Расчеты переходов между однофононными состояниями на базисе функционала Фаянса: изотопы олова

М.И. Шитов, С.П. Камерджиев
НИЦ «Курчатовский Институт»

НИИЯФ МГУ
20.10.2022

План

- Общие соотношения
- Ангармонические эффекты второго порядка в ядерной квантовой теории многих тел
- Трехквазичастичные корреляции в основном состоянии
- Результаты расчетов для изотопов олова
- Особенность ^{114}Sn
- Выводы

Общие положения Теории Конечных Ферми-Систем

- Метод
  - Ядерная квантовая теория многих тел (метод функций Грина)
  - Активное использование диаграммных техник
- Малый параметр g^2

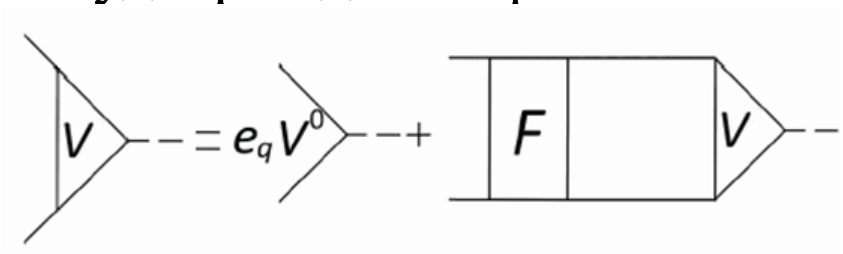
$$\alpha = \frac{|\langle 1||g_s||2\rangle|^2}{(2j_1+1)\omega_s^2} < 1$$

- Уравнения для вершины и амплитуды рождения фонона в поле:
  - Уравнение для эффективного поля

$$\hat{V}(\omega) = e_q\hat{V}_0(\omega) + \hat{F}\hat{A}(\omega)\hat{V}(\omega)$$

  - Амплитуда рождения фонона в поле

$$\hat{g}_s(\omega) = \hat{F}\hat{A}(\omega)\hat{g}_s(\omega)$$



Метод Хаотических фаз- МХФ (на языке квантовых функций Грина)

где

$$A(\omega) = \int G\ (\varepsilon + \omega/2)\, G\ (\varepsilon - \omega/2)\, d\varepsilon/(2\pi i)$$

означает частично-дырочный пропагатор, а $G\ (\varepsilon)$— квазичастичная функция Грина.

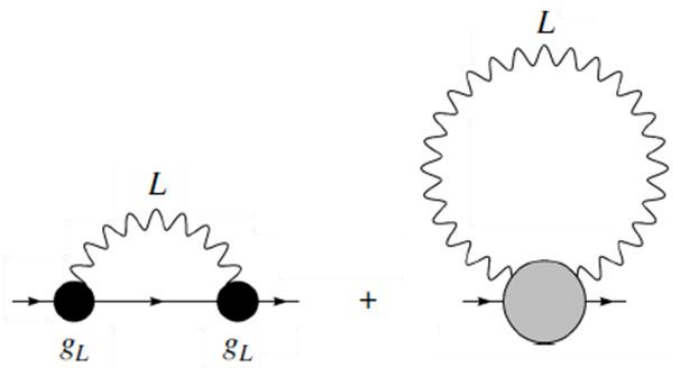
Энергетический функционал плотности(ЭФП) и квазичастично-фононные поправки

- Самосогласование: В нашем подходе мы используем только хорошо известный набор параметров ЭФП Фаянса[1,2] с параметрами DF3-a.
  - Среднее поле (основное состояние) определяется первой производной функционала по ядерной плотности.
  - Эффективное pp- и ph-взаимодействие определяется второй производной функционала.

- КФВ-поправка к массовому оператору[3]:

$$\delta\Sigma^{\mathrm{PC}} = \delta\Sigma^{\mathrm{pole}} + \delta\Sigma^{\mathrm{tad}}$$

$$\delta\Sigma^{\mathrm{tad}} = \int \frac{d\omega}{2\pi i}\,\delta_L g_L D_L(\omega)$$



КФВ-поправка к массовому оператору. Серый кружок обозначает неполюсной (tadpole) член.

1)А.В. Смирнов, С.В. Толоконников, С.А. Фаянс, ЯФ **48**, 1661 (1988)

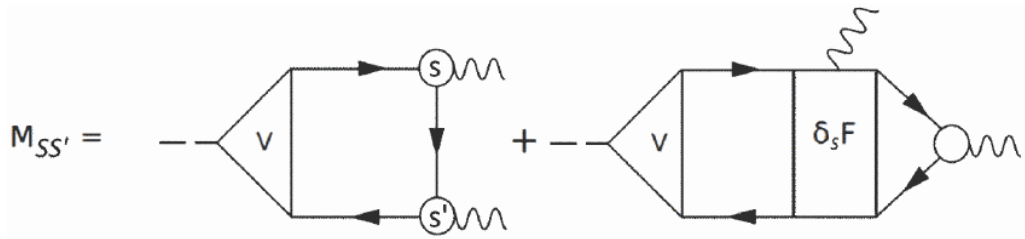
2)Э.Е. Саперштейн, С.В. Толоконников, ЯФ **79**, 703 (2016).

3)V.A. Khodel, E.E. Saperstein, Phys. Rep. **92**, 183 (1982).

Ангармонические эффекты второго порядка в рамках ядерной квантовой теории многих тел

- Амплитуда перехода[1] между однофононными состояниями в **ядрах без спаривания**

$$M_{ss'} = VGg_sGg_{s'}G + \underbrace{VGG\delta_sFGGg_{s'}}_{\text{незначительно}^2}$$



$$M_{ss'} = M^{(1)}_{ss'} + M^{(2)}_{ss'} = \sum_{123}[V_{12}(g^s_{31})^* g^{s'}_{23} A^{(1)}_{123} + V_{12} g^{s'}_{31}(g^s_{23})^* A^{(2)}_{123}],$$

Нижние индексы – одночастичные квантовые числа1=(n_1 ; j_1 ; l_1 ; m_1)

Суммирование по одночастичному базису до 100 MeV

- Пропагатор $A^{(1)}_{123}$ – интеграл от трех функций Грина

$$A^{(1)}_{123}(\omega_s, \omega_{s'}) = \int G_1(\varepsilon)G_2(\varepsilon+\omega)G_3(\varepsilon+\omega_s)d\varepsilon, \qquad \boldsymbol{A^{(12)}_{123} = A^{(1)} + A^{(2)}} = A_{\text{КФМ}} + A_{\text{КОС}}$$

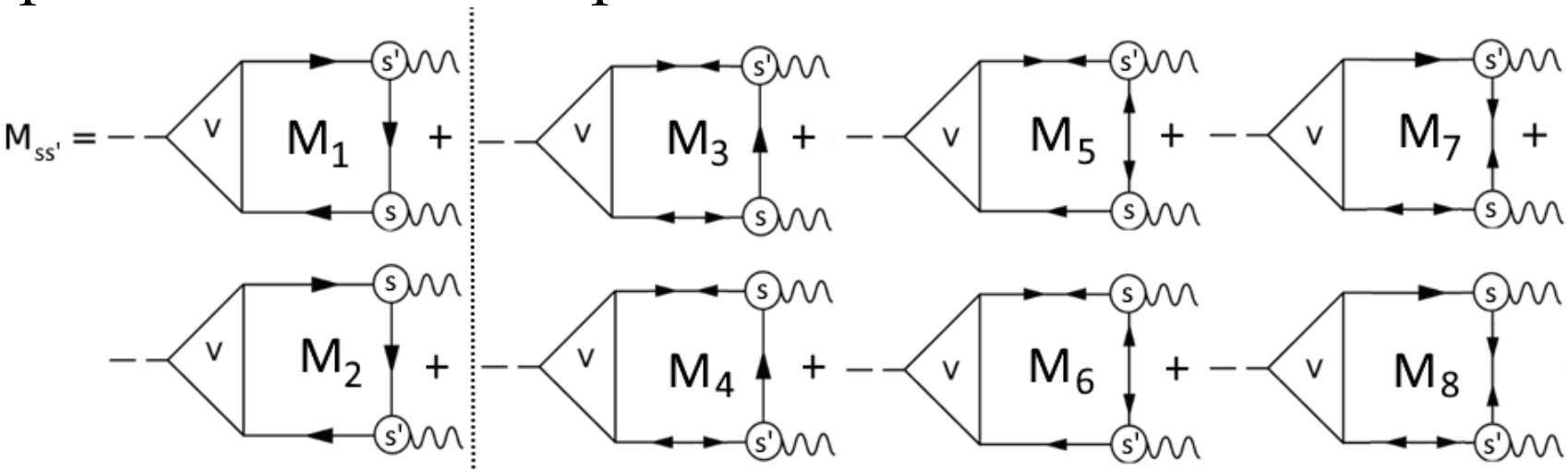
- Вероятность перехода $B(EL)(I_s \to I_{s'})$ с энергией $\omega = \omega_s - \omega_{s'}$:

$$B(EL) = \frac{1}{2I_s+1}|\langle I_s||M_L||I_{s'}\rangle|^2$$

1)В.А. Ходель, ЯФ **24**, 704 (1976).

2)D. A. Voitenkov [et al.] ,Physical Review C. **85** P. 054319. 2012

Ангармонические эффекты второго порядка в рамках ядерной квантовой теории многих тел



- Для учета спаривания нужно использовать набор функций Грина G и аномальных функций Грина F:

$$G_1(\varepsilon) = G_1^h(-\varepsilon) = \frac{u_1^2}{\varepsilon - E_1 + \imath\delta} + \frac{v_1^2}{\varepsilon + E_1 - \imath\delta}$$

$$F_1^{(1)}(\varepsilon) = F_1^{(2)}(\varepsilon) = -\frac{\Delta_1}{2E_1}\left[\frac{1}{\varepsilon - E_1 + \imath\delta} + \frac{1}{\varepsilon + E_1 - \imath\delta}\right],$$

где

$$E_1 = \sqrt{(\varepsilon_1 - \mu)^2 + \Delta_1^2}, u_1^2 = (E_1 + \varepsilon_1 - \mu)/\,2E_1 = 1 - v_1^2$$

V.A. Khodel, Sov.J Nucl. Phys 24, 367 (1976).

Для амплитуды перехода между состояниями I_s и $I_{s'}$ с энергиями ω_s и $\omega_{s'}$:

$$B(E_L) = \frac{1}{2I_s+1}|\langle I_s||M_L||I_{s'}\rangle|^2,$$

$$\langle I_s||M_L||I_{s'}\rangle = \sum_{123}\left\{\begin{array}{ccc} I_s & I_{s'} & L \\ j_2 & j_1 & j_3 \end{array}\right\} V_{12} g^s_{31} g^{s'}_{23} \left[A^{(12)}_{123} + A^{(34)}_{123} + (-1)^{L+I_s} A^{(76)}_{123} + (-1)^{L+I_{s'}} A^{(58)}_{123}\right]$$

$$\left[A^{(12)}_{123} + A^{(34)}_{123} + (-1)^{L+I_s} A^{(76)}_{123} + (-1)^{L+I_{s'}} A^{(58)}_{123}\right] = \left[\frac{1}{(E_{13}-\omega_s)(E_{23}-\omega_{s'})} + \frac{1}{(E_{13}+\omega_s)(E_{23}+\omega_{s'})}\right] *$$

$$(u_1^2u_2^2v_3^2 - v_1^2v_2^2u_3^2 + C_{12}(u_3^2-v_3^2) + C_{13}(u_2^2-v_2^2) + C_{23}(u_1^2-v_1^2)) + \frac{1}{(E_{12}^2-\omega^2)} *$$

$$\left[\frac{2(E_{32}E_{12}+\omega\omega_{s'})}{(E_{32}^2-\omega_{s'}^2)} * (u_1^2v_2^2u_3^2 - v_1^2u_2^2v_3^2 + C_{12}(u_3^2-v_3^2)) + \frac{2(E_{32}E_{12}-\omega\omega_{s'})}{(E_{32}^2-\omega_{s'}^2)} * (C_{13}(u_2^2-v_2^2) + C_{23}(u_1^2-v_1^2)) + \right.$$

$$\left.\frac{2(E_{31}E_{21}-\omega\omega_s)}{(E_{31}^2-\omega_s^2)} * (v_1^2u_2^2u_3^2 - u_1^2v_2^2v_3^2 + C_{12}(u_3^2-v_3^2)) + \frac{2(E_{31}E_{21}+\omega\omega_s)}{(E_{31}^2-\omega_s^2)} * (C_{13}(u_2^2-v_2^2) + C_{23}(u_1^2-v_1^2))\right].$$

$$v^-_{12}u^+_{23}u^+_{31} = u_1^2u_2^2v_3^2 - v_1^2v_2^2u_3^2 + C_{12}(u_3^2-v_3^2) + C_{13}(u_2^2-v_2^2) + C_{23}(u_1^2-v_1^2)$$

где

$$C_{12} = \frac{\Delta_1\Delta_2}{4E_1E_2}.$$

V. Yu. Ponomarev, Ch. Stoyanov, N. Tsoneva and M. Grinberg, Nucl. Phys. A 635, 470 (1998).

Корреляции в основном состоянии (КОС):

МХФ

$$A(\omega) = \int G_1 G_2 d\varepsilon$$

Двухквазичастичные КОС

-порождены интегралом от двух ФГ

-малы

Четырехквазичастичные КОС в МХФ

-появляются при решении интегрального уравнения, как следующая итерация двухчастичных КОС

-малы

Наш подход

$$A(\omega) = \int G_1 G_2 G_3 d\varepsilon$$

$$G_1 = G_1^p + G_1^h$$

Трехвазичастичные КОС

-появляются благодаря двум частям ФГ, при расчете интеграла от трех ФГ

-значительны

Характеристики 2_1^+-состояний в четных изотопах Sn, ω_2(MeV) и B(E2)↑ e^2b^2

A	$\omega_2^{\rm th}$	$\omega_2^{\rm exp}$	$B(E2)^{\rm th}$	$B(E2)^{\rm exp}$
102	1.453	1.472	0.065	-
104	1.388	1.260	0.107	-
106	1.316	1.207	0.142	0.195 (0.039)
108	1.231	1.206	0.155	0.222 (0.019)
110	1.162	1.212	0.188	0.220 (0.022)
112	1.130	1.257	0.197	0.240 (0.014)
114	1.156	1.300	0.193	0.24 (0.05)
116	1.186	1.294	0.182	0.209 (0.006)
118	1.217	1.230	0.172	0.209 (0.008)
120	1.240	1.171	0.152	0.202 (0.004)
122	1.290	1.141	0.158	0.192 (0.004)
124	1.350	1.132	0.147	0.166 (0.004)

Характеристики 3_1^--состояний в четных изотопах Sn, ω_3(MeV) и B(E3)↑ e^2b^3

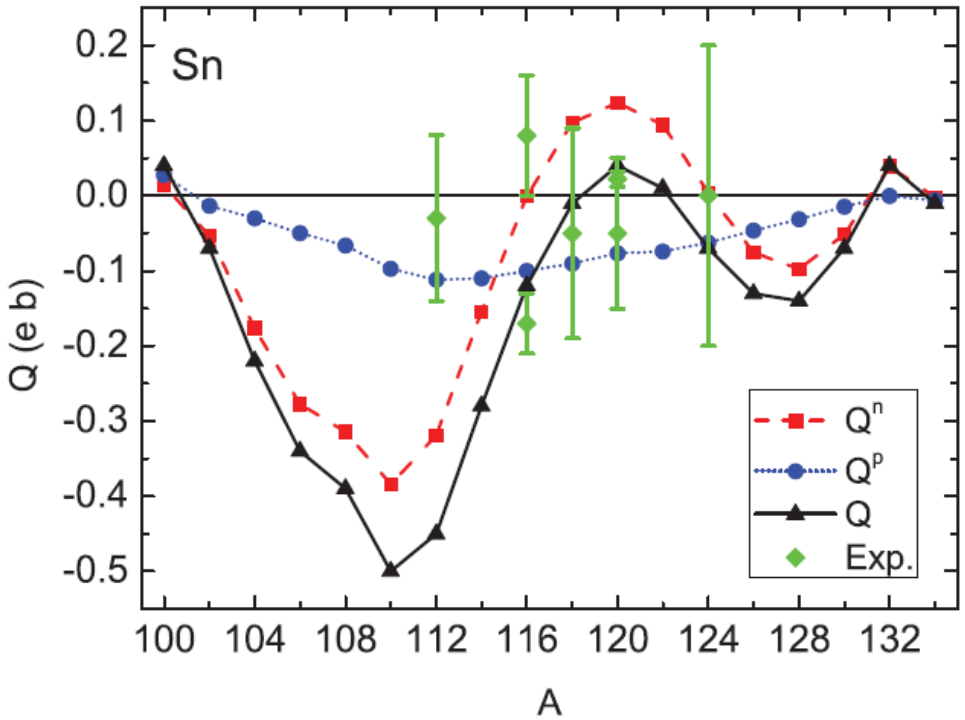
- Что особенно важно для g^2 подхода, мы имеем хорошее описание вероятностей B(E2)↑ and B(E3)↑

A	ω_3	$\omega_3^{\rm exp}$	$B(E3)$	$B(E3)^{\rm exp}$
100	5.621	–	0.109	–
102	3.959	–	0.0565	–
104	3.643	–	0.0760	–
106	3.457	–	0.0901	–
108	3.350	–	0.0959	–
110	3.282	2.459	0.0996	–
112	3.221	2.355	0.102	0.087(12)
114	3.157	2.275	0.106	0.100(12)
116	3.100	2.266	0.106	0.127(17)
118	3.072	2.325	0.106	0.115(10)
120	3.069	2.401	0.112	0.115(15)
122	3.112	2.493	0.107	0.092(10)
124	3.208	2.614	0.103	0.073(10)

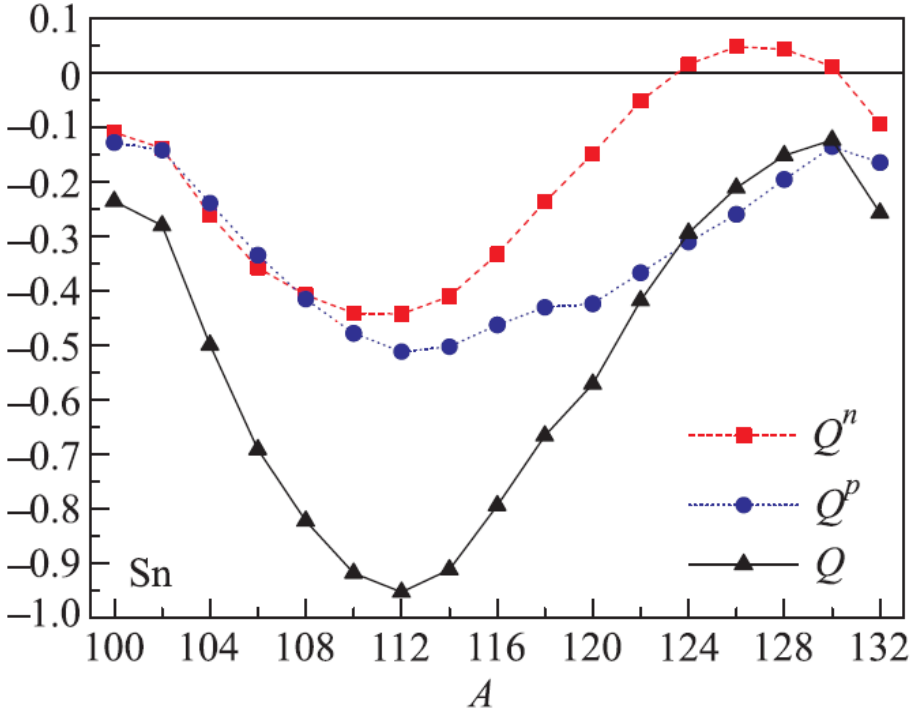
В предыдущих работах: квадрупольные моменты первых 2+ и 3- состояний

Доля КОС ~ 50%

Квадрупольные моменты 2+



Квадрупольные моменты 3-

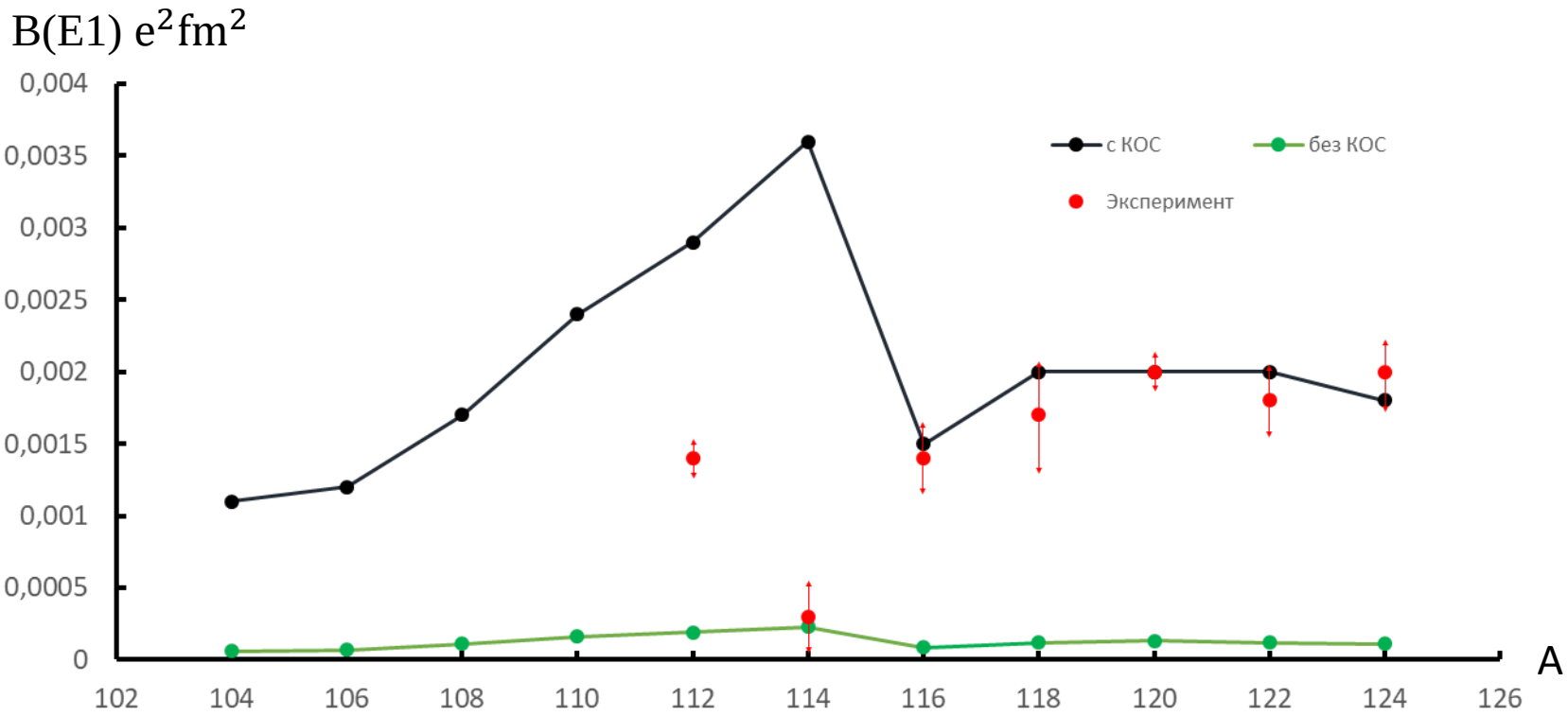


Voitenkov D. A., Kamerdzhiev S. P., Krewald S. et al.,Physical Review C. **85**, 054319 (2012).

Камерджиев С. П., Войтенков Д. А., Саперштейн Э. Е., Толоконников С. В., Письма в ЖЭТФ, **108,** 155 (2018)

Предварительные расчеты переходов между первыми однофононными состояниями для четных изотопов олова:

- Приведенные вероятности переходов B(E1) $(3_1^- \rightarrow 2_1^+)e^2fm^2$



Данные для $^{124\text{-}116}$Sn: L.I. Govor, A.M. Demidov, O.K. Zhuravlev, I.V. Michailov and E.Yu. Shkuratova, Soy. J. Nucl. Phys. 54 (1991) 196. Для ^{112,114}Sn - R. Wirowski, M. Shimmer, L. Eser, S. Alberos, K.O. Zell and P. von Brentano, Nucl. Phys. A 586, 427 (1995).

Приведенные вероятности перехода между первыми 3^-- и 2^+-фононами $B(E1)$, e^2фм^2 для изотопов олова (в колонке 2 приведены результаты расчетов без учета поляризуемости и без КОС; в колонке 3 – с поляризуемостью, но без КОС; в колонке 4 – без поляризуемости, но с КОС; в колонке 5 – окончательные результаты с поляризуемостью и КОС; в колонке 6 – эксперимент)

1	2	3	4	5	6
Ядро	$V = e_q V^{(0)}$ КОС $= 0$	$V = V_{\text{pol.}}$ КОС $= 0$	$V = e_q V^{(0)}$ КОС $\neq 0$	$V = V_{\text{pol.}}$ КОС $\neq 0$	Эксп.
^{124}Sn	0.0004	0.0001	0.0078	0.0018	0.0020 ± 0.0002
^{122}Sn	0.0005	0.0001	0.0090	0.0020	0.0018 ± 0.0002
^{120}Sn	0.0004	0.0001	0.0094	0.0020	0.0020 ± 0.0001
^{118}Sn	0.0004	0.0001	0.0093	0.0020	0.0017 ± 0.0004
^{116}Sn	0.0003	0.0001	0.0065	0.0015	0.0014 ± 0.0002
^{114}Sn	0.0009	0.0002	0.0186	0.0036	0.0003 ± 0.0002
^{112}Sn	0.0006	0.0002	0.0142	0.0028	0.0014 ± 0.0001
^{110}Sn	0.0004	0.0002	0.0097	0.0023	-
^{108}Sn	0.0003	0.0001	0.0054	0.0013	-
^{106}Sn	0.0002	0.0001	0.0022	0.0006	-
^{104}Sn	0.0001	0.0001	0.0015	0.0003	-

Обсуждение результатов, вопрос 112-114 Sn

- 1. Экспериментальные методы для 112-114, и 116-124 различались
  - В 112-114 : данные были получены из реакций $^{112}\mathrm{Cd}(\alpha, 2n)^{114}Sn$ методом γ-спектроскопии на массиве Ge-детекторов OSIRIS-куб [1]
  - В 116-124 : данные были получены из анализа γ-излучения от неупругого рассеяния быстрых нейтронов реактора [2]
- В работе [1] авторы полагают, что переход из 3_1^- уровня на 2_1^+ совершаются из деформированной полосы в сферическую полосу. Что никак не учитывалось в наших расчетах, и может быть причиной несовпадения.
- 2. В работах [3,4] обращалось внимание на специфику ^{114}Sn по сравнению с соседними ядрам, которая, по мнению автора, состояла в появлении локального магического числа N=64 в этом ядре. Эти результаты были основаны в основном, на анализе соответствующих данных для нечетных ядер из реакций срыва и подхвата, из которых извлекались данные о наблюдаемых одночастичных энергиях и спектроскопических ядрах в соответствующих четно-четных ядрах.

[1] R. Wirowski, M. Shimmer, L. Eser, S. Alberos, K.O. Zell and P. von Brentano, Nucl. Phys. A 586, 427 (1995).

[2] L.I. Govor, A.M. Demidov, O.K. Zhuravlev, I.V. Michailov and E.Yu. Shkuratova, Soy. J. Nucl. Phys. 54 (1991) 196.

[3] I. N. Boboshin, V .V. Varlamov, B. S. Ishkhanov and I.M. Kapitonov, Nucl. Phys. A 496, 93 (1989).

[4] И. Н. Бобошин, Препринт НИИЯФ МГУ №2018-1/892 (2018).

Заключение

- Используя параметры Фаянса DF3-a мы получили разумное описание переходов между первыми 3^-- and 2^+-состояниями в большинстве изотопов Sn.
- Согласие с экспериментом получено **только** благодаря тому, что мы учитываем **два** важных эффекта: ядерную поляризуемость и трехквазичестичные КОС.
- В отличии от статической задачи(расчета квадрупольных моментов) где КОС составляли около 50% величины, в динамической задаче КОС обеспечивают около 70% величины амплитуды перехода.

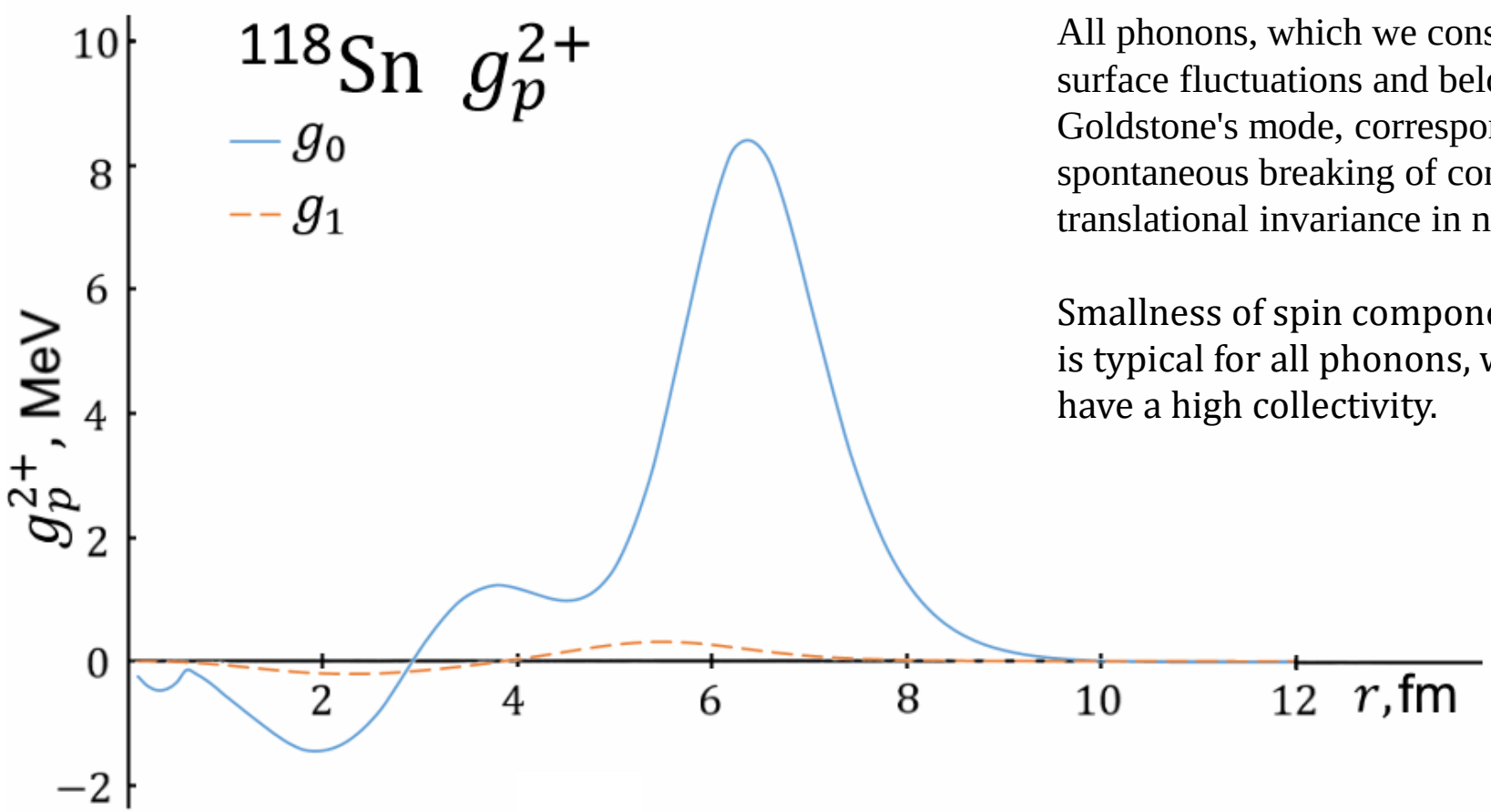
Работа поддержана внутренним грантом Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (приказ №2767 от 28.10.21)

Спасибо за внимание!

Phonons

g_s is the sum of two components with spins S = 0 and S = 1:

- $g_s = g^s_{I_s 0} Y_{I_s M} + g^s_{I_s 1} [\boldsymbol{Y}_{\boldsymbol{I_s}} \otimes \boldsymbol{\sigma}]_{I_s M}$



All phonons, which we consider are surface fluctuations and belong to Goldstone's mode, corresponding to spontaneous breaking of continuous translational invariance in nuclei

Smallness of spin component g^s_1 is typical for all phonons, which have a high collectivity.

Таблица 1. Параметры нормальной части ЭФП Фаянса

Параметр	DF3 [29]	DF3-a [30]
μ_0 [МэВ]	−16.05	−16.05
r_0 [фм]	1.147	1.145
K_0 [МэВ]	200	200
β [МэВ]	28.7	28.7
a_+^v	−6.598	−6.575
h_{1+}^v	0.163	0.163
h_{2+}^v	0.724	0.725
a_-^v	5.565	5.523
h_{1-}^v	0	0
h_{2-}^v	3.0	3.0
a_+^s	−11.4	−11.1
h_+^s	0.31	0.31
a_-^s	−4.11	−4.10
h_-^s	0	0
r_c [фм]	0.35	0.35
κ	0.216	0.190
κ'	0.077	0.077
g_1	0	0
g_1'	−0.123	−0.308

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V \\ d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{V}_0 = \begin{pmatrix} V_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathcal{F}} = \begin{pmatrix} \mathcal{F} & \mathcal{F}^{\omega\xi} & \mathcal{F}^{\omega\xi} \\ \mathcal{F}^{\xi\omega} & \mathcal{F}^{\xi} & \mathcal{F}^{\xi\omega} \\ \mathcal{F}^{\xi\omega} & \mathcal{F}^{\xi\omega} & \mathcal{F}^{\xi} \end{pmatrix},$$

$$\hat{A}(\omega) = \begin{pmatrix} \mathcal{L}(\omega) & \mathcal{M}_1(\omega) & \mathcal{M}_2(\omega) \\ \mathcal{O}(\omega) & -\mathcal{N}_1(\omega) & \mathcal{N}_2(\omega) \\ \mathcal{O}(-\omega) & -\mathcal{N}_1(-\omega) & \mathcal{N}_2(-\omega) \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{F}_1^s = C_0 r_0^2 (g_1 + g_1' \boldsymbol{\tau}_1 \boldsymbol{\tau}_2) \times$$
$$\times\, \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2)(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2).$$

$$\mathcal{F}^{\xi} = C_0 f^{\xi} =$$
$$= C_0 \left(f_{\text{ex}}^{\xi} + h^{\xi} x^{2/3} + f_{\nabla}^{\xi} r_0^2 (\nabla x)^2 \right)$$

$$\delta_L \mathcal{F} = \frac{\delta \mathcal{F}(\rho)}{\delta \rho} \delta \rho_L, \;\; \delta \rho_L = A g_L$$