F_{\text{кул}} + F_{\text{пов}} \approx 0. \quad (66)$$

В частном случае небольшой квадрупольной деформации β_q

$$\partial \bar{V} / \partial \beta_q = \kappa \hat{q}(\mathbf{r}), \quad (67)$$

где $\hat{q}(\mathbf{r})$ — одночастичный оператор квадрупольного момента; κ — константа связи с поверхностью [22]. Для квадрупольной оболочечной силы δF_q получаем

$$\delta F_q = \kappa \int dv \hat{q} \delta \rho^s = \kappa \delta Q^s, \quad (68)$$

т. е. оболочечная сила оказывается пропорциональной квадрупольному моменту распределения $\delta \rho^s$, который, в свою очередь, определяется как разность квадрупольных моментов $Q^s_>$ и $Q^s_<$ одночастичных состояний, расположенных выше и ниже энергии Ферми. Эта дополнительная сила действует на поверхность ядра в направлении избыточной плотности (рис. 5) в полном соответ-

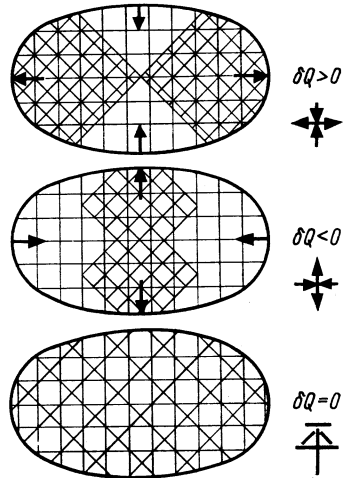


Рис. 5. Связь деформирующей оболочечной силы, действующей на поверхность ядра, с пространственной вариацией плотности нуклонов; стрелками указано направление сил. Равновесию соответствует $\delta Q = 0$.

ствии с качественными представлениями объединенной модели Рейнуотера — Бора — Моттельсона [22, 23], хотя $\delta\rho^s$ не соответствует ни распределению плотности отдельной частицы (Рейнуотер), ни нуклонам незаполненной оболочки (Бор, Моттельсон).

Для равновесной формы при небольшой деформации относительно сферы выполняется условие (66) и

$$\delta F = \kappa \delta Q = 0,$$

т. е. одночастичный квадрупольный момент ядра совпадает с таковым для сглаженного распределения нуклонов $\tilde{\rho}^s(r)$. Эти вопросы будут рассмотрены более подробно в связи с проблемой деформированных ядер в части II.

5. ОСЦИЛЛЯЦИИ ПЛОТНОСТИ НУКЛОНОВ

Вопрос о происхождении осцилляций плотности нуклонов в ядрах представляет самостоятельный интерес. Эта проблема неоднократно рассматривалась в литературе в рамках модели оболочек [24]. Недавние расчеты распределения нуклонов в ядрах по усовершенствованному приближению типа Хартри — Фока с феноменологическим взаимодействием, зависящим от локальной плотности, показали, что осцилляции плотности имеют место также и при взаимодействии, препятствующем отклонению плотности от равновесного значения. Рассчитанное слегка осциллирующее распределение согласуется с данными по рассеянию электронов высоких энергий [25].

Выше было показано, что некоторая часть осцилляций плотности связана с неоднородностью распределения одночастичных состояний около энергии Ферми (большими оболочками), и именно эта компонента осцилляций плотности связана с оболочечными вариациями энергий связи ядер.

В литературе существование больших оболочек связывается традиционно со сферичностью среднего одночастичного потенциала или объясняется сходством с потенциалом гармонического осциллятора. Такая интерпретация никогда серьезно не обосновывалась, между тем, как показали конкретные расчеты, речь идет о весьма общем явлении [12]. Значительные неоднородности оболочечного типа обнаруживаются практически при любой форме потенциальной ямы и любом одночастичном потенциале. Они остаются, например, при увеличении параметров спин-орбитального взаимодействия в несколько раз по сравнению с нормальным значением, хотя магические числа при этом совершенно иные. Присутствие магических оболочек в деформированных ядрах имеет решающее значение в вопросе о происхождении устойчивых равновесных деформаций ядер и для процесса деления [12, 26].

Формально проблема состоит в анализе причин и условий появления значительных неоднородностей в распределении собственных значений однородного уравнения типа уравнения Шредингера. Аналогичная задача появляется, например, в теории радиочастотных и лазерных резонаторов, когда возникает необходимость сосредоточить собственные частоты системы в ограниченной области. Этому вопросу посвящена довольно обширная математическая литература, в частности [27].

Было показано, что существование групп собственных значений соответствует появлению простых периодических траекторий классического движения, которые возникают как огибающие пакета собственных функций (см., например, [27]). Каждая из собственных функций при этом имеет мало общего с классической траекторией или с другими функциями пакета. К сожалению, лишь совсем недавно была отмечена возможность такой интерпретации оболочечных явлений в ядрах. Бальян и Блок [28] рассматривают функцию Грина для одночастичной задачи, усредненную по конечному интервалу энергии γ . Плотность уровней, усредненная по интервалу,

$$g_{\gamma}(E) = \frac{1}{\pi} \int dE' \frac{\gamma}{(E-E')^2 + \gamma^2} \Sigma_{\lambda} \delta(E' - E_{\lambda}) = \frac{1}{\pi} \text{Im Sp} [(E - H - i\gamma)^{-1}]. \quad (69)$$

Эта величина выражается через усредненную функцию Грина, через которую можно выразить также и усредненное по энергии распределение плотности нуклонов в пространстве. Такая функция Грина определяется уравнением Шредингера с комплексной энергией $\tilde{E} = E + i\gamma$. При достаточно большом интервале усреднения γ и квазиклассичности движения вдали от точек поворота решение соответствует приближению Томаса — Ферми с характерным гладким распределением. При меньшем, но конечном γ возникают осцилляции в энергетическом и пространственном распределениях нуклонов, которые связываются со стационарными классическими периодическими траекториями. Несколько таких траекторий в сферической потенциальной яме с бесконечно высокими стенками показано на рис. 6. Траектории каждого типа характеризуются периодической зависимостью от величины волнового вектора \mathbf{k} с периодом порядка

$$\Delta k \approx \pi/2R, \quad (70)$$

где $2R$ — величина порядка размера системы. Этому соответствует период по энергии порядка

$$\Delta E \approx E_F (\pi/k_F R) \approx \frac{1}{2} E_F A^{-1/3}, \quad (71)$$

где k_F — импульс для энергии Ферми E_F . Эта оценка согласуется с величиной $\hbar\Omega$. При усреднении большее значение имеют более простые траектории [28]. Периодические траектории характеризуются различной степенью устойчивости по отношению к вариациям формы ямы, и можно предположить, что именно это обстоятельство приводит к стабилизации оболочками одних форм данного ядра и уменьшению устойчивости других.

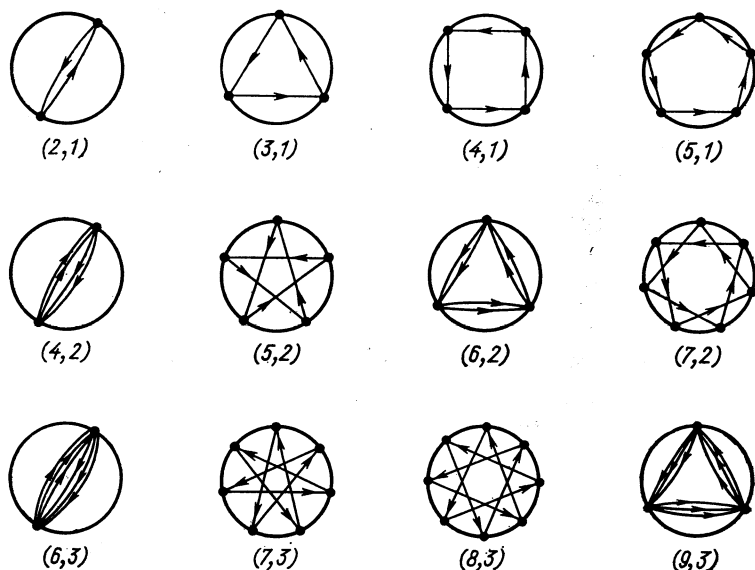


Рис. 6. Периодические траектории частицы в сферической потенциальной яме, с которыми связываются большие нуклонные оболочки. Каждой такой траектории отвечает пакет квантовых одночастичных состояний и сгущение одночастичных энергий. Числа в скобках — классификация периодических орбит по Блоку и Бальяну [28], первая цифра — число вершин, вторая — число поворотов вокруг центра.

К сожалению, формальный метод, развитый в работах [28], мало пригоден для конкретных расчетов, особенно при использовании реалистических потенциалов и при произвольной форме ядра. Практически проще получить решение одночастичной задачи с помощью одного из существующих численных методов [19], а затем выделить осциллирующие компоненты, как описано выше. Такой подход обладает большей общностью и более гибок. Связь нашего метода с работами Бальяна и Блока, которые имеют большое значение для качественного понимания результатов расчетов по модели оболочечных поправок, вполне очевидна.

Отметим также работу А. С. Тяпина [29], в которой было показано, что оболочечные осцилляции одночастичной энергии

можно определить аналитически как поправочные члены при корректной замене сумм по уровням интегралами. При этом получаются такие же результаты, как при численном усреднении в модели оболочечных поправок. Применимость метода Тяпина ограничивается тем, что необходимо знать аналитическое выражение для одночастичного спектра.

Оболочечные осцилляции являются следствием замкнутости объема потенциальной ямы, т. е. в конечном счете следствием конечности размеров ядра. В системе невзаимодействующих частиц возможны также осцилляции пространственной плотности нуклонов, не связанные с оболочками. Кон и Шэм [30] обратили внимание на то, что в системе независимых частиц в пространстве, ограниченном отражающей плоской стенкой, также возникают осцилляции плотности. Амплитуда таких колебаний убывает по мере удаления от края, и, таким образом, речь идет о некотором поверхностном явлении. Происхождение этого эффекта легко понять. Вблизи стенки все волновые функции обращаются в нуль, а суммарная плотность выражается в виде

$$\rho(z) = \text{const} \int_{(k^2 < k_F^2)} dk \sin^2(k_z z), \quad (72)$$

где z — координата в направлении, перпендикулярном стенке. Из этого выражения находим

$$\rho(z) = \rho(\infty) \left(1 + 3 \frac{\cos x}{x^2} - 3 \frac{\sin x}{x^3} \right), \quad (73)$$

где $x = 2k_F z$. Плотность (72) осциллирует вблизи края с периодом

$$\Delta z \approx \pi/k_F, \quad (74)$$

причем амплитуда осцилляции убывает как $1/z^2$ (рис. 7). Первые два слагаемых в (73) совпадают с асимптотической формулой Кона и Шэма.

Ясно, что такой тривиальный эффект должен присутствовать и в модели оболочек, особенно в тех случаях, когда средний потенциал имеет достаточно резкую границу, как, например, в модели

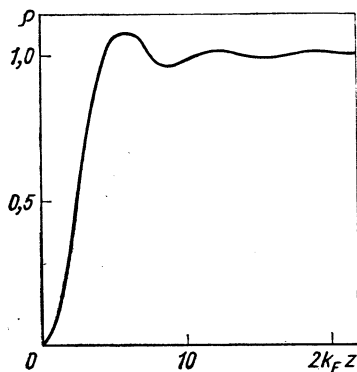


Рис. 7. Осцилляции плотности вблизи бесконечной стенки (эффект Кона — Шэма) [30].

Вудса — Саксона. Отделить его можно, воспользовавшись тем обстоятельством, что, в отличие от оболочечных осцилляций, краевые слабо зависят от энергии Ферми. Следовательно, они должны присутствовать в осцилляциях плотности нуклонов после усреднения по спектру с $\gamma \approx \tilde{\gamma}$, тогда как оболочечные осцилляции должны исчезнуть. Рассмотрим с этих позиций результаты конкретных расчетов. Выше уже было введено четыре различные функции, характеризующих пространственное распределение нуклонов, а именно плотность нуклонов ρ^c в самосогласованной задаче, статистически усредненное распределение $\bar{\rho}^c$, с которым связывается средний потенциал модели оболочек \bar{V} , плотность ρ^s для несамосогласованной задачи, в которой \bar{V} — внешний потенциал (плотность в модели оболочек), и, наконец, ρ^s , полученная с «размазанным» по оболочкам распределением чисел заполнения \tilde{n}_λ . Как видно из (60), для оболочечных вариаций энергий связи ядер существенной величиной является

$$\delta\rho^s = \rho^s - \tilde{\rho}^s, \quad (75)$$

и в духе изложенных выше качественных соображений именно ее естественно сопоставить с оболочечными осцилляциями плотности, связанными с классическими периодическими орбитами.

Несколько примеров распределений плотности ρ^s и $\tilde{\rho}^s$ приведено на рис. 8 и 9. В расчетах использовался обычный сферический потенциал модели Вудса — Саксона. Для того чтобы избежать осложнений, связанных с малой глубиной энергии Ферми в потенциальной яме, использовался потенциал, соответствующий ядру с $Z = 114$ и $N = 184$. За счет большой величины радиуса ямы в ней помещается больше связанных состояний, что позволяет использовать сравнительно широкий интервал $\tilde{\gamma}$. Радиальные функции нормированы на единицу при интегрировании по радиусу, так что

$$\int_0^\infty r^2 \rho^s dr = \int_0^\infty r^2 \tilde{\rho}^s dr = N. \quad (76)$$

Несколько примеров величины $\delta\rho^s$ дано на рис. 10. Видно, что амплитуда $\delta\rho^s$ действительно мала, за исключением области вблизи $r = 0$ порядка 1,0—1,5 ферми. Здесь отклонение ρ^s от среднего значения достигает 15—20%, но объем этой области мал и она не вносит существенного вклада в величины, содержащие интегралы по объему ядра. Рис. 10 показывает, что $\delta\rho^s$ не определяется распределением нуклонов в последней заполненной подоболочке (j -уровень). В частности, величина $\delta\rho$ не возрастает вблизи края ядра в тех случаях, когда заполняется подоболочка

Рис. 8. Оболочечная плотность нейтронов $\rho^s(r)$ в модели Вудса — Саксона. Потенциальная яма для ядра $Z = 114, N = 184$.

Кривые приведены для разных заполнений уровней ямы, соответствующих указанным числам нуклонов.

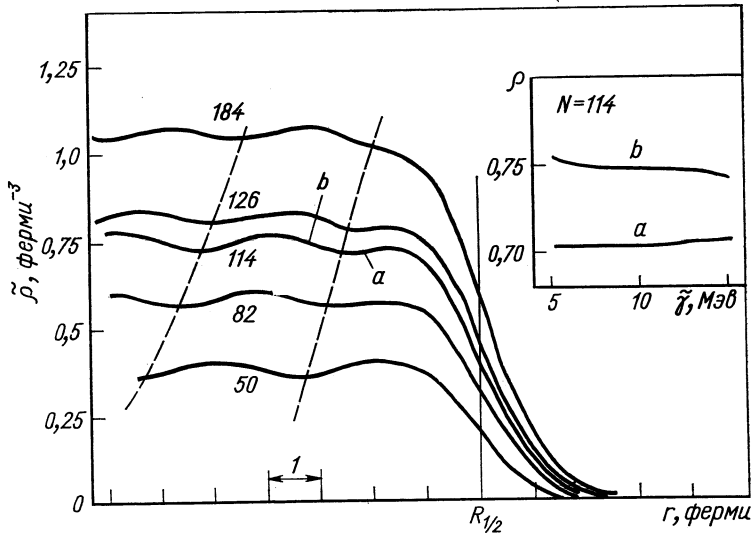
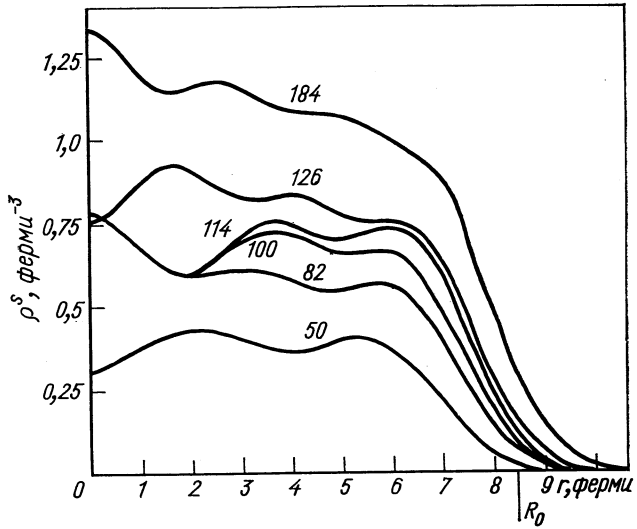


Рис. 9. Плотность нейтронов в модели оболочек, сглаженная по энергетическому распределению, для тех же чисел заполненных уровней и той же потенциальной ямы, что и на рис. 8.

Осцилляции $\tilde{\rho}^s$ не зависят от заполнения оболочек и качественно соответствуют эффекту Кона — Шэма. Однозначность определения осцилляций $\tilde{\rho}^s$ иллюстрируется на вставке, где в увеличенном масштабе показаны значения $\tilde{\rho}^s(r)$ в двух точках, соответствующих максимуму (b) и минимуму (a). Для удобства сравнения кривых совмещены радиусы половинной плотности $R_{1/2}$.

с большим угловым моментом. Вблизи края ядра амплитуда $\delta\rho^s$ мала, и эта область также не вносит особого вклада в оболочечные поправки.

Распределение $\delta\rho^s$ мало изменяется при росте радиуса потенциальной ямы, несмотря на значительное увеличение числа уровней, которые учитываются при вычислении среднего значения.

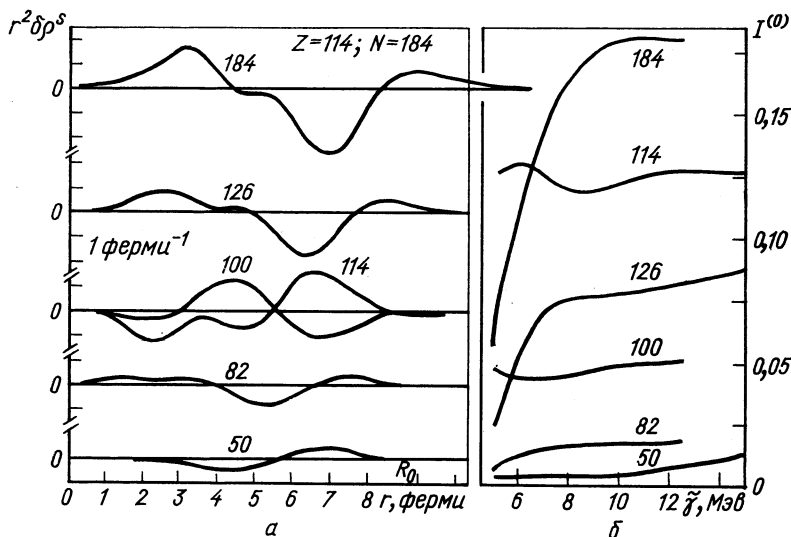


Рис. 10. Оболочечная компонента осцилляций одночастичной плотности $\delta\rho^s(r)$ (а) для различного числа заполненных уровней ямы и интеграл (77) от квадрата $\delta\rho^s$, которым определяется масштаб второго приближения модели оболочечных поправок (б). Независимость I^0 от $\tilde{\gamma}$ показывает однозначность определения $\delta\rho^s$.

Фактически изменяется только амплитуда $\delta\rho^s$, убывающая пропорционально кубу радиуса ямы.

Характерной особенностью модели Вудса — Саксона является то, что амплитуда осцилляций плотности, связанных с оболочками ($\delta\rho^s$), значительно меньше вариации величины ρ^s . Согласно уравнению (75), это означает, что сглаженное по энергии распределение $\tilde{\rho}^s$ в данном случае сохраняет значительную долю осцилляций. Остаточные осцилляции естественно интерпретировать как вызванные краевым эффектом Кона — Шэма. Однако прежде всего следует убедиться, что осцилляции выделяются однозначно при использовании размазанных чисел заполнения \tilde{n}_λ , полученных из средних величин в разд. 3 (см. рис. 9). Там показаны (в увеличенном масштабе) значения одной из функций $\tilde{\rho}^s$, взятые

в минимуме и максимуме. Неопределенность, связанная с выбором параметра $\tilde{\gamma}$, не превосходит нескольких процентов амплитуды колебаний $\tilde{\rho}^s$.

Сравнение приведенных на рис. 9 распределений, рассчитанных для разного числа нуклонов, показывает, что осцилляции $\tilde{\rho}^s$ не связаны с оболочечной структурой и практически не зависят от N , причем период осцилляций приблизительно совпадает с оценкой (74). (В данном случае $k_F \sim N^{-1/3}$, так как радиус потенциальной ямы не меняется.) Для удобства сравнения все распределения приведены к одному и тому же значению радиуса половинной плотности $R_{1/2}$. Это вызвано тем, что хотя все распределения рассчитаны в одной и той же яме, длина хвостов распределений в классически запрещенной области разная в зависимости от положения уровня Ферми в яме, вследствие чего эффективный радиус плотности оказывается несколько большим для большего числа нуклонов. По-видимому, этим объясняется также и меньшая амплитуда краевого максимума для наибольшего числа нуклонов $N = 184$, когда отличие от приближения бесконечно высокой стенки сказывается сильнее.

Амплитуда остаточных осцилляций $\tilde{\rho}^s$ должна уменьшаться в модели Нильссона или в чистом гармоническом осцилляторе, где нуклонные распределения для глубоких состояний характеризуются изменяющимся радиусом, и при интегрировании по состояниям в уравнении (72) происходит усреднение также и по радиусу распределения, что приводит к дополнительному сглаживанию осцилляций. Такое качественное соображение согласуется с численными расчетами. В противоположность модели Вудса — Саксона амплитуда остаточных осцилляций ρ^s в модели Нильссона мала, а для простого гармонического осциллятора $\tilde{\rho}^s$ практически не отличается от гладкого квазиклассического распределения модели Томаса — Ферми, за исключением, разумеется, классически запрещенной области, где томас-фермиевская плотность равна нулю, а $\tilde{\rho}^s$ конечно, хотя и экспоненциально мало (рис. 11 и 12), см. также [31].

В отличие от $\tilde{\rho}^s$ осцилляции плотности $\delta\rho^s$ связаны только с энергетическими оболочками в распределении одночастичных уровней около энергии Ферми. Для них получаются близкие результаты в различных реалистических моделях (ср., например, рис. 8, 10 и 11, где показаны расчеты для $Z = 82$ в модели Вудса — Саксона и модели Нильссона). Эти разные модели отражают близкие распределения одночастичных уровней около энергии Ферми. Несколько примеров $\delta\rho^s$ для разных N показано на рис. 10. Для удобства представления $\delta\rho^s$, весьма малого при средних значениях радиуса, эта величина умножена на r^2 .

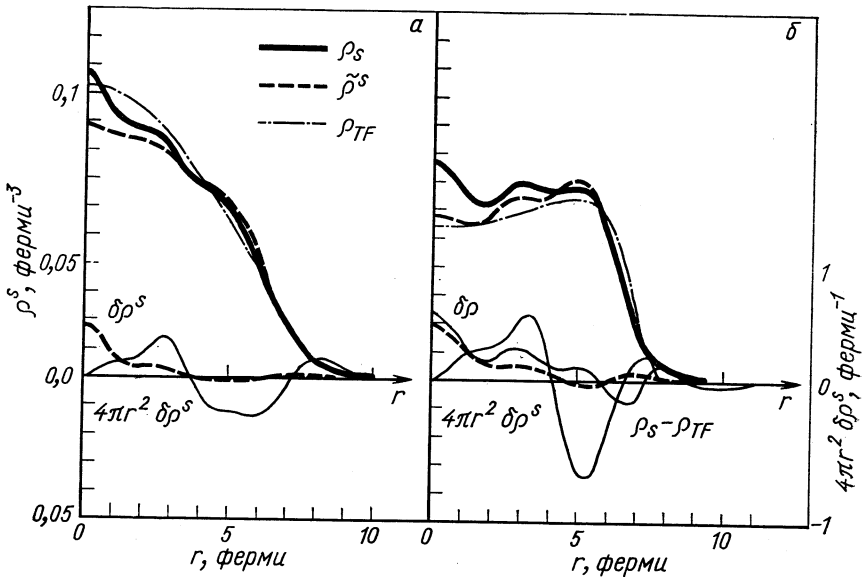


Рис. 11. Различные распределения плотности протонов и оболочечные поправки к пространственной плотности, рассчитанные для ядра Rh^{208} с помощью модели Нильссона (а) и модели Вудса — Саксона (б): томас-фермиевские распределения ρ_{TF} вычислены без ls -члена, а для модели Нильссона — также и без l^2 -члена. В расчетах с моделью Вудса — Саксона учитывался кулоновский потенциал [13].

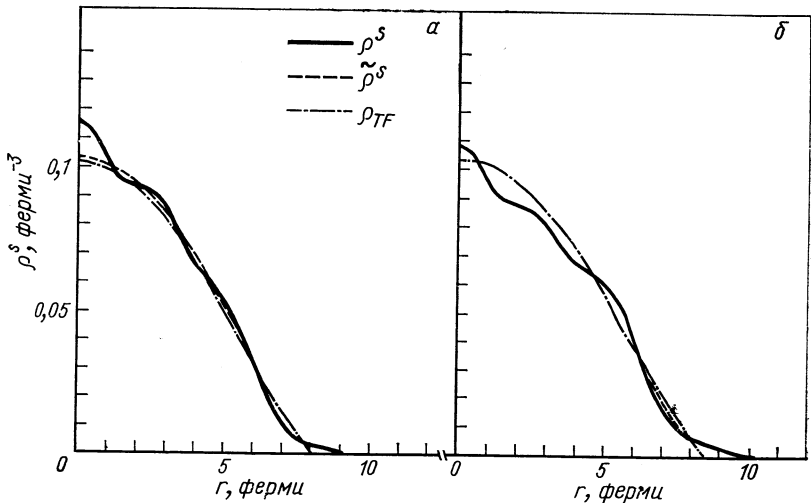


Рис. 12. Распределения плотности, рассчитанные для магических чисел нуклонов $N = 70$ в осцилляторном потенциале (а) и $N = 82$ в осцилляторном потенциале с добавлением спин-орбитального члена (б): томас-фермиевская плотность на рис. б практически совпадает со сглаженной по оболочкам, за исключением классически запрещенной области при $r > 7$ ферми.

Справа изображен интеграл

$$I_0 = \int_0^{\infty} r^2 (\delta\rho^s)^2 dr \quad (77)$$

в зависимости от параметра $\tilde{\gamma}$. Приближенное постоянство такой величины как функции $\tilde{\gamma}$ свидетельствует об однозначности определения $\delta\rho^s$. Интеграл (77) может служить для оценки масштаба членов порядка $(\delta\rho)^2$ в уравнениях (15) и (17). Чтобы формально оценить величину оболочечной поправки и члены более высокого порядка, необходимо знать амплитуду $\delta\rho$ в объеме ядра. Предположим, что разница между ρ^s и $\tilde{\rho}^s$ определяется флуктуацией плотности в последней оболочке. Поскольку большая оболочка содержит в среднем $A^{2/3}$ нуклонов, среднеквадратическая флуктуация числа частиц, связанная с ней, равна

$$\Delta A \approx \int_0^{\infty} r^2 \sqrt{(\delta\rho^s)^2} dr \approx A^{1/3},$$

т. е. порядка $A^{-2/3}$ относительно полного числа частиц. В численных расчетах для величины ΔA получается значение порядка нескольких единиц. Таким образом, среднее значение

$$\delta\rho/\rho \sim A^{-2/3}. \quad (78)$$

Теперь оценим амплитуду оболочечной вариации энергии связи ядра $\delta\mathcal{U}$. Для этой цели воспользуемся уравнением (60), где $\Delta\bar{V}$ соответствует изменению среднего потенциала \bar{V} , вызванное различием числа нуклонов на величину порядка $A^{2/3}/2$, что соответствует переходу от магического ядра к середине оболочки. Изменение \bar{V} сводится к изменению объема v потенциальной ямы на величину порядка $\Delta v/v \approx A^{-1/3}/2$. Для вариации оболочечной поправки от магического ядра к середине оболочки имеем оценку

$$\Delta(\delta\mathcal{U}) \approx E_F \delta\rho \Delta v \approx \frac{1}{2} E_F \approx 20 \text{ Мэв} \quad (79)$$

(глубина потенциальной ямы предполагается равной $E_F \approx 40 \text{ Мэв}$). Эта оценка для максимальной амплитуды вариации оболочечной поправки согласуется с величинами, найденными в численных расчетах для сферических ядер. В действительности же вариация оболочечной поправки при переходе к середине большой оболочки оказывается меньше, чем оценка (79), из-за того, что меняется форма ядра.

Оценку величины членов второго порядка в (15) определяют, беря первую итерацию в уравнении (23) для Γ и заменяя там пар-

ное взаимодействие δ -функцией:

$$v(1, 2) \approx f_0 (dE_F/d\rho) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

где коэффициент $f_0 \approx 1$ [17]. В этом случае

$$I \approx \frac{1}{9} f_0 E_F r_0^3 I_0.$$

Численные расчеты дают для I значения менее 1—2 *Мэв*. Близкие по величине значения получаются в более точных расчетах с амплитудой Γ , вычисленной по теории конечных ферми-систем [14]. С помощью (78) находим формальную оценку

$$I \approx \frac{f_0}{3} E_F \frac{1}{A^{1/3}} \approx \frac{1}{A^{1/3}} \delta \mathcal{U}.$$

Остаточные осцилляции $\tilde{\rho}^s$ являются следствием крайнего предположения о полной независимости движения всех частиц в ядре и, по-видимому, должны отсутствовать в реальных случаях из-за возрастающего влияния нуклонных корреляций для более глубоких состояний. Но это не имеет значения для расчетов оболочечных явлений, так как показано, что даже такое осциллирующее распределение является плавной функцией атомного номера, деформации * и т. п. Это позволяет отождествить его со статистически усредненным распределением $\tilde{\rho}^s$, которое вводится при обосновании модели оболочечных поправок. Появление в методе оболочечной поправки нескольких плотностей, характеризующих пространственное распределение нуклонов, создает возможность нового подхода к проблеме определения коллективных переменных формы ядра. Действительно, вполне естественно определить коллективные переменные формы по сглаженному распределению $\bar{\rho}$, например по величине квадрупольного момента этого распределения:

$$\bar{Q} = \int \hat{q} \bar{\rho} dr. \quad (80)$$

Такое распределение формы является весьма удобным обобщением метода, принятого в статистической модели ядер [32], где форма ядра определяется по гладкому томас-фермиевскому распределению плотности. Таким образом, можно отказаться от требования микроскопического самосогласования для коллективных переменных, которое вносит большие трудности и фактически не позволяет отличить изменение формы от небольших колебаний плотности в объеме ядра.

* В. В. Пашкевич показал, что плавность сохраняется при произвольной деформации ядра.

6. МАССЫ ЯДЕР

Расчет масс ядер является одним из основных применений метода оболочечной поправки. В этой части рассмотрим только некоторые вопросы, связанные с расчетами оболочечных поправок к капельным массам сферических ядер.

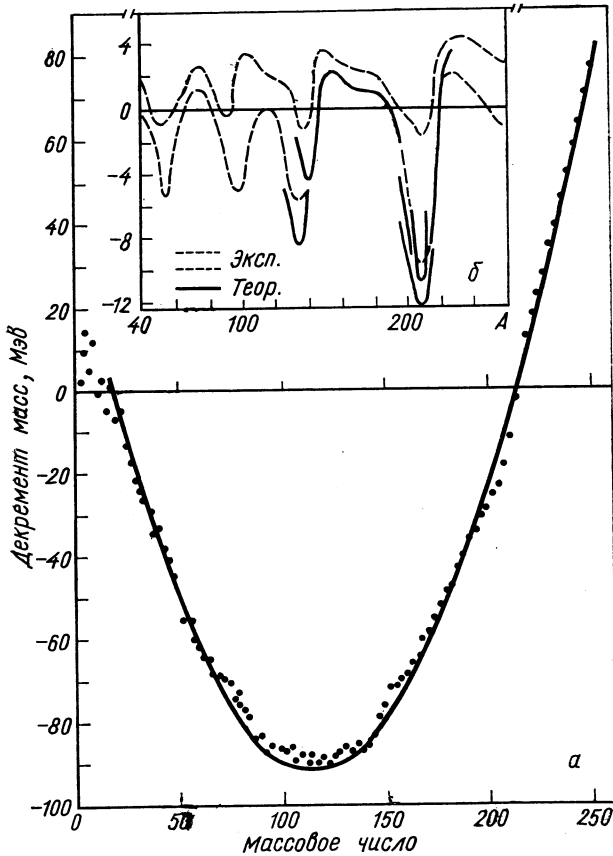


Рис. 13. Оболочечные эффекты в массах ядер:
 а — зависимость декремента масс ядер от массового числа [34];
 б — рассчитанные оболочечные поправки для основных состояний сферических и деформированных ядер сравниваются с отклонениями экспериментальных масс от капельного значения для сферического ядра, экспериментальным значениям соответствует область между двумя пунктирными кривыми [12].

Общая картина оболочечных вариаций масс ядер изображена на рис. 13. Видно довольно близкое согласие теоретических расчетов с опытом. Следует отметить, что в этих расчетах использовался один из простых первоначальных вариантов модели Нильссона

и не вводилось каких-либо параметров. Впоследствии подобные расчеты, но несколько в другом плане, были проведены Сигером [33], и полная масса ядра имеет следующий вид:

$$M(N, Z) = M_{\text{к.м}}(N, Z) + \Delta M(N, Z),$$

где $\Delta M(N, Z)$ — рассчитываемая оболочечная поправка. Это выражение используется для одновременной подгонки параметров капельной модели (К. М) и нильссоновского потенциала из условия наилучшего совпадения с экспериментальными массами.

Интересно, что таким образом определяются параметры нильссоновского потенциала, весьма близкие к обычным, полученным подгонкой одночастичного спектра. Хотя подобные расчеты еще далеки от совершенства, было найдено довольно хорошее согласие почти для 1000 ядер со среднеквадратическим отклонением 0,6—0,7 *Мэв*, т. е. примерно такое же, как и при феноменологическом подходе, когда для описания оболочечных поправок к массам вводят много дополнительных специальных параметров. Эту погрешность следует сравнить с величиной порядка 2—3 *Мэв* среднеквадратического отклонения от экспериментальных масс для простой капельной модели. Нильссон, Томпсон и Цанг [35] провели недавно расчеты оболочечных поправок к массам ядер, используя последний вариант модели Нильссона. Хотя при этом не было достигнуто значительного улучшения среднеквадратического отклонения, было показано, что в расчетах воспроизводится даже сравнительно тонкая структура эмпирических оболочечных поправок (рис. 14).

К сожалению, из-за технических трудностей еще не проводились систематические расчеты такого рода с более реалистичским потенциалом модели Вудса — Саксона. Имеющиеся результаты для нескольких отдельных случаев согласуются с результатами для модели Нильссона. При расчетах масс ядер необходимо учесть более точно остаточные взаимодействия, которые во всех работах [13, 18, 33, 35] учитывались лишь в виде куперовского спаривания, а также учесть член $(\delta\rho)^2$, который не учитывался в главном приближении модели оболочечных поправок и который также зависит от остаточного взаимодействия.

Отклонения экспериментальных масс ядер от «гладкого» приближения капельной модели можно найти во многих работах, посвященных феноменологическому описанию масс ядер. Эти отклонения сравнительно слабо зависят от конкретного вида используемого выражения для гладкой части, и их можно рассматривать как вполне определенные эмпирические данные (рис. 15), где приведены данные Майерса и Святецкого [7]. На рисунке изображена разность между экспериментальной массой ядра и вычисленным капельным значением в зависимости от числа нейтронов N и протонов Z . Как обычно, капельное значение вклю-

чает также поправку на четно-нечетный эффект (так называемую энергию спаривания), т. е.

$$M_{\text{к. м}} = M_{\text{к. м}}^0 + (11,0/A^{1/2}) \delta, \text{ Мэв}, \quad (81)$$

где

$$\delta = \begin{cases} +1 & \text{для четного ядра;} \\ 0 & \text{для нечетного ядра;} \\ -1 & \text{для нечетно-нечетного ядра.} \end{cases}$$

Поправка (81) устраняет четно-нечетные флуктуации эмпирических масс. Заметим также, что $M_{\text{к. м}}^0$ в уравнении (81) соот-

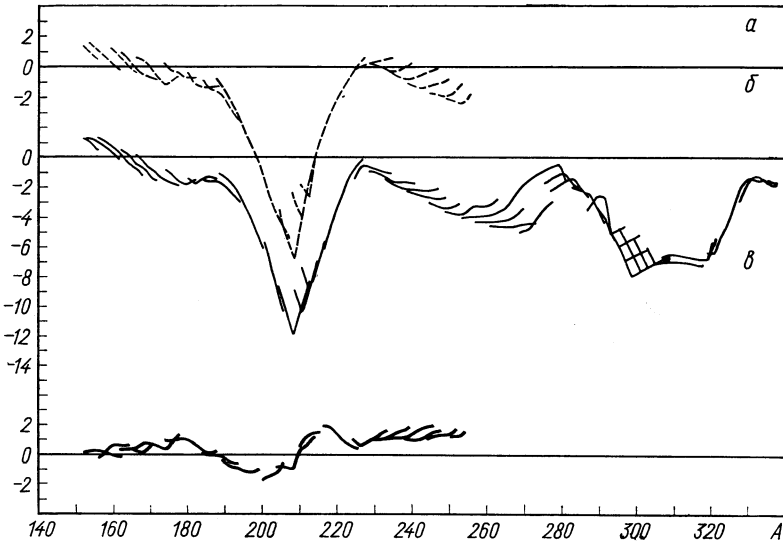


Рис. 14. Оболочечные поправки к формуле Вайцзекера (капельной модели):

a — экспериментальные значения (Мэв); *b* — расчет с более совершенной моделью Нильссона (Мэв); *в* — расхождение теоретических и экспериментальных значений (Мэв), согласно [35]. В расчетах учитывалось спаривание нуклонов в приближении Бардина — Купера — Шриффера.

ветствует сферическому ядру. В деформированных ядрах капельная энергия деформации

$$\mathcal{D}_{\text{к. м}} = M_{\text{к. м}}(\beta) - M_{\text{к. м}}^0 \quad (82)$$

также вносит вклад в разность ΔM между реальной массой ядра и модельным выражением (81). В уравнении (82) β может означать любой параметр деформации или набор таковых.

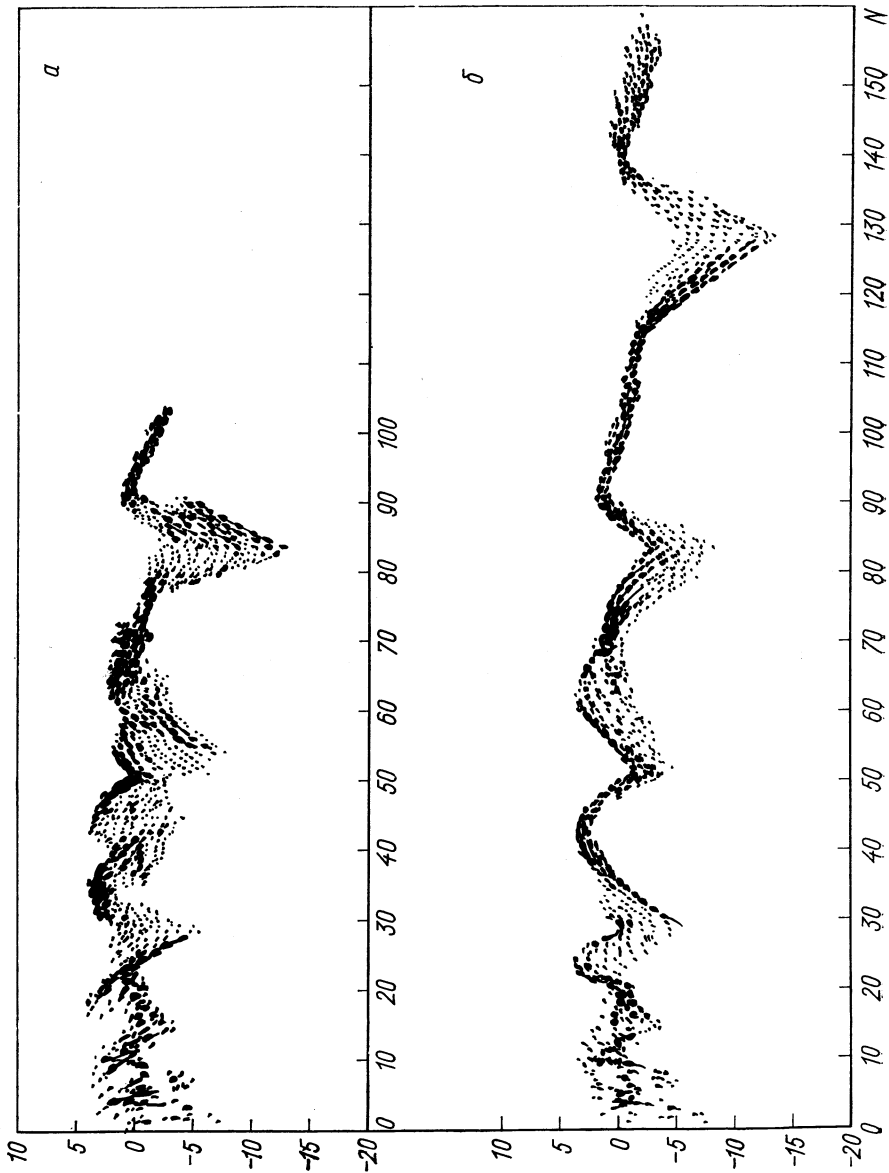


Рис. 15. Зависимость отклонения экспериментальных масс ядер (M_{exp}) от значения кэпальной модели для ядра сферической формы от числа протонов (а) или нейтронов (б) в ядре [7].

Таким образом, теоретическая величина, которую следует сравнивать с экспериментальными ΔM на рис. 15, равна

$$\Delta M = [\mathcal{E}_{\text{к. м}} + \sum_{i=p, n} (\delta \mathcal{U}_i + \delta P_i) + \sum_{i, j=p, n} I_{ij}]_{\beta=\beta^*}, \quad (83)$$

где $\delta \mathcal{U}_i$ — оболочечные поправки для протонов и нейтронов; δP_i — соответствующие поправки к энергии спаривания; I — поправки $(\delta p)^2$. Все величины рассчитываются для равновесной деформации ядра в основном состоянии $\beta = \beta^*$, которая находится из минимизации выражения (83) по параметрам, определяющим форму ядра.

Необходимо отметить, что величина ΔM , которую находят из уравнения (83), сравнивается непосредственно с экспериментальными значениями дефектов масс отдельных ядер, тогда как обычно в микроскопических теориях рассматриваются более или менее сложные комбинации масс отдельных ядер для того, чтобы избавиться от вклада членов типа капельной модели, как, например, в подходе, основанном на теории ферми-жидкости [17]. Для иллюстрации возможностей метода и возникающих специфических проблем рассмотрим ниже более детально область сферических ядер около дважды магического ядра ^{208}Pb .

Прежде всего отметим важную особенность эмпирических значений ΔM , приведенных на рис. 15. Видно, что в сферических околomagических ядрах все ΔM_n , определяемые в зависимости от числа нейтронов для заданного числа протонов, представляются в виде ряда приблизительно параллельных кривых. Величина сдвига при изменении Z равна приращению ΔM , рассматриваемого в зависимости от Z при заданном N . Подобная картина имеет место также и для зависимости от N . Это означает, что в первом приближении эмпирические оболочечные поправки можно представить в виде суммы независимых друг от друга парциальных оболочечных поправок для нейтронов и протонов отдельно:

$$\Delta M(N, Z) \approx \Delta M_n + \Delta M_p \quad (84)$$

в соответствии с главными членами формулы (83). Таким образом, зная ΔM_n для нескольких значений числа протонов (ΔZ) и ΔM_p — для нескольких значений числа нейтронов (ΔN), получаем оболочечные поправки ΔM для $\Delta N \Delta Z$ отдельных ядер. Из данных, приведенных на рис. 15, видно, что это имеет место приблизительно для 20—30 четных ядер вблизи свинца, и неточность приближения (84) в данной области не превосходит $0,5 M_{\text{эв}}$. При большем удалении от магического ядра параллельность ΔM_n и ΔM_p нарушается, что может быть вызвано изменением формы ядра. Уже на основании указанных данных можно сделать вывод, что величина членов взаимодействия I_{ij} в уравнении (83) невелика. Действительно, амплитуда эффективного протон-нейтронного парного взаимодействия частица — дырка в ядрах того же порядка

даже превосходит амплитуду nn - или pp -взаимодействия, между тем как член np -взаимодействия I_{np} в уравнении (83) оказывается настолько мал, что не отражается существенно на независимости парциальных ΔM_n и ΔM_p . Такой вывод подтверждается результатами численных расчетов поправки второго порядка по δr , для которой в области свинца получаются значения, не превосходящие 1 Мэв [14].

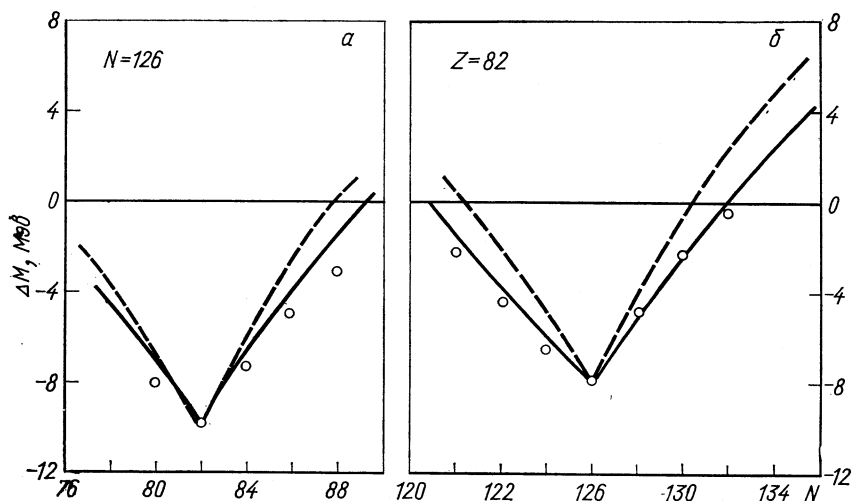


Рис. 16. Зависимость рассчитанных и эмпирических оболочечных поправок для некоторых сферических ядер около свинца от числа протонов (а) и нейтронов (б) в ядре:

○ — эмпирические значения Майерса и Святецкого; — — расчет в первом приближении модели оболочечных поправок с учетом спаривания по Бардину — Куперу — Шрифферу; — — — — то же самое без спаривания. В расчетах [13] использовался потенциал Вудса — Саксона. Теоретические кривые сдвинуты к экспериментальной точке для Pb^{208} , который имеет расхождение в $1-3 \text{ Мэв}$ для полной оболочечной поправки, ее экспериментальное значение $13,5 \text{ Мэв}$.

Это свойство позволяет несколько упростить сравнение теоретических значений с экспериментом. Определим сначала наилучшие экспериментальные парциальные оболочечные поправки для нейтронов и протонов. Например, нейтронные поправки можно получить, усредняя для каждого числа нейтронов N величину $\Delta M(Z, N+2) - \Delta M(Z, N)$ по нескольким значениям Z . То же самое можно сделать и для протонных поправок [13]. Усредненные парциальные поправки можно использовать в качестве экспериментальных значений в приближении уравнений (84) (рис. 16). Заметим, что из данных рис. 15 нельзя определить абсолютные значения ΔM_n и ΔM_p в отдельности, поскольку из опыта находится только их сумма ΔM , равная $12,8 \text{ Мэв}$ для ^{208}Pb . Таким образом, дело сводится к рассмотрению отдельно относительного изме-

нения ΔM_n и ΔM_p в зависимости от N и Z и вопросу о соответствии суммы этих величин полной оболочечной поправке для одного из ядер, например ^{208}Pb .

Интересная особенность распределения эмпирических значений ΔM около магических ядер состоит в том, что наклон прямых ΔM_n и ΔM_p значительно отличается по обе стороны от магического числа нуклонов. Так, из рис. 15 следует, что величина ΔM увеличивается в среднем на $2,3 \text{ Мэв}$ при росте N на две единицы, тогда как слева от $N = 126$ при уменьшении N на две единицы ΔM возрастает всего на $1,4 \text{ Мэв}$. Для протонов около $Z = 82$ соответствующие приращения равны $2,3$ и $1,2 \text{ Мэв}$. Подобная картина наблюдается также и около других магических чисел. Из рис. 16 видно, что эта особенность хорошо воспроизводится в расчетах в отличие от обычных феноменологических формул [7].

Представляется интересным выяснить, с чем связано такое различие. Для этого рассмотрим изменение оболочечной поправки при изменении числа нуклонов на две единицы. Непосредственно из определения $\delta\mathcal{U}$ имеем

$$\delta\mathcal{U}(N+2) - \delta\mathcal{U}(N) \approx 2 [E_{N+2} - \tilde{E}_F(N)]; \quad (85)$$

$$\delta\mathcal{U}(N-2) - \delta\mathcal{U}(N) \approx 2 [\tilde{E}_F(N) - E_N], \quad (86)$$

где \tilde{E}_F — энергия Ферми для «сглаженного» распределения; E_{N+2} и E_N — энергия последних заполненных одночастичных уровней для $N+2$ и N . Сумма величин (85) и (86) при $N = 126$ соответствует разности приращений справа и слева от магического числа $N = 126$. Эта величина равна

$$4 \{1/2 (E_{N+2} + E_N) - \tilde{E}_F\}. \quad (87)$$

Видно, что разница наклонов связана с отклонением положения $\tilde{E}_F(N)$ от среднего значения внутри щели между двумя ближайшими уровнями больших оболочек. В результате того, что число нуклонов в более высокой (большей) оболочке больше, энергия Ферми для сглаженного распределения оказывается ниже середины щели, что приводит к своеобразной асимметрии частиц и дырок (ср. пунктирные кривые на рис. 16).

Эффект асимметрии практически исчезает, если учитывается спаривание нуклонов в приближении Бардина — Купера — Шриффера (см. сплошные кривые на рис. 16). Происходит это потому, что энергия спаривания оказывается значительно больше в случае пары частиц, добавленных к магическому остову в состоянии с большим угловым моментом, чем для пары дырок в состоянии с малым моментом $p_{3/2}$ [13]. Теория Бардина — Купера — Шриффера неточна при малом числе частиц вне магического остова, но видно, что уже в этом простом приближении имеется неплохое согласие с опытом.

Еще лучшее согласие для ΔM_{np} в отдельных ядрах около свинца получается, если уменьшить приблизительно на 1,6 $Mэв$ расстояние между всеми уровнями двух соседних оболочек ^{208}Pb . Формально это эквивалентно добавлению постоянной энергии спаривания 1,5 $Mэв$ для каждой пары частиц или дырок относительно дважды магического остова. Расхождение рассчитанных величин ΔM_{np} с экспериментальными значениями в отдельных ядрах не превосходит тогда 0,2 $Mэв$. Этот результат заставляет предположить, что именно к такому простому эффекту сводится влияние взаимодействия спаривания.

Расхождение в несколько мегаэлектронвольт в величине оболочечной поправки для ^{208}Pb вполне соответствует точности главного приближения оболочечной поправки. Сравнение результатов расчетов с другими вариантами одночастичной модели показывает, что различие также находится в пределах теоретической оценки ошибки порядка $A^{-1/3} \approx 20\%$.

Вполне возможно, что точность расчетов масс сферических ядер удастся значительно повысить после того, как будут учтены члены порядка $(\delta\rho)^2$ и будет использовано лучшее приближение теории парных корреляций. Однако во многих других случаях, особенно в теории деформированных ядер, достаточно точности простого первого приближения модели оболочечных поправок и приближения Бардина — Купера — Шриффера для парных корреляций. Приложения модели оболочечных поправок к теории деформированных ядер и деления будут освещены во второй части обзора.

ЛИТЕРАТУРА

1. De-Shalit A., Talmi I. Nuclear Shell Theory, Academic Press, N. Y.—L., 1963.
2. Bohr A. Proc. int. Conf. on Nuclear Structure, Tokio, 1967.
3. Mottelson B., Nilsson S. G. Phys. Rev., 1955, 99, 1615.
4. Bes D. R., Szymanski Z. Nucl. Phys., 1963, 28, 42.
5. Belyaev S. T. Mat.-fys. medd. dansk vid. selskab., 1959, 31, 11.
6. Myers W. D., Swiatecki V. J. Nucl. Phys., 1966, 81, 1.
7. Myers W. D., Swiatecki V. J. Proc. Int. Symp. «Why and How...» Lysekil, Sweden 1966. Almquist and Wiksell, Stockholm, 1968, p. 343.
8. Strutinsky V. M. Phys. chem. fiss., 1965, 1, 171.
9. Гейликман Б. Т., Хлебников Г. И. «Ядерная физика», 1968, 7, 215.
10. Струтинский В. М. «Ядерная физика», 1966, 3, 613.
11. Strutinsky V. M. Nucl. Phys., 1967, A95, 420.
12. Strutinsky V. M. Nucl. Phys., 1968, A122, 1.
13. Brack M. e.a. Rev. Mod. Phys., 1972 (in press).
14. Bunatyan G. G., Kolomietz W. M., Strutinsky W. M. Nucl. Phys., 1972 (in press).
15. Bethe H. A. Preprint. Cornell University, Ithaca, 14850, 1971.
16. Bethe H. A. Phys. Rev., 1968, 167, 879.
17. Мигдал А. Б. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер. М., «Наука», 1965.

18. Nilsson S. G. e.a. Nucl. Phys., 1969, A131, 1.
19. Damgaard J. e.a. Nucl. Phys., 1969, A135, 432.
20. Lin W. Phys. Rev., 1970, C2, 871.
21. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Т. III. М., Физматгиз, 1963.
22. Bohr A., Mottelson B. Kgl. danske vid. selskab. Mat.-fys. medd., 1953, 27, N 16.
23. Rainwater J. Phys. Rev., 1950, 79, 432.
24. Green A. E. S., Lee K., Berkley R. J. Phys. Rev., 1956, 104, 1625.
25. Negele J. W. Phys. Rev., 1970, C1, 1260.
26. Vjornholm S., Strutinsky V. M. Nucl. Phys., 1969, A136, 1.
27. Лазуткин В. Ф. «Ж. вычисл. матем. и матем. физ.», 1970, 10, № 2, 362—373.
28. Balian R., Bloch C. Ann. Phys., 1970, 60, 401. Preprint (1971) DPh — T/71—16.
29. Тяпин А. С. «Ядерная физика», 1971, 14, 88.
30. Kohn W., Sham L. J. Phys. Rev., 1965, A137, 1697.
31. Siemens P. J. Phys. Rev., 1970, C1, 98.
32. Струтинский В. М., Тяпин А. С. ЖЭТФ, 1963, 45, 960.
33. Seeger P. A. Proc. of the Third International Conference of Atomik Masses, Winnepeg, 1967.
34. Strutinsky V. M. Proc. Int. Symp. «Why and How...» Lysekil, Sweden, 1966. Almquist and Wiksell, Stocholm, 1968, p. 629.
35. Nilsson S. G., Thompson S. G., Tsang C. F. Phys. Lett., 1969, 28B, 458.