

На правах рукописи

Родкин Дмитрий Михайлович

**Теоретическое описание кластеризованных
состояний легких ядер в рамках современных
микроскопических моделей**

Специальность: 01.04.16 – Физика атомного ядра и элементарных частиц

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2019

Работа выполнена в лаборатории радиационной и ядерной физики Центра Фундаментальных и Прикладных Исследований (ЦФПИ) Всероссийского Научно-Исследовательского Института Автоматики им. Н. Л. Духова

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор

Чувильский Юрий Михайлович
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, доцент

Узиков Юрий Николаевич
Объединенный институт ядерных исследований

доктор физико-математических наук

Соболевский Николай Михайлович
Институт ядерных исследований РАН

Ведущая организация:

Петербургский Институт Ядерной Физики НИЦ "Курчатовский институт"

Защита состоится _____ 2019 г. в 15⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 720.001.01 при Объединенном Институте Ядерных Исследований (Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова) по адресу: 141980 г. Дубна, Московская область, ул. Жолио-Кюри, д. 6

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан _____ 2019 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук

Быстрицкий Юрий Михайлович

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Исследование кластеризованных состояний является одним из важнейших направлений ядерной физики. Кластеризация представляет собой фрагментацию ядра на две или более многонуклонные подструктуры. Другой аспект явления кластеризации связан с динамикой ядерных реакций, поскольку кластеры нуклонов формируют как входные, так и выходные реакционные каналы. На данный момент накоплен большой объем экспериментальной информации касающейся этой проблемы, а именно значения полных энергий связи основных и низших возбужденных кластеризованных состояний ядер, асимптотических нормировочных коэффициентов связанных состояний, ширин распадов резонансных состояний, астрофизических S -факторов многих ядер и дифференциальных сечений реакций слияния, передачи кластеров и т.п.

Микроскопическое, то есть включающее в себя нуклон-нуклонный потенциал и рассматривающее исходное ядро и двухфрагментный канал реакции как системы A и $A_1 + A_2$ нуклонов, описание этих явлений было представлено в Модели Резонирующих Групп (МРГ) [1]. Обобщение развитых на ее основе представлений было сделано в монографии [2]. Это обобщение МРГ заключается в построении общих, математически эквивалентных методов для одновременных расчетов ядерной структуры и ядерных реакций. В рамках развития МРГ была создана Алгебраическая Версия Модели Резонирующих Групп (АВ МРГ) [3,4], которая позволяет рассчитывать как связанные состояния, так и состояния непрерывного спектра в двухкластерном представлении с правильной асимптотикой двухтельного решения.

Помимо указанных моделей было разработано множество теоретических методик для изучения явления кластеризации, таких как Метод Генераторных Координат [5], Микроскопическая Кластерная Модель [6], THSR-подход [7], методы Антисимметризованной Молекулярной Динамики [8] и Фермионной Молекулярной Динамики [9]. В этих подходах кластерные свойства ядерных состояний и характеристики кластерных реакций получаются непосредственно из данных о нуклон-нуклонных взаимодействиях. Данные модели позволяют рассчитывать сильно кластеризованные состояния как легких, так и средних ядер, подобные основным и нижним возбужденным состояниям ядер ^{12}C , ^{16}O , ^{20}Ne и ^{40}Ca .

Также нельзя не упомянуть прочие эффективные методы описания структуры ядра, подобные методу Монте-Карло для функции Грина (Green Function's Monte Carlo) [10] и методу ядерных расчетов на решетке в рамках эффективной теории поля (Nuclear Lattice Effective Field Theory) [11], с помощью которых можно также проводить расчеты структуры легких ядер, в том числе и кластеризованных.

Эра суперкомпьютеров предоставляет новые вычислительные возможно-

сти для совершенствования подходов, используемых в теории структуры легких ядер и реакций с их участием. Такие (характеризуемые как *ab initio*) микроскопические подходы основаны на гамильтонианах, включающих универсальные (общие для широкого круга исследуемых объектов), реалистические NN-, NNN-потенциалы. Один из наиболее развитых подходов такого рода реализован в Модели Оболочек Без Инертного Кора (МОБИК – NCSM) [12, 13]. Данный метод сводится к решению A -нуклонного уравнения Шрёдингера на базисе, содержащим все возможные конфигурации A -нуклонных осцилляторных функций вплоть до уровня обрезания, определяемого максимальным суммарным числом осцилляторных квантов N_{tot}^{max} . Размерность базиса в этой модели достигает порядка 10^{8-10} и ограничивается вычислительными возможностями компьютера или вычислительного кластера. Расчет волновых функций (ВФ) основных и низших возбужденных состояний сводится к нахождению собственных функций и собственных значений матрицы Гамильтониана в базисе A -нуклонных осцилляторных функций. Так как данная матрица характеризуется большими размерами и высокой степенью разреженности, то нахождение собственных функций и собственных векторов обычно осуществляется с помощью алгоритма Ланцоша. Однако, размер базиса быстро растет с числом нуклонов и надежность расчетов NCSM модели в случае достаточно тяжелых ядер падает из-за необходимости введения все более сильного обрезания многочастичного базиса. В настоящее время возможности современных вычислительных кластеров позволяют рассчитывать с достаточной точностью в данной модели ядра с массой $A \leq 16$. К недостаткам данной модели относятся трудности описания дальней асимптотики волновых функций. Методы вычисления кластерных характеристик состояний ядер в модели NCSM до представленного в диссертации исследования не были проработаны. Эти характеристики являются необходимыми для расчета ядерных реакций и свойств резонансов.

Для расчетов в рамках NCSM и подобных ей моделях применяются реалистические NN- и NNN- потенциалы. Нуклон-нуклонные потенциалы могут основываться на традиционной теории мезонного обмена (CD Bonn [14]), обратной теории рассеяния (JISP16 [15]) и на принципах квантовой хромодинамики (Daejeon16 [16]). Результаты NCSM расчетов с современными реалистическими NN- и NNN-потенциалами хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Существуют *ab initio* модели, которые применяются не только для расчета полных энергий связи и спектров низко возбужденных состояний легких ядер, но и для описания свойств резонансов и ядерных реакций с их участием. Наиболее известные из них, предназначенные для описания систем с малым числом частиц – методы, использующие уравнения Фаддеева и Фаддеева-Якубовского. Для описания рассеяния в системах, содержащих четыре и большее число нуклонов, используется метод гиперсферических гармоник и метод интегральных преобразований Лоренца.

Для одновременного описания структуры легких ядер и реакций с их уча-

стием были созданы подходы, которые заключаются в комбинировании NCSM и модели резонирующих групп (NCSM/RGM [17], NCSMC [18]). Данные подходы подразумевает *ab initio* описание кластерных волновых функций, написанных в форме МРГ, и объединение в рамках общего базиса векторов МРГ и векторов NCSM. На настоящий момент результаты NCSMC расчетов ограничены кластерными каналами с массой системы $A \leq 11$ и массой кластера $A_c \leq 3$.

Помимо указанных методов NCSM/RGM, NCSMC был создан метод SS-HORSE (Single State Harmonic Oscillator Representation of Scattering Equations), предназначенный для расчета ширин низколежащих резонансов. Он основывается на низкоэнергетическом приближении S-матрицы. В рамках данного метода были рассчитаны характеристики резонансов ряда легких ядер [19, 20].

Все указанные выше методы описания структуры легких ядер и реакций с их участием имеют свои ограниченные области применимости, что означает необходимость дальнейших теоретических изысканий в этой области.

В настоящей работе предлагается модель ортогональных функций кластерных каналов МОФКК–ССОФМ (Cluster Channel Orthogonal Functions Model), как способ *ab initio* описания кластеризованных слабосвязанных и резонансных состояний. Основными формальными компонентами созданной модели являются базис трансляционно-инвариантных ВФ кластерного канала, которые содержат рассчитанные в NCSM волновые функции кластеров, и метод проектирования записанных в микроскопическом виде ВФ ядер на базис кластерных волновых функций. ВФ кластерных каналов получаются с применением технологии кластерных коэффициентов и представляют собой линейную комбинацию детерминантов Слейтера (ДС). Эта особенность позволяет комбинировать в едином базисе кластерные компоненты и решения NCSM. Полученный базис применяется для двух задач.

Во-первых, мы анализируем роль кластерных компонент в решениях А-нуклонного уравнения Шрёдингера с реалистическими NN–потенциалами и пытаемся ответить на вопрос, является ли базис кластерных ВФ достаточным для описания свойств ядер, рассматриваемых в более простых подходах как чисто кластерные системы. Для этого мы решаем А-нуклонное уравнение Шрёдингера как на базисе кластерных функций, используя все физически разумные каналы, так и на комбинированном базисе включающем в себя кроме кластерных членов еще и ряд решений NCSM (поляризационные члены).

Во-вторых, в рамках *ab initio* подходов, как учитывающих, так и не учитывающих в явном виде кластерные базисные компоненты, мы проводим вычисления спектроскопических факторов и кластерных формфакторов и применяем их для расчета асимптотических нормировочных коэффициентов (АНК) связанных состояний и парциальных ширин распада резонансных состояний.

Заранее отметим, что важно для понимания постановки проблемы, тот факт что как базис NCSM, так и кластерный базис А-нуклонной задачи, при учете всех возможных каналов, в том числе и не физических, являются формально полными. Кроме того, компоненты этих двух базисов, очевидно, не ор-

тогональны, поэтому мы проводим процедуру ортонормировки векторов кластерных и комбинированных базисов.

В разработанном подходе, как и в упоминаемом ранее NCSMC, ВФ фрагментов и поляризационных членов рассчитываются в рамках *ab initio* подхода. Используемый нами формализм отличается от NCSMC техникой преобразования кластерных ВФ в "оболочечный" вид. Для этого применяется математический аппарат кластерных коэффициентов (КК), развитый в ряде работ (см., например, [21]). В отличие от NCSMC модели этот подход предоставляет разнообразные возможности для работы с широким набором возбужденных и относительно тяжелых фрагментов. А от метода SS-HORSE разработанный метод отличается универсализмом: он позволяет рассчитывать не только асимптотические характеристики, но и кластерные характеристики, подобные спектроскопическим факторам и кластерным формфакторам. Следует заметить, что параллельно нашим работам технология кластерных коэффициентов использовалась для расчета полных энергий связи и спектроскопических факторов кластеризованных состояний в [22]. Как эта работа, так и работы, представленные в данной диссертации используют общий формализм КК, имеющий своим источником работу [23]. Однако, представленный в диссертации метод реализации данного формализма более универсален и дает широкие возможности включать в базис каналы с возбужденными кластерами и фрагментами, более тяжелыми, чем альфа-частица. В работе [22] использовался реалистический NN-потенциал не прошедший, однако, проверку на широком наборе ядер, не был поставлен вопрос о вкладе некластерных компонент, асимптотические характеристики исследуемых состояний также не рассчитывались.

В диссертации в рамках данного подхода были представлены расчеты спектров таких сильно кластеризованных систем как ${}^7\text{Li}$, ${}^8\text{Be}$, ${}^9\text{Be}$ и ${}^9\text{B}$, проведен анализ вкладов кластерных и некластерных компонент в полные энергии связи основных состояний, приведены результаты расчетов величин парциальных ширин распадов резонансов и асимптотических нормировочных коэффициентов связанных состояний основных и нижних возбужденных состояний ядер ${}^7\text{Li}$, ${}^5\text{He}$ и ${}^8\text{Be}$.

Цели и задачи диссертационной работы.

Целью настоящей работы является создание *ab initio* подходов к описанию кластерных явлений в легких ядрах.

Задачами являются:

- Разработка формализма и развитие вычислительных методов модели, предназначенной для исследования кластерных свойств легких ядер, для расчетов полных энергий связи и других наблюдаемых характеристик слабосвязанных и резонансных состояний.
- Использование разработанной модели для анализа вклада кластерных и некластерных компонент в полную энергию связи сильно кластеризованных состояний.

- Развитие методов, позволяющих использовать разработанную модель для расчета асимптотических характеристик слабосвязанных и резонансных состояний - асимптотических нормировочных коэффициентов и парциальных ширин распадов. Расчет этих характеристик для различных состояний легких ядер. Проверка качества данной модели с помощью сравнения этих характеристик с экспериментальными данными.

Научная новизна.

- Создана модель ортогональных функций кластерных каналов, предназначенная для исследования кластерных свойств легких ядер, для расчетов полных энергий связи и других наблюдаемых характеристик слабосвязанных и резонансных состояний в подходе, непосредственно учитывающем их кластеризацию. В отличие от созданных ранее подобных моделей использование технологии кластерных коэффициентов позволяет проводить *ab initio* расчеты кластеризованных состояний с кластерами, подобными альфа-частице и более тяжелыми, находящимися как в основных, так и в возбужденных состояниях.
- Разработанная модель была использована для оценки вклада кластерных и некластерных компонент в полную энергию связи сильно кластеризованных состояний. Было впервые продемонстрировано преимущество использования чисто кластерного базиса в точности описания "разностных" величин, подобных энергиям связи отдельных нуклонов, кулоновским разностям энергий изобарических мультиплетов и т.п., особенно для случая относительно тяжелых ядер.
- Впервые получено надежное количественное обоснование того факта, что даже сильно кластеризованные состояния не являются чисто кластерными конфигурациями. Таким образом, продемонстрирована ограниченная применимость широко применяющихся в современной теории кластерных явлений методов моделирования кластеризованных систем чисто кластерными волновыми функциями с использованием эффективных нуклон-нуклонных потенциалов.
- В рамках созданной модели была развита схема *ab initio* расчета асимптотических характеристик слабосвязанных и резонансных состояний - асимптотических нормировочных коэффициентов и парциальных ширин распадов. В отличие от созданных ранее подобных методов, данный подход позволяет одновременно рассчитывать полные энергии связи и асимптотические характеристики как связанных, так и резонансных состояний. Значения ширин распадов резонансов систем ${}^7\text{Li}$, ${}^5\text{He}$ и ${}^8\text{Be}$ находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. С учетом этого и сложностей экспериментального определения асимптотических нормировочных коэффициентов (АНК), а также невысокой точности других теоре-

тических подходов, впервые предложенный в данной работе метод расчета АНК для легких ядер представляется одной из наиболее обоснованных на данный момент методик.

Теоретическая и практическая значимость.

Диссертационная работа является законченным теоретическим исследованием. Задача *ab initio* описания слабосвязанных и резонансных состояний является актуальной задачей современной ядерной физики, что доказывает большое количество работ, посвященных данной тематике. Разработанная автором модель ортогональных функций кластерных каналов вносит значимый вклад в развитие *ab initio* методов описания кластерных явлений в ядрах. Разработанный автором на основе данной модели метод *ab initio* расчета спектроскопических факторов и асимптотических характеристик связанных и резонансных состояний даёт возможность проводить реалистические расчеты ширин резонансов, астрофизических *S*-факторов, дифференциальных сечений резонансных ядерных реакций, реакций передачи или выбивания кластера, а также реакций слияния.

Результаты, полученные с помощью разработанной в данной работе методики, могут найти применение в теоретических и экспериментальных исследованиях, которые проводятся в российских и зарубежных научных организациях, в частности во ВНИИА им. Н. Л. Духова (г. Москва), НИИЯФ МГУ им. М.В. Ломоносова (г. Москва), ОИЯИ (г. Дубна), ПИЯФ НИЦ КИ (г. Санкт-Петербург), ИЯИ РАН (г. Москва), ТОГУ (г. Хабаровск), НИЯУ МИФИ (г. Москва), СПбГУ (г. Санкт-Петербург), НИЦ "Курчатовский Институт" (г. Москва), Iowa State University (США), RIKEN (Япония), а также во многих других научных центрах России, ближнего и дальнего зарубежья.

Положения, выносимые на защиту:

- Создана модель ортогональных функций кластерных каналов, предназначенная для исследования кластерных свойств легких ядер в рамках *ab initio* подходов, а также для расчетов полных энергий связи и других наблюдаемых характеристик слабосвязанных и резонансных состояний легких ядер в подходе, непосредственно учитывающем их кластеризацию. Использование технологии кластерных коэффициентов позволило впервые провести *ab initio* расчеты кластеризованных состояний ядер с кластерами, подобными альфа-частице, находящимися как в основном, так и в возбужденных состояниях.
- В рамках разработанной модели был проведен комплекс вычислений для оценки вклада кластерных и некластерных компонент в полную энергию связи сильно кластеризованных состояний ядер ${}^7\text{Li}$, ${}^8\text{Be}$, ${}^9\text{Be}$ и ${}^9\text{B}$. Эти расчеты показали преимущество чисто кластерного базиса в точности описания "разностных" величин: энергий связи отдельных нуклонов, разности кулоновских энергий изобарических дублетов.

- Впервые получено количественное обоснование факта, что даже сильно кластеризованные состояния, такие как состояние 0^+ ядра ${}^8\text{Be}$, не являются чисто кластерными конфигурациями. Таким образом продемонстрировано, что существенный вклад в полную энергию связи сильно кластеризованных состояний вносят компоненты некластерной природы.
- Впервые в рамках единой схемы был проведен *ab initio* расчет асимптотических характеристик одновременно слабосвязанных и резонансных состояний - асимптотических нормировочных коэффициентов и парциальных ширин распада низколежащих состояний ядер ${}^7\text{Li}$, ${}^5\text{He}$ и ротационных состояний ядра ${}^8\text{Be}$. Значения ширин рассмотренных резонансов оказываются в хорошем согласии с экспериментальными данными. Результаты анализа этих величин показывают, что разработанный метод расчета АНК является одной из наиболее обоснованных на данный момент методик.

Степень достоверности и апробация результатов.

Разработанный метод для *ab initio* описания кластеризованных состояний основан на надёжных и апробированных подходах, применяемых в теории атомного ядра. Входным элементом метода являются реалистические, хорошо зарекомендовавшие себя в многочисленных предыдущих расчетах нуклон-нуклонные потенциалы. В проведенных расчетах были использованы потенциалы созданные на принципах квантовой хромодинамики и данных о нуклон-нуклонном рассеянии. Эти потенциалы хорошо воспроизводят энергии основных состояний и спектры низших возбужденных состояний для ядер с массой $A \leq 16$, а также их радиусы и ряд прочих наблюдаемых характеристик.

Предложенный в работе метод с хорошей точностью воспроизводит экспериментальные результаты парциальных ширин распадов резонансов легких ядер, а на комбинированном базисе воспроизводит полную энергию связи основных и спектр уровней возбужденных состояний легких ядер.

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях:

- XXII Международный Весенний Семинар по текущим проблемам и перспективам ядерной физики и ядерной структуре (Сант-Анджело де Искья, Италия, 15 – 19 мая 2017 года);
- 67-ая Международная конференция по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра "Ядро-2017" (Алматы, Казахстан, 12 – 15 сентября 2017 г.);
- Семинар по кластерной ядерной физики WNCSP2017 (Саппоро, Япония, 25-27 октября 2017 г.);
- Объединенный семинар по физике сильных взаимодействий KLFTP-BLTP (Шенжень, Китай, 26–30 ноября 2017 г.);

- XXVI Международный семинар по взаимодействию нейтронов с ядрами ISINN-26 (Сиань, Китай, 28 мая – 1 июня 2018 г.);
- 68-ая Международная конференция по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра "Ядро-2018" (Воронеж, 1 – 6 июля 2018 г.);
- Международная конференция "Nuclear Theory in the Supercomputing Era – 2018" (Тэджон, Корея, 29 октября – 2 ноября 2018 г.).

Публикации. Материалы диссертационной работы опубликованы в 5 печатных работах [A1–A5], из них 5 в ведущих научных рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, которые индексируются в международных базах Web of Science или Scopus.

Личный вклад автора. Содержание диссертационной работы и положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Автор диссертационной работы принимал непосредственное участие, как на этапах постановки задач, так и на этапах вывода формул, выполнения численных расчётов, а также обсуждения полученных результатов и подготовки публикаций. Все представленные в диссертации результаты вычислений получены лично автором.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объём диссертации составляет 117 страниц, из них 100 страниц текста, включая 19 рисунков. Библиография включает 91 наименование на 12 страницах.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность разработанного метода ортогональных функций кластерных каналов, предназначенного для ab initio описания кластеризованных состояний легких ядер и реакций с их участием, сформулированы цели и задачи проведенных теоретических исследований, аргументирована их научная новизна, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе описываются современные ab initio методы расчета структуры легких ядер, использующиеся при подобных расчетах реалистические нуклон-нуклонные потенциалы и приводится подробное описание формализма SCSM, осуществляется сравнение разработанной модели с созданными ранее методами.

Во втором и третьем параграфах этой главы подробно описывается модель NCSM, методы созданные на ее основе и современные реалистические NN-потенциалы.

В качестве нового шага в развитии модели NCSM для учета кластерных характеристик автором была разработана модель ортогональных функций кла-

стерных каналов (CCOFM), которая позволяет учитывать кластерные характеристики в рамках ab initio подхода. Формализм данной модели подробно описывается в первом разделе четвертого параграфа. Компоненты базиса волновых функций кластерных каналов записываются в виде

$$\Psi_{A,nl}^{c_\kappa} = \hat{A}\{\Psi_{A_1}^{c_\kappa} \Psi_{A_2}^{c_\kappa} \varphi_{nl}(\rho)\}_{JM_J}, \quad (1)$$

где $\Psi_{A_i}^{c_\kappa}$ – волновые функции кластеров, рассчитанные с помощью NCSM модели, а $\varphi_{nl}(\rho)$ – осцилляторная функция относительного движения.

Для того, чтобы использовать хорошо развитые и весьма удобные для вычислений методы NCSM, требуется построить сохраняющий свойства функции (1) аналог, выражаемый в виде линейной комбинации детерминантов Слейтера (ДС). В качестве аналога используется функция (1) домноженная на функцию нулевых колебаний центра масс.

$$\Psi_{A,nl}^{SD,c_\kappa} = \Phi_{000}(\mathbf{R})\Psi_{A,nl}^{c_\kappa} = \hat{A}\{\Phi_{000}(\mathbf{R})\{\Psi_{A_1}^{\{k_1\}} \Psi_{A_2}^{\{k_2\}}\}_S \varphi_{nl}(\rho)\}_{JM_J T T_Z} \quad (2)$$

Ключевой элемент формализма – преобразование этих волновых функций в линейную комбинацию ДС. Для осуществления этого преобразования применяются преобразование Тальми-Мошинского и технология кластерных коэффициентов. Первая из этих операций приводит функцию двух кластеров с некоторым относительным движением, заданном в виде набора осцилляторных функций, к суперпозиции произведений ВФ кластеров, характеризующихся ненулевым движением по координатам их центров масс. Второе позволяет представить эти произведения в виде линейных комбинаций ДС.

Получившиеся волновые функции кластеров являются, в общем случае, неортогональными друг другу. Для решения уравнения на таком базисе его предварительно ортонормируют. В ходе данной операции в общем базисе можно объединить волновые функции различных кластерных каналов и решения NCSM модели (поляризационные члены). Ортонормированный базис получается в рамках процедуры диагонализации матрицы

$$\left\| \begin{array}{cc} \left[\langle \Psi_{pol}^{(j)} | \Psi_{pol}^{(j')} \rangle \right] & \left[\langle \Psi_{pol}^{(j)} | \Psi_{A,nl}^{SD,c_\kappa} \rangle \right] \\ \left[\langle \Psi_{pol}^{(j')} | \Psi_{A,n'l'}^{SD,c_{\kappa'}} \rangle \right] & \left[\langle \Psi_{A,n'l'}^{SD,c_{\kappa'}} | \Psi_{A,nl}^{SD,c_\kappa} \rangle \right] \end{array} \right\|. \quad (3)$$

Преимуществом нашей модели является значительно более короткий список базисных векторов, не превышающий 100, в то время как базис NCSM модели равен числу используемых ДС и составляет порядка 10^{8-10} . Также важной особенностью модели CCOFM является возможность одновременного использования кластерных и NCSM компонент в едином базисе, а разработанный формализм позволяет использовать этот алгоритм для расчетов на вычислительных кластерах, используя базисы ДС большой размерности. Еще одним преимуществом разработанного метода по сравнению с моделями NCSM/MRG, NCSMC

является явное представление кластерных компонент базиса в виде линейной комбинации ДС, а не расчет матричных элементов с их участием, что позволяет рассчитывать самые разнообразные характеристики кластеризованных состояний. В случае расчетов с ядром ${}^7\text{Li}$ была достигнута размерность базиса ДС $2.5 \cdot 10^8$.

Описанный выше математический аппарат является также основным элементом формализма вычисления спектроскопических факторов (СФ) и кластерных, а также нуклонных формфакторов произвольного канала любого, представимого в виде суперпозиции ДС, решения А-нуклонного уравнения Шрёдингера Ψ_A . СФ кластерного канала c_κ определяется в данном формализме как сумма квадратов интегралов перекрытия ВФ Ψ_A с ортонормированными между собой функциями кластерного канала. Эти функции получаются путем диагонализации матрицы, аналогичной матрице (3), но для единственного кластерного канала.

После диагонализации её собственные вектора и собственные значения выражаются в форме $\Psi_{A,l,k}^{c_\kappa} = \hat{A} \{ \{ \Psi_{A_1}^{c_\kappa} \Psi_{A_2}^{c_\kappa} \} s f_l^k(\rho) \}$,
 $\varepsilon_\kappa = \langle \hat{A} \{ \Psi_{A_1}^{c_\kappa} f_l^k(\rho) \Psi_{A_2}^{c_\kappa} \} | \hat{1} | \hat{A} \{ \Psi_{A_1}^{c_\kappa} f_l^k(\rho) \Psi_{A_2}^{c_\kappa} \} \rangle$, где $f_l^k(\rho) = \sum_n B_{nl}^k \varphi_{nl}(\rho)$.

Кластерный (нуклонный) формфактор, который является волновой функцией, описывающей относительное движение фрагментов, выражается через них как

$$F_A^{c_\kappa}(\rho) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k}} \langle \Psi_{A,l,k}^{c_\kappa} | \Psi_A \rangle f_l^k(\rho). \quad (4)$$

Спектроскопический фактор определяется как нормировка представленного выше кластерного (нуклонного) формфактора.

Ab initio вычисление значений спектроскопических факторов и кластерных формфакторов произвольных каналов может служить основой для описания реакций слияния легких ядер, распада, передачи кластера и др. на микроскопическом уровне. В разработанном методе эти кластерные характеристики применяются для расчета асимптотических характеристик связанных состояний и узких резонансов. Для этого проводится сшивка кластерного формфактора, учитывающего эффект обменного ядра МРГ, с соответствующим асимптотике двухтелным решением, которое является верным для больших расстояний между кластерами, при которых можно пренебречь сильным взаимодействием и обменными эффектами между ними. В случае заряженных частиц для связанного состояния асимптотическим решением является функция Уиттекера, для резонанса – Кулоновские функции непрерывного спектра. В случае однонейтронного гало асимптотикой являются функции Неймана и Бесселя.

Для объяснения метода рассмотрим случай распада резонанса в канал с заряженными кластерами. Для узких резонансов, формализм расчета которых в данной работе представлен, можно воспользоваться тем обстоятельством, что для таких резонансов существует достаточно широкая область расстояний, на которой ядерное притяжение пренебрежимо мало, но высота барьера значи-

тельно превосходит энергию распада. Для всех точек этой области ρ_{in} справедливо соотношение $F_l(\rho_{in}) \ll G_l(\rho_{in})$. В данной области вкладом регулярного решения можно пренебречь. Отметим, что здесь мы используем определения кулоновских функций, соответствующие их асимптотическому поведению: $F_l(\rho) \rightarrow \sin(k\rho)/(k\rho)^l$ и $G_l(\rho) \rightarrow \cos(k\rho)/(k\rho)^l$ при $\rho \rightarrow \infty$. При выполнении этого условия для определения точки сшивки ρ_{sh} кластерного формфактора и нерегулярной волновой функции можно использовать условие равенства логарифмических производных. Парциальная ширина распада по выбранному каналу c_κ выражается как

$$\Gamma = \frac{\hbar^2}{\mu k} \left(\frac{F_A^{c_\kappa}(\rho_{sh})}{G_l(\rho_{sh})} \right)^2. \quad (5)$$

Характеристика связанного состояния - асимптотический нормировочный коэффициент A^{c_κ} определяется сравнением величины кластерного формфактора с величиной нерегулярной функции Уиттекера в точке сшивки, определяемой тем же методом сшивки по значениям логарифмических производных:

$$A^{c_\kappa} = \rho_{sh} F_A^{c_\kappa}(\rho_{sh}) / W_{-\eta, l+1/2}(2k\rho_{sh}). \quad (6)$$

В итоге, модель ССОФМ в рамках общего ab initio подхода без привлечения дополнительных предположений и феноменологических постоянных позволяет одновременно с хорошей точностью описывать как полные энергии связи кластеризованных состояний легких ядер, так и кластерные и асимптотические характеристики связанных и узких резонансных состояний. Полученные кластерные и асимптотические характеристики могут в дальнейшем применяться для расчета реакций с участием легких ядер, что укладывается в рамки концепции создания единой теории атомного ядра, описывающей как ядерную структуру, так и ядерные реакции.

Существует ряд подходов, они подробно разбираются во втором разделе четвертого параграфа, которые в рамках ab initio подхода позволяют описывать как внутренние характеристики связанных состояний и состояний непрерывного спектра, так и ядерные реакции с их участием. Каждый из этих методов обладает своими преимуществами и недостатками, универсального, позволяющего даже в области легких ядер описывать с равным успехом все ядерные состояния и реакции с их участием на данный момент не существует.

По сравнению с существующими на данный момент методиками ab initio расчета кластеризованных состояний легких ядер, созданная модель ССОФМ имеет ряд преимуществ. Она позволяет рассчитывать кластеризованные состояния с кластерами подобными ${}^3\text{H}$, ${}^4\text{He}$, в том числе и в возбужденных состояниях, а также комбинировать в общем базисе несколько каналов. Особенности созданного формализма позволяют проводить расчеты с применением кластерных и комбинированных базисов на вычислительных кластерах, что допускает вычисления с большой размерностью базиса ДС. Также, благодаря тому, что кластерные компоненты базиса представляются в явном виде, он может рассчи-

тивать как полные энергии связи и меры кластеризации, так и асимптотические и прочие характеристики кластеризованных состояний.

Формализм метода CSOFM, сформулированный в первой главе, подробно представлен в работах [A1, A5].

Во второй главе приводятся результаты расчетов полных энергий связи и спектроскопических факторов основных и низколежащих состояний ряда легких ядер. В параграфе 2.2 представлены результаты расчетов основных и нижних возбужденных состояний ядер ${}^9\text{Be}$ и ${}^9\text{B}$ с применением оболочечного кода Antoine [24] без использования технологий распараллеливания вычислений. Базисы рассматривались как: чисто кластерные, NCSM и комбинированные. Данные расчеты проводились на относительно коротких базисах ДС, порядка 10^{6-7} , они показали недостаточность кластерного базиса для получения полных энергий связи систем, но заметное влияние кластерных компонент на разностные характеристики в случае малой размерности базиса NCSM. Данный результат является полезным для расчета более тяжелых ядер, характеризующихся высокой степенью кластеризации, для которых сложно проводить расчеты для большого значения суммарного осцилляторного кванта.

Наиболее ярко выраженной кластеризацией обладают нижние резонансные состояния системы ${}^8\text{Be}$. В большинстве работ, посвященных свойствам ядерной кластеризации, данные состояния рассматриваются как системы $\alpha + \alpha$. Ab initio расчеты с применением реалистических нуклон-нуклонных потенциалов позволяют проверить этот факт.

Полная энергия связи нижнего состояния системы ${}^8\text{Be}$ рассчитывалась с применением нескольких типов базисов, со значением осцилляторного параметра базиса $\hbar\omega=15$ МэВ. Во всех случаях максимальное значение суммарного осцилляторного кванта N_{tot}^{max} определялось как основной параметр расчета наряду с осцилляторным параметром базиса. Базисы были определены следующим способом:

Во-первых, использовался обычный базис NCSM, обозначенный как *mod1*.

Во-вторых, применялись два типа чисто кластерных базисов. Один из них содержал волновые функции α -кластеров в нижней оболочечной конфигурации. Второй же использовал реалистические волновые функции 0_1^+ и 0_2^+ состояний ${}^4\text{He}$. Они были рассчитаны с параметром обрезания $N_\alpha^{max}=2$. Этот базис является трехканальным. Обозначим эти версии базиса как *mod2* и *mod3*.

В-третьих, были созданы два гибридных базиса *mod4* and *mod5*. Каждый из них включает поляризационный член, рассчитанный в NCSM, ограниченный условием $N_{pol}^{max} = N_{tot}^{max} - 2$, в качестве основного компонента. Дополнительные кластерные члены с суммарным осцилляторным квантом $N = N_{tot}^{max}$, с кластерами в минимальной конфигурации и с кластерами с параметром обрезания $N_\alpha^{max}=2$, были включены в версии *mod4* и *mod5* соответственно.

ПЭС ядра ${}^8\text{Be}$, вычисленная с применением базисов *mod1*, *mod2* и *mod3*, как функция максимального суммарного числа осцилляторных квантов N_{tot}^{max} представлена на гистограмме, показанной на рисунке 1. Как следует из данной

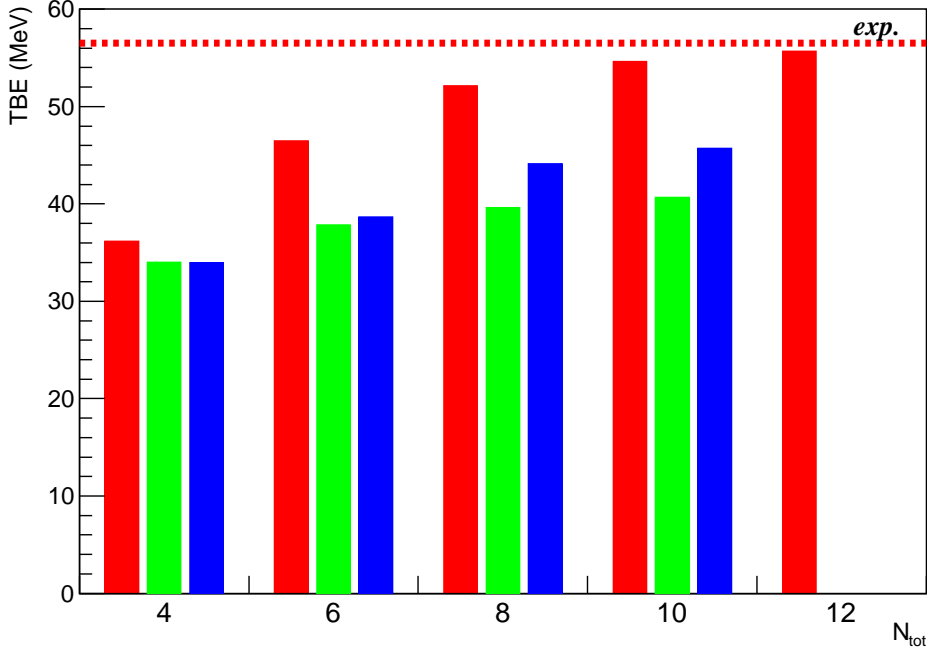


Рис. 1. ПЭС ядра ${}^8\text{Be}$, рассчитанная с помощью потенциала Daejeon16, со значением осцилляторного параметра $\hbar\omega=15$ МэВ. Красные столбцы – *mod1*, зеленые – *mod2*, синие – *mod3*. Горизонтальной линией обозначено экспериментальное значение ПЭС.

Таблица 1. ПЭС ядра ${}^8\text{Be}$, рассчитанная с применением потенциала Daejeon16.

mod	$N_{tot}^{max}=4$	$N_{tot}^{max}=6$	$N_{tot}^{max}=8$	$N_{tot}^{max}=10$	$N_{tot}^{max}=12$
mod1	36.20	46.47	52.17	54.62	55.72
mod4		39.00	47.16	52.34	
mod5		38.98	46.82	52.22	

гистограммы, кластерные компоненты соответствующие минимальному значению N_{tot}^{max} вносят основной вклад в значение полной энергии связи по сравнению с некластеризованными компонентами как для одноканального *mod2*, так и трехканального *mod3* базиса. Тем не менее, даже в таком тривиальном базисе вклад некластеризованных компонент нельзя считать несущественным. Расширение базиса резко меняет картину - относительный вклад некластеризованных компонент растет значительно быстрее, чем вклад кластеризованных. Таким образом, использование базиса состоящего из только кластерных ВФ приводит к сильно недооценке полной энергии связи, хотя рассматриваемая система является сильно кластеризованной. Данный результат не зависит от того, рассматривается ли волновая функция кластера в минимальной конфигурации *mod2* или в реалистической кластерной модели *mod3*.

Наиболее детальный анализ взаимосвязи между вкладами кластеризован-

Таблица 2. Мера кластеризации ядра ${}^8\text{Be}$, рассчитанная с применением потенциала Daejeon16.

mod	$N_{tot}^{max}=4$	$N_{tot}^{max}=6$	$N_{tot}^{max}=8$	$N_{tot}^{max}=10$	$N_{tot}^{max}=12$
Состояние 0^+					
one-ch	0.068	0.765	0.866	0.861	0.875
two-ch	0.442	0.793	0.868	0.868	
three-ch	0.992	0.864	0.879	0.873	
Состояние 2^+					
one-ch		0.679	0.811	0.823	0.840
two-ch		0.729	0.812	0.826	
three-ch		0.784	0.815	0.827	
Состояние 4^+					
one-ch			0.667	0.731	0.765
two-ch			0.678	0.747	
three-ch			0.678	0.747	

ных и некластеризованных компонент в ПЭС проводится путем сравнения расчетов значений ПЭС в версиях базисов $mod1$, $mod4$ и $mod5$. Эти расчеты позволяют сравнить вклад кластеризованных и некластеризованных компонент базиса при фиксированных значениях N_{tot}^{max} . Результаты расчета для случая применения потенциала Daejeon16 представлены в таблице 1. Наиболее информативным является анализ разницы в значениях ПЭС, вычисленных в смешанных базисах версий $mod4$ или $mod5$ с параметром обрезания N_{tot}^{max} и в NCSM базисах ($mod1$) с параметрами обрезания $N_{tot}^{max} - 2$ и N_{tot}^{max} . Во всех этих случаях расширение NCSM базиса с параметром обрезания $N_{tot} - 2$ путем добавления полного набора оболочечных волновых функций вплоть до N_{tot}^{max} приводила к значительно более сильному уточнению полной энергии связи состояния чем добавление исключительно кластерных компонент с тем же N_{tot}^{max} . При больших значениях N_{tot}^{max} добавление кластерных компонент увеличивало полную энергию связи на величину порядка несколько сотен КэВ, в то время как добавление полного набора оболочечных функций приводило к увеличению на несколько МэВ. Таким образом, совокупный вклад некластерных компонент при вычислении полной энергии связи в этой области значений N_{tot}^{max} доминирует. Более того, их относительный вклад растет с увеличением N_{tot}^{max} .

Мера кластеризации, будучи одноканальной (в этом случае она совпадает со СФ) или совокупной, является непосредственной мерой содержания кластерных компонент в волновых функциях ядерных состояний. Расчеты данной величины проводились в этой работе по следующим пунктам. Волновая функция основного состояния исходного ядра ${}^8\text{Be}$ была рассчитана в рамках NCSM. Волновые функции кластерных каналов (1) содержат функции внутреннего дви-

жения α -частицы, которые были рассчитаны в расчетах NCSM с ограничением $N^{max} = 2$. В случае ядра ${}^8\text{Be}$ рассматриваются следующие каналы: канал содержащий обе α -частицы в основном состоянии, канал содержащий одну частицу в состоянии 0_2^+ и канал с обеими частицами в состоянии 0_2^+ . ВФ канала соответствующего основным состояниям кластеров рассматриваются в общем базисе с ВФ каналов содержащих одну или обе α -частицы в 0_2^+ состоянии. Данный базис проходит процедуру ортонормировки и мера кластеризации определяется аналогично спектроскопическому фактору, который был определен на стр. 12. В итоге, в таблице 2 представлены значения одноканальной меры кластеризации для α -частиц в основном состоянии и совокупных мер кластеризации для двух- и трехканальных случаев для основного и нижних резонансных состояний ${}^8\text{Be}$.

Таблицы демонстрируют быструю сходимость значений данных мер для всех нижних резонансных состояний ${}^8\text{Be}$. Точность их определения, достаточная для использования в расчетах ядерных реакций достигается при $N_{tot}^{max} = 10$, что является относительным небольшим значением суммарного осцилляторного кванта системы. Результаты этих расчетов подтверждают представления о том, что рассматриваемые системы сильно кластеризованы.

Основной же результат проведенных *ab initio* расчетов нижних резонансных состояний ядра ${}^8\text{Be}$ заключается в том, что вклад некластеризованных компонент базиса в полную энергию связи велик даже в столь типичной кластеризованной системе, как рассмотренная нами. Более того, относительная роль некластеризованных компонент, в отличие от того, что можно было ожидать, с увеличением базиса увеличивается, хотя при увеличении N_{tot}^{max} функция относительного движения кластеров правильной описывается на больших расстояниях. Добавление каналов содержащих возбужденные состояния кластеров с физически разумной шириной распада играет незначительную роль и не может изменить общей картины из-за чрезвычайно большой неортогональности дополнительных каналов к основному. То же самое верно и для случая уточнения описания ВФ кластеров. В итоге начинает вырисовываться более полная картина кластеризованного состояния, как чисто кластерной волновой функции, погруженной в "море" диффузных некластерных конфигураций.

В рамках продолжения работ по теоретическому исследованию кластеризованных состояний в параграфе 2.4 рассчитывались характеристики основного и нижних состояний ядра ${}^7\text{Li}$ как системы $\alpha+t$. Для анализа кластерных эффектов использовалось несколько типов базисов, аналогичных представленным ранее.

Наиболее важным результатом данного расчета является детальный анализ степени кластеризации нижних уровней ядра ${}^7\text{Li}$. Волновые функции нижних уровней ядра ${}^7\text{Li}$ были получены в базисе NCSM, а функции кластеров – в NCSM расчетах с фиксированным параметром обрезания $N_{tot}^{max}=2$. Результаты расчета приведены в таблице 3.

Результаты таблицы 3 демонстрируют, что значения спектроскопического фактора всех нижайших уровней с фиксированными J^π , за исключением вто-

Таблица 3. Энергии возбуждения (МэВ) и СФ основного и нижних возбужденных состояний ${}^7\text{Li}$. В четвертом столбце приведены экспериментальные значения энергий уровней и ширины распада $\Gamma_{\alpha+t}$ (кэВ) Знаки $>$ и $<$ идентифицируют состояния с большим и малым значением СФ соответственно.

N_{tot}^{max}	9	11	13	15	exp
$3/2^-$	0/0.81	0/0.84	0/0.855	0/0.86	0/
$1/2^-$	1.18/0.77	1.03/0.81	0.94/0.83	0.83/0.83	0.478/
$7/2^-$	4.54/0.69	4.64/0.72	4.68/0.72	4.70/0.72	4.63/93
$5/2_{>}^-$	9.53/0.54	9.06/0.52	8.74/0.46	7.50/0.40	6.68/880
$5/2_{<}^-$	7.99/0.17	7.87/0.23	7.75/0.28	8.29/0.36	7.46/89

рого уровня $5/2^-$, оказываются больше 0.5, т. е. эти состояния обладают ярко выраженными кластерными свойствами. В итоге, проделанные ab initio расчеты подтверждают выводы работы [23], полученные в рамках оболочечной модели с кором.

Интересны свойства второго, если исходить из данных эксперимента, уровня $5/2_{<}^-$. Несмотря на более высокую энергию возбуждения он имеет малую ширину распада в $\alpha+t$ канал, т. е. характеризуется крайне малым значением СФ. Расчеты также выделяют один уровень $5/2^-$ с большим и один – с малым значением СФ. Поскольку вариационный расчет спектра дает лишь энергии уровней, вычисленные СФ являются хорошим идентификатором свойств уровня при наличии данных о его ширине или сечении реакции подхвата кластера на этот уровень. Хорошая иллюстрация этого – данные таблицы, где для всех вариантов расчета, кроме как с максимальным значением параметра обрезания, второй уровень оказывается существенно ниже первого.

В итоге, в ходе продолжения ab initio расчетов был проведен анализ степеней кластеризации нижних уровней ядра ${}^7\text{Li}$, хорошо согласующийся с экспериментальными результатами и работами предыдущих групп. Полученные в главе 2 результаты представлены в работах [A1–A4].

В третьей главе приводятся результаты расчетов асимптотических характеристик ряда легких ядер, а именно основных и нижних возбужденных состояний ядер ${}^5\text{He}$, ${}^7\text{Li}$, ${}^8\text{Be}$. Осцилляторный базис, используемый в этих вычислениях, характеризуется тем, что с ростом максимального полного числа осцилляторных квантов N_{tot}^{max} область расстояний, где корректно описываются решения уравнения Шрёдингера, расширяется пропорционально $[N_{tot}^{max}]^{1/2}$. В связи с этим микроскопическое описание кластерных каналов на расстояниях, где справедливо асимптотическое представление волновой функции относительного движения кластеров, требует использования базиса чрезвычайно большой размерности. Поэтому в расчетах, результаты которых представлены в данной работе, использован базис функций ограниченный параметром обре-

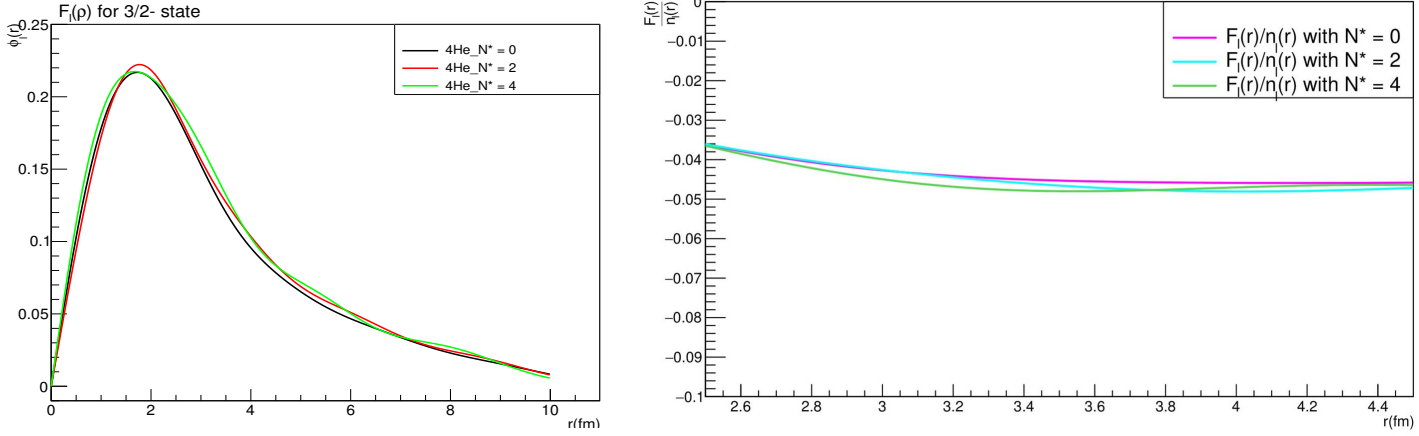


Рис. 2. Нейтронный формфактор состояния $3/2^-$ ${}^5\text{He}$ и соотношение в окрестности точки сшивки между нейтронным формфактором и внешним решением

Таблица 4. Результаты расчета резонанса $3/2^-$ для различных значений N_{max} и $\hbar\omega$

	$N_{max}=15$ $\hbar\omega=12.5$	$N_{max}=15$ $\hbar\omega=15$	$N_{max}=15$ $\hbar\omega=17.5$	$N_{max}=17$ $\hbar\omega=12.5$	$N_{max}=17$ $\hbar\omega=15$	$N_{max}=17$ $\hbar\omega=17.5$
$N_{4\text{He}}^{max}=0$	443 кэВ	530 кэВ	597 кэВ	427 кэВ	578 кэВ	577 кэВ
$N_{4\text{He}}^{max}=2$	545 кэВ	590 кэВ	615 кэВ	515 кэВ	587 кэВ	600 кэВ
$N_{4\text{He}}^{max}=4$	563 кэВ	629 кэВ	630 кэВ	—	611 кэВ	620 кэВ

зания $N_{tot}^{max}=15$ для описания ядра ${}^7\text{Li}$, имеющий размерность базиса ДС примерно $2.5 \cdot 10^8$. В случае расчетов ядра ${}^5\text{He}$ параметр обрезания равен 17, а для ядра ${}^8\text{Be}$ параметр обрезания, в свою очередь, равен 14.

Наиболее легкой системой, обладающей явными кластерными характеристиками, является ядро ${}^5\text{He}$, нижнее состояние $3/2^-$ которого является резонансным состоянием системы ${}^4\text{He}+n$. Экспериментальное значение резонансной энергии данного состояния равняется 890 кэВ, ширина распада - 600 кэВ.

Расчеты проводились с применением потенциала Daejeon16 для целого набора значений осцилляторного параметра $\hbar\omega$. Подсистема ${}^4\text{He}$ рассчитывалась с разными параметрами обрезания вплоть до $N_{4\text{He}}^{max}=4$. В свою очередь, доля минимальной конфигурации $0s_{1/2}^4$ составляет от 89 до 97%. Данные значения показывают, что подсистема ${}^4\text{He}$ описывается с данными параметрами обрезания на достаточном для описания кластерных характеристик уровне.

Согласно представленному выше формализму были проведены расчеты нейтронных формфакторов, как функций координаты относительного движения, получены значения точек сшивки формфакторов с двухтельным решением и соотношения этих функций в точках сшивки.

На рисунке 2 представлены нейтронные формфакторы состояния $3/2^-$ для осцилляторного параметра $\hbar\omega=15$ МэВ и для разных значений параметра обрезания $N_{4\text{He}}^{max}$ и соотношение в окрестности точки сшивки между нейтронным

Таблица 5. Энергии возбуждения (МэВ) и АНК ($\text{фм}^{-1/2}$) (ширины распада (МэВ)) связанных (резонансных) состояний ядра ${}^7\text{Li}$.

J^π	$3/2^-$	$1/2^-$	$7/2_1^-$	$5/2_1^-$	$5/2_2^-$
$E^{tot}(th)$	39.110	38.279	34.410	31.613	30.816
$E^{tot}(exp)$	39.245	38.767	34.615	32.565	31.786
$E^*(th)$	0	0.831	4.700	7.497	8.294
$E^*(exp)$	0	0.478	4.630	6.680	7.459
$E_{\alpha+t}(th)$	-2.405	-1.569	2.295	5.092	5.889
$E_{\alpha+t}(exp)$	-2.467	-1.989	2.163	4.213	4.992
$S_{\alpha+t}(th)$	0.86	0.83	0.72	0.40	0.36
ρ_{match}	4.41	4.42	4.34	4.34	4.36
$A^{\alpha+t}(th)$	3.44	2.95	—	—	—
$A^{\alpha+t}(exp)$	3.57 ± 0.15	3.00 ± 0.15	—	—	—
$\Gamma(th)$	—	—	65	564	797
$\Gamma(exp)$	—	—	93 (69)	880	89

формфактором и внешним решением. Как видно из графика различие между формфакторами для разных значений параметра обрезания N_{4He}^{max} незначительно. А из того, что соотношение между нейтронным формфактором и внешним решением выходит на константу, следует правильность определения точки сшивки и достаточность использованного оболочечного базиса для высококачественного вычисления формфактора.

Данные соотношения, использовались для расчета ширины резонанса. Результаты расчетов представлены в таблице 4. Как следует из этих расчетов, уже для параметра обрезания $N_{4He}^{max}=2$ теоретические расчеты находятся в хорошем согласии с экспериментальным значением, равным 600 кэВ. Согласие между результатами для разных значений осцилляторного параметра и параметра обрезания показывают также высокую стабильность произведенных расчетов и доказывает применимость созданного метода.

В параграфах 3.3 и 3.4 приводятся результаты расчетов асимптотических характеристик связанных и нижних резонансных состояний ядер ${}^7\text{Li}$ и ${}^8\text{Be}$ для каналов $\alpha + t$ и $\alpha + \alpha$, соответственно.

Для расчетов волновых функций ядра ${}^7\text{Li}$ и кластеров α -частицы и тритона в рамках модели NCSM использовался оболочечный код Bigstick, удобный для использования на многопроцессорных компьютерных кластерах. Это позволило при расчетах энергий и волновых функций уровней ядра ${}^7\text{Li}$ выйти на указанный уровень параметра обрезания базиса $N_{tot}^{max}=15$, а для состояний ${}^8\text{Be}$ - на уровень $N_{tot}^{max}=14$.

Полученные в расчетах с потенциалом Daejeon16 величины полных энер-

гий связи нижних уровней ядра ${}^7\text{Li}$, представленные в таблице 5, с высокой точностью совпадают с результатами предшествующих вычислений различных авторов и вполне удовлетворительно воспроизводят измеренные значения. Известные из эксперимента разностные величины – энергии возбуждения исследованных уровней и энергии фрагментации воспроизводятся с меньшей точностью. Это связано как с особенностями используемого потенциала, так и, для высоко лежащих уровней $5/2^-$, с недостаточной размерностью используемого базиса ДС. В то же время проведенные расчеты демонстрируют весьма высокую чувствительность асимптотических характеристик исследованных уровней, в большей степени ширин распада, чем асимптотических нормировочных коэффициентов, от энергии фрагментации, поэтому в наших расчетах использовались экспериментальные значения энергии развала. Их результаты представлены в таблице 5.

Большие значения СФ связанных и резонансных состояний указывают на высокую степень кластеризации системы в этих состояниях. Для всех этих состояний точки сшивки практически совпадают и для резонансных состояний находятся в подбарьерной области и, поэтому, удовлетворяют условию $F_l(\rho_{in}) \ll G_l(\rho_{in})$. Величины АНК связанных состояний находятся в хорошем согласии со значениями, извлеченными из экспериментов. А с учетом трудностей извлечения экспериментального значения, полученные теоретические результаты можно считать даже более обоснованными. Состояние $7/2^-$ также сильно кластеризовано. Вычисленное значение его распадной ширины находится в очень хорошем согласии с экспериментальным значением, полученным в работе [25] (в таблице 5 указано с скобках). В стандартных спектроскопических таблицах это значение приводится как альтернативное к общепринятой величине ширины 93 кэВ. Учитывая высокую стабильность наших расчетов, мы рассматриваем полученный результат как серьезный аргумент в пользу версии работы [25].

На фоне успешного описания асимптотических характеристик трех указанных уровней наблюдается резкое несоответствие вычисленной ширины второго уровня $5/2^-$ экспериментальной. Возможной причиной этого несоответствия является малое (~ 800 кэВ) расстояние между двумя уровнями $5/2^-$, что приводит к высокой чувствительности ВФ к небольшому изменению параметров взаимодействия.

В рамках этого теоретического исследования был также проведен расчет ширин нижних резонансных состояний ядра ${}^8\text{Be}$, а именно состояний ротационной серии 0^+ , 2^+ , 4^+ . Расчеты производились с помощью того же программного обеспечения, что и расчеты ядра ${}^7\text{Li}$. Суммарное главное квантовое число в этих расчетах достигало значения 14, базис в таком случае равнялся $1.87 \cdot 10^8$ ДС.

Как следует из таблицы 6, при такой размерности базиса обеспечивается сходимость значений полных энергий связи этих состояний к экспериментальным значениям, также энергии возбуждения уровней 2^+ и 4^+ показывают хорошее согласие с экспериментом. Результаты расчетов ширин распада состояний

Таблица 6. Энергии возбуждения (МэВ), ширины распада резонансных состояний ядра ${}^8\text{Be}$.

J^π	E	E*	ρ_{match}	$S_{\alpha+\alpha}$	Γ
экспериментальные значения					
0^+	56.500	0.0	—	—	6.8(5.6) эВ
2^+	53.460	3.040	—	—	1.5 МэВ
4^+	45.100	11.40	—	—	3.5 МэВ
теоретический расчет с $N_{tot}=14$					
0^+	56.241	0.0	4.23	0.8797	7.29 эВ
2^+	52.840	3.401	4.27	0.8497	1.31 МэВ
4^+	44.617	11.624	4.56	0.7920	3.24 МэВ

0^+ , 2^+ , 4^+ для потенциала Daejeon16 представлены в таблице 6. Теоретическое значение ширины состояния 0^+ равняется в таком случае 7.29 эВ, что хорошо согласуется с экспериментальным значением. Теоретические расчеты ширин состояний 2^+ и 4^+ составляют 1.31 и 3.24 МэВ, что также хорошо согласуется с экспериментом.

В итоге, разработанный метод подтвердил свою эффективность в расчете асимптотических характеристик и для случая ядра ${}^8\text{Be}$. Причем, в отличие от случая дублета уровней $5/2^-$ ядра ${}^7\text{Li}$, наблюдается хорошее согласие с экспериментом для всех рассмотренных состояний.

В итоге, метод CCOFM показал свою применимость для расчета асимптотических характеристик низколежащих возбужденных состояний, как связанных, так и резонансных, как в случае расчетов состояний с нейтронным гало, так и в случае кластеризованных состояний с кластерами подобными ${}^4\text{He}$. Результаты *ab initio* расчетов АНК могут считаться одними из наиболее обоснованных из полученных на данный момент. Также расчет известных асимптотических характеристик с помощью данного метода может оказаться еще одним тестом для оценки предлагаемых реалистических нуклон-нуклонных потенциалов, наряду с расчетами полных энергий связи основных и нижних возбужденных состояний, моментов ядер и амплитуд электромагнитных переходов. Данные результаты были представлены в работе [A5].

В Заключение представлены основные результаты и выводы представленной работы, а именно сформулированы преимущества созданной модели ортогональных функций кластерных каналов, подведены итоги анализа роли кластерных компонент в волновых функциях кластеризованных состояний и продемонстрирован краткий вывод из результатов расчетов асимптотических характеристик связанных состояний и узких резонансов легких ядер с помощью данной модели.

Список публикаций по теме диссертации

- A1. Rodkin D. M., Tchuvil'sky Yu. M. Ab initio calculation of one-nucleon halo states // Journal of Physics: Conference Series (2018) vol. **966**, 012022-1-012022-6;
- A2. Родкин Д. М., Чувильский Ю. М. Описание кластерных явлений в спектрах легких ядер в рамках ab initio подхода // Письма в ЖЭТФ (2018) том **108** №7 стр. 459-465;
- A2. Rodkin D. M., Tchuvil'sky Yu. M. Ab Initio Description of Clustering Phenomena in Spectra of Light Nuclei // JETP Letters (2018) vol. **108** №7 p. 429-434;
- A3. Родкин Д. М. Чувильский Ю. М. Исследование резонансных и слабосвязанных состояний легких ядер с однонуклонным гало на базе первопринципов // Ядерная физика и инжиниринг (2017) том **8**, № 6 стр. 539-544;
- A3. Rodkin D. M., Tchuvil'sky Yu. M. Ab Initio Study of Resonant and Weakly Bound States of Light Nuclei with Single-Nucleon Halo Based on First Principles // Physics of Atomic Nuclei (2018) vol. **81** № 10 p. 1455-1459;
- A4. Rodkin D. M., Tchuvil'sky Yu. M. Analysis of clustering phenomena in ab initio approaches // Physics Letters B (2019) vol. **788** p. 238-242;
- A5. Родкин Д. М. Чувильский Ю. М. Асимптотические характеристики кластерных каналов в рамках ab initio подхода // Письма в ЖЭТФ (2019) том **109** № 7 стр. 435-441.

Список цитируемой литературы

1. Wheeler J. A. Molecular viewpoints in nuclear structure. On mathematical description of light nuclei by method of resonating group structure. I // Phys. Rev. 1937. Vol. 52. P. 1083.

2. Wildermuth K., Tang Y. C. A Unified Theory of the Nucleus. Veiweg, 1977. 502 p.
3. Filippov G. F., Okhrimenko I. P. Use of an oscillator basis for solving continuum problems // Soviet journal of nuclear physics. 1980. Vol. 32, no. 4. P. 480.
4. Solovyev A., Igashov S., Tchuvil'sky Y. M. Study of the Radioactive Capture Reaction $T+\alpha \rightarrow {}^7\text{Li}+\gamma$ in the Algebraic Version of the Resonating Group Method // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2014. Vol. 78. P. 433.
5. Adahchour A., Descouvemont P. Microscopic cluster model of ${}^5\text{H}$ and ${}^5\text{He}$ ($T=3/2$) // Nucl. Phys. A. 2008. Vol. 813. P. 252.
6. Descouvemont P., Baye D. ${}^{12}\text{Be}$ molecular states in a microscopic cluster model // Phys. Lett. B. 2001. Vol. 505. P. 71.
7. Tohsaki A., Horiuchi H., Schuck P., Roepke G. Alpha Cluster Condensation in ${}^{12}\text{C}$ and ${}^{16}\text{O}$ // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 192501.
8. Kanada-En'yo Y., H.Horiuchi. Structure of Light Unstable Nuclei with Antisymmetrized Molecular Dynamics // Prog. Theor. Phys. Suppl. 2001. Vol. 142. P. 205.
9. Neff T. Microscopic Calculation of the ${}^3\text{He}$ (α, γ) ${}^7\text{Be}$ and ${}^3\text{H}$ (α, γ) ${}^7\text{Li}$ Capture Cross Sections Using Realistic Interactions // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106. P. 042502.
10. Pudliner B. S., Pandharipande V. R., Carlson J. et al. Quantum Monte Carlo calculations of nuclei with $A \leq 7$ // Phys. Rev. C. 1997. Vol. 56. P. 1720.
11. Epelbaum E., Krebs H., Lee D., Meissner U. G. *Ab initio* calculation of the Hoyle state // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106. P. 192501.
12. Navratil P., Quaglioni S., Stetcu I., Barrett B. Recent developments in no-core shell model calculations // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 2009. Vol. 36. P. 083101.
13. Navratil P., Vary J. P., Barrett B. R. Properties of ${}^{12}\text{C}$ in the *Ab Initio* Nuclear Shell Model // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84.

P. 5728.

14. Machleidt R. The high-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential (CD-Bonn) // *Phys. Rev. C*. 2000. Vol. 63. P. 024001.
15. Shirokov A. M., Kulikov V. A. et al. NN interaction JISP16: Current Status and Prospect // *EPJ Web of Conferences*. 2010. Vol. 3, no. 05015.
16. Shirokov A. M., Shin I. J. et al. N3L0 NN Interaction adjusted to light nuclei in ab exitu approach // *Phys. Lett. B*. 2016. Vol. 761. P. 87.
17. Quaglioni S., Navratil P. Ab initio many-body calculations of nucleon-nucleus scattering // *Phys. Rev. C*. 2009. Vol. 79. P. 044606.
18. Baroni S., Navratil P., Quaglioni S. Unified ab initio approach to bound and unbound states: no-core shell model with continuum and its application to ${}^7\text{He}$ // *Phys. Rev. C*. 2013. Vol. 87. P. 034326.
19. Shirokov A. M., Papadimitriou G., Mazur A. I. et al. Prediction for a Four-Neutron Resonance // *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 117. P. 182502.
20. Shirokov A. M., Mazur A. I., Vary J. P., Mazur I. A. Oscillator basis, scattering and nuclear structure // *J. Phys. Conf. Ser.* 2012. Vol. 403. P. 012021.
21. Smirnov Y. F., Tchuvil'sky Y. M. Cluster spectroscopic factors for the p-shell nuclei // *Phys. Rev. C*. 1977. Vol. 15. P. 84.
22. Kravvaris K., Volya A. Study of Nuclear Clustering from Ab Initio Perspective // *Phys. Rev. Lett.* 2017. Vol. 119. P. 062501.
23. Volya A., Tchuvil'sky Y. M. Nuclear clustering using a modern shell model approach // *Phys. Rev. C*. 2015. Vol. 91. P. 044319.
24. Caurier E. Present status of shell model techniques // *Acta Physica Polonica B*. 1998. Vol. 30, no. 3. P. 705.
25. Tilley D. R., Cheves C. M., Godwina J. L. et al. Energy levels of light nuclei $A = 5$, $A = 6$, $A = 7$ // *Nuclear Physics A*. 2002. Vol. 708. P. 3.

Родкин Дмитрий Михайлович

Теоретическое описание кластеризованных состояний
легких ядер в рамках современных микроскопических
моделей

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать _____. Формат 60×84 1/16.

Усл. печ. л. _____. Тираж ? экз. Заказ ?.

Отпечатано в отделе

с готового оригинал-макета

адрес: