

Исследование ядер в модели  
оболочек без инертного кора с  
нуклон-нуклонным взаимодействием,  
полученным в  $J$ -матричном  
формализме обратной задачи  
рассеяния.

м. н. с. ОФАЯ Куликов В. А.

Научный руководитель  
к. ф.-м. н. А. М. Широков

*НИИЯФ МГУ*

# Цель работы

Широкомасштабное исследование характеристик ядер с помощью  $NN$ -потенциала JISP16, проверка необходимости его дальнейшей модификации и осуществление этой модификации.

Разработка и апробация нового типа фазово-эквивалентных преобразований, позволяющего улучшить описание ядер.



# Публикации

Статья в Phys. Rev. C (2012)

3 статьи в Известиях РАН (2010-2012)

3 статьи в трудах конференций (2010-2012)

7 тезисов

# План доклада

- Глава 1 — исследование характеристик ядер, полученных с использованием  $NN$ -взаимодействия JISP16
- Глава 2 — разработка и апробация в расчетах ядер  $NN$ -взаимодействия JISP16<sub>2010</sub>
- Глава 3 — преобразование DET-PET



- В связи с увеличением мощности суперкомпьютеров и появлением новых методов расчетов необходимо провести широкомасштабное исследование энергий связи и спектров ядер, полученных с помощью NN-потенциала JISP16 и проанализировать результаты этого исследования с точки зрения необходимости модификации потенциала.

# Расчеты *ab initio*

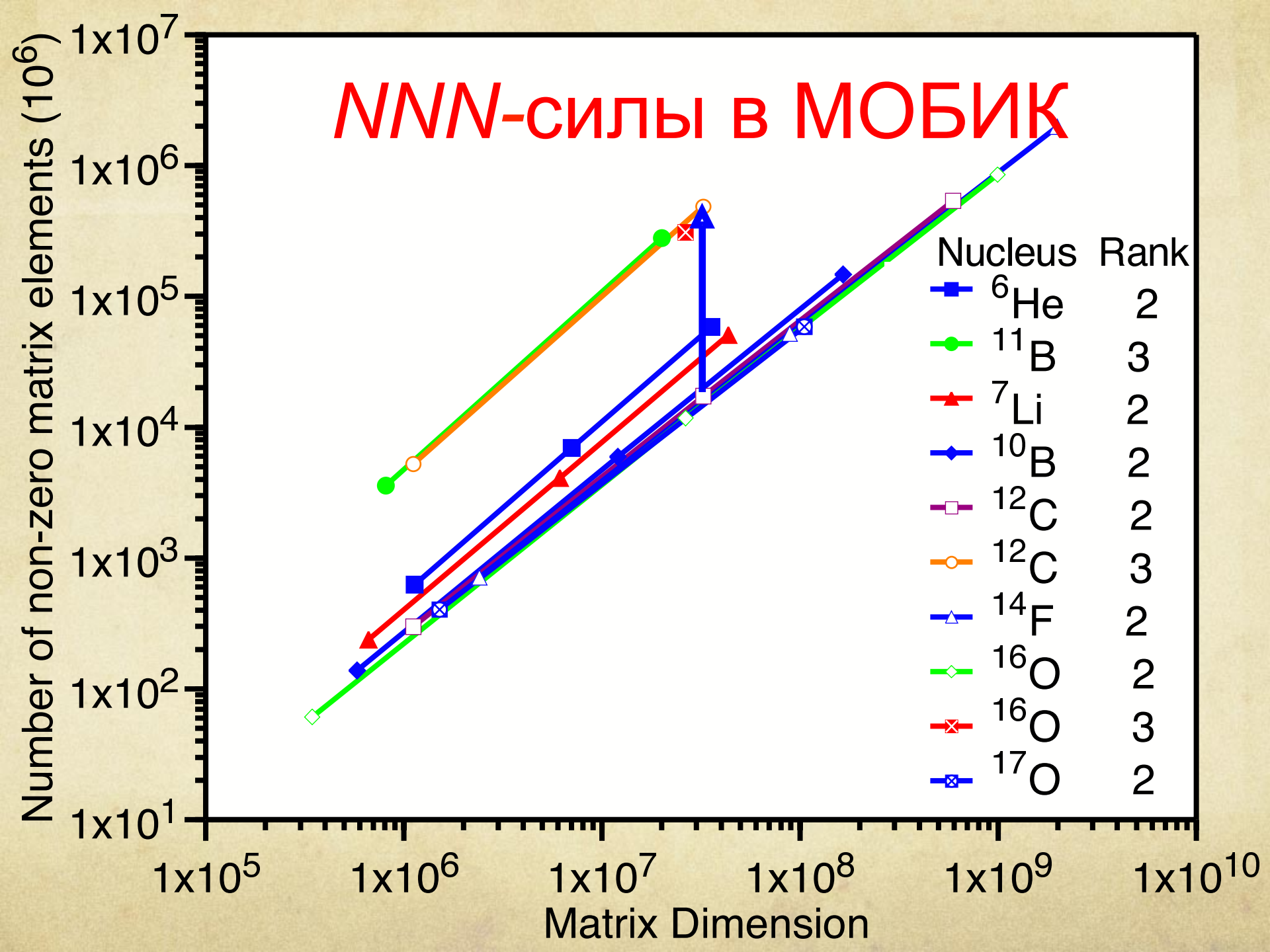
- Используем МОБИК – модель облочек без инертного кора
- Базис – детерминант Слэтера из осцилляторных функций для всех нуклонов
- параметры:  $\hbar\Omega$  и  $N_{\max}$  (максимальное число квантов возбуждения)
- Входная информация —  $NN$ -взаимодействие



# $NN$ -взаимодействие

- Существующие реалистические  $NN$ -потенциалы (CD-Bonn, Argonne V18, Idaho N3LO) хорошо описывают ядра в комбинации с  $NNN$ -силами (Illinois, Urbana, N2LO)
- $NN$ -потенциал JISP16 так же хорошо описывает легкие ядра, не требует трехчастичных сил

# NNN-силы в МОБИК





# Метод NCFC

Метод NCFC (No-core full configuration method)

МОБИК+экстраполяция результатов=NCFC

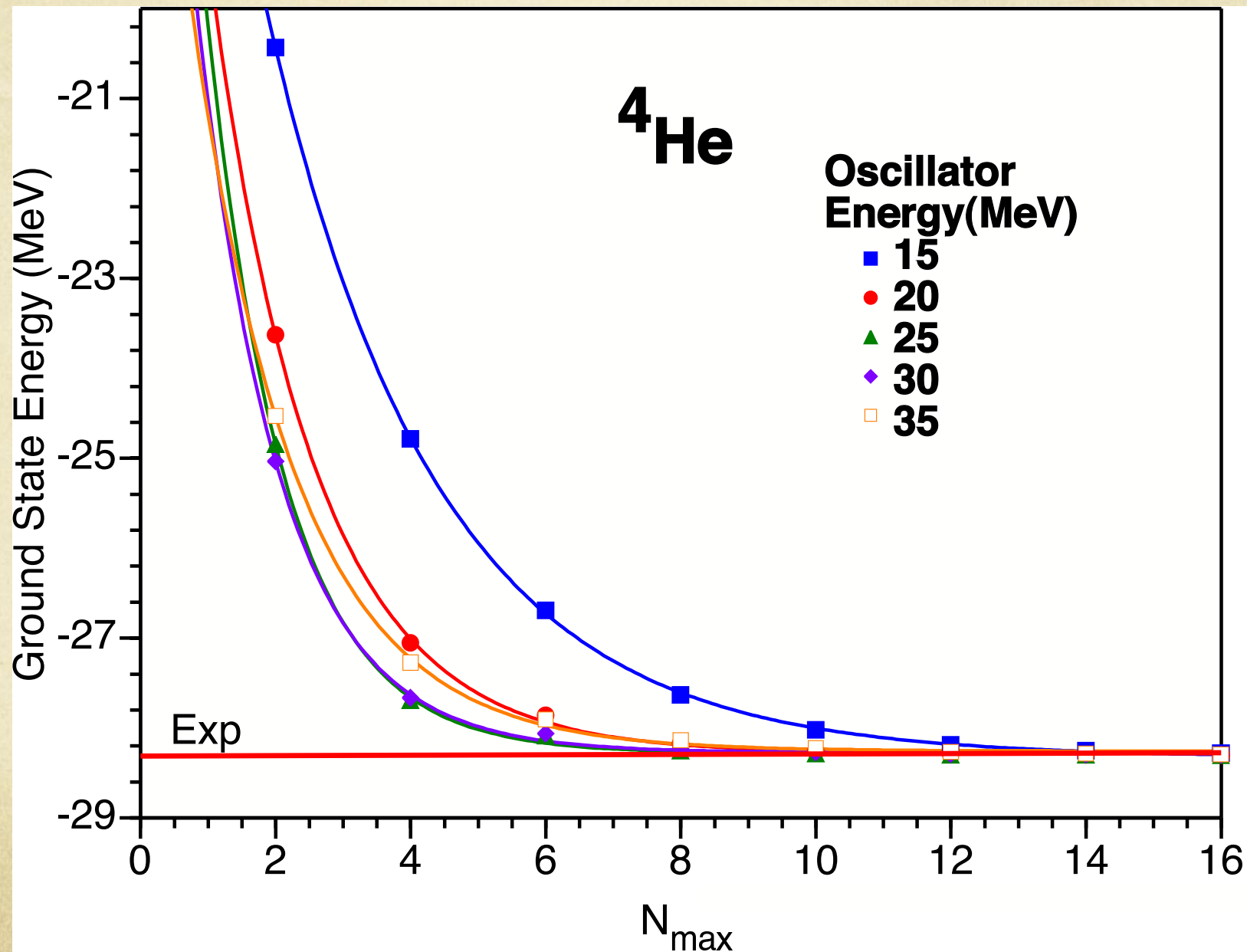
# Метод NCFC

При одном и том же значении  $\hbar\omega$  результаты  
ложатся на одну экспоненту

$$E_N = ae^{-bn} + E_\infty$$

$$E_\infty = \frac{E_n^2 - E_{N+2}E_{N-2}}{2E_n - E_{N+2} - E_{N-2}}$$

# Метод NCFC





# Метод NCFS

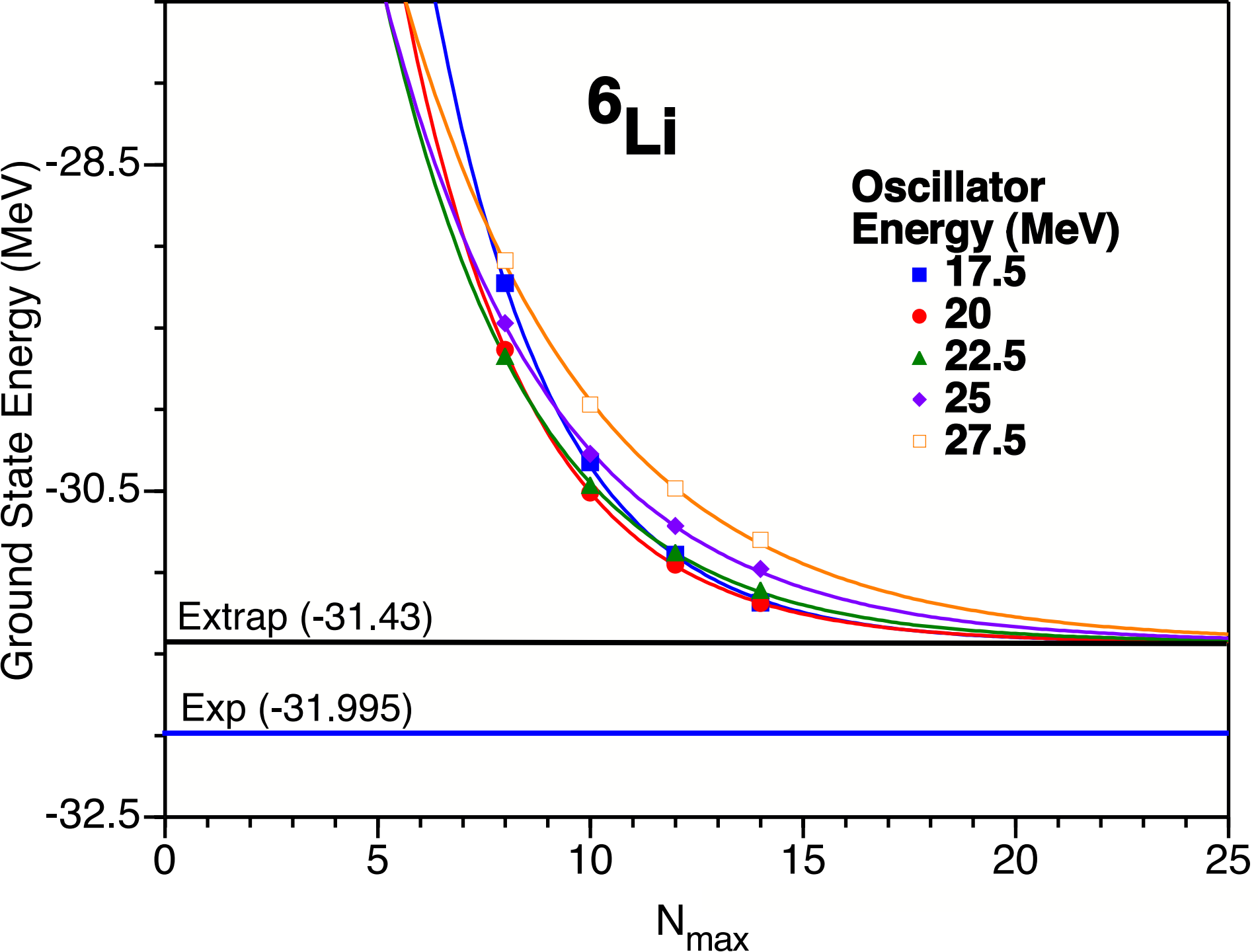
Существует 2 способа экстраполяции:

- Глобальная экстраполяция (Экстраполяция А)
- Экстраполяция при фиксированной величине  $h\Omega$  (Экстраполяция В)

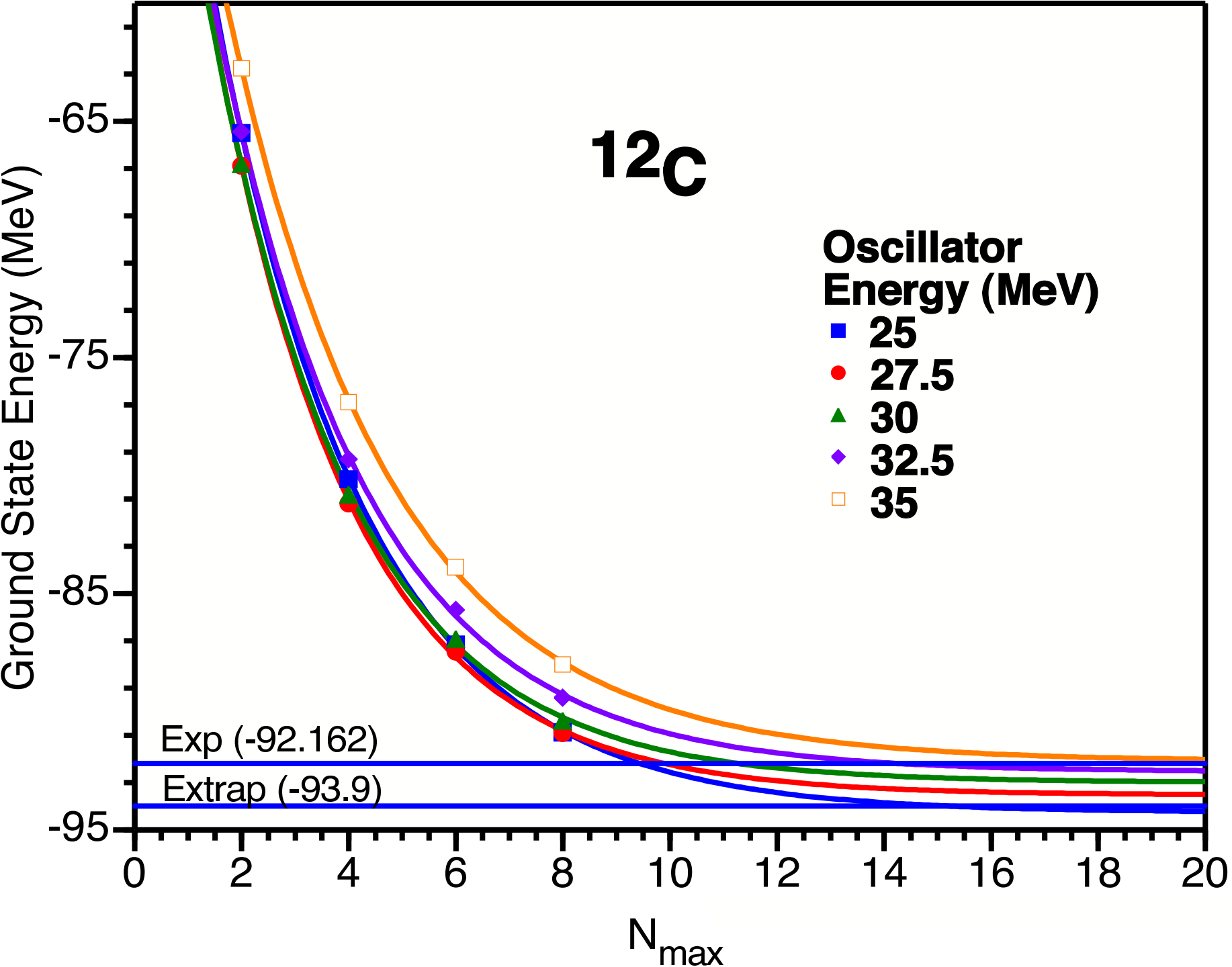
# Экстраполяция A

- Глобальная экстраполяция проводится по четырем значениям  $N_{\max}$  и пяти значениям  $\hbar\Omega$
- Учет более высокой точности результата с большим  $N_{\max}$
- Слабая зависимость от  $\hbar\Omega$

Определение погрешности:  
из разброса экстраполированных значений энергии







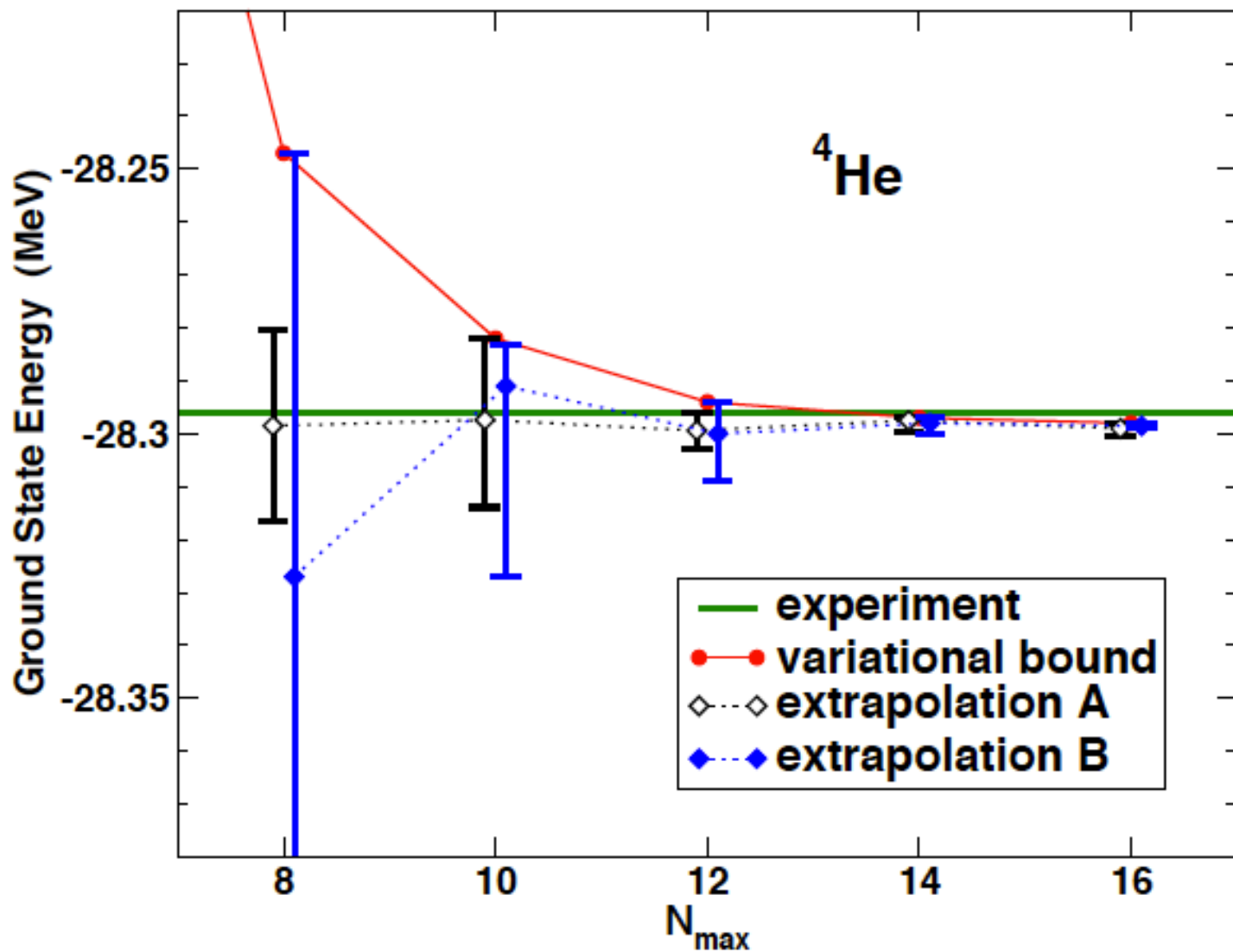
# Экстраполяция В

- Экстраполяция В проводится по трём значениям  $N_{\max}$  при одном значении  $\hbar\Omega$
- $\hbar\Omega$ -зависимый результат

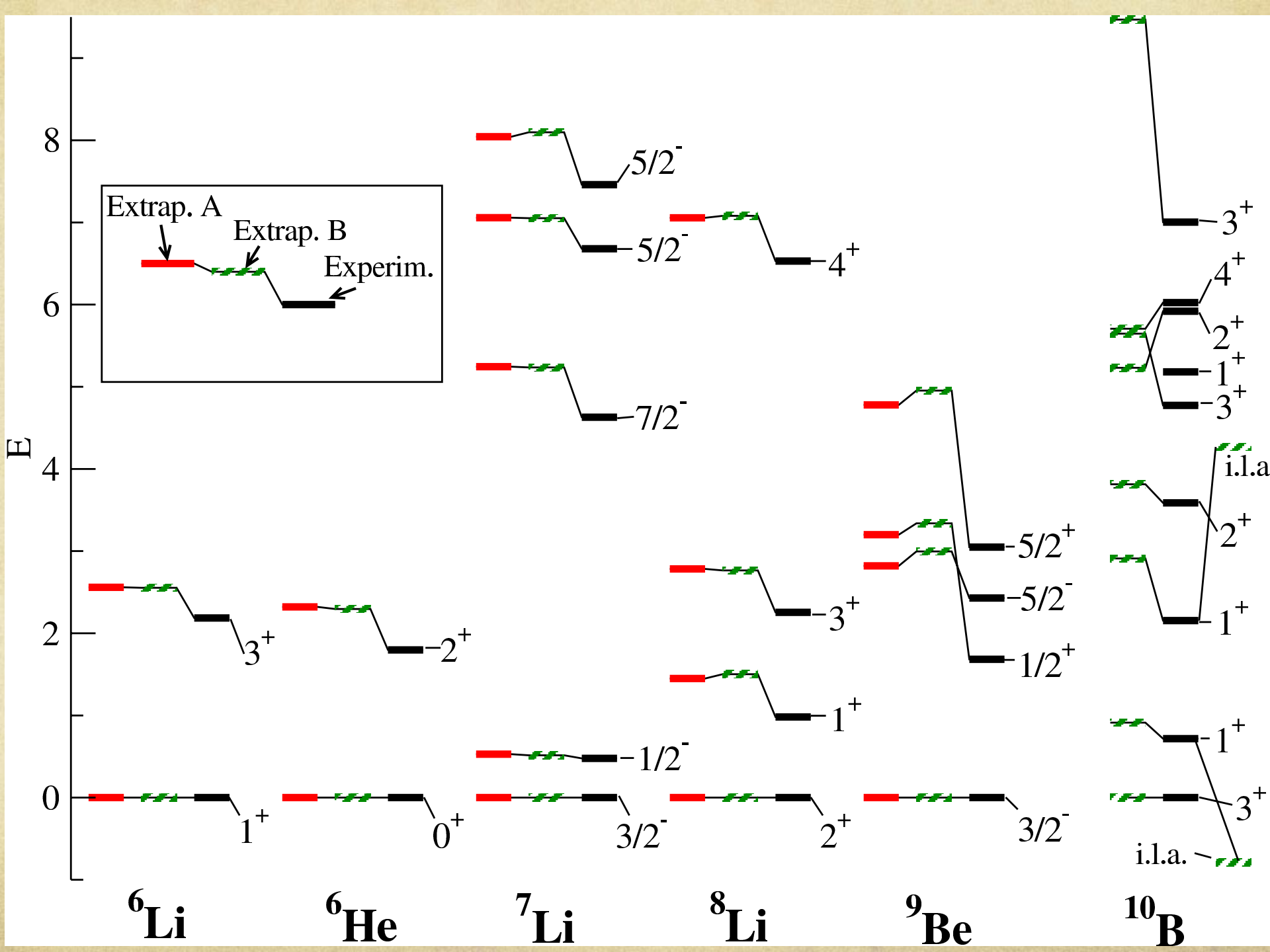
Определение погрешности:  
из разности экстраполированных значений энергии в  
различных модельных пространствах

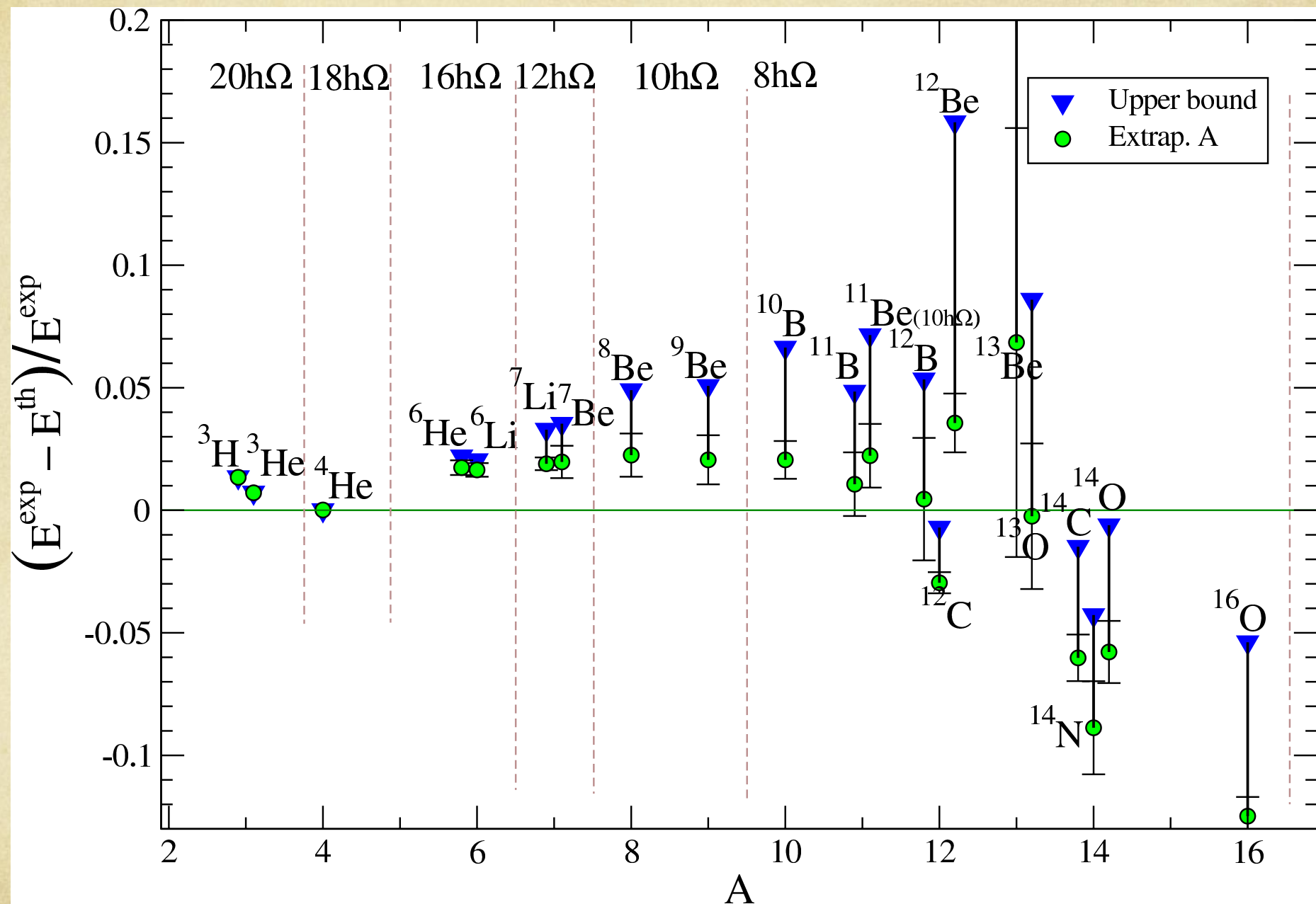
$$\Delta(N_{\max}) = E(N_{\max}) - E(N_{\max} - 2)$$

# Метод NCFC









По результатам исследования потенциала JISP16 было выяснено, что данное взаимодействие в целом хорошо описывает легкие ядра, а ядра с  $A \geq 12$  пересвязывает. Необходимо модифицировать потенциал для улучшения описания этих ядер.



- Глава 1 — исследование характеристик ядер, полученных с использованием  $NN$ -взаимодействия JISP16
- Глава 2 — разработка и апробация в расчетах ядер  $NN$ -взаимодействия JISP16<sub>2010</sub>
- Глава 3 — преобразование DET-PET

# Потенциал JISP16<sub>2010</sub>

Появилась необходимость в дальнейшем улучшении потенциала JISP16 в области описания ядер с  $A \geq 12$

Можно применить фазово-эквивалентные преобразования

# Фазово-эквивалентные преобразования

$$[\tilde{H}] = [U][H][U^\dagger]$$

$$[U] = [U_0] \oplus [I] = \left[ \begin{array}{c|c} [U_0] & 0 \\ \hline 0 & [I] \end{array} \right]$$

$$[U_0] = \begin{bmatrix} \cos \vartheta & +\sin \vartheta \\ -\sin \vartheta & \cos \vartheta \end{bmatrix}$$

$$\tilde{V} = V + \Delta V$$

С помощью фазово-эквивалентных преобразований потенциал подгоняется для описания свойств ядер.



# Потенциалы JISP

| Потенциал              | $^1s_0$         | $^3p_0$       | $^1p_1$        | $^3p_1$       | $^3s_1-^3d_1$  | $^1d_2$       | $^3d_2$      | $^3p_2-^3f_2$ | $^3d_3-^3g_3$ |
|------------------------|-----------------|---------------|----------------|---------------|----------------|---------------|--------------|---------------|---------------|
| JISP6                  |                 |               | $-16^\circ$    | $-6^\circ$    |                |               | $25^\circ$   | $8^\circ$     |               |
| JISP16                 |                 | $-10^\circ$   | $-12^\circ$    | $-6^\circ$    | $-11.0^\circ$  |               | $25^\circ$   | $5^\circ$     |               |
| JISP16 <sub>2010</sub> | $-0.0966^\circ$ | $-8.72^\circ$ | $-15.62^\circ$ | $-6.01^\circ$ | $-11.00^\circ$ | $-2.73^\circ$ | $7.25^\circ$ | $7.00^\circ$  | $0.457^\circ$ |

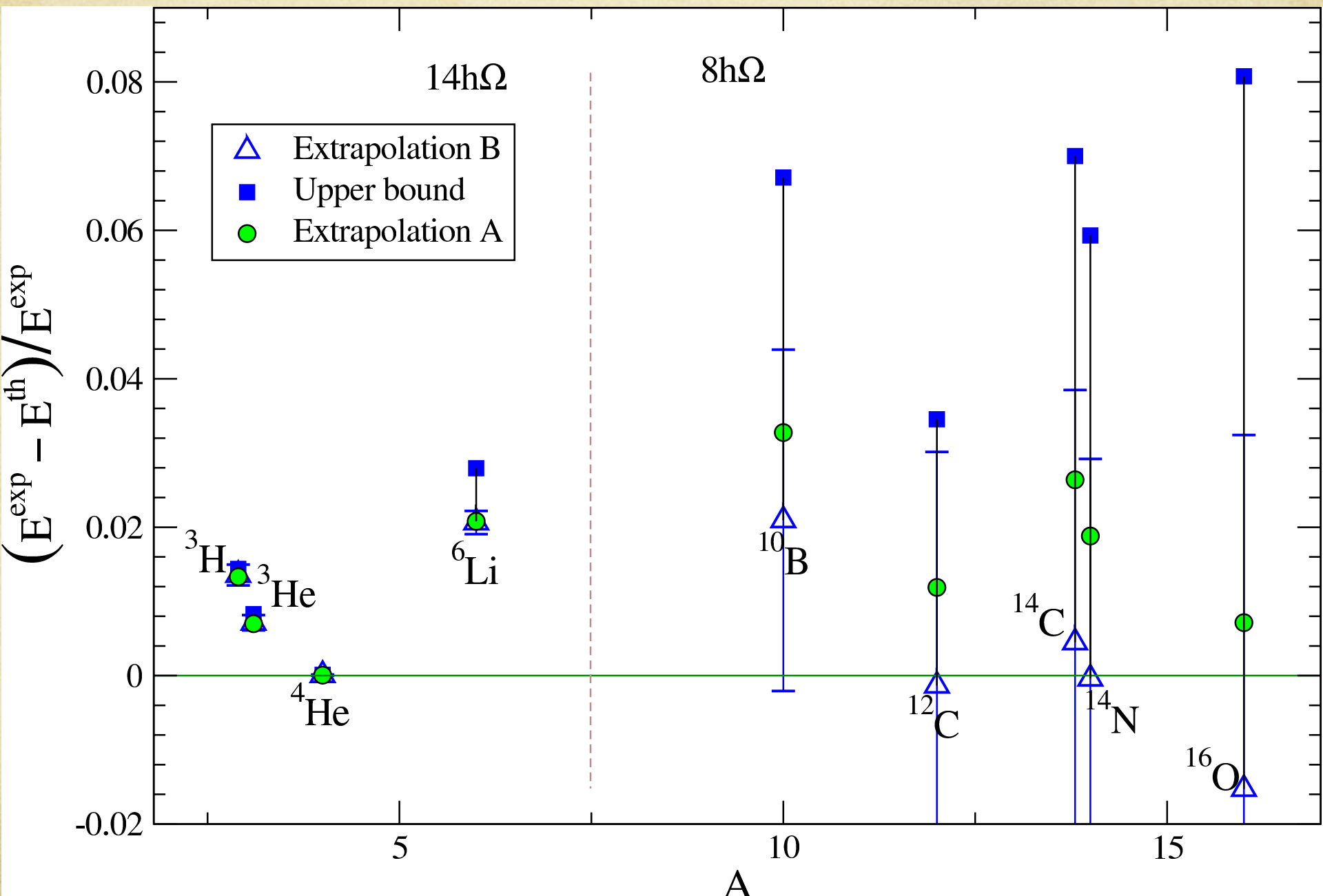
# Свойства дейтрона

| Потенциал              | $E_d$ , МэВ  | Вероятность $d$ состояния, % | rms радиус, фм | $Q$ , фм <sup>2</sup> |
|------------------------|--------------|------------------------------|----------------|-----------------------|
| ISTP                   | −2.224575    | 5.696                        | 1.968          | —                     |
| JISP6                  | −2.224575    | 4.1360                       | 1.9647         | 0.2915                |
| JISP16                 | −2.224575    | 4.1360                       | 1.9643         | 0.288585              |
| JISP16 <sub>2010</sub> | −2.224575    | 4.1360                       | 1.9643         | 0.288585              |
| AV18                   | −2.224575    | 5.76                         | 1.967          | 0.270                 |
| CD-Bonn                | −2.224575    | 4.85                         | 1.966          | 0.270                 |
| Эксперимент            | −2.224575(9) | —                            | 1.971(6)       | 0.2859(3)             |

# Описание легчайших ядер

| Потенциал              | ${}^3\text{H}$ | ${}^3\text{He}$ | ${}^4\text{He}$ | ${}^6\text{Li}$ |
|------------------------|----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| ISTP                   | —              | 7.860           | 26.734          | —               |
| JISP6                  | 8.461(5)       | 7.751(3)        | 28.611(41)      | 31.48(27)       |
| JISP16                 | 8.369(1)       | 7.668(5)        | 28.299(1)       | 31.48(3)        |
| JISP16 <sub>2010</sub> | 8.367(10)      | 7.663(8)        | 28.294(1)       | 31.34(47)       |
| Эксперимент            | 8.482          | 7.718           | 28.296          | 31.994          |





# Энергии связи с JISP16 и JISP16<sub>2010</sub>

| Ядро            | Эксперим. | JISP16             |                     |            | JISP16 <sub>2010</sub> |                            |            |
|-----------------|-----------|--------------------|---------------------|------------|------------------------|----------------------------|------------|
|                 |           | Экстрап. А         | Экстрап. В          | $N_{\max}$ | Экстрап. А             | Экстрап. В                 | $N_{\max}$ |
| $^3\text{H}$    | 8.482     | $8.369 \pm 0.001$  | $8.3695 \pm 0.0025$ | 18         | $8.369 \pm 0.010$      | $8.367^{+0.007}_{-0.012}$  | 14         |
| $^3\text{He}$   | 7.718     | $7.665 \pm 0.001$  | $7.668 \pm 0.005$   | 18         | $7.664 \pm 0.011$      | $7.663 \pm 0.008$          | 14         |
| $^4\text{He}$   | 28.296    | $28.299 \pm 0.001$ | $28.299 \pm 0.001$  | 18         | $28.294 \pm 0.002$     | $28.294^{+0.001}_{-0.002}$ | 14         |
| $^6\text{Li}$   | 31.995    | $31.47 \pm 0.09$   | $31.45 \pm 0.05$    | 14         | $31.33 \pm 0.16$       | $31.34 \pm 0.05$           | 14         |
| $^{10}\text{B}$ | 64.751    | $63 \pm 1$         | $64 \pm 1$          | 8          | $63 \pm 1$             | $63 \pm 2$                 | 8          |
| $^{12}\text{C}$ | 92.162    | $94 \pm 1$         | $95 \pm 3$          | 8          | $91 \pm 1$             | $92 \pm 3$                 | 8          |
| $^{14}\text{C}$ | 105.284   | $112 \pm 2$        | $114 \pm 6$         | 8          | $103 \pm 2$            | $105 \pm 4$                | 8          |
| $^{14}\text{N}$ | 104.659   | $114 \pm 2$        | $116 \pm 6$         | 8          | $103 \pm 1.5$          | $105 \pm 3$                | 8          |
| $^{16}\text{O}$ | 127.619   | $144 \pm 1$        | $145 \pm 8$         | 8          | $127 \pm 3$            | $130 \pm 6$                | 8          |

# Спектр ядра ${}^6\text{Li}$ с JISP16 и JISP16<sub>2010</sub>

| nucleus         | $(J^\pi, T)$ | JISP16 <sub>2010</sub> |          |          | JISP16     |          |          | experiment |
|-----------------|--------------|------------------------|----------|----------|------------|----------|----------|------------|
|                 |              | $N_{\max}$             | Экстр. А | Экстр. В | $N_{\max}$ | Экстр. А | Экстр. В |            |
| ${}^6\text{Li}$ | $(1^+, 0)$   | 14                     | 31.3(2)  | 31.34(7) | 16         | 31.47(9) | 31.48(3) | 31.995     |
| ${}^6\text{Li}$ | $(3^+, 0)$   | 14                     | 2.1(2)   | 2.097(3) | 16         | 2.56(4)  | 2.55(7)  | 2.186(2)   |
| ${}^6\text{Li}$ | $(0^+, 1)$   | 14                     | 3.5(2)   | 3.498(7) | 16         | 3.8(1)   | 3.65(6)  | 3.563      |



## Среднеквадратичное отклонение для потенциалов JISP16 и JISP16<sub>2010</sub>

| Параметр            | JISP16 Экстрап. В | JISP16 <sub>2010</sub> Экстрап. В |
|---------------------|-------------------|-----------------------------------|
| Абсолютная эн.      | 5.3               | 3.7                               |
| Энергия возбуждения | 6.64              | 3.9                               |
| Относительная эн.   | 0.053             | 0.049                             |
| Энергия на нуклон   | 0.38              | 0.31                              |

Все величины даны в МэВ

Взаимодействие JISP16<sub>2010</sub> позволило улучшить описание ядер  $p$ -оболочки, сохранив при этом хорошее описание более легких ядер.

Необходимо продолжать расчеты ядер с JISP16<sub>2010</sub>

- Глава 1 — исследование характеристик ядер, полученных с использованием  $NN$ -взаимодействия JISP16
- Глава 2 — разработка и апробация в расчетах ядер  $NN$ -взаимодействия JISP16<sub>2010</sub>
- Глава 3 — преобразование DET-PET



# Преобразование DET-PET

DET-PET (deuteron-equivalent phase equivalent transformation) — фазово-эквивалентное преобразование потенциала, не меняющее волновую функцию дейтрона. Возможно, позволит изменять потенциал для улучшения описания ядер. Ранее это преобразование не предлагалось.

# Уравнение Шредингера

Уравнение  
Шредингера

$$H\Psi(E, r) = E\Psi(r)$$

Разложение  
в ряд:

$$\Psi(E, r) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(E) |\phi_n\rangle$$

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\sum_{n'=0}^{\infty} (H_{nn'} - \delta_{nn'} E) c_{n'}(E) = 0$$



# PET

$$[\widetilde{H}] = [U][H][U^\dagger]$$

$$[U] = [U^0] \oplus [I] = \begin{bmatrix} [U^0] & 0 \\ 0 & [I] \end{bmatrix}$$



# DET-PET

$$U^0 = \sum_{i,j \leq N'} |a_i\rangle \tilde{U}_{ij}^0 \langle a_j|$$

$$\det U_0 = \pm 1$$

$$|a_i\rangle = \sum_{l \leq N''} \alpha_i^l \varphi_l$$

$\varphi$ -осцилляторные функции

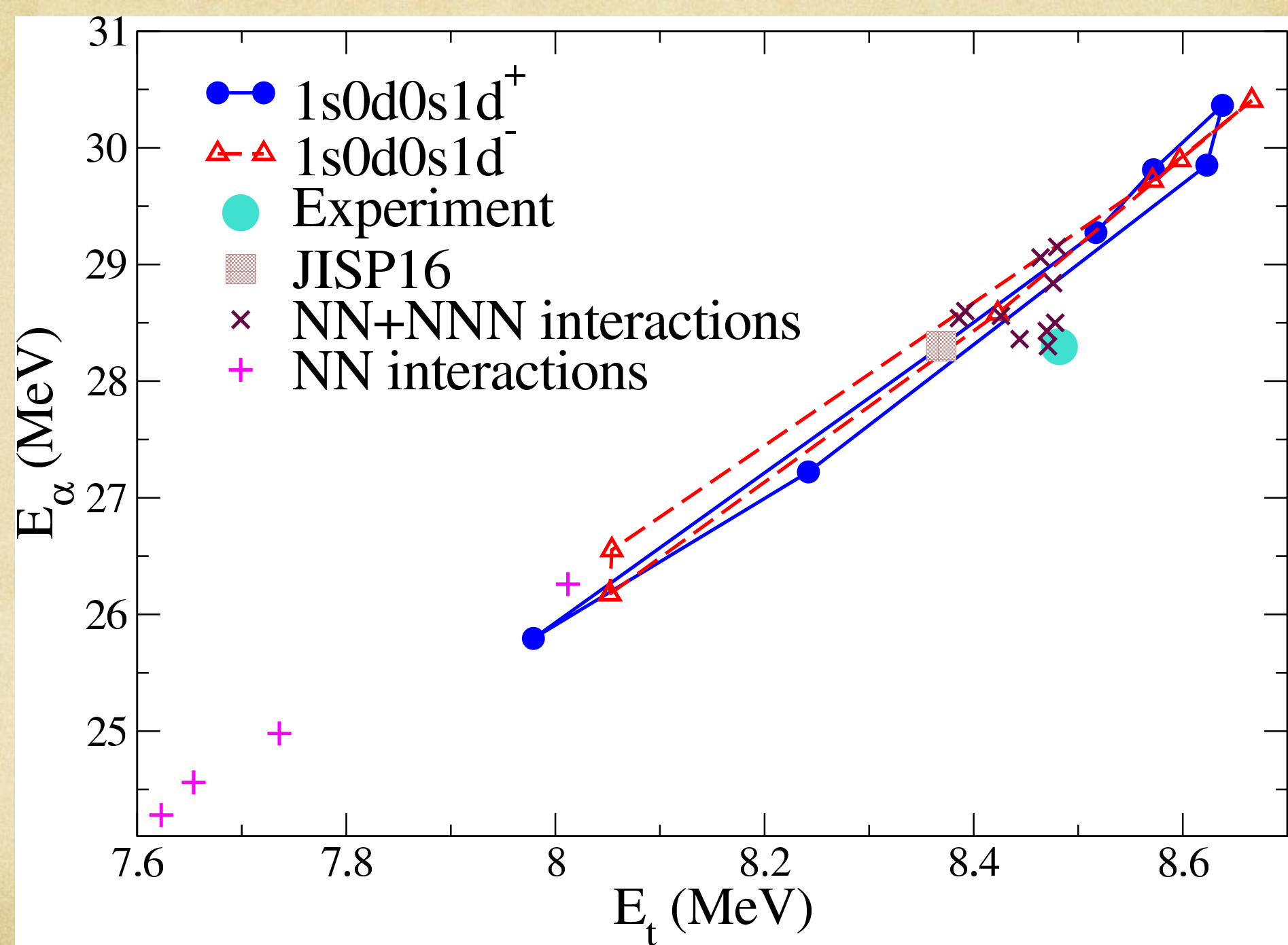
$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\langle a_i | d \rangle = 0$$

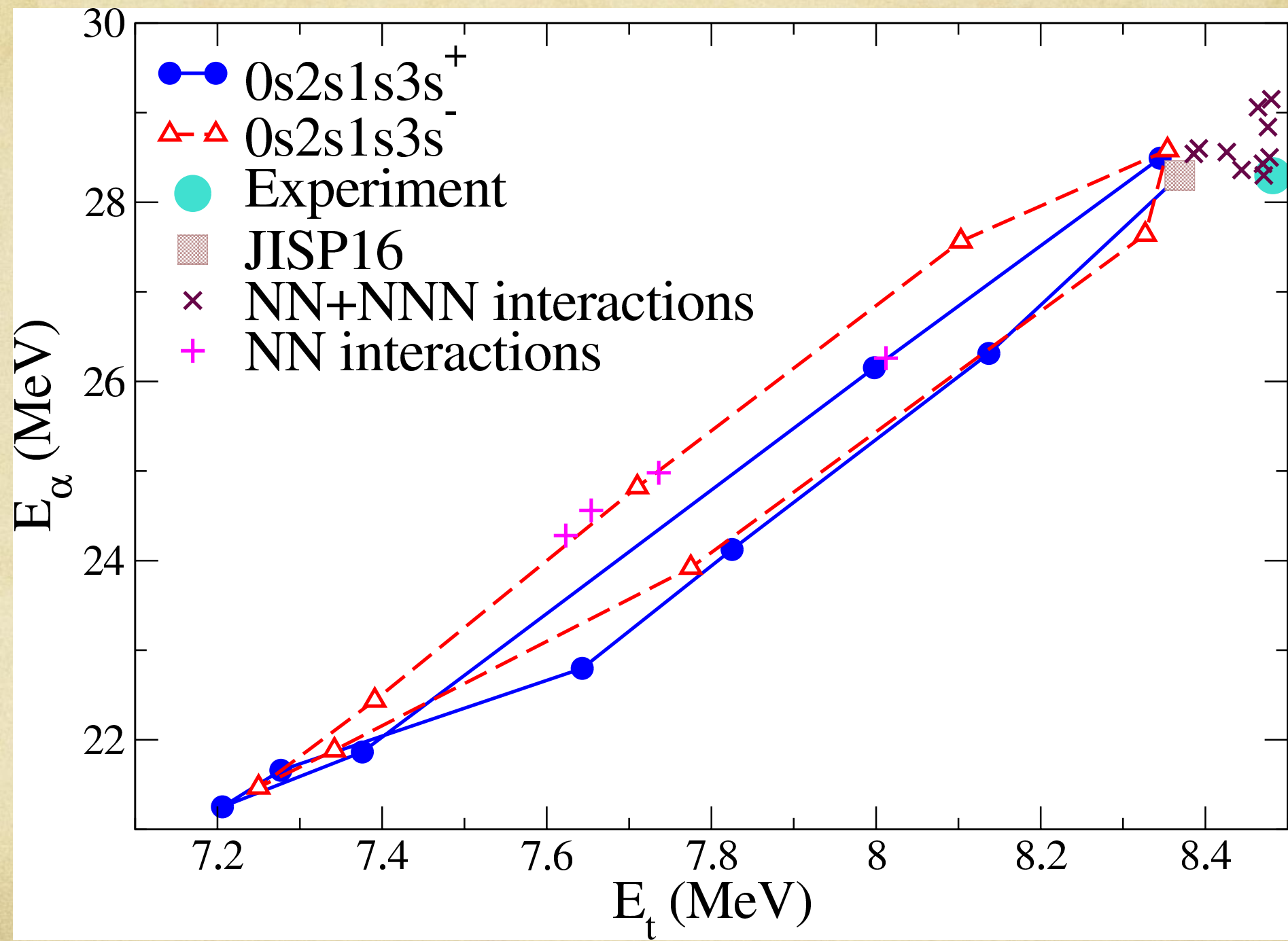
$$|a_\alpha\rangle = a_\alpha^n \varphi_n + a_\alpha^m \varphi_m$$

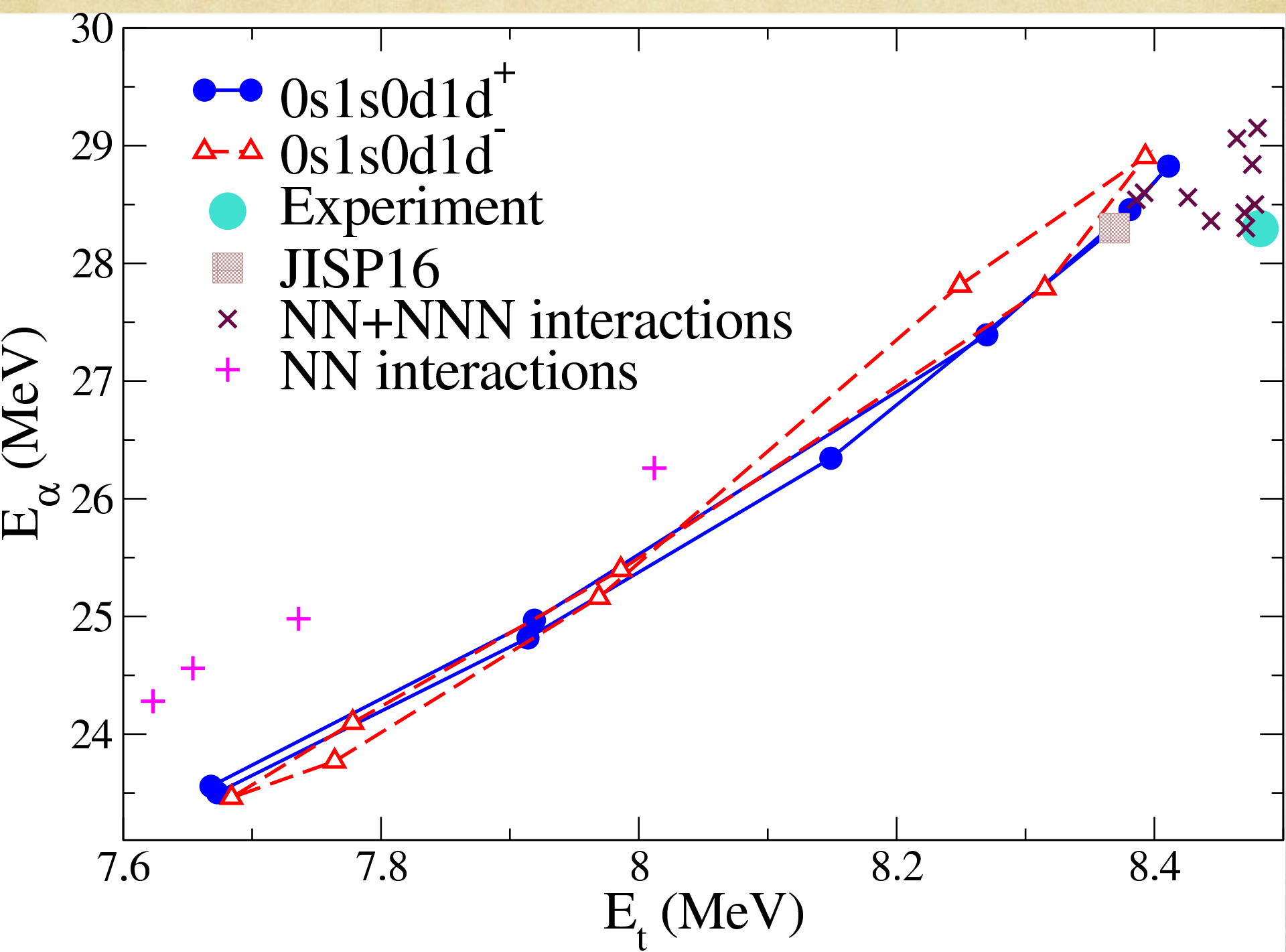
# Линия Тьона

Линия Тьона — корреляция энергий связи  ${}^3\text{H}$  и  ${}^4\text{He}$









| Комбинация волн | Поворот           |                   |                   | Поворот + Отражение |                   |                   |
|-----------------|-------------------|-------------------|-------------------|---------------------|-------------------|-------------------|
|                 | $0s2s$ и $1s3s$   | $0s1s$ и $0d1d$   | $1s0d$ и $0s1d$   | $0s2s$ и $1s3s$     | $0s1s$ и $0d1d$   | $1s0d$ и $0s1d$   |
| $0^\circ$       | $8.359 \pm 0.022$ | $8.359 \pm 0.022$ | $8.359 \pm 0.022$ | $8.045 \pm 0.07$    | $8.248 \pm 0.014$ | $8.052 \pm 0.013$ |
| $30^\circ$      | $8.357 \pm 0.151$ | $8.419 \pm 0.011$ | $8.508 \pm 0.020$ | $8.315 \pm 0.020$   | $8.394 \pm 0.010$ | —                 |
| $60^\circ$      | $8.093 \pm 0.209$ | $8.273 \pm 0.021$ | $8.567 \pm 0.012$ | $8.316 \pm 0.016$   | $8.316 \pm 0.012$ | $8.420 \pm 0.018$ |
| $120^\circ$     | $7.267 \pm 0.058$ | $7.944 \pm 0.019$ | $8.631 \pm 0.007$ | $7.779 \pm 0.038$   | $7.987 \pm 0.021$ | $8.595 \pm 0.008$ |
| $180^\circ$     | $7.175 \pm 0.009$ | $7.663 \pm 0.023$ | $8.617 \pm 0.007$ | $7.328 \pm 0.036$   | $7.768 \pm 0.030$ | $8.662 \pm 0.007$ |
| $240^\circ$     | $7.301 \pm 0.028$ | $7.673 \pm 0.038$ | $8.239 \pm 0.011$ | $7.228 \pm 0.024$   | $7.671 \pm 0.023$ | $8.561 \pm 0.015$ |
| $270^\circ$     | $7.643 \pm 0.082$ | —                 | —                 | —                   | —                 | —                 |
| $300^\circ$     | $8.107 \pm 0.075$ | $7.907 \pm 0.072$ | $7.997 \pm 0.027$ | $7.348 \pm 0.017$   | $7.759 \pm 0.024$ | $8.045 \pm 0.019$ |
| $330^\circ$     | $8.270 \pm 0.062$ | $8.134 \pm 0.047$ | —                 | $7.612 \pm 0.08$    | $7.966 \pm 0.020$ | —                 |



Преобразование DET-PET позволяет заметно изменять энергию связи ядер: более 1 МэВ для  $^3\text{H}$  и около 7 МэВ для  $^4\text{He}$ . Линия Тьона, построенная с использованием DET-PET, отличается от ранее известной.

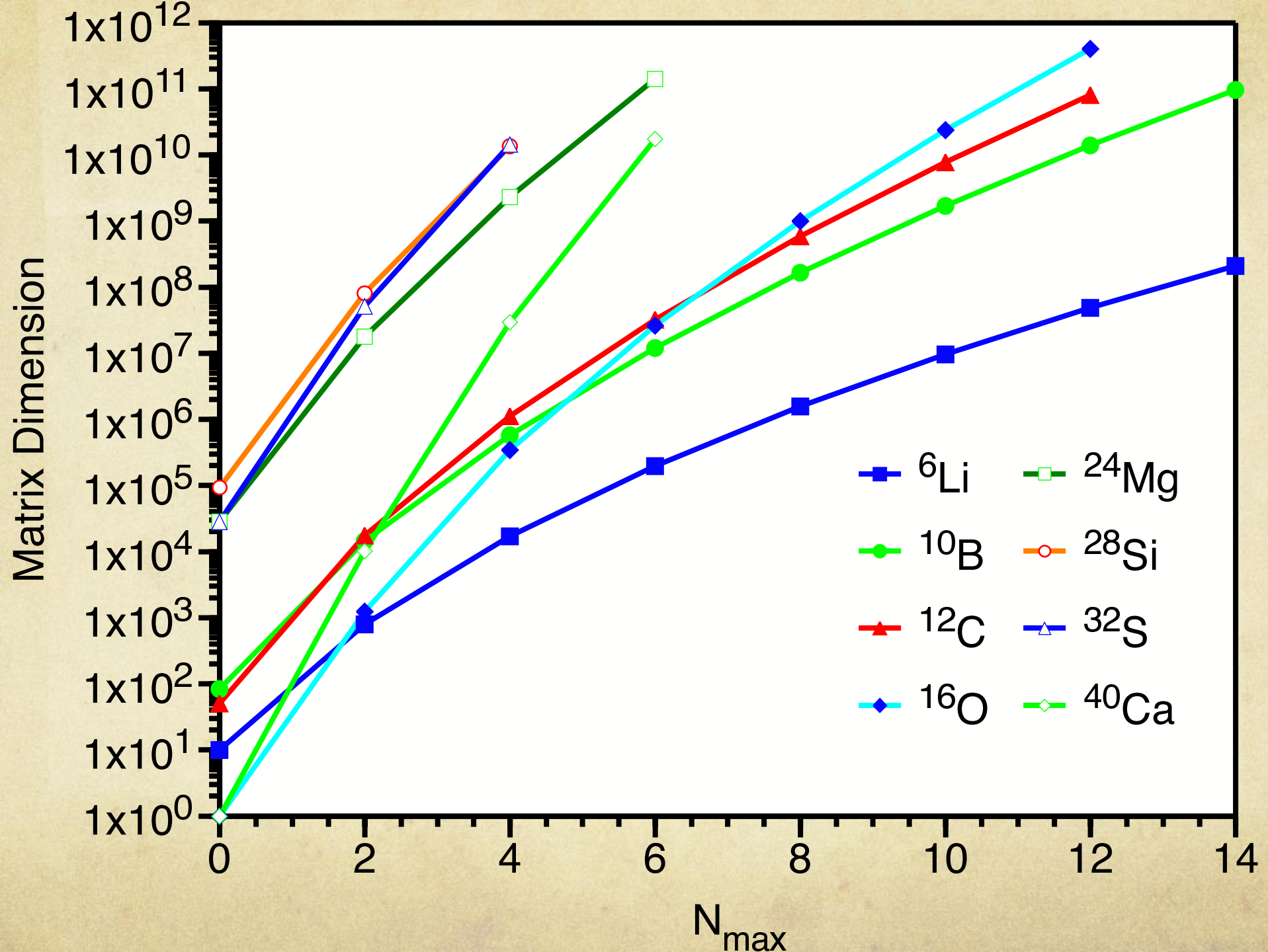
# Итоги

- Проведено широкомасштабное исследование энергий связи ядер, полученных со взаимодействием JISP16, выявлены недостатки этого потенциала в описании ядер  $p$ -оболочки.
- Построена новая версия NN-взаимодействия JISP — потенциал JISP16<sub>2010</sub>. В данной версии значительно улучшено описание ядер с  $A \geq 12$ .
- Предложено и апробировано в расчетах  ${}^3\text{H}$  и  ${}^4\text{He}$  фазово-эквивалентное преобразование DET-PET. Обнаружено, что это преобразование позволяет заметно изменять энергию связи этих ядер.

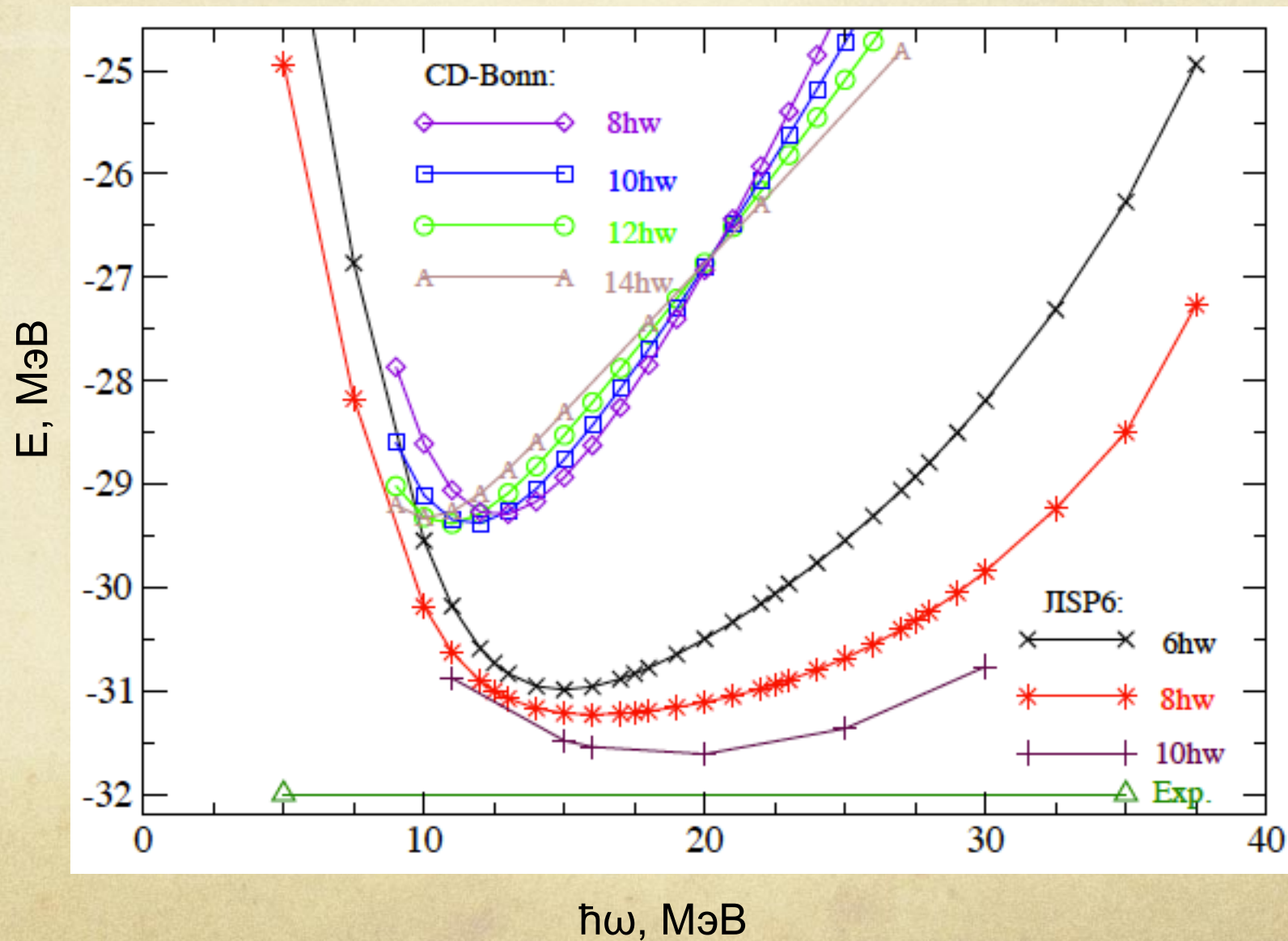


***Спасибо за внимание!***

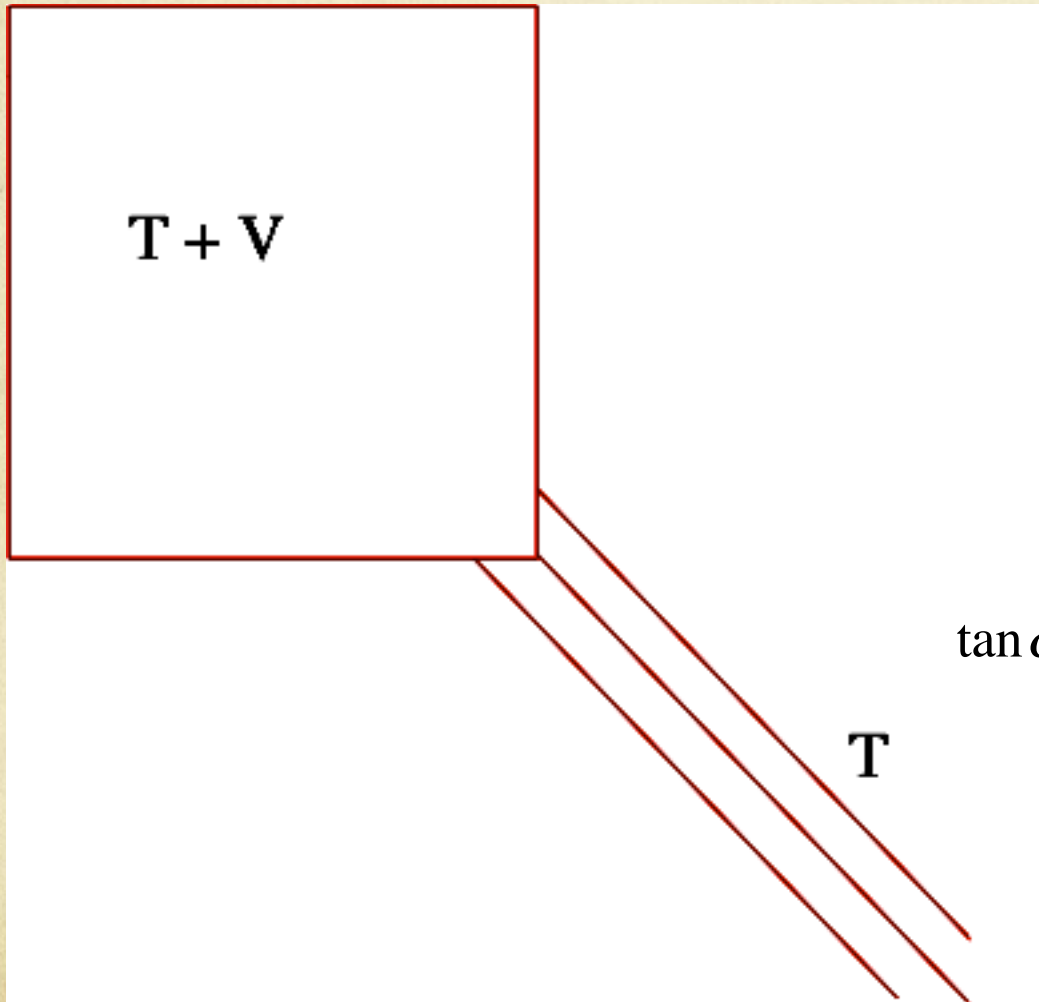




# Расчеты в МОБИК



# Формализм J-матрицы: рассеяние в осцилляторном базисе



$$\sum_{n'=0}^N H_{nn'}^l \langle n' | \lambda \rangle = E_\lambda \langle n | \lambda \rangle$$

$$G_{nn'} = - \sum_{\lambda'=0}^N \frac{\langle n | \lambda' \rangle \langle \lambda' | n' \rangle}{E_{\lambda'} - E}$$

$$\tan \delta(E) = - \frac{S_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l S_{N+1,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l C_{N+1,l}(E)}$$



# Обратная задача рассеяния

**Сдвиги фаз считаются известными**

$$\tan \delta(E) = - \frac{S_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l S_{N+1,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN} T_{N,N+1}^l C_{N+1,l}(E)}$$

**нахождение собственных значений  $E_\lambda$ ,  $\lambda = 0, 1, \dots, N$**

$$\cos \delta(E_\lambda) S_{N+1,l} + \sin \delta(E_\lambda) C_{N+1,l} = 0$$

$$E = (q^2 / 2) \hbar \omega$$

**и компонент собственного вектора  $\langle N | \lambda \rangle$ .**

$$|\langle N | \lambda \rangle|^2 = \frac{a_{Nl}(E_\lambda)}{a_l^\lambda T_{N,N+1}^l}$$

$$a_l^\lambda = \left. \frac{da_{N+1,l}(E)}{dE} \right|_{E=E_\lambda}$$

# Обратная задача рассеяния

**Второй  
шаг:**

$$E_\lambda, \langle N | \lambda \rangle \quad \lambda = 1, 2, 3, \dots \quad \rightarrow \quad \mathbf{JISP}$$

При таком подходе гамильтониан задан неоднозначно, так как существуют фазово-эквивалентные преобразования.

**JISP:**

$$\hbar\omega = 40 \text{ МэВ} \quad \begin{array}{l} {}^1s_0, {}^1p_1, {}^3p_0, {}^3p_1 \\ {}^1d_2, {}^3d_2, {}^1f_3, {}^3f_3 \\ {}^1g_4, {}^3g_4 \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{-- (5x5) матрицы;} \\ \text{-- (4x4) матрицы;} \\ \text{-- (3x3) матрицы} \end{array} \quad \left[ \begin{array}{l} 2N+1 = 8 \text{ для четных } u \\ 2N+1 = 9 \text{ для нечетных} \\ \text{парциальных волн} \end{array} \right]$$