

일반화된 하트리-포크근사방법에 의한 몇가지 가벼운 핵들의 평균 2 제곱반경계산

김래성, 김련희, 오수일

위대한 수령 김일성 동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《...원자력부문의 과학자들이 원자력에 대한 연구사업을 더 적극적으로 하도록 하여야 합니다.》(《김일성전집》 제60권 352페이지)

본문에서는 일반화된 하트리-포크근사방법을 리용하여 일부 가벼운 핵들의 평균 2 제곱반경을 계산하고 선행연구[2-5]결과와 비교하여 핵의 바닥상태계산에서 일반화된 하트리-포크근사방법의 정확성을 고찰하였다.

핵구조연구에서는 하트리-포크방법이 많이 리용되고있으며 그중에서 많이 쓰이는 방법은 하트리-포크-보골류보브근사방법[3]과 스카임-하트리-포크방법[4]이다. 그러나 이 방법들은 다계의 바닥상태계산에만 적용할 수 있다.

핵의 바닥상태뿐만 아니라 여기상태까지 동시에 구하기 위한 연구사업이 진행되어왔으며 그 과정에 일반화된 하트리-포크근사방법이 제기되였다.[1]

일반화된 하트리-포크방정식은 다음과 같다.

$$\sum_{\beta} b_{\beta} \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^N \langle \beta'_i | \hat{f}_i | P \beta_i \rangle \prod_{k \neq i} \delta_{\beta'_k, P \beta_k} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \langle \beta'_i \beta'_j | \hat{g}_{ij} | P \beta_i P \beta_j \rangle \prod_{k \neq i, j} \delta_{\beta'_k, P \beta_k} \right) = \mu b_{\beta'} \quad (1)$$

$$\sum_{\beta'} b_{\beta'}^* b_{\beta} \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^N \hat{f}_i | P \beta_i \rangle \delta_{\beta'_i P} \prod_{k \neq i} \delta_{\beta'_k, P \beta_k} + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \langle \beta'_j | \hat{g}_{ij} | P \beta_j \rangle | P \beta_i \rangle \delta_{\beta'_i P} \prod_{k \neq i, j} \delta_{\beta'_k, P \beta_k} \right) = \lambda_p | p \rangle \quad (2)$$

여기서 상태벡터 $|\beta_i\rangle$ 는

$$|\beta_i\rangle = |n_i J_i L_i M_i\rangle = \frac{R_{n_i L_i}(r)}{r} Y_{J_i M_i}^{L_i}(\Omega) \quad (3)$$

이고

$$Y_{J_i M_i}^{L_i}(\Omega) = \sum_{s_i=-1/2}^{1/2} \left\langle L_i M_i - s_i \frac{1}{2} s_i \left| J_i M_i \right. \right\rangle Y_{L_i M_i - s_i}^{L_i}(\Omega) \chi_{1/2, s_i} \quad (4)$$

로서 구면스피노르이다. 일반적으로 N 개 핵자로 이루어진 핵의 하밀토니안은

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \sum_{i=1}^N \hat{f}_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \hat{g}_{ij} \quad (5)$$

이다.

방정식계 (1)과 (2)를 푸는 방법은 다음과 같다.[2]

먼저 초기 한립자파동함수 $|p\rangle$ 를 가정한다. 다음 방정식계 (1)을 풀어 전개결수 b_{β} 와 고유값 μ 를 구한다. 그다음 그것을 방정식계 (2)에 대입하여 한립자파동함수 $|p\rangle$ 와

한립자에네르기준위 λ_p 를 구한다. 이 결과를 리용하여 풀이결과들이 더이상 변하지 않을 때까지 방정식계 (1)과 (2)를 푸는 과정을 계속 반복진행한다.

론문에서는 일반화된 하트리-포크근사방법을 리용하여 가벼운 핵들의 바닥상태에서 평균2제곱반경을 계산하고 DZ모형[5]으로 계산한 결과와 비교함으로써 고찰하는 근사방법의 정확성을 평가하기로 한다.

식 (5)에서 $V(r)$ 와 $V(r_i, r_j)$ 를 어떻게 선택하는가는 핵계의 성질을 정확히 반영하는 문제뿐만아니라 자체모순없는 마당방법으로 이 방정식계를 푸는데 많은 영향을 준다. 따라서 중심력포텐셜부분을 핵의 평균포텐셜마당과 매우 근사하게 줌으로써 호상작용포텐셜의 영향을 작게 하였다. 그러면 방정식계를 자체모순없는 마당방법으로 풀수 있게 된다.[2]

론문에서는 핵의 중심포텐셜을 우드스-썩손포텐셜로 놓고 그속에서 핵자들이 서로 조화진동하면서 운동한다고 될수록 간단한 경우에 대하여 고찰하기로 한다. 핵자수가 A , 원자번호가 Z , 중성자수가 $N(=A-Z)$ 인 핵의 하밀토니안은 다음과 같이 표현된다.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V^{(np)}(r_i) + D \hat{I}_i^2 + C \hat{I}_i \cdot \hat{s}_i \right] + \frac{1}{2} \sum_i^A \sum_{j \neq i}^A k(r_i - r_j)^2 \quad (6)$$

론문에서는 다음과 같은 우드스-썩손포텐셜을 리용하였다.

$$V^{(np)}(r) = -V_0^{(np)} \left[1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right) \right]^{-1} \quad (7)$$

여기서 i 는 핵자의 번호, n 은 중성자, p 는 양성자를 의미하며 $V_0^{(np)}$ 는 포텐셜깊이로서 양성자와 중성자에 대하여 약간 차이 나는데 여기서는 가벼운 핵을 대상으로 하기때문에 같은 값으로 취급하였다. 그리고 R 는 핵반경으로서 $R=r_0 A^{1/3}$ 로 계산되며 $r_0=1.2\text{fm}$ 로 선택하였다. a 는 분산파라미터로서 핵의 표면에서 핵밀도가 령으로 되게 하는 비를 의미하며 k 는 핵자-핵자호상작용결수이고 D 와 C 는 궤도호상작용과 스핀-궤도호상작용 특성을 반영하는 결수들이다.

우선 결합에너지를 실험값과 맞추는 방법으로 파라미터 V_0 과 a 를 구하였다.(표 1) 이렇게 하면 마수가 나오는 한립자준위배치가 얻어지게 된다. 이 한립자준위파동함수들을

표 1. 결합에너기에 맞추기한 몇가지 핵들의 파라미터값들

핵	실험 값[7]/MeV	V_0 /MeV	a /fm
^2H	2.224 573	21.353 48	0.95
^3H	8.481 821	25.099 91	0.95
^3He	7.718 058	22.422 45	1.20
^4He	28.295 674	33.094 11	1.20
^5He	27.410	30.193 10	1.30
^5Li	26.330	29.588 60	1.30
^6Li	31.994 55	30.773 38	1.30
^7Li	39.244 55	32.051 17	1.30

초기파동함수들로 선택하고 자체모순없는 마당방법을 리용하여 일반화된 하트리-포크방정식계 (1)과 (2)를 푼다. 결과 얻어진 중수소핵과 초중수소핵, 헬륨동위핵들, 리튬동위핵들의 바닥상태동경부분파동함수그래프를 그림 1~3에 보여주었다. 이에 기초하여 여러 핵의 바닥상태파동함수뿐만아니라 양성자, 중성자밀도의 평균2제곱반경과 중성자피복두께 등을 구할수 있다.

다음 수소, 헬륨, 리튬동위원소들의 밀도분포를 그림 4~6에 보여주었다. 일반적으로 하트리-포크방법에서 중성자 혹은 양성자밀도는 다음과 같이 주어진다.

$$\rho_q(r) = \sum_{\beta \in q} w_{\beta} \Psi_{\beta}^{+}(r) \Psi_{\beta}(r) \quad (q \text{ 는 중성자 혹은 양성자}) \quad (8)$$

여기서 Ψ_{β} 는 상태 β 로 주어진 한립자파동함수이며 w_{β} 는 β 상태의 점유율이다.

중성자와 양성자밀도의 평균2제곱반경, 중성자피복두께는 다음과 같은 식을 리용하여 평가할수 있다.[6]

$$r_q = \langle r_q^2 \rangle^{1/2} = \left(\frac{\int r^2 \rho_q dr}{\int \rho_q dr} \right)^{1/2} \quad (9)$$

$$t = r_n - r_p = \langle r_n^2 \rangle^{1/2} - \langle r_p^2 \rangle^{1/2} \quad (10)$$

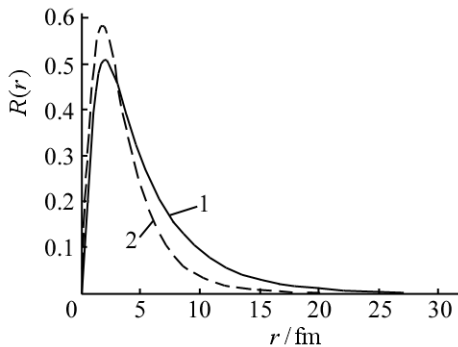


그림 1. 중수소(1)와 초중수소(2)핵의 바닥상태 동경부분파동함수그래프

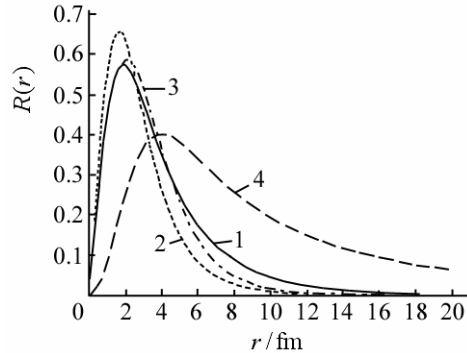


그림 2. 헬륨동위핵들의 바닥상태 동경부분파동함수그래프

1-³He, 2-⁴He, 3-⁵He(L=0), 4-⁶He(L=1)

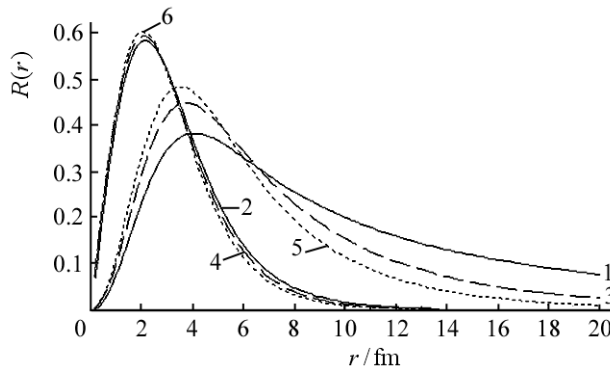


그림 3. 리튬동위핵들의 바닥상태동경부분파동함수그래프

1-⁵Li(L=0), 2-⁵Li(L=1), 3-⁶Li(L=0), 4-⁶Li(L=1), 5-⁷Li(L=0), 6-⁷Li(L=1)

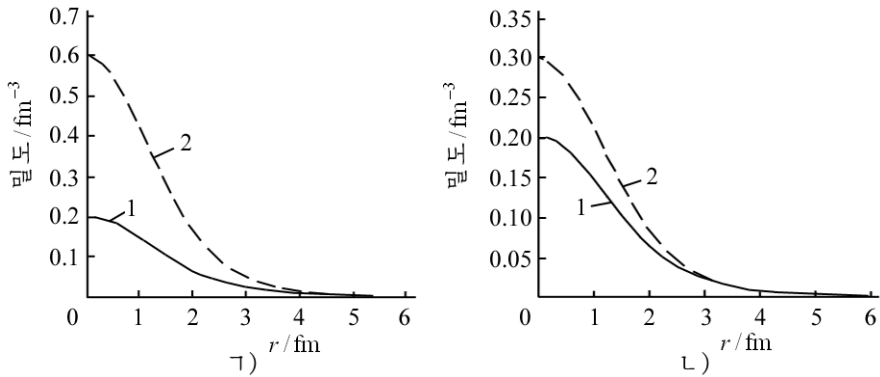


그림 4. 수소동위핵들의 밀도분포

ㄱ) 중성자밀도분포, ㄴ) 양성자밀도분포, 1— ^2H , 2— ^3H

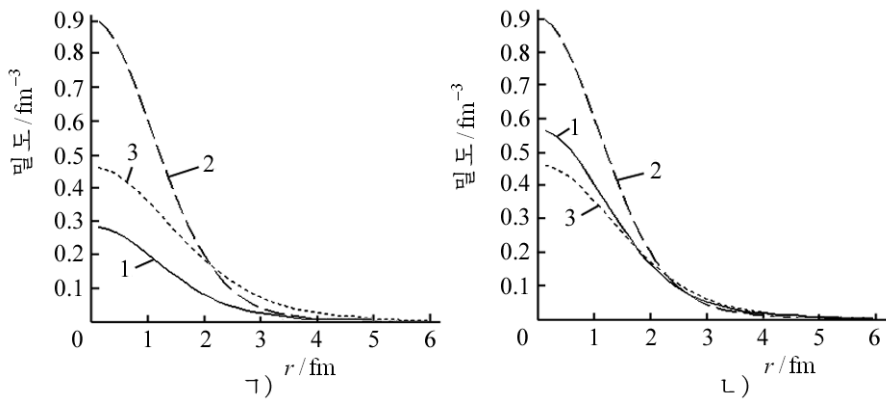


그림 5. 헬륨동위핵들의 밀도분포

ㄱ) 중성자밀도분포, ㄴ) 양성자밀도분포, 1— ^3H , 2— ^4H , 3— ^5H

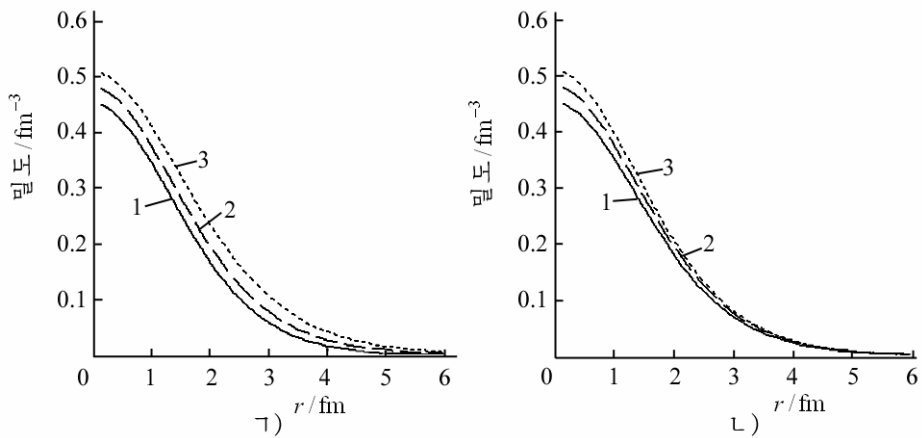


그림 6. 리튬동위핵들의 밀도분포

ㄱ) 중성자밀도분포, ㄴ) 양성자밀도분포, 1— ^5H , 2— ^6H , 3— ^7H

매 핵의 중성자와 양성자밀도의 평균2제곱반경과 중성자피복두께에 대한 계산결과를 표 2에 주었다.

표 2. 중성자와 양성자밀도의 평균2제곱반경과 중성자피복두께(fm)

핵	중성자	양성자	피복두께	DZ모형[4]	핵	중성자	양성자	피복두께	DZ모형[4]
^2H	2.028 6	2.030 9	-0.002 3	1.998 4	^5He	1.895 3	1.608 7	0.286 6	1.858 2
^3H	1.699 8	1.701 2	-0.001 4	1.657 9	^5Li	1.621 8	1.919 0	-0.297 2	2.055 2
^3He	1.889 1	1.890 6	-0.001 5	2.035 1	^6Li	1.852 5	1.853 7	-0.001 2	2.037 9
^4He	1.527 6	1.528 5	-0.000 9	1.941 4	^7Li	1.986 7	1.805 1	0.181 6	2.011 1

일반적으로 무거운 핵들에서는 핵중심밀도가 중심근방에서는 일정하게 유지되다가 표면근방으로 가면서 급격히 감소하지만 그림 4~6에서 보는바와 같이 가벼운 핵들에서는 핵중심밀도가 유지되지 못하고 핵표면으로 가면서 급격히 감소한다. 또한 동위핵들의 밀도분포를 비교하면 원자번호가 클수록 동위핵들의 중성자밀도분포(혹은 양성자밀도분포)에서의 차이가 심하지 않고 원자번호가 작을수록 밀도분포의 차이는 심하다는것을 알 수 있다.

또한 표 2로부터 중성자수가 양성자수에 비하여 많을수록 중성자피복두께는 정의 값을 가지고 더 커진다는것을 알 수 있다. 이것은 가벼운 핵들에서는 중성자수가 양성자수에 비하여 그리 크지 않기때문에 대체로 중성자피복두께는 부의 값을 가지며 중성자가 핵을 전반적으로 덮지 못한다는것을 보여준다.

다음으로 계산결과와 선행연구결과[5]를 비교하면 마수핵인 ^4He 에서 제일 많이 차 이난다는것을 알 수 있다. 선행연구[5]에서 제기한 DZ모형은 마수핵을 특별히 잘 맞추도록 설계되어있으므로 계산결과들은 마수핵에서는 잘 맞지 않는다는 결론을 얻게 된다.

맺 는 말

- 1) 일반화된 하트리-포크근사방법으로 일부 가벼운 핵들의 평균2제곱반경을 계산하고 그 결과들을 DZ모형결과들과 비교함으로써 새 방법의 정확성을 평가하였다.
- 2) 일반화된 하트리-포크근사방법이 마수핵을 제외한 가벼운 핵들의 결합에너지와 구조적성질들을 비교적 잘 설명한다는것을 밝혔다.

참 고 문 헌

- [1] 김일성 종합대학학보 물리학, 65, 1, 124, 주체108(2019).
- [2] 김일성 종합대학학보 물리학, 65, 4, 99, 주체108(2019).
- [3] S. Goriely et al.; Phys. Rev., C 88, 061302, 2013.
- [4] Ali A. Alzubadi, Duaa Majid Hameed; World Journal of Nuclear Science and Technology, 7, 67, 2017.
- [5] J. Mendoza-Temis et al.; Nuclear Physics, A 843, 14, 2010.
- [6] M. Brack et al.; Phys. Lett., 5, 36, 1985.
- [7] G. Audi, A. H. Wapstra; Nucl. Phys., A 565, 1, 1993.

주체108(2019)년 12월 5일 원고접수

Calculation of Mean Square Radius of Some Light Nuclei with the Generalized Hartree-Fock Approximation Method

Kim Thae Song, Kim Ryon Hui and O Su Il

We calculated the mean square radius of some light nuclei with the generalized Hartree-Fock approximation method and compared the results with DZ model results to assess the accuracy of the new method. We cleared that the generalized Hartree-Fock approximation method could relatively well explain the binding energies and structural properties of light nuclei except the magic nuclei.

Keywords: Hartree-Fock approximation, many-body problem