

## ФИЗИКА АТОМНОГО ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

**Приближение для матрицы плотности в расчетах потенциала среднего поля взаимодействия ядер**С. А. Гончаров<sup>а</sup>, Р. В. Сухоруков*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра нейтронографии. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.**E-mail: <sup>а</sup>gsa@srd.sinp.msu.ru*

Статья поступила 27.06.2017, подписана в печать 24.07.2017.

Предложено приближение для расчета одночастичной матрицы плотности ядра в рамках вычисления обменной компоненты потенциала среднего поля в модели двукратной свертки. Метод основан на псевдоосцилляторном представлении матрицы плотности и позволяет разделить одночастичную и межнуклонную переменные, что многократно упрощает и ускоряет процесс вычисления потенциала среднего поля. Тестовые расчеты на примерах взаимодействия альфа-частиц с ядрами  $^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$  показали адекватность предложенного приближения.

*Ключевые слова:* матрица плотности, потенциал среднего поля, модель гармонического осциллятора, дифракционная оптическая модель, легкие ядра.

УДК: 539.172.17. PACS: 21.10.Re, 24.10.Nt, 25.55.Ci.

**Введение**

В работе [1] для описания упругого рассеяния в ядро-ядерных столкновениях в области энергий до 100 МэВ/нуклон в рамках дисперсионной оптической модели была разработана и в дальнейшем многократно апробирована дисперсионная полумикроскопическая модель оптического потенциала (ДПМОП), теоретической основой которой является формализм эффективного потенциала [2]. Этот потенциал, будучи нелокальным, комплексным и зависящим от энергии, представляется в виде суммы двух составляющих: «статической» и «динамической». Первая из них — взаимодействие ядер в их основных состояниях — не зависит от энергии и называется потенциалом среднего поля (СП). Вторую обычно называют динамическим поляризационным потенциалом (ДПП), в котором заключена информация обо всех возможных, отличных от упругого каналов взаимодействия ядер, как о виртуальных (действительная часть ДПП), так и реальных (мнимая часть ДПП) переходах. ДПП формирует «основную» зависимость от энергии эффективного потенциала. Важнейшую роль играют аналитические свойства эффективного потенциала и дисперсионные соотношения между действительной и мнимой частями ДПП [2, 3].

Одна из основных причин нелокальности связана с действием принципа Паули, приводящего к появлению так называемых обменных компонент в эффективном потенциале. В результате применения различных приближений для перехода к локальному представлению возникает «дополнительная» слабая и плавная энергетическая зависимость эффективно-го потенциала.

ДПМОП сочетает микроскопический расчет СП и феноменологическое построение ДПП. ДПП стро-

ится на основе физически оправданной комбинации объемной и поверхностной форм, геометрические параметры которых предполагаются независимыми от энергии, что позволяет явно учесть дисперсионные соотношения [1]. Такая модель эффективно имеет меньшее число параметров, чем обычная оптическая модель, и позволяет уменьшить неоднозначность анализа, сохраняя простоту и удобство применения.

Микроскопический расчет СП принципиально предложен довольно давно в рамках известной модели двукратной свертки [4]. Явный учет обменных эффектов осуществляется, однако, только в приближении одночастичного обменного выбивания («SNKE»), при этом для перехода к локальному представлению, как правило, используется плоско-волновое приближение ([1] и цит. лит.). Обменная компонента СП тогда выражается через соответствующие компоненты эффективных нуклон-нуклонных сил и одночастичные матрицы плотности взаимодействующих ядер.

Анализ экспериментальных данных в достаточно широком интервале энергий с использованием полностью феноменологического оптического потенциала и дисперсионных соотношений для объемных интегралов позволяет определить эмпирическую зависимость от энергии объемного интеграла СП. Оказалось (например, [5]), что эмпирическая зависимость заметно слабее получаемой при микроскопическом вычислении СП в рамках модели двукратной свертки с учетом обменных эффектов в приближении SNKE.

Основную причину этого дефицита следует искать в недостаточности приближений, используемых при вычислении обменной компоненты СП. Подробнее этот вопрос рассмотрен в работе [6], в которой предложен метод коррекции зависимости от энергии обменной компоненты СП через перенормировку,

определяемую эмпирической зависимостью от энергии объемного интеграла СП. Использование этого метода показало хороший результат (см., например, [7, 8]).

Обычно для вычисления матрицы плотности используется модифицированное слэтеровское приближение (например, [6] и цит. лит.), где матрица плотности выражается через произведение одночастичной плотности и обменного коррелятора, зависящего от эффективного импульса, который определяется выражением, полученным с использованием обобщенного приближения Томаса–Ферми для плотности кинетической энергии в форме, предложенной в работе [9]. В литературе встречаются варианты расчета матрицы плотности с другим приближением для плотности кинетической энергии, например [10], а также с использованием точного расчета в модели гармонического осциллятора для ядерных волновых функций. Более детально обобщенное приближение Томаса–Ферми и его применение для вычисления матрицы плотности анализируется в работе [11], а в работах [12–14] на конкретных примерах проведено сравнение обменных компонент, вычисленных с использованием двух версий приближения для плотности кинетической энергии с расчетом, в котором матрицы плотности взаимодействующих ядер вычислялись точно в рамках модели гармонического осциллятора. Было показано, что с включением плотностной зависимости эффективных нуклон-нуклонных взаимодействий отличие результатов расчета СП обеих версий и «точных» расчетов становится заметным, особенно для малых энергий. При этом следует подчеркнуть, что все эти варианты вычисления ядерных матриц плотности, являясь приближенными, довольно трудоемки.

В работе [6] предложено приближенное представление матрицы плотности в виде произведения эмпирической одночастичной плотности как функции относительной одночастичной координаты и простой гауссовской зависимости от межнуклонной координаты с параметром, пропорциональным зависимости от массового числа  $A^{1/3}$ . Такая факторизация многократно упрощает и ускоряет расчет. Если в качестве одночастичной плотности взять точное выражение в модели гармонического осциллятора, то матрица плотности точно совпадает с модельной для ядер с  $A \leq 4$ . Поэтому это приближение было названо «псевдоосцилляторным». Однако, очевидно, что форма зависимости от межнуклонной координаты для ядер с большим  $A$  должна быть более сложной.

В настоящей работе мы предлагаем и тестируем усовершенствованное приближенное факторизованное представление матрицы плотности более пригодное для более тяжелых ядер в микроскопических расчетах СП. В последующих разделах кратко представлены формализм микроскопического расчета СП, предлагаемая приближенная форма факторизации матрицы плотности и результаты те-

стовых расчетов СП и сравнения с другими приближениями.

### 1. Формализм микроскопического расчета СП

Напомним, что СП для взаимодействия ядра  $a$  с ядром  $A$  в рамках SNKE-приближения может быть представлен (см., например, [1, 15]) через интегралы свертки для прямой и обменной компонент (опуская спиновые переменные и спиновые компоненты):

$$\widehat{V}_F = \widehat{V}^D + \widehat{V}^E. \quad (1)$$

Здесь прямая компонента

$$\widehat{V}^D(r) = \sum_{T=0,1} \widehat{V}_T^D(r), \quad (2)$$

$$\widehat{V}_T^D(r) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 g_T^{c,D}(s) \rho_T^a(\mathbf{r}_1) \rho_T^A(\mathbf{r}_2),$$

где  $\rho_T^i$  — изоскалярная ( $T = 0$ ) и изовекторная ( $T = 1$ ) компоненты ядерных плотностей ( $i = a, A$ ), которые обычным образом определяются через распределения плотности протонов и нейтронов в каждом ядре,  $\mathbf{s} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}$  — межнуклонная координата — радиус-вектор между отдельными нуклонами взаимодействующих ядер и  $r$  — расстояние между центрами масс ядер.

Локализованная обменная компонента

$$\widehat{V}^E(r, \mathbf{E}) = \sum_{T=0,1} \widehat{V}_T^E(r, \mathbf{E}), \quad (3)$$

$$\widehat{V}_T^E(r, \mathbf{E}) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 g_T^{c,E}(s) \rho_T^a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 + \mathbf{s}) \rho_T^A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2 - \mathbf{s}) \times \exp\left(\frac{i\mathbf{K}(\mathbf{E}, \mathbf{r})\mathbf{s}}{\mu}\right),$$

$\rho_T^i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  — соответствующие компоненты ядерных матриц плотности, а величина локального импульса  $\mathbf{K}(\mathbf{E}, \mathbf{r})$  дается формулой

$$\mathbf{K}^2(\mathbf{E}, \mathbf{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} (\mathbf{E} - V(\mathbf{r}) - V_C(\mathbf{r})), \quad (4)$$

где  $V(\mathbf{r})$  и  $V_C(\mathbf{r})$  — ядерный и кулоновский потенциалы взаимодействия сталкивающихся ядер.

Как говорилось выше, в эффективные нуклон-нуклонные взаимодействия (в данном случае — центральные прямые и обменные компоненты) включается плотностная зависимость в виде являющегося функцией плотности множителя к модельному взаимодействию МЗУ (опуская индексы):

$$g(s, \rho) = f(\rho) \cdot g(s). \quad (5)$$

При этом в настоящей работе мы использовали параметризацию

$$f(\rho) = C \cdot [1 + \alpha \cdot e^{-\beta\rho} - \gamma \cdot \rho] \quad (6)$$

в версии «CDMЗУ6», где параметры определены по свойствам холодной ядерной материи [16], но, в отличие от работы [16], мы не вводим здесь искусственную зависимость от энергии.

Применение интегральных преобразований Фурье–Бесселя и разложения по мультиполям приводит далее к выражениям, по которым вычисляется обменная компонента:

$$\widehat{V}_T^E(E, r) = 4\pi \int_0^\infty g_T^{c,E}(s, \rho) j_0(K(E, r)s/M)s^2 ds \times \\ \times \int f_T^a(r_1, s) f_T^A(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|, s) d\mathbf{r}_1, \quad (7)$$

где  $K(E, r)$  — модуль локального импульса, а матрицы плотности после отделения части угловых переменных сводятся к так называемым профилям плотности  $f_T^i(x, s)$  ( $i = a, A$ ).

Эти выражения и детали вычислительных процедур представлены более подробно, например, в [1, 15].

## 2. Факторизованная форма матрицы плотности

В работе [14] в расчетах СП использовались профили плотности для ядер  $^{12}\text{C}$  и  $^{16}\text{O}$  в модели гармонического осциллятора:

$$f_{j,HO}^i(x, s) = \frac{4}{\pi^{3/2} b_{i,j}^3} \cdot \left[ 1 + \frac{F_j^i \cdot \left(x^2 - \frac{s^2}{4}\right)}{b_{i,j}^2} \right] \times \\ \times \exp\left(-\frac{s^2}{4b_{i,j}^2} - \frac{x^2}{b_{i,j}^2}\right), \\ j = p, n; \quad i = a, A, \quad (8)$$

где  $F = 4/3$  для  $^{12}\text{C}$  и  $F = 2$  для  $^{16}\text{O}$  и для протонов, и для нейтронов. Соответственно одночастичная плотность имеет вид

$$\rho_{j,HO}^i(x) = \frac{4}{\pi^{3/2} b_{i,j}^3} \cdot \left[ 1 + \frac{F_j^i x^2}{b_{i,j}^2} \right] \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{b_{i,j}^2}\right). \quad (9)$$

Выражение (8) можно переписать в виде

$$f_j^i(x, s) = \rho_{j,HO}^i(x) \cdot \left[ 1 - D_j^i(x) \cdot \frac{s^2}{4b_j^2} \right] \exp\left(-\frac{s^2}{4b_j^2}\right), \quad (10)$$

где

$$D_j^i(x) = \frac{F_j^i}{1 + F_j^i x^2 / b_j^2}. \quad (11)$$

Далее мы обобщаем эти выражения для других ядер следующим образом:

$$F_p^i = \frac{Z-2}{3} \quad \text{и} \quad F_n^i = \frac{N-2}{3}, \quad (12)$$

а также будем использовать систематику параметров осцилляторной модели из [17]:

$$b_{i,p}^2 = b_{i,n}^2 = b_i^2 = 0.983 \cdot A^{1/3} + 0.373 \text{ фм}^2. \quad (13)$$

Далее, чтобы разделить переменные  $x$  и  $s$ , что позволит многократно упростить и ускорить вычисления, принимается следующее приближение:

$$D_j^i(x) \approx D_j^i(x^2 = b_i^2) = \frac{F_j^i}{1 + F_j^i} \equiv \bar{D}_j^i. \quad (14)$$

И, наконец, модельную осцилляторную плотность в (10) мы заменяем на эмпирическую, параметры которой определяются из анализа различных

экспериментальных данных, а форма дает правильное асимптотическое поведение. Такие приближения оправдываются тем, что наибольшее отличие от точной зависимости находится в областях значений, дающих малый вклад в интеграл в силу известных форм радиальной зависимости нуклон-нуклонных взаимодействий и одночастичных плотностей. Это подтверждается ниже тестовыми расчетами.

Таким образом, для функций профиля плотности в изоспиновом представлении в (7) имеем приближенное выражение

$$f_T^i(x, s) = \rho_T^i(x) \cdot \left[ 1 - \bar{D}_T^i \cdot \frac{s^2}{4b_i^2} \right] \exp\left(-\frac{s^2}{4b_i^2}\right), \quad (15)$$

где  $\rho_T^i(x)$  — эмпирическая одночастичная плотность (материальная, или изоскалярная при  $T = 0$  и изовекторная при  $T = 1$ ). Используя (12), (14) и условие нормировки, можно получить

$$\bar{D}_T^i = \frac{1}{N + (-1)^T Z} \left[ \frac{N(N-2)}{N+1} + (-1)^T \frac{Z(Z-2)}{Z+1} \right], \quad (16)$$

(в случае  $N = Z$  считается, что изовекторные компоненты отсутствуют).

Заметим, что для ядер с  $A \leq 4$  мы можем использовать применявшуюся нами ранее в работе [6] приближенную форму, отвечающую  $\bar{D}_T^i = 0$ .

## 3. Тестовые расчеты

Чтобы оценить адекватность предложенных приближений, рассмотрим величину невязки отношений профиля плотности к одночастичной плотности для нашего приближения (15) и точного расчета в модели гармонического осциллятора (10) как функцию одночастичной и межнуклонной переменных:

$$\delta_T^i(x, s) = \left| \frac{f_T^i(x, s)}{\rho_T^i(x)} - \frac{f_{T,HO}^i(x, s)}{\rho_{T,HO}^i(x)} \right|. \quad (17)$$

Расчеты проведены для нескольких ядер:  $^4\text{He}$ ,  $^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$  и  $^{40}\text{Ca}$ . На рис. 1, а в качестве примера для ядра  $^{16}\text{O}$  представлен расчет величины как функции межнуклонной переменной  $s$  при различных значениях одночастичной переменной  $x$ . Здесь же показана величина эффективного нуклон-нуклонного взаимодействия в параметризации CDM3Y6 [16]. На рис. 1, б представлен расчет величины как функции одночастичной переменной  $x$  при различных значениях межнуклонной переменной  $s$  вместе с эмпирической материальной плотностью в параметризации из работы [18] и материальной плотностью в модели гармонического осциллятора (9) с множителем  $x^2$ , возникающем в интеграле (7).

Расчеты показывают, что наименьшее различие нашего приближения и осцилляторной модели находится в областях значений переменных  $x$  и  $s$ , которые дают основной вклад в интеграл (7) в силу радиальной зависимости нуклон-нуклонных взаимодействий и одночастичных плотностей. При этом

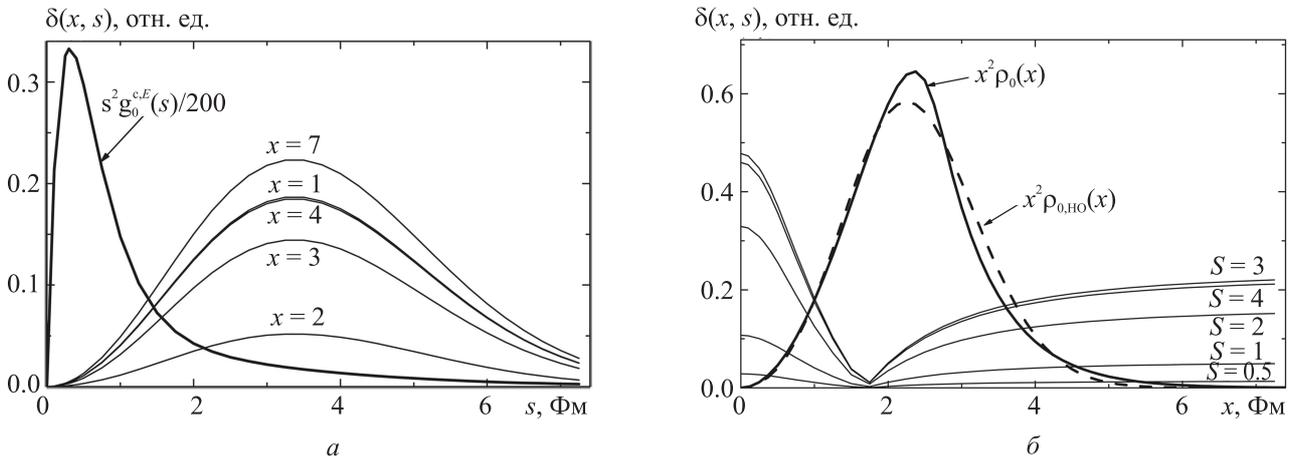


Рис. 1. Величина невязки: а — как функции межнуклонной переменной  $s$  при различных значениях одночастичной переменной  $x$  в сравнении с параметризацией CDM3Y6 [16] (для наглядности в уменьшенном в 200 раз масштабе); б — как функции  $x$  при различных значениях  $s$  в сравнении с эмпирической  $x^2$  [18] и  $x^2$  в модели гармонического осциллятора

наибольшее различие достигается при малых значениях одночастичной переменной  $x < 1$  Фм. Как видно из (7), это отвечает наибольшему искажению расчетного СП при малых радиусах  $r < 2$  Фм.

В качестве иллюстрации на рис. 2 представлен расчет СП на примере взаимодействия  $\alpha + {}^{12}\text{C}$  при лабораторной энергии  $\alpha$ -частиц 120 МэВ, который сравнивается с точным расчетом СП в модели гармонического осциллятора, а также с расчетами из работы [14], где использовались матрицы плотности в одной из форм модифицированного слэтеровского приближения СВ1 [9] и СВ2 [10], а в качестве материальных плотностей  $\alpha$ -частицы и ядра  ${}^{12}\text{C}$  — плотности в осцилляторной модели. В наших расчетах для ядра  ${}^{12}\text{C}$  мы использовали эмпирическую материальную плотность в параметризации из работы [18].

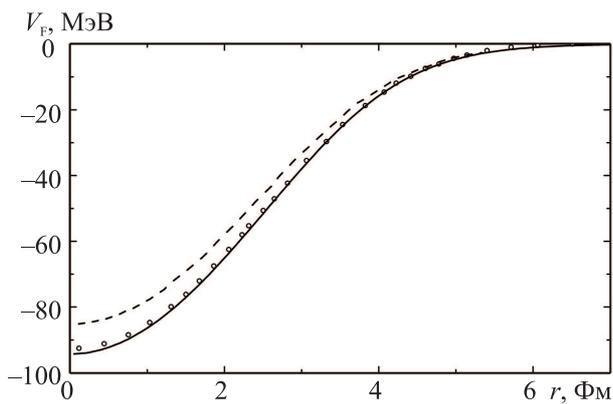


Рис. 2. Потенциал среднего поля для  $\alpha + {}^{12}\text{C}$  при энергии 120 МэВ (сплошная линия) в сравнении с точным расчетом в модели гармонического осциллятора (светлые кружки), а также с расчетами из работы [14], использующими приближения СВ1 и СВ2 (штриховые линии)

Как отмечалось в работе [14], результаты расчета с использованием приближения СВ1 отличаются от

точного расчета в осцилляторной модели только на 1%. Результаты наших расчетов также близки к точным расчетам в осцилляторной модели. Они ожидаемо сильнее отличаются в асимптотической области при больших  $r$ , давая более правильное поведение, а также при малых радиусах, на что нами указывалось выше. При этом хорошо известно, что наблюдаемые величины взаимодействия двух ядер в рассматриваемой области энергий не чувствительны к потенциалу как раз при таких малых радиусах. Отметим, что расчеты при других энергиях для рассмотренных пар ядер дают такие же результаты, показывая для более тяжелых ядер отличия несколько большие, но практически не существенные с точки зрения конечного результата вычисления СП и наблюдаемых величин.

### Заключение

Предложен приближенный метод расчета одночастичной матрицы плотности ядра в рамках вычисления потенциала среднего поля с использованием приближения одночастичного обменного выбивания для обменной компоненты в модели двукратной свертки. Метод основан на псевдоосцилляторном представлении матрицы плотности и позволяет разделить одночастичную и межнуклонную переменные, что многократно упрощает и ускоряет процесс вычисления потенциала среднего поля. Приближение протестировано на примерах взаимодействия альфа-частиц с ядрами  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{16}\text{O}$  и  ${}^{40}\text{Ca}$ . Результаты расчетов показали адекватность предложенного приближения.

В последующей работе будет представлен анализ имеющихся, в том числе новых данных по рассеянию  ${}^3\text{He} + {}^6\text{Li}$  в рамках дисперсионной полумикроскопической модели оптического потенциала с последующим использованием найденного потенциала для анализа неупругого рассеяния и реакции  ${}^6\text{Li} ({}^3\text{He}, t) {}^6\text{Be}$ .

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант 14-12-00079).

### Список литературы

1. Гончаров С.А., Князьков О.М., Коложвари А.А. // ЯФ. 1996. **59**. С. 666.
2. Satchler G.R. // Direct Nuclear Reactions. Clarendon Press, Oxford, 1983.
3. Mahaux C., Ngo H., Satchler G.R. // Nucl. Phys. A. 1986. **449**. P. 354.
4. Satchler G.R., Love W.G. // Phys. Rep. 1979. **55**. P. 83.
5. Ogloblin A.A., Goncharov S.A., Glukhov Yu.A. et al. // ЯФ. 2003. **66**. С. 1523.
6. Goncharov S.A., Izadpanah A. // Phys. At. Nucl. 2007. **70**. P. 18.
7. Goncharov S.A., Izadpanah A. // Phys. At. Nucl. 2007. **70**. P. 1491.
8. Belyaeva T.L., Danilov A.N., Dem'yanova A.S. // Phys. Rev. C. 2010. **82**. 054618.
9. Campi X., Bouyssy A. // Phys. Lett. B. 1978. **73**. P. 263.
10. Baltin R. // Z. Naturforsch. A. 1972. **27**. P. 1176.
11. Soubbotin V.B., Vinas X. // Nucl. Phys. A. 2000. **665**. P. 291.
12. Ismail M., Salah F., Osman M.M. // Phys. Rev. C. 1996. **54**. P. 3308.
13. Ismail M., Osman M.M., Salah F. // Phys. Rev. C. 1999. **60**. 037603.
14. Khoa D.T. // Phys. Rev. C. 2001. **63**. 034007.
15. Khoa D.T., Satchler G.R. // Nucl. Phys. A. 2000. **668**. P. 3.
16. Khoa D.T., Satchler G.R., von Oertzen W. // Phys. Rev. C. 1997. **56**. P. 954.
17. Kirson M.W. // Nucl. Phys. A. 2007. **781**. P. 350.
18. Sorensen J.H., Winther A. // Nucl. Phys. A. 1992. **550**. P. 329.

### An approximation for the density matrix in calculations of the mean-field potential of the interaction of nuclei

S. A. Goncharov<sup>a</sup>, R. V. Sukhorukov

*Department of Neutronography, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*

*E-mail: <sup>a</sup>gsa@srd.sinp.msu.ru.*

An approximation has been proposed for the nucleus single-particle density matrix in calculating the exchange component of the mean-field potential in the double-folding model. The method is based on the pseudo-oscillator representation of the density matrix and makes it possible to separate single-particle and internucleon variables, which greatly simplifies and accelerates the process of calculating the mean-field potential. Test calculations based on examples of alpha-particle interactions with <sup>12</sup>C, <sup>16</sup>O, and <sup>40</sup>Ca nuclei have shown the adequacy of the proposed approximation.

*Keywords:* density matrix, mean-field potential, harmonic oscillator model, diffraction optical model, light nuclei.

*PACS:* 21.10.Re, 24.10.Ht, 25.55.Ci.

*Received 27 June 2017.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2018. **72**, No. 3. Pp. 301–305.

### Сведения об авторах

1. Гончаров Сергей Антонович — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-24-92, e-mail: gsa@srd.sinp.msu.ru.
2. Сухоруков Руслан Владимирович — аспирант; тел.: (495) 939-24-92, e-mail: ruslan.sukhorukov@yandex.ru.