TẠP CHÍ KHOA HỌC VÀ GIÁO DỤC
ISSN: 1859-1612
Journal homepage: https://tckhgd.dhsphue.edu.vn

Vai trò của thế bậc hai trong mô hình thế quang học vi mô

Đỗ Quang Tâm[1,2,3], Nguyễn Cao Bảo Duy[1,2], Đặng Phước Đức[1,2], Trần Viết Nhân Hào[1,2]

[1]Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

[2]Trung tâm Vật lý lý thuyết và vật lý tính toán, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

[3]Khoa Cơ bản, Trường Đại học Y-Dược, Đại học Huế

THÔNG TIN BÀI BÁO

Quá trình xử lý:
Ngày nhận: 19/5/2025
Ngày nhận bản chỉnh sửa: 28/7/2025
Ngày nhận đăng: 06/9/2025
Ngày xuất bản: 20/10/2025

Từ khóa:
Thế quang học vi mô
Thế bậc hai
Trường trung bình tự hợp

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này chúng tôi đánh giá vai trò của thế bậc hai trong mô hình thế quang học vi mô cho tán xạ đàn hồi neutron lên các bia hạt nhân. Cụ thể, chúng tôi sử dụng phương pháp trường trung bình tự hợp áp dụng lên mô hình thế quang học vi mô để đánh giá thế hấp thụ bậc hai cho các hạt nhân có số khối từ nhẹ, trung bình đến nặng như ^{16}O, ^{40}Ca, ^{48}Ca và ^{208}Pb. Kết quả tính toán cho thấy đối với hạt nhân nhẹ ^{16}O, thế bậc hai tồn tại ở dải năng lượng từ 9 - 22 MeV. Đối với hạt nhân ^{40}Ca, thế bậc hai xuất hiện khi năng lượng neutron tới lớn hơn 20 MeV. Thế bậc hai ở hạt nhân ^{48}Ca xuất hiện ngay ở năng lượng thấp. Đối với hạt nhân nặng ^{208}Pb, thế bậc hai có hiệu ứng nhỏ. Từ đó kết luận rằng, độ lớn của thế bậc hai tăng theo năng lượng hạt neutron tới và phụ thuộc vào hạt nhân bia.

1. GIỚI THIỆU

Thế quang học là một khái niệm quan trọng trong lý thuyết phản ứng hạt nhân. Nó được sử dụng để mô tả tương tác giữa hạt tới lên hạt nhân bia. Ngày nay, mô hình thế quang học là một trong những công cụ lý thuyết hiệu quả nhất để nghiên cứu nhiều vấn đề phức tạp của vật lý hạt nhân, đặc biệt là cấu trúc hạt nhân và phản ứng hạt nhân. Sự hiệu quả của thế quang học thể hiện ở khả năng đơn giản hóa bài toán phức tạp tương tác giữa hạt tới và hạt nhân bia bằng một thế phức gồm hai thành phần: phần thực và phần ảo. Trong đó, phần thực của thế quang học đặc trưng cho kênh tán xạ đàn hồi và phần ảo của thế này mô tả sự hấp thụ năng lượng từ hạt tới thông qua các kênh tán xạ phi đàn hồi.

Khái niệm thế quang học trong vật lý hạt nhân xuất phát từ sự tương đồng giữa tán xạ hạt nhân và quang học. Năm 1935, Hans Bethe (Bethe, 1935) lần đầu tiên đề xuất ý tưởng về thế phức để mô tả sự tán xạ neutron dựa trên sự tương tự với chiết suất trong quang học. Cụ thể, trong quang học, chiết suất ánh sáng đặc trưng cho sự lệch hướng truyền của ánh sáng khi đi từ môi trường này sang môi trường khác. Điều này tương tự với tương tác giữa hạt tới đến hạt nhân bia. Sau đó, dạng tường minh của thế quang học được đưa ra lần đầu tiên từ công trình của Feshbach và cộng sự (1958) (Feshbach, 1958):

$$V = V_{00} + V_0 \frac{1}{E^{(+)} - H} V_0^{\dagger}, \quad (1)$$

trong đó V là thế quang học, V_{00} là thế tương tác trực tiếp ở trạng thái cơ bản, V_0 là toán tử mô tả khả năng chuyển từ trạng thái cơ bản sang trạng thái kích thích, H là Hamiltonian hiệu dụng cho các trạng thái kích thích, $E^{(+)}$ là năng lượng phức với $E^{(+)} = E + i\eta$. Tiếp đó là sự phát triển mô hình thế quang học hiện tượng luận khi thế Woods-Saxon trở thành dạng chuẩn với các tham số được phát triển bởi Becchetti-Greenlees (1969) cho protons (Becchetti, 1969) và Wilmore-Hodgson (1964) cho neutrons (Wilmore, 1964). Giai đoạn những năm 1970 - 1990, thế quang học vi mô cho phản ứng hạt nhân được phát triển từ các công trình của Jeukenne

Tác giả liên hệ: T. V. Nhân Hào;
Địa chỉ e-mail: tvnhao@hueuni.edu.vn
DOI: https://doi.org/10.26459/jse.073.2025

(1977) (Jeukenne, 1977) Brieva-Rock (Brieva, 1977, 1978). Trong những thập kỷ gần đây, nhờ sự quan tâm nhiều hơn trong việc phát triển các thế quang học vi mô, các mô hình này đã có tính hệ thống, phù hợp hơn với các quy tắc vật lý, là phương pháp đầy tiềm năng trong việc dự đoán các tính chất vật lý xảy ra bên trong các hạt nhân không bền (Hebborn, 2023). Hầu hết thế quang học vi mô được tính dựa trên các mô hình *ab initio* (Somà, 2020; Navrátil, 2016; Rotureau, 2017), mô hình vật chất hạt nhân dựa trên lý thuyết trường hiệu dụng chiral (Epelbaum, 2015; Hammer, 2020; Holt, 2016; Whitehead, 2019), mô hình bán vi mô (Kobos, 1984; Bauge, 1998, 2001), mô hình năng lượng tự hợp (Deb, 2001; Dickhoff, 2004), mô hình vật chất hạt nhân (Dupuis, 2006; Barbieri, 2005, 2007), và mô hình cấu trúc hạt nhân (Bernard, 1979; Mizuyama, 2012, 2014; Blanchon, 2015, 2017; Nhan Hao, 2015, 2018; Hoang Tung, 2020).

Cho đến nay, hầu hết các thế quang học được xây dựng từ mô hình hiện tượng luận hoặc vi mô. Thế quang học hiện tượng luận là một mô hình đơn giản hóa, được xây dựng dựa trên dữ liệu thực nghiệm để mô tả tương tác giữa nucleon với hạt nhân bia. Dạng tiếp cận này có nhiều ưu điểm như đơn giản, dễ sử dụng do các tham số được khớp với số liệu thực nghiệm kết hợp với các tính toán không quá phức tạp. Cũng chính vì thế mà mô hình này phù hợp với dữ liệu thực nghiệm, có thể tính toán nhanh nhiều loại hạt nhân với các năng lượng khác nhau bằng cách chỉ việc điều chỉnh các tham số hiệu chỉnh cho phù hợp với mỗi trường hợp (Koning, 2003). Tuy nhiên, thế quang học hiện tượng luận chưa thể mở rộng cho tính toán đối với các hạt nhân không bền do rất khó để có số liệu thực nghiệm tán xạ đàn hồi tương ứng lên các bia hạt nhân này.

Ngược lại với thế quang học hiện tượng luận, thế quang học vi mô được xây dựng từ các tương tác cơ bản giữa các nucleon, thường dựa trên lý thuyết trường lượng tử và/hoặc phương pháp hệ nhiều hạt. Đặc biệt, đối với thế quang học vi mô xây dựng từ phương pháp tiếp cận cấu trúc hạt nhân, dựa trên phương pháp hàm Green được áp dụng để tính toán thế hiệu dụng trong môi trường hạt nhân. Những phương pháp này không chỉ xem xét tương tác trung bình mà còn tính đến các hiệu ứng tương quan, hiệu ứng Pauli, và sự hấp thụ do các kênh không đàn hồi. Chính vì thế, thế quang học vi mô có dạng rất phức tạp, cần phải qua nhiều phương pháp tính toán số, bỏ qua một số hiệu ứng động học phức tạp nên độ chính xác còn kém so với thế quang học hiện tượng luận và thời gian tính toán lâu. Tuy vậy, thế quang học vi mô tỏ ra vượt trội trong việc phân tích, dự đoán tốt các hiệu ứng vật lý xảy ra đối với hạt nhân không bền, phù hợp cho nghiên cứu một cách toàn diện cấu trúc của nhiều loại hạt nhân khác nhau.

Trong quá trình tính toán số sử dụng mô hình thế quang học vi mô, thế bậc hai được sử dụng nhằm cải thiện các tính toán thông qua việc xét đến một số hiệu ứng đã bị bỏ qua trong thế bậc nhất, chẳng hạn như sự vi phạm nguyên lý loại trừ Pauli do việc xét các fermion như là boson. Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát mức độ đóng góp của thế bậc hai đối với các hạt nhân có khối lượng khác nhau với năng lượng tới khác nhau. Kết quả tính số được thực hiện với các hạt nhân có số khối từ nhẹ, trung bình đến nặng như ^{16}O, ^{40}Ca, ^{48}Ca và ^{208}Pb.

2. CỞ SỞ LÝ THUYẾT

Xét trường hợp tán xạ đàn hồi neutron - hạt nhân ở năng lượng thấp. Thế quang học vi mô có dạng:

$$V_{\text{opt}} = V_{\text{HF}} + \Delta\Sigma(\omega), \tag{2}$$

trong đó:

$$\Delta\Sigma(\omega) = \Sigma(\omega) - \frac{1}{2}\Sigma^{(2)}(\omega). \tag{3}$$

Ở phương trình (2) và (3), V_{HF} là thế tĩnh Skyrme-Hartree-Fock, đây là thế thực, định xứ và không phụ thuộc năng lượng. $\Delta\Sigma(\omega)$ là phần thế động, đây là thế phức, phi định xứ và phụ thuộc năng lượng. Thế động này chứa hiệu ứng hấp thụ và kích thích liên quan đến các dao động tập thể - phonon. Trong đó, $\Sigma(\omega)$ là thế bậc nhất, $\Sigma^{(2)}(\omega)$ là thế bậc hai.

Xét quá trình tính toán phần thế động $\Delta\Sigma(\omega)$. Các trạng thái đơn hạt Hartree-Fock:

$$\begin{aligned}
&\hat{\alpha} = (\epsilon_\alpha, l_\alpha, j_\alpha, m_\alpha, q_\alpha) = (\alpha, m_\alpha, q_\alpha)\text{: các trạng thái đơn hạt tổng quát;}\\
&\hat{a} = (\epsilon_a, l_a, j_a, m_a, q_a) = (a, m_a, q_a)\text{: các trạng thái đơn hạt đã chiếm chỗ;}\\
&\hat{A} = (\epsilon_A, l_A, j_A, m_A, q_A) = (A, m_A, q_A)\text{: các trạng thái đơn hạt chưa chiếm chỗ;}
\end{aligned} \tag{4}$$

trong đó các ký hiệu có (không có) dấu mũ bao gồm (không bao gồm) thành phần mô men góc thứ ba, ε là năng lượng đơn hạt, l là mô men góc quỹ đạo, j là mô men góc toàn phần, m là thành phần thứ ba của j, và q = 0 cho neutron, q = 1 cho proton. Trong giả định đối xứng cầu, hàm sóng đơn hạt HF $\varphi_{\hat{a}}(r, \sigma, q)$ có thể được phân tích thành hàm bán kính $u_\alpha(r)$, phần spin-góc $\mathcal{Y}_{\hat{\alpha}}(\hat{r}, \sigma)$ và hàm isospin $\chi_{q_a}(\tau)$:

$$\varphi_{\hat{a}}(r, \sigma, q) = \frac{u_\alpha(r)}{r}\mathcal{Y}_{\hat{a}}(\hat{r}, \sigma)\chi_{q_a}(\tau), \tag{5}$$

trong đó:

$$\mathcal{Y}_{\widehat{\alpha}}(\hat{r},\sigma) = [Y_{\alpha}(\hat{r}) \otimes \chi(\sigma)]_{\widehat{\alpha}}. \quad (6)$$

Sử dụng khai triển sóng riêng phần cho Σ, ta thu được:

$$\Sigma(r,\sigma,r',\sigma',\omega) = \sum_{ljm} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{r},\sigma)\Sigma_{lj}(r,r',\omega)\mathcal{Y}^{\dagger}_{\ell jm}(\widehat{r'},\sigma'), \quad (7)$$

khi đó các thành phần sóng riêng phần của Σ được cho bởi:

$$\Sigma_{lj}(r,r',\omega) = \sum_{\sigma\sigma'} \int d\hat{r}d\hat{r}'\mathcal{Y}^{\dagger}_{ljm}(\hat{r},\sigma)\Sigma(\mathbf{r},\sigma,\mathbf{r}',\sigma',\omega)\mathcal{Y}_{ljm}(\hat{r}',\sigma'). \quad (8)$$

Đồng thời, ta có thể phân tích $\Sigma(\mathbf{r},\sigma,\mathbf{r}',\sigma',\omega)$ trên cơ sở đơn hạt:

$$\Sigma(\mathbf{r},\sigma,\mathbf{r}',\sigma',\omega) = \sum_{\alpha,\beta} \varphi_{\alpha}(\mathbf{r},\sigma,q)\langle\alpha|\Sigma(\omega)|\beta\rangle\varphi^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{r}',\sigma',q), \quad (9)$$

trong đó α, β chạy trên toàn bộ tập các trạng thái đơn hạt. Thay thế phương trình (9) vào phương trình (8), ta thu được:

$$\Sigma_{lj}(r,r',\omega) = \sum_{\epsilon_{\alpha},\epsilon_{\beta},m} \frac{u^{(\epsilon_{\alpha})}_{lj}(r)}{r}\langle\epsilon_{\alpha},ljm|\Sigma(\omega)\big|\epsilon_{\beta},ljm\rangle\frac{u^{(\epsilon_{\beta})}_{lj}(r')}{r'}. \quad (10)$$

Ta có thể biểu diễn tổng này theo m bằng cách sử dụng định lý Wigner-Eckardt:

$$\Sigma_{lj}(r,r',\omega) = \hat{\jmath}\sum_{\epsilon_{\alpha},\epsilon_{\beta}} \frac{u^{(\epsilon_{\alpha})}_{lj}(r)}{r}\big\langle\epsilon_{\alpha},lj\|\Sigma(\omega)\|\epsilon_{\beta},lj\big\rangle\frac{u^{(\epsilon_{\beta})}_{lj}(r')}{r'} = \hat{\jmath}\sum_{\epsilon_{\alpha},\epsilon_{\beta}} \frac{u^{(\epsilon_{\alpha})}_{lj}(r)}{r}\Sigma^{(lj)}_{\alpha\beta}(\omega)\frac{u^{(\epsilon_{\beta})}_{lj}(r')}{r'}, \quad (11)$$

trong đó $\hat{\jmath}_{\alpha} = (2j_{\alpha}+1)^{1/2}$. Các phần tử ma trận rút gọn $\Sigma^{(lj)}_{\alpha\beta}(\omega)$ được định nghĩa bởi:

$$\Sigma^{(lj)}_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \big\langle\epsilon_{\alpha},lj\|\Sigma(\omega)\|\epsilon_{\beta},lj\big\rangle$$
$$= \hat{\jmath}_{\alpha}^{-1}\hat{\jmath}_{\beta}^{-1}\left[\sum_{nL,A>F} \frac{\langle\alpha\|V\|A,nL\rangle\langle A,nL\|V\|\beta\rangle}{\omega-\epsilon_A-\omega_{nL}+i\eta} + \sum_{nL,a<F} \frac{\langle\alpha\|V\|a,nL\rangle\langle a,nL\|V\|\beta\rangle}{\omega-\epsilon_a+\omega_{nL}-i\eta}\right], \quad (12)$$

trong đó η là tham số tương ứng với trung bình hóa năng lượng, ω_{nL} là năng lượng phonon với đa cực L, các phần tử ma trận rút gọn $\langle i\|V\|j,nL\rangle$ liên quan đến đỉnh kết cặp hạt - dao động (particle-vibration copling - PVC). Các phần tử này được tính bởi:

$$\langle\gamma\|V\|\delta,nL\rangle = \hat{L}\sum_{Aa} X^{nL}_{Aa}V_L(\gamma a\delta A) + (-)^{L+j_a-j_A}Y^{nL}_{Aa}V_L(\gamma A\delta a), \quad (13)$$

và

$$\langle\gamma\|V\|\delta,nL\rangle = (-)^{L+j_{\gamma}-j_{\delta}}\langle\delta,nL\|V\|\gamma\rangle, \quad (14)$$

trong đó V_L là phần tử ma trận ghép cặp $\mathrm{p}-\mathrm{h}$, X và Y là các vector riêng của ma trận trong phép gần đúng pha ngẫu nhiên (random phase approximation - RPA).

Trong nghiên cứu cấu trúc hạt nhân, bên cạnh các trạng thái cơ bản của hạt nhân được mô tả bởi trường trung bình tự hợp Hartree-Fock (HF), các trạng thái kích thích như kích thích tập thể, cộng hưởng khổng lồ... chỉ có thể được giải thích nếu cho rằng sự chồng chập các trạng thái kích thích đơn hạt dẫn đến sự kích thích tập thể ở các hạt nhân nếu dao động là nhỏ và trạng thái cộng hưởng khổng lồ nếu dao động là lớn. Các trạng thái này đóng vai trò quan trọng trong phần ảo của thế quang học. Phép gần đúng pha ngẫu nhiên (RPA) có thể tính đến mối tương quan các trạng thái cơ bản cũng như trạng thái kích thích. Phương pháp này là một trong những cách tiếp cận được sử dụng rộng rãi nhất để mô tả chuyển động tập thể biên độ nhỏ của hạt nhân ở năng lượng thấp.

Phép gần đúng pha ngẫu nhiên được xây dựng từ Hamiltonian của hệ hai hạt có dạng (Ring, 2004):

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_{\mathrm{res}} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}c^{\dagger}_{\alpha}c_{\alpha} - \frac{1}{2}\sum_{\substack{\alpha,\beta \\ \varepsilon_{\alpha,\beta}\leq\varepsilon_F}} \bar{v}_{\alpha\beta\alpha\beta} + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}{:}\, c^{\dagger}_{\alpha}c^{\dagger}_{\beta}c_{\delta}c_{\gamma}{:}, \quad (15)$$

tương ứng với phương trình Schrödinger:

$$\mathcal{H}|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle, \tag{16}$$

trong đó $|\nu\rangle$ là một tập hợp các trạng thái riêng chính xác, và E_ν là các giá trị riêng tương ứng. Ta có thể viết phương trình Schrödinger dưới dạng phương trình chuyển động:

$$\left[H, \Gamma_\nu^\dagger\right]|0\rangle = (E_\nu - E_0)\Gamma_\nu^\dagger|0\rangle, \tag{17}$$

và nhân hai vế với $\langle 0|\delta\Gamma$:

$$\langle 0|\left[\delta\Gamma, \left[H, \Gamma_\nu^\dagger\right]\right]|0\rangle = (E_\nu - E_0)\langle 0|\left[\delta\Gamma, \Gamma_\nu^\dagger\right]|0\rangle. \tag{18}$$

Ở đây, $\Gamma_\nu^\dagger$ được định nghĩa bởi:

$$\Gamma_\nu^\dagger = \sum_{ph} X_{ph}^\nu c_p^\dagger c_h - Y_{ph}^\nu c_h^\dagger c_p, \tag{19}$$

dẫn đến định nghĩa trạng thái cơ bản trong RPA:

$$\Gamma_\nu|\mathrm{RPA}\rangle = 0. \tag{20}$$

Từ phương trình (18), ta thu được hai hệ phương trình:

$$\langle \mathrm{RPA}|\left[c_h^\dagger c_p, \left[H, \Gamma_\nu^\dagger\right]\right]|\mathrm{RPA}\rangle = \hbar\omega_\nu\langle \mathrm{RPA}|\left[c_h^\dagger c_p, \Gamma_\nu^\dagger\right]|\mathrm{RPA}\rangle; \tag{21}$$

$$\langle \mathrm{RPA}|\left[c_p^\dagger c_h, \left[H, \Gamma_\nu^\dagger\right]\right]|\mathrm{RPA}\rangle = \hbar\omega_\nu\langle \mathrm{RPA}|\left[c_p^\dagger c_h, \Gamma_\nu^\dagger\right]|\mathrm{RPA}\rangle; \tag{22}$$

với $\hbar\omega_\nu$ là năng lượng kích thích $\hbar\omega_\nu = E_\nu - E_0$ của trạng thái $|\nu\rangle$. Việc giải các phương trình này rất phức tạp do trạng thái $|\mathrm{RPA}\rangle$ chưa được biết. Do đó, phép gần đúng giả boson (quasi-boson approximation - QBA) đã được sử dụng để đơn giản hóa các phương trình. Trong phép gần đúng này, các toán tử cặp lỗ trống hoạt động như boson lý tưởng, dẫn đến hệ thức giao hoán giả boson:

$$\left[c_h^\dagger c_p, c_{p'}^\dagger c_{h'}\right] \simeq \delta_{pp'}\delta_{hh'}. \tag{23}$$

Vì vậy, ta có thể tính tất cả các giá trị khả dĩ trong phép gần đúng Hartree-Fock (HF) do trạng thái cơ bản tương quan $|\mathrm{RPA}\rangle$ không khác nhiều so với trạng thái cơ bản HF. Lưu ý rằng phép gần đúng này hoạt động tốt khi các trạng thái RPA được tạo thành từ nhiều kích thích lỗ-trống kết hợp như các cộng hưởng khổng lồ hoặc trạng thái năng lượng thấp. Trong QBA, bình phương module của các biên độ $X_{ph}^\nu\left(Y_{ph}^\nu\right)$ cho xác suất tìm thấy trạng thái $c_p^\dagger c_h|0\rangle\left(c_h^\dagger c_p|0\rangle\right)$ trong trạng thái kích thích $|\nu\rangle$, tương ứng:

$$\langle 0|c_h^\dagger c_p|\nu\rangle \simeq \langle \mathrm{HF}|\left[c_h^\dagger c_p, \Gamma_\nu^\dagger\right]|\mathrm{HF}\rangle = X_{ph}^\nu; \tag{24}$$

$$\langle 0|c_p^\dagger c_h|\nu\rangle \simeq \langle \mathrm{HF}|\left[c_p^\dagger c_h, \Gamma_\nu^\dagger\right]|\mathrm{HF}\rangle = Y_{ph}^\nu. \tag{25}$$

Các phương trình (24) và (25) có thể được biểu diễn dưới dạng ma trận, gọi là ma trận thế RPA:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \hbar\omega\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}, \tag{26}$$

trong đó hai biên độ *X* và *Y* là các vectơ riêng, và các ma trận đối xứng *A* và *B* được định nghĩa bởi:

$$A_{php'h'} = \left\langle \mathrm{HF}\left|\left[c_h^\dagger c_p, \left[H, c_{p'}^\dagger c_{h'}\right]\right]\right|\mathrm{HF}\right\rangle = \left(\epsilon_p - \epsilon_h\right)\delta_{pp'}\delta_{hh'} + \tilde{v}_{ph'p'h}; \tag{27}$$

$$B_{php'h'} = -\left\langle \mathrm{HF}\left|\left[c_h^\dagger c_p, \left[H, c_{h'}^\dagger c_{p'}\right]\right]\right|\mathrm{HF}\right\rangle = \tilde{v}_{pp'h'h}. \tag{28}$$

Để hiệu chỉnh nguyên lý Pauli bị vi phạm trong RPA, thế năng bậc hai được xây dựng từ các kích thích particle-hole không kết hợp đã được đưa vào. Các tính toán của thế năng $\Sigma^{(2)}$ tương tự như của Σ. Thế bậc hai lúc này có dạng như biểu thức (12):

$$\frac{1}{2}\Sigma^{(2)}(\omega) = \frac{1}{2}j_\alpha^{-1}j_\beta^{-1} \times$$

$$\times\left[\sum_{cC,A>F}\frac{\hat{L}^2(-)^{L+j_\beta-j_A}V_L(\alpha cAC)V_L(\beta cAC)}{\omega - \epsilon_A - (\epsilon_C - \epsilon_c) + i\eta} + \sum_{dD,a<F}\frac{\hat{L}^2(-)^{L+j_\beta-j_a}V_L(\alpha daD)V_L(\beta daD)}{\omega - \epsilon_a + (\epsilon_D - \epsilon_d) - i\eta}\right], \tag{29}$$

trong đó, hệ số $\frac{1}{2}$ nhằm tránh đếm trùng lặp các trạng thái trung gian tương đương. Trong phương trình (29),

$j_\alpha^{-1} j_\beta^{-1}$ là các hệ số với $\hat{j}_\alpha = (2j_\alpha + 1)^{1/2}, \hat{j}_\beta = \left(2j_\beta + 1\right)^{1/2}$.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Trong phần này, chúng tôi trình bày các kết quả nghiên cứu của thế bậc hai đối với 4 loại hạt nhân khác nhau: ^{16}O, ^{40}Ca, ^{48}Ca và ^{208} Pb.

Bước đầu tiên, chúng tôi thực hiện phép tính Hartree-Fock để thu được các trạng thái hạt đơn hạt và số hạng bậc thấp nhất của năng lượng tự hợp (thế Hartree-Fock HF). Đối với tất cả các hạt nhân được xem xét, các phương trình HF xuyên tâm được giải trong một hộp có bán kính 15 fm với lưới tọa độ xuyên tâm 0,1fm với tính chất đối xứng cầu của hạt nhân được áp dụng. Tương tác nucleon - nucleon hiện tượng luận hiệu dụng SLy5 được chọn vì tương tác này có thể mô tả tốt các tính chất của các hạt nhân kích thích (Chabanat, 1998). Để mô tả các trạng thái đơn hạt, tính liên tục đã được rời rạc hóa bằng cách áp dụng các điều kiện biên thích hợp. Để xây dựng ma trận cho các phép tính RPA, tất cả các trạng thái lỗ được tính đến để xây dựng các cấu hình hạt-lỗ trong khi chúng tôi giới hạn tám trạng thái không chiếm giữ thấp nhất cho các trạng thái đơn hạt.

Sử dụng đầu ra của mã HF, các trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích sau đó được mô tả trong một phép tính RPA tự hợp (Colò, 2013). Tương tác hiệu dụng SLy5 được sử dụng một cách tự hợp cho toàn bộ quá trình. Lưu ý rằng, tất cả các thành phần của tương tác đều được tính đến ngoại trừ thành phần tenxơ trong cả phép tính HF và RPA. Để chuẩn bị đầu vào cho các phép tính liên kết hạt - dao động (particle-vibration copling - PVC) tiếp theo, chúng ta phải đặt hai giới hạn để tránh sự phân kỳ do sử dụng các lực với tầm tương tác bằng không (zero-range) trong các phương pháp tiếp cận ngoài trường trung bình (đối với tính toán của chúng tôi là phương pháp PVC). Đầu tiên, chỉ có phonon chẵn lẻ tự nhiên với bậc đa cực L từ 0 đến 5 có năng lượng nhỏ hơn 50 MeV mới được tính đến. Thứ hai, không gian mô hình cho các trạng thái không chiếm chỗ λ bị giới hạn ở $\epsilon\lambda < 50\text{MeV}$. Lưu ý rằng, các điểm giới hạn phải được đặt ra ngay cả với tương tác hiệu dụng phạm vi hữu hạn (tương tác Gogny) vì nó có hàm δ phụ thuộc vào mật độ. Để đạt đủ điều kiện cho mỗi phản ứng đa cực, chúng ta phải kiểm tra cẩn thận các quy tắc tổng trọng số năng lượng (Energy-Weighted Sum Rule - EWSR). Đối với các trạng thái gần như kích thích, EWSR đạt giá trị hơn 90%. Đối với các trạng thái tập thể mạnh nhất như 3^- và 4^+, EWSR đạt 99,50%.

Như chúng ta đã biết, QBA đã được sử dụng để đơn giản hóa các phương trình RPA. Phép tính gần đúng này hoạt động tốt đối với các trạng thái tập thể được tạo thành bởi các cấu hình lỗ-hạt đối với các hạt nhân trung bình và nặng. Để loại bỏ các trạng thái không tập thể, chỉ các trạng thái có tổng cường độ isoscalar hoặc isovector lớn hơn 5% mới được tính đến. Thế quang học bậc hai được thêm vào để củng cố cách xử lý các trạng thái giả do vi phạm nguyên lý Pauli của phương pháp RPA. Ngoài ra, chúng tôi loại bỏ bằng tay trạng thái kích thích lưỡng cực đầu tiên, đây là trạng thái liên quan đến chuyển động của khối tâm.

Phần ảo của thế quang học đặc trưng cho phần hấp thụ. Để nghiên cứu độ lớn, hình dạng và tính phi định xứ của phần ảo một cách thuận tiện, ta định nghĩa thế hấp thụ có dạng:

$$W(\mathrm{R}, \mathrm{s}) = \mathrm{Im}\Delta\Sigma(\mathrm{r}, \mathrm{r}', \omega), \tag{30}$$

trong đó: $\mathrm{R} = \frac{1}{2}(\mathrm{r} + \mathrm{r}')$ tương ứng với bán kính và hình dạng, và $\mathrm{s} = \mathrm{r} - \mathrm{r}'$ cho thấy tính phi định xứ của nó. N. Vinh Mau và A. Bouyssy đã chứng minh rằng $W(\mathrm{R}, \mathrm{s})$ không phụ thuộc vào góc θ giữa R và s (Vinh Mau, 1976). Do đó, một cách gần đúng, ta có thể viết lại:

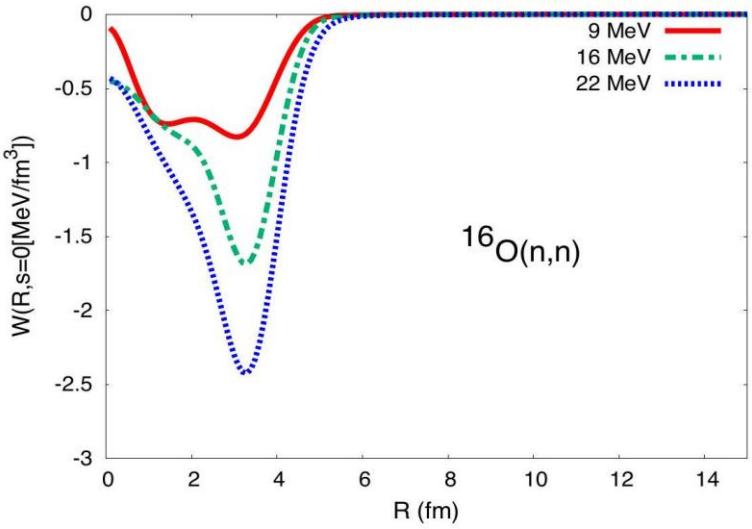
$$W(\mathrm{R}, \mathrm{s}) = W(R, s). \tag{31}$$

Sử dụng khai triển sóng một phần cho $\Delta\Sigma_{lj}(r, r', \omega)$, ta thu được:

$$W(R, s) = \sum_{lj} \frac{2j+1}{4\pi} \mathrm{Im}\Delta\Sigma_{lj}(r, r', \omega), \tag{32}$$

trong đó: $r = R + \frac{s}{2}$ và $r' = R - 2s$.

Để nghiên cứu ảnh hưởng của thế bậc hai đối với thế hấp thụ trong các hạt nhân nhẹ, chúng tôi chọn ^{16}O làm hệ mẫu. Kết quả từ hình 1 cho thấy: Thế hấp thụ $W(R, s)$ của ^{16}O dưới tác dụng của neutron tới ở các mức năng lượng 9 MeV (thấp), 16 MeV (trung bình) và 22 MeV (cao) đều chịu ảnh hưởng rõ rệt từ thế bậc hai. Hiệu ứng hấp thụ thể hiện mạnh nhất tại bề mặt hạt nhân ($R \approx 3 - 4\text{fm}$) với cường độ tương đồng ở cả ba mức năng lượng. Trong vùng tâm hạt nhân ($R < 2\text{fm}$), cường độ hấp thụ giảm dần nhưng vẫn duy trì đóng góp đáng kể từ thế bậc hai. Như vậy, thế bậc hai đóng vai trò quan trọng trong thế quang học vi mô của ^{16}O ở các dải năng lượng neutron được xét đến.

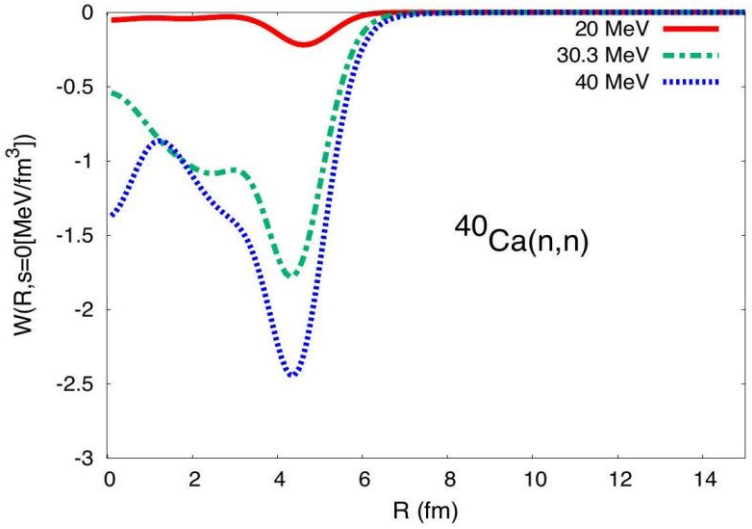


Hình 1. Thế hấp thụ bậc hai $W(R, s = 0)$ đối với tán xạ đàn hồi neutron của ^{16}O với các năng lượng neutron tới là 9 MeV, 16 MeV và 22 MeV.

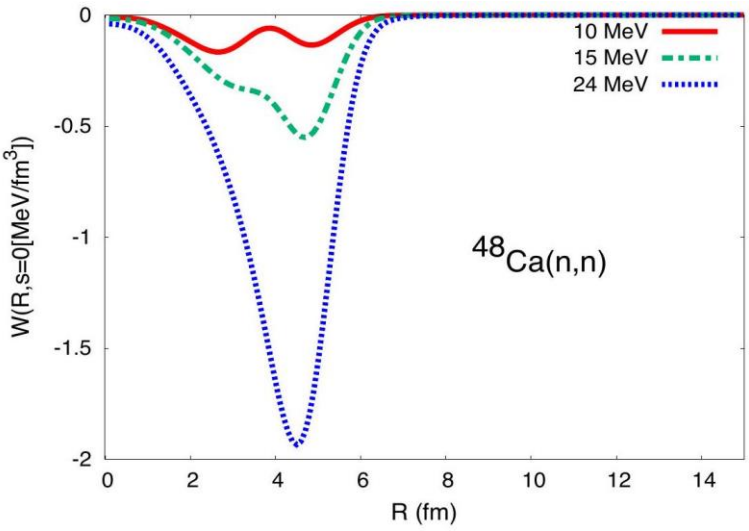
Hình 2 cho ta kết quả tính số đánh giá vai trò của thế bậc hai trong phần ảo của thế quang học đối với hạt nhân ^{40}Ca. Kết quả nghiên cứu cho thấy, ở năng lượng neutron tới dưới 20 MeV, thế bậc hai hầu như không ảnh hưởng đến thế hấp thụ. Khi năng lượng đạt 20 MeV, hiệu ứng hấp thụ xuất hiện yếu ở vùng tâm ($R < 2$fm) và rõ rệt hơn tại bề mặt ($R > 3$fm). Ở 30,3MeV, cường độ hấp thụ tăng mạnh, tương tự như trường hợp ^{16}O. Từ những phân tích trên, ta thấy thế bậc hai chỉ thể hiện vai trò rõ rệt khi năng lượng neutron vượt ngưỡng 20 MeV, đặc biệt ở vùng bề mặt.

Tương tự, vai trò của thế bậc hai đối với ^{48}Ca được thể hiện ở hình 3. Kết quả tính toán cho thấy: Ngay ở năng lượng neutron tới thấp (10 MeV), thế bậc hai đã có đóng góp đáng kể đến thế hấp thụ. Hiệu ứng mạnh nhất tại 24 MeV, với cường độ hấp thụ tăng rõ rệt ở cả vùng tâm và bề mặt. Từ đó cho thấy rằng, hạt nhân ^{48}Ca nhạy cảm với thế bậc hai ngay cả ở năng lượng thấp.

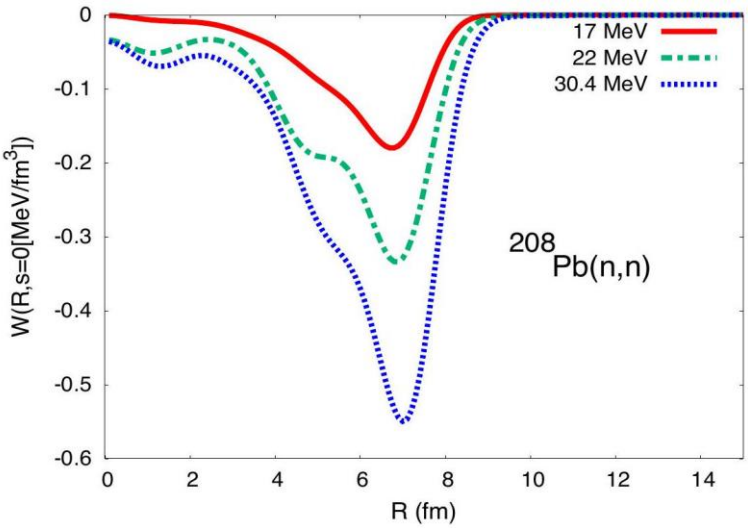
Cuối cùng, hình 4 cho ta kết quả tính số đối với ^{208} Pb($Z = 82, N = 126$). Kết quả nghiên cứu chỉ ra: Ở năng lượng neutron dưới 17 MeV, thế bậc hai không ảnh hưởng đáng kể đến thế hấp thụ. Trong dải năng lượng $17 - 30{,}4$MeV, hiệu ứng hấp thụ xuất hiện nhưng có cường độ yếu hơn so với các hạt nhân nhẹ do tính ổn định cao của cấu trúc. Như vậy, thế bậc hai chỉ thể hiện vai trò rõ rệt khi năng lượng neutron đủ lớn (> 17 MeV).



Hình 2. Thế hấp thụ bậc hai $W(R, s = 0)$ đối với tán xạ đàn hồi neutron của ^{40}Ca với các năng lượng neutron tới là 20 MeV, 30,3 MeV và 40 MeV.



Hình 3. Thế hấp thụ bậc hai $W(R, s = 0)$ đối với tán xạ đàn hồi neutron của ^{48}Ca với các năng lượng neutron tới là 10 MeV, 15 MeV và 24 MeV.



Hình 4. Thế hấp thụ bậc hai $W(R, s = 0)$ đối với tán xạ đàn hồi neutron của ^{208}Pb với các năng lượng neutron tới là 17 MeV, 22 MeV và 30,4 MeV.

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã khảo sát thế hấp thụ bậc hai cho các hạt nhân ^{16}O, ^{40}Ca, ^{48}Ca, ^{208}Pb. Tính toán dựa trên phương pháp trường trung bình tự hợp kết hợp với mô hình thế quang học vi mô. Kết quả tính số cho thấy sự phụ thuộc của thế hấp thụ bậc hai vào năng lượng tới của neutron và cấu trúc hạt nhân bia. Cụ thể, thế hấp thụ bậc hai tăng theo năng lượng neutron tới, đóng góp của thế bậc hai chủ yếu tại bề mặt của hạt nhân. Kết quả tính toán thể hiện rằng khi neutron có năng lượng tới càng lớn sẽ kích thích nhiều tương tác không kết hợp 1 hạt - 1 lỗ, là yếu tố làm tăng độ lớn thế bậc hai (do tăng cường vi phạm xấp xỉ QBA). Bên cạnh đó, thế hấp thụ bậc hai phụ thuộc vào cấu trúc hạt nhân bia. Nguyên nhân là do phương pháp trường trung bình tự hợp xuất phát từ vật lý chất rắn. Do đó, sự chính xác của mô hình phụ thuộc vào số hạt của hệ khảo sát. Chính vì thế, với các hạt nhân với cấu trúc khác nhau (khác nhau về số A, Z), kết quả tính số của thế hấp thụ bậc hai tương ứng cũng khác nhau. Qua đó thể hiện rằng, phương pháp trường trung bình tự hợp cho kết quả chính xác hơn đối với hạt nhân nặng (^{208}Pb). Kết quả cũng cho thấy thế hấp thụ bậc hai tập trung chủ yếu ở bề mặt hạt nhân khi năng lượng hạt tới thấp và lan tỏa dần về tâm hạt nhân khi năng lượng hạt tới cao. Điều này thể hiện rằng hạt tới với năng lượng cao có tầm ảnh hưởng rộng hơn và có khả năng tương tác với các nucleon bên trong hạt nhân.

Thế bậc hai là một bổ sung cần thiết cho hiệu ứng động, giúp mô tả chính xác hơn sự kích thích dao động tập thể bị bỏ qua trong thế bậc nhất. Nhờ đó, thế bậc hai không chỉ cải thiện độ chính xác của mô hình mà còn giải thích được sự khác biệt trong tiết diện tán xạ neutron giữa các hạt nhân nhẹ và nặng. Kết quả này cũng cho phép dự đoán các đặc trưng phổ kích thích, đặc biệt ở vùng năng lượng trung bình và cao.

Lời cám ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Đại học Huế thông qua đề tài khoa học và công nghệ, mã số: DHH2025-04-231.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Barbieri, C., & Jennings, B. (2005). Nucleon–nucleus optical potential in the particle-hole approach. *Physical Review C, 72*(1), 014613.

Barbieri, C., Van Neck, D., & Dickhoff, W. (2007). Quasiparticles in neon using the Faddeev random-phase approximation. *Physical Review A, 76*(5), 052503.

Bauge, E., Delaroche, J., & Girod, M. (1998). Semimicroscopic nucleon–nucleus spherical optical model for nuclei with A ≳ 40 at energies up to 200 MeV. *Physical Review C, 58*(2), 1118–1145.

Bauge, E., Delaroche, J., & Girod, M. (2001). Lane-consistent, semimicroscopic nucleon–nucleus optical model. *Physical Review C, 63*(2), 024607.

Becchetti, F. D., & Greenlees, G. W. (1969). Nucleon–nucleus optical-model parameters, A > 40, E < 50 MeV. *Physical Review, 182*, 1190–1209.

Bernard, V., & Van Giai, N. (1979). Microscopic calculation of the optical potential in nuclear matter. *Nuclear Physics A, 327*(2), 397–418.

Bethe, H. A. (1935). Theory of disintegration of nuclei by neutrons. *Physical Review, 47*(10), 747–759.

Blanchon, G., Dupuis, M., Arellano, H., & Vinh Mau, N. (2015). Microscopic positive-energy potential based on the Gogny interaction. *Physical Review C, 91*(1), 014612.

Blanchon, G., Dupuis, M., & Arellano, H. (2015). Prospective study on microscopic potential with Gogny interaction. *The European Physical Journal A, 51*, 1–13.

Blanchon, G., Dupuis, M., Bernard, R., & Arellano, H. (2017). Asymmetry dependence of Gogny-based optical potential. *The European Physical Journal A, 53*, 1–12.

Brieva, F., & Rook, J. (1977). Nucleon–nucleus optical model potential: I. Nuclear matter approach. *Nuclear Physics A, 291*(2), 299–316.

Brieva, F., & Rook, J. (1978). Microscopic description of nucleon–nucleus elastic scattering. *Nuclear Physics A, 307*(3), 493–514.

Chabanat, E., Bonche, P., Haensel, P., Meyer, J., & Schaeffer, R. (1998). A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities. Part II. Nuclei far from stabilities. *Nuclear Physics A, 635*(1–2), 231–256.

Colò, G., Cao, L., Van Giai, N., & Capelli, L. (2013). Self-consistent RPA calculations with finite-range interactions. *Computer Physics Communications, 184*(1), 142–161.

Deb, P., Amos, K., Karataglidis, S., Chadwick, M., & Madland, D. (2001). Predicting total reaction cross sections for nucleon–nucleus scattering. *Physical Review Letters, 86*(15), 3248–3251.

Dickhoff, W., & Barbieri, C. (2004). *Progress in Particle and Nuclear Physics, 52*(2), 377–496.

Dupuis, M., Karataglidis, S., Bauge, E., Delaroche, J., & Gogny, D. (2006). Correlations in microscopic optical model for nucleon elastic scattering off doubly closed-shell nuclei. *Physical Review C, 73*(1), 014605.

Epelbaum, E., Krebs, H., & Meißner, U. (2015). Improved chiral nucleon–nucleon potential up to next-to-next-to-next-to-leading order. *The European Physical Journal A, 51*, 1–29.

Feshbach, H. (1958). *Annals of Physics, 5*(4), 357–390.

Hammer, H.-W., König, S., & Van Kolck, U. (2020). Nuclear effective field theory: Status and perspectives. *Reviews of Modern Physics, 92*(2), 025004.

Hebborn, C., et al. (2023). Optical potentials for the rare-isotope beam era. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 50*(6), 060501.

Hoang Tung, N., Quang Tam, D., Pham, V. N., Lam Truong, C., & Nhan Hao, T. V. (2020). Effects of velocity-dependent and spin–orbit terms of the Skyrme interaction on neutron elastic scattering observables. *Physical Review C, 102*(3), 034608.

Holt, J., Kaiser, N., & Miller, G. (2016). Microscopic optical potential for exotic isotopes from chiral effective field theory. *Physical Review C, 93*(6), 064603.

Jeukenne, J.-P., Lejeune, A., & Mahaux, C. (1977). Optical-model potential in finite nuclei from Reid's hard core interaction. *Physical Review C, 16*(1), 80–96.

Kobos, A., Brown, B., Lindsay, R., & Satchler, G. (1984). Folding-model analysis of elastic and inelastic α-particle scattering using a density-dependent force. *Nuclear Physics A, 425*(2), 205–232.

Koning, A., & Delaroche, J. (2003). Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV. *Nuclear Physics A, 713*(3–4), 231–310.

Mizuyama, K., & Ogata, K. (2012). Self-consistent microscopic description of neutron scattering by ^{16}O based on the continuum particle-vibration coupling method. *Physical Review C, 86*(4), 041603.

Mizuyama, K., & Ogata, K. (2014). Low-lying excited states of ^{24}O investigated by a self-consistent microscopic description of proton inelastic scattering. *Physical Review C, 89*(3), 034620.

Navrátil, P., Quaglioni, S., Hupin, G., Romero-Redondo, C., & Calci, A. (2016). Unified ab initio approaches to nuclear structure and reactions. *Physica Scripta, 91*(5), 053002.

Nhan Hao, T. V., et al. (2018). Microscopic optical potential obtained from energy density-functional approach for neutron–nucleus elastic scattering. *International Journal of Modern Physics E, 27*(6), 1850052.

Nhan Hao, T. V., Loc, B. M., & Phuc, N. H. (2015). Low-energy nucleon–nucleus scattering within the energy density functional approach. *Physical Review C, 92*(1), 014605.

Ring, P., & Schuck, P. (2004). *The nuclear many-body problem*. Springer.

Rotureau, J., Danielewicz, P., Hagen, G., Nunes, F., & Papenbrock, T. (2017). Optical potential from first principles. *Physical Review C, 95*(2), 024315.

Somà, V., Navrátil, P., Raimondi, F., Barbieri, C., & Duguet, T. (2020). Novel chiral Hamiltonian and observables in light and medium-mass nuclei. *Physical Review C, 101*(1), 014318.

Vinh Mau, N., & Bouyssy, A. (1976). Optical potential for low-energy neutrons: Imaginary potential for neutron–^{40}Ca elastic scattering. *Nuclear Physics A, 257*(2), 189–220.

Whitehead, T., Lim, Y., & Holt, J. (2019). Proton elastic scattering on calcium isotopes from chiral nuclear optical potentials. *Physical Review C, 100*(1), 014601.

The role of second-order potential in the microscopic optical potential model

Do Quang Tam[1,2,3], Nguyen Cao Bao Duy[1,2], Dang Phuoc Duc[1,2], Tran Viet Nhan Hao[1,2]

[1] *Faculty of Physics, University of Education, Hue University*

[2]*Center for Theoretical and Computational Physics, University of Education, Hue University*

[3]*Faculty of Basic Sciences, University of Medicine and Pharmacy, Hue University*

ARTICLE INFO

Article history:
Received 19 May 2025
Received in revised form 28 July 2025
Accepted 06 September 2025
Published 20 October 2025

Keywords:
Microscopic optical potential
Second-order potential
Self-consistent mean-field

Corresponding author:
T. V. Nhan Hao
E-mail address:
tvnhao@hueuni.edu.vn

ABSTRACT

In this study, we evaluate the role of second-order potential in the microscopic optical potential model for elastic neutron scattering off double-magic targets. We employed the self-consistent mean-field method, applied to the microscopic optical potential model, to evaluate the second-order absorption potential for light, medium, and heavy nuclei, such as ^{16}O, ^{40}Ca, ^{48}Ca, and ^{208}Pb. The computational results show that for the light nucleus ^{16}O, the second-order potential exists in the energy range of 9–22 MeV. For the medium nucleus ^{40}Ca, the second-order potential appears when the incident neutron energy exceeds 20 MeV. In the case of ^{48}Ca, the second-order potential exists even at low energies. For the heavy nucleus ^{208}Pb, the second-order potential has a minor effect. From the obtained results, we conclude that the magnitude of the second-order potential increases with the incident neutron energy and depends on the target nucleus.