Федеральное государственное унитарное предприятие Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова

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

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель доктор физико-математических наук, профессор Чувильский Юрий Михайлович

Оглавление

Введ	цение	4
Глав	а 1. Модель ортогональных функций кластерных каналов	18
1.	1. Введение	18
1.	2. Формализм оболочечной модели ядра без инертного кора	21
1.	3. Потенциалы взаимодействия нуклонов в ab initio моделях	26
1.	4. Описание модели ортогональных функций кластерных каналов .	30
1.	5. Выводы	47
Глав	а 2. Применение модели ортогональных функций кластер-	
H	ых каналов для расчетов полных энергий связи и спектроско-	
Π	ических факторов основных и низколежащих состояний лег-	
K	их ядер	50
2.	1. Введение	50
2.	2. Расчет девятинуклонных систем ⁹ Ве и ⁹ В	52
2.	3. Расчеты полных энергий связи и мер кластеризации состояний	
	ядра ⁸ Ве	55
2.	4. Расчеты полных энергий связи и спектроскопических факторов	
	основного и нижних возбужденных состояний ядра ⁷ Li	64
2.	5. Выводы	69
Глав	а 3. Применение модели ортогональных функций кластер-	
H	ых каналов для расчетов асимптотических характеристик лег-	
K	их ядер	71
3.	1. Введение	71
3.	2. Результаты расчета нижнего резонанса $3/2^-$ ядра ⁵ He \ldots .	72
3.	3. Связанные и резонансные состояния ядра ⁷ Li	78
3.	4. Расчеты ширин нижних резонансных состояний ядра ⁸ Ве	88

3.5.	Выводы	 	 	 	97
Заклю	чение	 ••••	 	 10)0
Списон	к литературы	 	 	 10)6

Введение

Актуальность темы исследования. Исследование кластеризованных состояний является одним из важнейших направлений ядерной физики. Кластеризация представляет собой фрагментацию ядра на две или большее число многонуклонных подструктур. Другой аспект явления кластеризации относится к динамике ядерных реакций, поскольку кластеры формируют как входные, так и выходные каналы реакций. 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 коэфициентов 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 потенциал взаимодействия между нуклонами и рассматривающее исходное ядро и двухфрагментный канал реакции как A и $A_1 + A_2$ нуклонные системы, описание этих явлений было представлено в Модели Резонирующих Групп (МРГ) [1,2]. Обобщение развитых на ее основе представлений было слелано в монографии [3]. 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 (AB МРГ) [4], которая, в дальнейшем, была развита в работах [5–8]. Эта модель позволяет рассчитывать связанные состояния 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 [9, 10], Микроскопическая Кластерная Модель [11, 12], THSR-подход [13–15], метод Антисимметризованной Молекулярной Динамики [16] и метод Фермионной Молекулярной Динамики [17, 18]. В этих методиках кластерные свойства ядерных состояний и характеристики кластерных реакций получаются непосредственно из данных о нуклон-нуклонных взаимодействиях. Данные модели позволяют рассчитывать сильно кластеризованные состояния легких и средних ядер, подобных основным и нижним возбужденным состояниям 12 C, 16 O, 20 Ne и 40 Ca.

Также нельзя не упомянуть прочие эффективные методы описания структуры ядер, подобные методу Монте-Карло для функции Грина (Green Function's Monte Carlo) [19–22] и методу ядерных расчетов на решетке в рамках эффективной теории поля (Nuclear Lattice Effective Field Theory) [23, 24], с помощью которых можно также проводить расчеты структуры легких ядер, в том числе и кластеризованных.

Эра суперкомпьютеров предоставляет новые вычислительные возможности и выдвигает новые требования к подходам, используемым в теории кластерных явлений. 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) [25–30]. Данный метод сводится к решению А-нуклонного уравнения Шрёдингера на базисе, содержащем все возможные конфигурации А-нуклонных осцилляторных функций вплоть до уровня обрезания, определяемого максимальным суммарным числом осцилляторных квантов N_{tot}^{max}. Чаще всего используется *М*-схема, в которой эти функции записываются в форме детерминантов Слейтера (ДС) с фиксированной для каждого нуклона проекцией полного момента. Размерность базиса ДС в этой модели достигает порядка 10⁸⁻¹⁰ и ограничивается вычислительными возможностями компьютера или вычислительного кластера. Расчет волновых функций основных и низших возбужденных состояний сводится к нахождению собственных

5

функций и собственных значений матрицы оператора Гамильтониана в базисе ДС. Так как данная матрица характеризуется большими размерами и высокой степенью разреженности, то нахождение собственных функций и собственных векторов обычно осуществляется алгоритмом Ланцоша. Однако, размер базиса быстро растет с число 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 < 16. В целях уточнения теоретических предсказаний значений полной энергии связи состояний, зарядовых радиусов и подобных им величин был предложен метод экстраполяции [31], который, используя технологию нейронных сетей, позволяет оценивать значения этих величин в полных бесконечных базисах ДС. К недостаткам данной модели относятся трудности описания дальней асимптотики. Методы вычисления кластерных характеристик состояний ядер в модели NCSM до представленного в диссертации исследования не были проработаны.

Для улучшения точности расчетов в данной модели и применения ее для более тяжелых систем существует целый ряд ее обобщений, таких как методы Importace Truncation No-Core Shell Model (IT–NCSM) [32, 33], No-Core Monte-Carlo Shell Model (NCMCSM) [34], SU(3) No-Core Shell Model (SU(3)–NCSM) [35– 38]. Модель IT–NCSM позволяет проводить ab initio расчеты на большем по размерности базисе, применяя теорию возмущений. Модель NCMCSM с помощью метода Монте-Карло сводит задачу диагонализации на огромном ($\approx 10^{10}$) базисе ДС к диагонализации на базисе порядка 100 векторов, каждый из которых представляет собой линейную комбинацию ДС. Данная модель позволяет проводить расчеты даже некоторых средне-тяжелых ядер. Модель SU(3)–NCSM учитывает естественные симметрии A-нуклонной системы и уменьшает таким способом базис, что позволяет рассчитывать состояния, характеризующиеся больпим расстоянием между нуклонами, например нижние возбужденные состояния ¹²С. Также стоит упомянуть, что оболочечные расчеты можно проводить не только в осцилляторном, но и в других базисах, в том числе в базисе функций Гаусса [39].

Для расчетов в рамках данных моделей применяются реалистические NNи NNN-потенциалы. Нуклон-нуклонные потенциалы могут основываться на традиционной теории мезонного обмена (NijmegenX [40], CD Bonn [41]), обратной теории рассеяния [42] (JISP6 [43], JISP16 [44]) и на принципах квантовой хромодинамики (Daejeon16 [45], N^{x} LO NN [46]). Потенциалы, основанные на принципах квантовой хромодинамики, используют киральную эффективную теорию поля. В области низких энергий для аккуратного расчета нуклон-нуклонного потенциала требуется учитывать большое количество диаграмм при разложении по теории возмущений. На данный момент существуют NN- и NNN-потенциалы, учитывающие разложение вплоть до четвертого порядка и ведутся активные работы по созданию потенциалов, учитывающих вплоть до пятого порядка теории возмущений. В рамках квантовой хромодинамики допускается существование 3-х, 4-х и более частичных сил, учет которых приводит к серьезным усложнениям ab initio расчетов. Для минимизации их влияния используются фазово-эквивалентные преобразования, относительно которых лагранжиан инвариантен. Современные реалистические NN-и NNN-потенциалы позволяют проводить расчеты основных и нижних возбужденных состояний легких ядер и их результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Аb initio модели могут применятся не только для расчета полных энергий связи и спектров низко лежащих состояний, но и для описания свойств резонансов и ядерных реакций. Наиболее известные из них, предназначенные для описания систем с малым число частиц - методы уравнений Фадеева и Фадеева-Якубовского [47,48]. Для описания рассеяния в системах, содержащих четыре и большее число нуклонов, предложены метод гиперсферических гармоник [49] и метод интегральных преобразований Лоренца [50,51]. Существуют также подходы, которые заключаются в комбинировании NCSM и модели резонирующих групп (NCSM/RGM [52], NCSMC [53–55]). Данные методы подразумевают ab initio описание кластерных волновых функций, написанных в форме МРГ, и объединение в рамках общего базиса векторов МРГ и векторов NCSM. Эти подходы с успехом используются для описания как слабосвязанных состояний и резонансов, так и реакций с участием легких кластеров с массой $A_c \leq 3$.

Помимо указанных методов для описания непрерывного спектра и резонансных состояний был создан метод SS–HORSE (Single State Harmonic Oscillator Representation of Scattering Equations) [56–58], который базируется на анализе решений NCSM, проделанном в работах [59, 60], где было показано, что NCSM модель может генерировать состояния непрерывного спектра. В качестве первого этапа, в рамках этого метода, получается зависимость собственных значений E_{ν} гамильтониана NCSM от модельных параметров - параметра обрезания базиса N^{max} и параметра осцилляторных функций $\hbar\omega$. Вторым этапом является получение зависимости сдвига фаз от рассчитанной энергии состояния и получение параметров резонансов на ее основе. В рамках данного метода были рассчитаны характеристики резонансов ⁵He, ⁷He, ⁵Li и получено указание на существование резонанса в системе 4n [61], намек на который был получен в эксперименте [62].

В настоящей работе предлагается модель ортогональных функций кластерных каналов МОФКК–ССОFМ (Cluster Channel Orthogonal Functions Model), как способ ab initio описания кластеризованных слабосвязанных и резонансных состояний. Основными формальными компонентами созданной модели являются базис трансляционно-инвариантных волновых функций кластерных каналов, которые содержат NCSM рассчитанные волновые функции кластеров, и метод проектирования записанных в микроскопическом виде волновых функций ядер на базис кластерных волновых функций. Кластерные компоненты данного базиса получаются с применением технологии кластерных коэффициентов и представляют собой линейную комбинацию ДС. Эта особенность позволяет комбинировать в едином базисе кластерные компоненты и решения NCSM. Данная модель 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 волновых функций (ВФ) достаточным для описания свойств ядер, рассматриваемых в более простых подходах как системы с ярко выраженной кластеризацией. Для этого мы решаем А–нуклонное уравнение Шредингера как на базисе кластерных функций, используя все физически разумные каналы, так и на комбинированном базисе, включающем в себя кроме кластерных компонент еще и ряд решений NCSM (поляризационные члены).

Во-вторых, в рамках *ab initio* подходов, причем как учитывающих, так и не учитывающих в явном виде кластерные компоненты базиса, мы проводим вычисления спектроскопических факторов и кластерных формфакторов и применяем их для расчета асимптотических нормировочных коэффициентов 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 являются формально полными. Во втором случае полнота достигается включением в базис кластерных компонент (см. ниже формулу (1.20)), содержащих все возможные внутренние функции отдельных кластеров. При этом кластерный базис является неортогональным и даже переполненным. Кроме того, компоненты этих двух базисов, очевидно, не ортогональны. Поэтому мы ограничиваем список реальных физических каналов, называемых кластерными, только теми, которые содержат кластеры в связанных состояниях или в резонансных состояниях с относительно небольшой шириной, и проводим процедуру ортонормировки векторов общего базиса.

Вообще, работа с неортогональными базисными функциями требует не

только применения специфического формализма, но и аккуратного использования качественных определений и понятий. В частности, при обсуждении соотношения весов кластерных и "некластерных"компонент мы условно делим функции базиса на два класса: ВФ всех исследуемых кластерных каналов и все функции, ортогональные к ним. Такое деление приводит к получению меры кластеризации - величины необходимой для общей оценки уровня кластеризации выбранного ядерного состояния.

Также надо упомянуть определенные особенности расчетов асимптотических характеристик. В последовательном R-матричном подходе радиальный формфактор получается проектированием функции - решения A-нуклонной задачи в исследуемый канал: кластер + дочернее ядро. На следующем этапе данная функция сшивается с соответствующим асимптотике двухтельным решением. Однако, в работах [63, 64] была предложена концепция, согласно которой сопоставлять с решением двухтельного уравнения Шрёдингера надо не проекцию A-нуклонного решения в кластерный канал, а результат ее преобразования с помощью обменного ядра МРГ. В настоящее время эта концепция приобрела всеобщее признание [65, 66]. При корректном описании радиального формфактора на больших расстояниях эффект обменного ядра МРГ не играет большой роли, но при расчетах в моделях, основанных на NCSM, достичь аккуратного описания волновых функций на таких расстояниях невозможно. Это подчеркивает важность описанной выше концепции.

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 упомянутый выше математический аппарат кластерных коэффициентов (KK), развитый в работах [67–70], вследствие которого волновые функции каналов преобразуются в форму суперпозиций ДС и проходят процедуру ортогонализации вместе с поляризационными членами. Этот метод предоставляет разнообразные возможности для работы с широким спектров возбужденных и относительно тяжелых фрагментов. Отличаются и цели данной работы и работ [52–55, 71]. Нами изучаются структурные характеристики кластеризованных систем: полные энергии связи, спектры нижних возбужденных состояний ядер, спектроскопические факторы различных каналов фрагментации, асимптотические нормировочные коэффициенты связанных состояний и парциальные ширины распадов резонансов. А от метода SS-HORSE разработанный метод отличается универсализмом: он позволяет рассчитывать не только асимптотические характеристики, но и полные энергии связи и кластерные величины, подобные спектроскопическим факторам и кластерным формфакторам.

К настоящему моменту в рамках данного подхода были осуществлены расчеты спектров таких сильно кластеризованных систем как ⁷Li, ⁸Be, ⁹Be, ⁹B, проведен анализ влияния кластерных и некластерных компонент на полные энергии связи основных состояний, получены парциальные ширины распадов резонансов и асимптотические нормировочные коэффициенты связанных состояний основных и нижних возбужденных состояний ядер ⁷Li, ⁵He и ⁸Be.

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 и 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 моделировании кластеризованных систем чисто кластер-

ными 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 ⁷Li, ⁵He и ⁸Be находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. С учетом этого и сложностей экспериментального определения асимптотических нормировочных коэффициентов (АНК), а также невысокой точности других теоретических 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 метод 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 мето-

дики, 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 ⁷Li, ⁸Be, ⁹Be и ⁹B. 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 ⁸Ве, не являются чисто кластерными конфигурациями. Таким образом продемонстри-

ровано, 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 ⁷Li, ⁵He и ротационных состояний ядра ⁸Be. 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.

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 WNCP2017 (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 и 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.

Основное содержание работы изложено в трёх главах.

Глава 1 посвящена описанию методов модели ортогональных функций кластерных каналов ССОFM (Cluster Channel Orthogonal Functions Model). Описание начинается с разбора общеизвестной NCSM модели и теорий развитых на ее основе. Затем разбираются современные реалистические потенциалы нуклонного взаимодействия. Потом идет описание, собственно, модели ССОFM и ее сравнение с существующими ab initio моделями, применяющимися для решения близких по содержанию задач.

В главе 2 приводятся результаты расчетов с применением ССОFM и анализ полученных результатов для основных и нижних возбужденных состояний ядер 9 Be, 9 B, 7 Li и 8 Be.

Глава 3 посвящена результатам расчетов асимптотических величин с помощью модели CCOFM - асимптотических нормировочных коэффициентов связанных состояний и парциальных ширин распада резонансов основных и нижних возбужденных состояний ядер ⁷Li, ⁵He и ⁸Be.

В *заключении* представлены основные результаты и выводы данной работы.

Глава 1

Модель ортогональных функций кластерных каналов

1.1. Введение

На данный момент существует большое количество моделей в явно виде учитывающих кластеризацию при расчетах ядерных структур. В их число входят Алгебраическая Версия Модели Резонирующих Групп (AB MPГ) [5–8], Meтод Генераторных Координат [9,10], THSR-подход [13–15], методы Антисимметризованной Молекулярной Динамики [16] и Фермионной Молекулярной Динамики [17,18]. В рамках этих методов при решении А-нуклонного уравнения Шрёдингера волновые функции кластеров рассматриваются в минимальной конфигурации. В качестве примера продемонстрируем трансляционно-инвариантную волновую функцию α -кластера: $\psi = exp(-1/2\alpha \sum_{i=1}^{4} (r_i - R_\alpha)^2) * \epsilon_\alpha(s_K, t_K),$ где r_i – координаты нуклонов кластеров, а $\epsilon_{\alpha}(s_K, t_K)$ – функция описывающая спин и изоспин системы. Взаимодействие между нуклонами в данных моделях описывается с помощью эффективных феноменологических нуклон-нуклонных потенциалов с рядом свободных параметров. Данные методы позволяют корректно описывать спектры низколежащих уровней легких ядер и реакции с их участием. Заметим, что все эти методы a priori предполагают, что сильно кластеризованные системы можно полностью описывать как совокупность входящих в них кластеров.

На данный момент активно развиваются современные ab initio методы, описывающие легкие ядра. В этих методах напрямую решается А–нуклонное уравнение Шрёдингера, а все нуклоны считатся равноправными. Для описания взаимодействия между нуклонами прибегают к реалистическим нуклон-нуклонным потенциалам, которые основываются либо на традиционной теории мезонного обмена, либо на принципах квантовой хромодинамики, либо на данных о нуклон-нуклонном рассеянии. Базовой моделью в данном случае является NCSM, которая упоминалась выше. Данная модель подробно описывается в работах [25–30]. Она позволяет получать в явном виде волновые функции основных и нижних возбужденных состояний, а также ряд функций из непрерывного спектра. К явным недостаткам данной модели относятся чрезмерный рост базиса ДС при описании ядер с $A \ge 20$, трудности описания дальней асимптотики волновых функций также из-за чрезмерного роста базиса и сложности при вычислении кластерных характеристик состояний.

Для учета кластерных характеристик автором была разработана модель ортогональных функций кластерных каналов – Cluster Channel Orthogonal Functions Model (МОФКК – ССОFМ), которая позволяет учитывать кластерные характеристики в рамках ab initio подхода. Компоненты базиса волновых функций кластерных каналов рассматриваются в виде 1.20, представленном в четвертом разделе главы 1. Для расчета с помощью реалистических нуклон-нуклонных потенциалов кластерные волновые функции представляются в виде линейной комбинации детерминантов Слейтера, что делает их абсолютно идентичными, с вычислительной точки зрения, волновым функциям, созданным в рамках NCSM модели. Для осуществления этой операции к каждой из кластерных функций применяется преобразование Тальми-Мошинского, которое приводит функцию двух кластеров с некоторым относительным движением, заданном в виде набора осцилляторных функций к суперпозиции произведений функций кластеров с ненулевым движением по координатам их центров масс. Получение волновых функций кластеров с ненулевым движением по координате центра масс осуществляется с помощью метода вторичного квантования. Получившиеся кластерные волновые функции являются, в общем случае, неортогональными друг другу. Для решения уравнения Шрёдингера на таком базисе, его предварительно ортонормируют. В ходе данной операции в общем базисе можно объединить волновые функции различных кластерных каналов. Для более точного описания волновых функций ядер в базис включаются также волновые функции, рассчитанные с помощью NCSM модели. Преимуществом нашей модели является значительно более короткий список базисных векторов, не превышающий 100, в то время как базис NCSM модели равен числу используемых детерминантов Слейтера и составляет порядка 10^{8-10} .

Разработанный метод может применяться также для расчета спектроскопических факторов, кластерных и нуклонных формфакторов и асимптотических характеристик, получаемых на их основе, а именно асимптотических нормировочных коэффициентов связанных состояний и парциальных ширин распадов резонансов. Для этого осуществляется проектирование исходной волновой функции выбранного состояния на базис волновых функций определенного кластерного канала. Кластерные волновые функции определяются способом, аналогичному указанному выше. Исходная волновая функция состояния может быть рассчитана в рамках ССОFM модели, NCSM модели или любой другой модели, чье решение представляет собой суперпозицию А-нуклонных детерминантов Слейтера. Итогом проектирования является формфактор - волновая функция относительного движения фрагментов выбранного канала реакции в исходной волновой функции состояния и спектроскопический фактор - нормировка формфактора. Для определения асимптотических характеристик требуется сшивка полученного формфактора с соответствующим асимптотике решением двухчастичной задачи. Сшивка осуществляется методом равенства логарифмических производных в координатном пространстве. Для случая связанных состояний сшивка осуществляется с функцией Уиттекера, для резонансных состояний – с Кулоновскими функциями или со сферическими функциями Бесселя и Неймана.

Формализм оболочечной модели ядра без инертного кора

Базовой моделью для ab initio расчетов является оболочечная модель ядра без инертного кора (NCSM). В данной модели решение А–нуклонного уравнения Шрёдингера ищется в виде линейной комбинации детерминантов Слейтера (ДС):

$$\Psi_{i}^{A}(r_{1}, r_{2}, ..., r_{A}) = \sqrt{\frac{1}{A!}} \begin{vmatrix} \psi_{1}(r_{1}) & \psi_{1}(r_{2}) & ... & \psi_{1}(r_{A}) \\ \psi_{2}(r_{1}) & \psi_{2}(r_{2}) & ... & \psi_{2}(r_{A}) \\ ... & ... & ... & ... \\ \psi_{A}(r_{1}) & \psi_{A}(r_{2}) & ... & \psi_{A}(r_{A}) \end{vmatrix},$$
(1.1)

где волновые функции $\psi_i(r_j)$ являются осцилляторными функциями - решениями одночастичного уравнения Шрёдингера с потенциалом $U = m\omega^2 r^2/2$ с соответствующими квантовыми числами n_i, l_i, j_i, m_i . Осцилляторный базис выбирается ввиду того, что в данном базисе легко отделяется движение центра масс и расчет коэффициентов Тальми-Мошинского осуществляется по аналитической формуле. Данный базис является полным, то есть любую А-нуклонную антисимметричную функцию можно разложить по данному базису. Но данный базис является бесконечным, поэтому используется ограничение базиса, обычно выбираемое в виде $\sum_i (2 * n_i + l_i) \leq N_{min} + N_{extra}$, где N_{min} – минимально возможное суммарное число осцилляторных квантов А-нуклонной системы. В расчетах ДС представляется в виде операторов рождения нуклонов: $\Psi_i^A(r_1, r_2, ..., r_A) = a_{i,1}^+ a_{i,2}^+ ... a_{i,n}^+ >$. Базис ДС обычно рассматривается в М-схеме, где в базис отбираются те детерминанты, которые характеризуются определенной полной проекцией суммарного спина: $M = \sum_{i=1}^{N} m_i$.

На построенном таким образом базисе решается А-нуклонное уравнение Шрёдингера со следующим гамильтонианом, в котором могут учитываться также трехнуклонные и т. п. силы:

$$H = T + V = \sum_{i=1}^{A} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} V_{ij} + \sum_{i < j < k} V_{ijk}.$$
 (1.2)

Для учета движения центра масс используется метод штрафной функции $H' = H + \lambda H_{CM}$. Этот метод позволяет избавиться от решений с ненулевыми колебаниями центра масс при расчете основного и низких возбужденных состояний. Итоговый гамильтониан представляется в виде комбинации операторов рождения и уничтожения нуклонов:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} A_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \sum_{i < j,k < l} B_{ijkl} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_k a_l + \sum_{i < j < k,l < m < n} C_{ijklmn} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_k^{\dagger} a_l a_m a_n + \dots$$
(1.3)

Решение А-нуклонного уравнения Шрёдингера $\hat{H}\psi = E\psi$ сводится к нахождению собственных функций и собственных значений матрицы $\langle \Psi_i^A | \hat{H} | \Psi_j^A \rangle$. Размерность матрицы составляет порядка 10^{8-10} , число ненулевых элементов доходит до 10^{13} . Нахождение собственных функций и собственных значений данной матрицы не может быть осуществленно методом прямой диагонализации, применяются итерационные алгоритмы наподобие алгоритма Ланцоша [72]. Нахождение собственных функций в алгоритме Ланцоша начинается с произвольного вектора $|v_1 \rangle$ с нормой $\langle v_1 | v_1 \rangle = 1$ и коэффициентом $\beta_1 = 0$. Затем осуществляется N операций по следующему алгоритму:

$$1.|w_{i} >= A|v_{i} >$$

$$2.\alpha_{i} = \langle w_{i}|v_{i} >$$

$$3.|w_{i} >= |w_{i} > -\alpha_{i}|w_{i} > -\beta_{i}|v_{i} >$$

$$4.\beta_{i+1} = \sqrt{\langle w_{i}|w_{i} >}$$

$$5.|v_{i+1} >= |w_{i} > /\beta_{i+1}$$

Алгоритм Ланцоша позволяет находить с высокой точностью наибольшие по модулю собственные значения и собственные функции, что позволяет рассчитывать основные и низшие возбужденные состояния ядер. Результаты расчетов



Рис. 1.1. Результаты расчетов полной энергии связи основных состояний легких ядер, полученных в рамках NCSM модели (из работы [73]).

полной энергии связи основных состояний ядер в диапазоне от ⁴He до ¹²C, представленные на рис. 1.1, показывают хорошее согласие с экспериментальными результатами в случае расчета с применением потенциала, учитывающего разложение вплоть до второго порядка малости по теории возмущений. Расчеты полной энергии связи ядра ¹⁶O показывают пересвязку, по сравнению с экспериментальными результатами. Это может быть связано как со свойствами потенциала, на данный момент существуют парные нуклон-нуклонные потенциалы учитывающие большее число порядков по теории возмущений чем использованные в данном расчете, так и с необходимостью учета трех - и более частичных сил.

Недостаток модели NCSM заключается в быстром росте размерности ба-

зиса при увеличении числа нуклонов или при увеличении числа используемых оболочек. Для устранения подобного недостатка было создано несколько моделей на основе NCSM. В их числе модели Importace Truncation No-Core Shell Model (IT-NCSM) [32, 33], No-Core Monte-Carlo Shell Model (NCMCSM) [34, 74] и SU(3) No-Core Shell Model (SU(3)-NCSM) [35–38, 75].

Модель IT-NCSM позволяет проводить ab initio расчеты на большем по размерности базисе, применяя методы теории возмущений. В этой модели проводятся расчеты волновой функции $\Psi_{ref,N_{max}=x}$ в рамках NCSM вплоть до $N_{max} = x$. Расчет вплоть до $N_{max} = x + 2$ осуществляется с применением теории возмущений:

$$|\Psi_{ref,N_{max}=x+2,IT}\rangle = |\Psi_{ref,N_{max}=x}\rangle + \sum_{\nu \in N_{max}=x+2} \frac{\langle \psi_{\nu} | \hat{H} | \Psi_{ref,N_{max}=x}\rangle}{E_{\nu} - E_{ref,sp}} | \psi_{\nu} \rangle .$$
(1.4)

Данная модель с успехом применяется рядом исследовательских групп для уточнения расчетов NCSM для легких ядер.

В NCMCSM модели волновая функция $\Psi^{J^{\pi}M}$ ищется в виде линейной комбинации неортогональных функций с полным моментом J, четностью π и проекцией момента M:

$$|\Psi^{J^{\pi}M}\rangle = \sum_{n=1}^{N_b} f_n \sum_{K=-J}^{J} g_{nK} P^J_{MK} P^{\pi} |\phi_n\rangle, \qquad (1.5)$$

где N_b - число деформированных детерминантов Слейтера, P_{MK}^J , P^{π} - операторы проектирования на полный момент J и четность π . Деформированный детерминант Слейтера $|\phi_n\rangle$ определяется как $|\phi_n\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^+|\rangle$, где $a_i^+ = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} c_{\alpha}^+ D_{\alpha i}$. Коэффициент $D_{\alpha i}$ определяется с помощью метода Монте-Карло, используя результаты вычислений метода Хартри-Фока. Применение данного метода позволяет рассчитывать на значительно большем базисе, формальная размерность которого достигает 10^{30} детерминантов Слейтера [76]. Данный метод позволяет рассчитывать как в рамках NCSM расчетов со всеми активными нуклонами,

так и в расчетах с инертным кором и феноменологическим нуклон-нуклонным потенциалом.

В рамках SU(3)-NCSM модели базисные А-нуклонные вектора выбираются в виде

$$|\Psi_i\rangle = |\gamma; N(\lambda, \mu)\kappa L; (S_p S_n)S; JM \rangle, \qquad (1.6)$$

где S_p, S_n и S - спин протонов, нейтронов и полный спин системы, N -максимальное суммарное число квантов А–нуклонной системы, а (λ, μ) представляет собой сигнатуру, описывающую представление группы SU(3) (символ Эллиота). Полный орбитальный момент L складывается со спином S в полный момент J. Символ γ определяет дополнительные квантовые числа системы. Применение данного базиса, учитывающего естественные симметрии нуклонной системы, приводит к сильному сокращению размера базиса по сравнению с базисом NCSM модели, что позволяет проводить расчеты слабосвязанных систем, подобных возбужденным состояниям ¹²С. Наиболее интересным состоянием ¹²С является состояние 0⁺ с энергией возбуждения 7.65 МэВ (состояние Хойла). Оно играет огромную роль в нуклеосинтезе, определяя элементный состав Вселенной. В теоретических работах было показано, что состояние Хойла имеет увеличенные размеры, что затрудняет расчеты с применением NCSM модели. Предполагается, что это состояние сильно кластеризовано и представляет собой систему трех альфа-частиц. Результаты расчета возбужденных состояний ядра ¹²С представлены в работе [37]. Расчеты данного ядра в рамках обычной модели без кора возможны только вплоть до $N_{max} = 14 - 16$, в то время как расчеты в SU(3)-NCSM модели достигают $N_{max} = 20$, что приводит к лучшей сходимости по энергиям возбужденных состояний и к лучшему описанию поведения волновой функции ядерной системы на дальних расстояниях.

Подводя итог вышесказанному, модель NCSM и ее ближашие аналоги, несмотря на ряд существенных недостатков, ограничивающих их применение, являются наиболее развитым инструментом для теоретических исследований свойств легких ядер.

1.3. Потенциалы взаимодействия нуклонов в ab initio моделях

Для расчетов в рамках данных моделей применяются реалистические нуклон-нуклонные потенциалы. Нуклон-нуклонные потенциалы могут основываться на традиционной теории мезонного обмена (NijmegenX [40], CD Bonn [41]), обратной теории рассеяния (JISP6 [43], JISP16 [44]) и на принципах квантовой хромодинамики (Daejeon16 [45], N^xLO NN [46]).

Среди потенциалов, использующих традиционную теорию мезонного обмена, наиболее известный и широко применяемый потенциал - charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential (CD-Bonn). Данный потенциал базируется на одномезонном обмене всеми типами мезонов с массой ниже массой нуклонов.

Лагранжиан, описывающий взаимодействие нуклонов с мезонами, состоит из следующих частей:

$$L_{\pi^0 NN} = -g_{\pi^0} \bar{\psi} i \gamma^5 \tau_3 \psi \varphi^{\pi^0} \tag{1.7}$$

$$L_{\pi^{\pm}NN} = -\sqrt{2}g_{\pi^{\pm}}\bar{\psi}i\gamma^{5}\tau_{\pm}\psi\varphi^{\pi^{\pm}}$$
(1.8)

$$L_{\sigma NN} = -g_{\sigma} \bar{\psi} \psi \varphi^{\sigma} \tag{1.9}$$

$$L_{\omega NN} = -g_{\omega} \bar{\psi} \gamma^{\mu} \psi \varphi^{\omega} \tag{1.10}$$

$$L_{\rho NN} = -g_{\rho} \bar{\psi} \gamma^{\mu} \tau \psi \varphi^{\rho}_{\mu} - \frac{f_{\rho}}{4M_{\rho}} \bar{\psi} \sigma^{\mu\nu} \tau \psi (\partial_{\mu} \varphi^{(\rho)}_{\nu} - \partial_{\nu} \varphi^{(\rho)}_{\mu})$$
(1.11)

В качестве примера продемонстрируем получающийся на основе $L_{\pi^0 NN}$ нуклон-нуклонный потенциал, который является составной частью итогового потенциала:

$$V_{\pi^{0}}(q',q) = -\frac{g_{\pi^{0}}^{2}}{4M^{2}} \frac{(E'+M)(E+M)}{(q'-q)^{2}+m_{\pi^{0}}^{2}} \left(\frac{\sigma_{1}q'}{E'+M} - \frac{\sigma_{1}q}{E+M}\right) * \left(\frac{\sigma_{2}q'}{E'+M} - \frac{\sigma_{2}q}{E+M}\right).$$
(1.12)

Константы $g_{\pi^0}, g_{\pi^{\pm}}, g_{\sigma}, g_{\omega}, g_{\rho}$ определяются эмпирическим способом, на основе данных о нуклон-нуклонном рассеивании и энергии связи дейтрона. Этот потенциал активно используется для описания основных и нижних возбужденных состояний легких ядер, хотя его точность уступает более современным потенциалам.

Потенциалы, применяющие обратную теорию рассеяния, базируются на методе обратной J-матрицы. В этом методе записывается уравнение Шредингера для волновой функции относительного движения фрагментов:

$$H^{l}\Psi_{lm}(E,r) = E\Psi_{lm}(E,r),$$
 (1.13)

где волновая функция $\Psi_{lm}(E,r)$ ищется в виде линейной комбинации осцилляторных функций: $\Psi_{lm}(E,r) = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\inf} a_{nl}(E) R_{nl}(r) Y_{lm}(r).$

На этом базисе уравнение Шредингера приводится к алгебраическому виду:

$$\sum_{n'=0}^{\inf} (T_{nn'}^l + V_{nn'}^l - \delta_{nn'}E)a_{n'l}(E) = 0.$$
(1.14)

Во внешней области, где $V_{nn'}^l = 0$, данное уравнение принимает вид:

$$T_{n,n-1}^{l}a_{n-1,l}(E) + (T_{nn}^{l} - E)a_{nl}(E) + T_{n,n+1}^{l}a_{n+1,l}(E) = 0.$$
(1.15)

Любое решение этого уравнения является суперпозицией регулярного и нерегулярного решений: $a_{nl}(E) = cos(\delta(E))S_{nl}(E) + sin(\delta(E))C_{nl}(E)$. Для внутренней области, с $n < N_{ed}$, $a_{nl}(E) = G_{nN}T_{N,N+1}^{l}a_{N+1,l}(E)$, где G_{nN} выражается через собственные функции гамильтониана $G_{nN} = -\sum_{\lambda=0}^{N} \frac{\langle n|\lambda \rangle \langle \lambda|n' \rangle}{E_{\lambda}-E}$. Матричный элемент G_{NN} используется для получения фазы смещения $\delta(E)$.

$$tg(\delta(E)) = -\frac{S_{Nl}(E) - G_{NN}T_{N,N+1}^{l}S_{N+1,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN}T_{N,N+1}^{l}C_{N+1,l}(E)}$$
(1.16)

В методе прямой Ј-матрицы на основе рассчитанного набора собственных векторов находится фаза как функция от энергии, в методе обратной Ј-матрицы, исходя из данных о фазе, находится набор собственных векторов. Этот набор используется в дальнейшем для нахождения матричных элементов гамильтониана: $H_{nn}^{l} = \sum_{\lambda=0}^{N} E_{\lambda} < n | \lambda >^{2}, H_{n,n-1}^{l} = -\sqrt{\sum_{\lambda=0}^{N} E_{\lambda}^{2} < n | \lambda >^{2} - (H_{nn}^{l})^{2} - (H_{n,n+1}^{l})^{2}}.$ Они, в свою очередь используются для нахождения матричных элементов потенциала, что и является конечной целью данного метода. Потенциалы, основанные на данном методе, с успехом применяются для расчетов легких ядер вплоть до ¹⁶О.

Потенциалы, основанные на принципах квантовой хромодинамики, используют киральную эффективную теорию поля, которая в области низких энергий сводит цветные взаимодействия к взаимодействию между нуклонами и пионами. В данном приближении образованием Δ -изобар пренебрегают. В таком случае лагранжиан модели принимает следующий вид: $L_{eff} = L_{\pi\pi} + L_{\pi N} + L_{NN}$ и организуется в порядке возрастания порядков:

$$L_{\pi\pi} = L_{\pi\pi}^{(2)} + L_{\pi\pi}^{(4)} + \dots$$
 (1.17)

$$L_{\pi N} = L_{\pi N}^{(1)} + L_{\pi N}^{(2)} + L_{\pi N}^{(3)} + L_{\pi N}^{(4)} + \dots$$
(1.18)

$$L_{NN} = L_{NN}^{(2)} + L_{NN}^{(4)} + \dots, (1.19)$$

где верхний индекс относится к числу производных или массовых вставок пионов.



Рис. 1.2. Диаграммы Фейнмана, описывающие взаимодействия между нуклонами, разложенные по порядкам теории возмущения. Сплошная линия соответствует нуклонам, прерывистая пионам.

Нуклон-нуклонный потенциал основан на обмене пионами. Диаграммы Фейнмана, соответствующие нуклон-нуклонным взаимодействиям, представлены на рис. 1.2. Как следует из данной схемы, начиная со второго порядка малости по параметру $Q/\Lambda_{\chi},$ киральная эффективная теория поля допускает существование трех- и более частичных сил. В качесте примера, приведем значение нуклонного потенциала в рамках LO (лидирующего порядка): $V_{1\pi}^{(CI)}(\mathbf{p}',\mathbf{p}) =$ $-\frac{g_A^2}{4f_z^2}\tau_1\tau_2\frac{\sigma_1*\mathbf{q}\sigma_2*\mathbf{q}}{q^2+m_z^2}$. В большинстве нуклон-нуклонных потенциалов из-за трудностей расчетов с применением многочастичных сил используются фазово-эквивалентные преобразования относительно которых лагранжиан инвариантен, но которые минимизируют роль трех- и более частичных сил. Потенциалы, основанные на данной методике, подобные Daejeon16 [45], N^xLO NN [46], с успехом применяются для расчетов спектров легких ядер. Данная тематика активно развивается и стоит ожидать появления новых потенциалов, учитывающих большее число порядков по теории возмущений и лучше описывающих ядерные структуры. В текущей работе для расчетов применялись упомянутые выше потенциалы JISP16 и Daejeon16.

1.4. Описание модели ортогональных функций

кластерных каналов

Модель ортогональных функций кластерных каналов (CCOFM) базируется, как упоминалось во введении, на базисе трансляционно-инвариантных волновых функций кластерных каналов. Данный базис применяется для решения двух задач.

Во-первых, на его основе возможен анализ роли кластерных компонент в решениях А–нуклонного уравнения Шрёдингера с реалистическими NN–потенциалами и уточнение NCSM расчетов кластеризованных состояний.

Во-вторых, в рамках *ab initio* подходов можно проводить вычисления спектроскопических факторов (С Φ), кластерных и нуклонных формфакторов, которые характеризуют меру кластеризации [65] и могут быть использованы в расчетах асимптотических характеристик и сечений ядерных реакций.

Для первой из этих целей используется формализм, основой которого является базис, включающий в себя волновые функции различных кластерных каналов, отличающихся внутренними функциями фрагментов A₁ и A₂, а также A–нуклонные BФ, полученные в NCSM (по терминологии монографии [3] – поляризационные члены). Такой базис, в отличие от базиса NCSM, содержит небольшое число многокомпонентных векторов. Возможности подхода ограничиваются длиной векторов, то есть числом детерминантов Слейтера, на которые они раскладываются.

Как упоминалось ранее, компоненты данного базиса не являются ортогональными друг другу, и базис может оказаться переполненным. Для решения этой задачи данный базис подвергается процедуре ортонормировки.

Следует отметить, что подход, нацеленный на *ab initio* описание кластерных реакций, вызванных столкновениями легких ядер, был развит в упомянутых ранее работах [52,53]. Подход сочетает в себе методики МРГ, учитывающие кластерные свойства каналов реакций, и NCSM. Он был назван NCSM/MRG (МОБИК/МРГ). Поляризационные члены были введены в эту схему в работах [53–55]. Новая модель получила название Модели Оболочек Без Инертного Кора с Континуумом (МОБИКК – NCSMC).

Модель NCSMC имеет ряд общих черт с предложенной нами. В обоих подходах ВФ фрагментов и поляризационных членов рассчитываются в рамках *ab initio* подхода. Но используемый нами формализм отличается от NCSMC техникой преобразования кластерных ВФ в "оболочечный"вид. Для этого применяется математический аппарат кластерных коэффициентов (KK), развитый в работах [67–70], посредством которого волновые функции каналов преобразуются в суперпозиции детерминантов Слейтера. Разработанный нами метод, в отличие от модели NCSMC, предоставляет разнообразные возможности для работы с широким спектров возбужденных и относительно тяжелых фрагментов.

31

Расчеты в данной работе проводились с использованием современных NNпотенциалов JISP16 [44] и Daejeon16 [45], которые были упомянуты ранее. Данный метод применялся для расчетов спектров таких сильно кластеризованных систем как ⁸Be, ⁹Be, ⁹B, с его помощью проводился анализ влияния кластерных и некластерных компонент на полные энергии связи основных состояний, получались парциальные ширины распадов резонансов и асимптотические нормировочные коэффициенты связанных состояний основных и нижних возбужденных состояний ядер ⁷Li, ⁵He и ⁸Be.

1.4.1. Формализм ССОҒМ

Изложим формализм разработанной модели. Рассмотрим систему двух кластеров массой A₁ и A₂. Трансляционно-инвариантная волновая функция произвольного канала c_{κ} с заданным относительным движением фрагментов записывается в виде:

$$\Psi_{A,nl}^{c_{\kappa}} = \hat{A}\{\{\Psi_{A_1}^{\{k_1\}}\Psi_{A_2}^{\{k_2\}}\}_S \varphi_{nl}(\boldsymbol{\rho})\}_{JM_JTT_Z}, \qquad (1.20)$$

где $A = A_1 + A_2$; \hat{A} – антисимметризатор, $\Psi_{A_i}^{\{k_i\}}$ – трансляционно-инвариантные волновые функции фрагментов, рассчитанные в рамках NCSM; $\varphi_{nl}(\rho)$ – осцилляторная ВФ относительного движения. Волновая функция (1.20) характеризуется квантовыми числами ВФ кластеров $\{k_i\}$, а также числами n, l, J, M_J, S, T, T_Z . Данная функция является антисимметризованной, но не нормированной.

Для того, чтобы использовать хорошо развитые и весьма удобные для вычислений методы NCSM, требуется построить сохраняющий свойства функции (1.20) аналог, выражаемый в виде линейной комбинации детерминантов Слейтера, содержащих однонуклонные волновые функции осцилляторного базиса, выраженные в координатах лабораторной системы отсчета. В качестве аналога используется функция (1.20) домноженная на функцию нулевых колебаний центра масс.

$$\Psi_{A,nl}^{SD,c_{\kappa}} = \Phi_{000}(\boldsymbol{R})\Psi_{A,nl}^{c_{\kappa}} = \hat{A}\{\Phi_{000}(\boldsymbol{R})\{\Psi_{A_{1}}^{\{k_{1}\}}\Psi_{A_{2}}^{\{k_{2}\}}\}_{S}\varphi_{nl}(\boldsymbol{\rho})\}_{JM_{J}TT_{Z}}$$
(1.21)

Домножение на функцию движения центра масс является коммутативной операцией с операцией антисимметризации, поэтому функцию движения центра масс можно внести под знак антисимметризации (1.21). На следующем этапе переходим в формуле (1.21) к представлению с определенными проекциями спинов кластеров:

$$\hat{A}\{\Phi_{000}(\boldsymbol{R})\{\Psi_{A_{1}}^{\{k_{1}\}}\Psi_{A_{2}}^{\{k_{2}\}}\}_{S}\varphi_{nl}(\boldsymbol{\rho})\}_{JM_{J}TT_{Z}} = \\ \hat{A}\{\Phi_{000}(\boldsymbol{R})\sum_{m,M_{S},M_{J_{1}},M_{J_{2}}} C_{lmSM_{S}}^{JM_{J}} C_{J_{1}M_{J_{1}}J_{2}M_{J_{2}}}^{SM_{S}} \Psi_{A_{1}T_{1}T_{Z_{1}}}^{\{k_{1}J_{1}M_{J_{1}}\}}\Psi_{A_{2}T_{2}T_{Z_{2}}}^{\{k_{2}J_{2}M_{J_{2}}\}}\varphi_{nlm}(\boldsymbol{\rho})\}.$$
(1.22)

Затем осуществляется преобразование Тальми-Мошинского произведения функций $\Phi_{000}(\mathbf{R})\varphi_{nlm}(\boldsymbol{\rho})$ к волновым функциям от координат центров масс фрагментов [77]:

$$\Phi_{000}(\mathbf{R})\varphi_{nlm}(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{N_i, L_i, M_i} \left\langle \begin{array}{c} 000 \\ nlm \end{array} \middle| \begin{array}{c} N_1, L_1, M_1 \\ N_2, L_2, M_2 \end{array} \right\rangle$$

$$\Phi_{N_1, L_1, M_1}^{A_1}(\mathbf{R}_1) \Phi_{N_2, L_2, M_2}^{A_2}(\mathbf{R}_2).$$
(1.23)

В результате ВФ (1.21) принимает вид:

$$\Psi_{A,nl}^{SD,c_{\kappa}} = \sum_{m,M_S,M_{J_1},M_{J_2}} C_{lmSM_S}^{JM_J} C_{J_1M_{J_1}J_2M_{J_2}}^{SM_S} \sum_{N_i,L_i,M_i} \left\langle \begin{array}{c} 000 \\ nlm \\ nlm \\ N_2,L_2,M_2 \end{array} \right\rangle$$

$$\hat{A} \{ \Phi_{N_1,L_1,M_1}^{A_1}(\boldsymbol{R_1}) \Psi_{A_1}^{\{k_1\}} \Phi_{N_2,L_2,M_2}^{A_2}(\boldsymbol{R_2}) \Psi_{A_2}^{\{k_2\}} \}.$$

$$(1.24)$$

Ключевой элемент формализма – преобразование волновых функций, относящихся к каждому кластеру, в линейную комбинацию ДС:

$$\Phi_{N_i,L_i,M_i}^{A_i}(\mathbf{R}_i)\Psi_{A_i}^{c_{\kappa}} = \sum_k X_{N_i,L_i,M_i}^{A_i(k)}\Psi_{A_i(k)}^{SD}$$
(1.25)

Перекрытие волновых функций

$$X_{N_{i},L_{i},M_{i}}^{A_{i}(k)} = <\Psi_{A_{i}(k)}^{SD} |\Phi_{N_{i},L_{i},M_{i}}^{A_{i}}(\boldsymbol{R}_{i})\Psi_{A_{i}}^{c_{\kappa}} >$$
(1.26)

называется кластерным коэффициентом (КК). В работах [67–69] и монографии [70] представлено большое количество разнообразных методик вычисления КК. Самая общая схема основывается на использовании метода вторичного квантования осцилляторных квантов. В общей схеме волновая функция движения центра масс представляется в виде

$$\Phi_{N_i,L_i,M_i}^{A_i}(\boldsymbol{R_i}) = N_{N_i,L_i}(\hat{\boldsymbol{\mu}}^{\dagger})^{N_i - L_i} Y_{L_i,M_i}(\hat{\boldsymbol{\mu}}^{\dagger}) \Phi_{000}^{A_i}(\boldsymbol{R_i}), \qquad (1.27)$$

где $\hat{\mu}^{\dagger}$ – оператор рождения осцилляторного кванта по координате центра масс.

Таким образом КК записывается в виде матричного элемента тензорного оператора, представленного в формуле (1.27):

$$< \Psi_{A_{i}(k)}^{SD} |\Phi_{N_{i},L_{i},M_{i}}(\boldsymbol{R}_{i})\Psi_{A_{i}}^{\{k_{i}\}} > = N_{N_{i},L_{i}} \left\langle \Psi_{A_{i}(k)}^{SD} \right|$$

$$(\hat{\boldsymbol{\mu}}^{\dagger})^{N_{i}-L_{i}}Y_{L_{i},M_{i}}(\hat{\boldsymbol{\mu}}^{\dagger}) \left| \Phi_{000}^{A_{i}}(\boldsymbol{R}_{i})\Psi_{A_{i}}^{c_{\kappa}} \right\rangle$$

$$(1.28)$$

Представим метод расчета кластерных коэффициентов, примененный в модели CCOFM. Оператор рождения осцилляторного кванта по координате центра масс можно выразить через одночастичные операторы рождения и уничтожения следующим способом:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\mathbf{R}}{\mathbf{R}_0} + i\frac{\mathbf{P}}{\mathbf{P}_0}\right) = \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{i=1}^{A} \boldsymbol{a}_i^{\dagger}.$$
(1.29)

Таким образом оператор рождения осцилляторного кванта по координате центра масс можно применить к любой волновой функции, представимой в виде линейной комбинации ДС. Волновые функции кластеров с нулевыми колебаниями по координате центра масс $\Phi_{000}^{A_i}(\mathbf{R}_i)\Psi_{A_i}^{c_{\kappa}}$ представимы в виде линейных комбинаций ДС. В настоящем подходе для нахождения волновых функций $\Phi_{NLM}^{A_i}(\mathbf{R}_i)\Psi_{A_i}^{c_{\kappa}}$ с N+1 суммарным квантом возбуждения по координате центра масс через волновые функции кластеров с N суммарным квантом возбуждения используется система уравнений

$$\mu_{q}^{\dagger} |\Phi_{NLM}^{A_{i}}(\boldsymbol{R}_{i})\Psi_{A_{i}}^{c_{\kappa}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{i=1}^{A} a_{iq}^{\dagger} |\Phi_{NLM}^{A_{i}}(\boldsymbol{R}_{i})\Psi_{A_{i}}^{c_{\kappa}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2L+3}} C_{(L+1)(M+q)}^{LM1q} \langle NL+1||\mu^{+}||NL\rangle |\Phi_{N(L+1)(M+q)}^{A_{i}}(\boldsymbol{R}_{i})\Psi_{A_{i}}^{c_{\kappa}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2L-1}} C_{(L-1)(M+q)}^{LM1q} \langle (N+1)(L-1)||\mu^{+}||NL\rangle |\Phi_{(N+1)(L-1)(M+q)}^{A_{i}}(\boldsymbol{R}_{i})\Psi_{A_{i}}^{c_{\kappa}}\rangle, \tag{1.30}$$

для q, n, l, m : 2n + l = N, основываясь на которой можно получить все требуемые волновые функции с N+1 суммарным квантом возбуждения по координате центра масс. В итоге, получаем наборы функций $\Phi_{N_i,L_i,M_i}^{A_i}(\mathbf{R}_i)\Psi_{A_i}^{c_{\kappa}}$, необходимых для расчета функций исходного базиса $\Psi_{A,nl}^{SD,c_{\kappa}}$. В отличие от оригинальной работы [78], где трансляционно-инвариантные волновые функции записываются в координатах Якоби, в нашем формализме выражение

$$\Psi_{A,nl}^{c_{\kappa}} = \Psi_{A,nl}^{SD,c_{\kappa}} / \Phi_{000}^{A}(\boldsymbol{R})$$
(1.31)

рассматривается как определение этих функций. В итоге, приведенные выше формулы определяют алгоритм построения трансляционно-инвариантных волновых функций кластерных каналов.

Как отмечалось выше, волновые функции кластерных компонент (1.20) одного и того же канала c_{κ} с различающимися числами n, а также относящихся к разным каналам, не ортогональны. К тому же, все эти функции не ортогональны поляризационным членам, полученным в ходе NCSM расчетов. Таким образом, следующий шаг состоит в построении базиса ортонормированных функций, включающего в себя как кластерные функции нескольких каналов, так и поляризационные члены. Ортонормированный базис получается в рамках процедуры диагонализации матрицы

$$\left\| \begin{array}{c} \left[\left\langle \Psi_{pol}^{(j)} \middle| \Psi_{pol}^{(j')} \right\rangle \right] & \left[\left\langle \Psi_{pol}^{(j)} \middle| \Psi_{A,nl}^{SD,c_{\kappa}} \right\rangle \right] \\ \left[\left\langle \Psi_{pol}^{(j')} \middle| \Psi_{A,n'l'}^{SD,c_{\kappa'}} \right\rangle \right] & \left[\left\langle \Psi_{A,n'l'}^{SD,c_{\kappa'}} \middle| \Psi_{A,nl}^{SD,c_{\kappa}} \right\rangle \right] \end{array} \right\|,$$
(1.32)

в которой квадратными скобками обозначаются субматрицы. Поскольку волновые функции каналов, построенные согласно выражениям (1.20 – 1.30), представлены в виде линейных комбинаций детерминантов Слейтера, то собственные вектора этой матрицы, нормированные на ее собственные значения формируют итоговый базис, каждый элемент которого нормирован на единицу, ортогонален всем прочим и представляет собой линейную комбинацию ДС.

В силу этого расчет в данном базисе матричных элементов кинетической и потенциальной энергии, а также других величин, принципиально не отличается от расчета матричных элементов модели NCSM. Поэтому в предложенном подходе можно использовать произвольный микроскопический гамильтониан, *ab initio* или эффективный. Описанный подход обладает высокой степенью гибкости благодаря свободе выбора: числа кластерных каналов и поляризационных членов, размерностей пространств А-, А₁-, А₂-нуклонных ВФ и функций относительного движения. Он позволяет комбинировать в общем базисе с решениями NCSM модели волновые функции кластерных каналов с кластерами как в минимальной оболочечной конфигурации, так и с их реалистическим описанием. Это свойство позволяет проводить тщательный анализ роли кластерных компонент в волновой функции кластеризованного слабосвязанного или резонансного состояния, что и будет показано в следующей главе.

Описанный выше математический аппарат является также основным элементом формализма вычисления спектроскопических факторов (СФ) и кластерных и нуклонных формфакторов произвольного канала любого, представимого в виде суперпозиции детерминантов Слейтера, 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 ортонормирован-
ными между собой функциями кластерного канала. Эти функции получаются путем диагонализации субсубматрицы правой-нижней субматрицы матрицы (1.32), ограниченной условием $\kappa = \kappa'$. Эта субсубматрица (матрица обменного ядра МРГ) может быть записана как

$$||N_{nn'}|| = \langle \Psi_{A_1}^{c_{\kappa}} \varphi_{nl}(\boldsymbol{\rho}) \Psi_{A_2}^{c_{\kappa}} | \hat{A}^2 | \Psi_{A_1}^{c_{\kappa}} \varphi_{n'l}(\boldsymbol{\rho}) \Psi_{A_2}^{c_{\kappa}} \rangle, \qquad (1.33)$$

После диагонализации её собственные значения и собственные вектора выражаются в форме

$$\Psi_{A,l,k}^{c_{\kappa}} = \hat{A}\{\{\Psi_{A_{1}}^{c_{\kappa}}\Psi_{A_{2}}^{c_{\kappa}}\}_{S} f_{l}^{k}(\boldsymbol{\rho})\}, \qquad (1.34)$$

$$\varepsilon_{\kappa} = <\hat{A}\{\Psi_{A_{1}}^{c_{\kappa}}f_{l}^{k}(\boldsymbol{\rho})\Psi_{A_{2}}^{c_{\kappa}}\}|\hat{1}|\hat{A}\{\Psi_{A_{1}}^{c_{\kappa}}f_{l}^{k}(\boldsymbol{\rho})\Psi_{A_{2}}^{c_{\kappa}}\}>, \qquad (1.35)$$

где

$$f_l^k(\boldsymbol{\rho}) = \sum_n B_{nl}^k \varphi_{nl}(\boldsymbol{\rho}).$$
(1.36)

В данном методе осцилляторные амплитуды кластерного(нуклонного) формфактора волновой состояния Ψ_A определяем, как:

$$C_{AA_1A_2}^{nl} = \langle \hat{A} \{ \Psi_{A_1}^{c_\kappa} \Psi_{A_2}^{c_\kappa} \varphi_{nl}(\boldsymbol{\rho}) \} | \Psi_A \rangle .$$

$$(1.37)$$

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

$$F_A^{c_\kappa}(\rho) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k}} < \Psi_{A,l,k}^{c_\kappa} | \Psi_A > f_l^k(\rho), \qquad (1.38)$$

а при перерасчете через осцилляторные амплитуды кластерный формфактор представляется в следующей форме:

$$F_{A}^{c_{\kappa}}(\rho) = \sum_{k} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{k}}} \sum_{n,n'} C_{AA_{1}A_{2}}^{n'l} B_{nl}^{k} B_{n'l}^{k} \varphi_{nl}(\rho).$$
(1.39)

Спектроскопический фактор, как нормировка кластерного формфактора, в таком случае, принимает вид

$$S_{l}^{\kappa} = \int |F_{A}^{c_{\kappa}}(\rho)|^{2} \rho^{2} d\rho = \sum_{k} \varepsilon_{k}^{-1} \sum_{nn'} C_{AA_{1}A_{2}}^{nl} C_{AA_{1}A_{2}}^{n'l} B_{nl}^{k} B_{n'l}^{k}, \qquad (1.40)$$

Это определение полностью эквивалентно предложенному в работе [63] (так называемый "новый"спектроскопический фактор). В отличие от традиционного определения "новый"СФ характеризует суммарный вклад в решение *А*-нуклонного уравнения Шрёдингера компонент вида (1.20), ортонормированных представленной процедурой. Аргументация необходимости использовать его для описания ядерных распадов и реакций представлена в обзорах [65, 66]. В работах [79–81] демонстрируется, что за счет корректного определения снимается резкое противоречие между результатами теоретических расчетов сечений реакций выбивания и передачи α-кластеров с экспериментальными данными. В работе [65] показано, что именно "новый"СФ следует рассматривать как меру кластеризации ядерного состояния.

Вычисление ab initio значений спектроскопических факторов и кластерных формфакторов произвольных каналов может служить основой для точного описания реакций распада, слияния легких ядер, реакций 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 точного решения с соответствующим асимптотике двухтельным 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 нейтронного гало или электрически нейтрального кластера асимптотикой являются функции Неймана и Бесселя.

Для объяснения метода воспользуемся случаем распада резонанса в ка-

нал с заряженными кластерами. Для узких резонансов можно воспользоваться тем обстоятельством, что для таких резонансов существует достаточно широкая область расстояний, на которой ядерное притяжение пренебрежимо мало, но высота барьера значительно превосходит энергию распада. Для всех точек этой области ρ_{in} имеет смысл соотношение $F_l(\rho_{in}) << G_l(\rho_{in})$. 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 используется условие равенства логарифмических производных:

$$\frac{dF_A^{c_\kappa}(\rho_{sh})/d\rho_{sh}}{F_A^{c_\kappa}(\rho_{sh})} = \frac{dG_l(\rho_{sh})/d\rho_{sh}}{G_l(\rho_{sh})}.$$
(1.41)

Парциальная ширина распада по выбранному каналу c_{κ} выражается как

$$\Gamma = \frac{\hbar^2}{\mu k} \left(\frac{F_A^{c_\kappa}(\rho_{sh})}{G_l(\rho_{sh})}\right)^2. \tag{1.42}$$

Асимптотическая характеристика связанного состояния - асимптотический нормировочный коэффициент $A^{c_{\kappa}}$ определяется сравнением величины кластерного формфактора с величиной нерегулярной функции Уиттекера в точке сшивки:

$$A^{c_{\kappa}} = \rho_{sh} F_A^{c_{\kappa}}(\rho_{sh}) / W_{-\eta, l+1/2}(2k\rho_{sh}).$$
(1.43)

Представленный формализм ССОFM модели в рамках общего ab initio подхода без привлечения дополнительных предположений и феноменологических постоянных позволяет с хорошей точностью описывать как полные энергии связи кластеризованных состояний легких ядер, так и кластерные и асимптотические характеристики, как связанных, так и 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 ядерные структуры, так и ядерные реакции.

1.4.2. Сравнение с родственными методами

Кроме созданного нами ab initio метода одновременного расчета полных энергий связи и кластерных, и асимптотических характеристик кластеризованных состояний легких ядер существует другие подходы, 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. Один из таких подходов заключается в комбинировании NCSM и модели резонирующих групп (модели NCSM/RGM [52] и NCSMC [53]). Данный подход подразумевает ab initio описание волновых функций кластеров векторов MPF и объединение в рамках общего базиса векторов MPF и векторов NCSM. Эти подходы с успехом используются для описания как слабосвязанных состояний и резонансов, так и реакций с легкими кластерами.

В подходе NCSM/RGM базисными функциями являются $|\Psi_A^{J^{\pi}T}>$, где

$$|\Psi_{A}^{J^{\pi}T}\rangle = \sum_{\nu} \int dr r^{2} \frac{\gamma_{\nu}(r)}{r} \hat{A}_{\nu} |\Psi_{\nu r}^{J^{\pi}T}\rangle .$$
(1.44)

Функции канала $|\Psi_{\nu r}^{J^{\pi}T}\rangle$ содержат (A-a)- и а-нуклонные функции кластеров с их угловыми моментами, четностями, изоспинами и дополнительными квантовыми числами: $I_i, \pi_i, T_i, \alpha_i$:

$$|\Psi_{\nu r}^{J^{\pi}T}\rangle = \left[(|A - a\alpha_1 I_1^{\pi_1} T_1 \rangle |a\alpha_2 I_2^{\pi_2} T_2 \rangle)^{sT} Y_l(r_{A-a,a}) \right]^{J^{\pi}T} \frac{\delta(r - r_{A-a,a})}{r_{A-a,a}}.$$
 (1.45)

Относительное движение кластеров описывается переменной

$$\mathbf{r}_{A-a,a} = \frac{1}{A-a} \sum_{i=1}^{A-a} \mathbf{r}_i - \frac{1}{a} \sum_{j=A-a+1}^{A} \mathbf{r}_j.$$
 (1.46)

Неизвестная волновая функция $\gamma_{\nu}(r)$ определяется через решение уравнения Шрёдингера в Гильбертовом пространстве функций $\hat{A}_{\nu}|\Psi_{\nu r}^{J^{\pi}T}>$:

$$\sum_{\nu} \int dr r^2 [H^{J^{\pi}T}_{\nu'\nu}(r',r) - E N^{J^{\pi}T}_{\nu'\nu}(r',r)] = 0, \qquad (1.47)$$

где

$$H^{J^{\pi}T}_{\nu'\nu}(r',r) = <\Psi^{J^{\pi}T}_{\nu'r'}|\hat{A}_{\nu'}\hat{H}\hat{A}_{\nu}|\Psi^{J^{\pi}T}_{\nu r}>, \qquad (1.48)$$

$$N_{\nu'\nu}^{J^{\pi}T}(r',r) = \langle \Psi_{\nu'r'}^{J^{\pi}T} | \hat{A}_{\nu'} \hat{A}_{\nu} | \Psi_{\nu r}^{J^{\pi}T} \rangle -$$
(1.49)

матрицы обменного ядра и ядра Гамильтониана. Оператор Гамильтониана в свою очередь равен

$$\hat{H} = \hat{T}_{rel} + \hat{V}_{rel} + \hat{V}_C(r) + \hat{H}_{A-a} + \hat{H}_a.$$
(1.50)

Волновые функции в модели NCSMC ищутся в виде линейной комбинации функций оболочечной модели(NCSM) и кластерных функций, подобных функциям NCSM/RGM:

$$|\Psi_A^{J^{\pi}T}\rangle = \sum_{\lambda} c_{\lambda} |A\lambda J^{\pi}T\rangle + \sum_{\nu} \int dr r^2 \frac{\gamma_{\nu}(r)}{r} \hat{A}_{\nu} |\Psi_{\nu r}^{J^{\pi}T}\rangle.$$
(1.51)

Построенный таким образом базис способен эффективно описывать как связанные, так и резонансные состояния. Это следует из того, что NCSM решения хорошо описывают ядерную структуру на коротких и средних дистанциях, в то время как кластерные члены хорошо описывают поведение волновой функции на дальних расстояниях.

Уравнение Шрёдингера в данном базисе приходит к следующему виду:

$$\begin{pmatrix} H_{NCSM} & h_{\lambda\nu} \\ h_{\lambda\nu} & H_{RGM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 1 & g_{\lambda\nu} \\ g_{\lambda\nu} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ \chi \end{pmatrix}.$$
(1.52)

Интерференционные элементы матрицы гамильтониана равны

$$h_{\lambda\nu} = \sum_{\nu'} \int dr' r'^2 < A\lambda J^{\pi} T |\hat{H}\hat{A}_{\nu'}| \Psi_{\nu',r'}^{J^{\pi}T} > N_{\nu',\nu}^{-1/2}(r',r), \qquad (1.53)$$

а интерференционные элементы матрицы обменного ядра равны в свою очередь

$$g_{\lambda\nu} = \sum_{\nu'} \int dr' r'^2 < A\lambda J^{\pi} T \hat{|} A_{\nu'} \Psi_{\nu',r'}^{J^{\pi}T} > N_{\nu',\nu}^{-1/2}(r',r).$$
(1.54)

На больших дистанциях кластеры взаимодействуют только через кулоновское взаимодействие. Во внешней области с $r \geq r_0$ радиальная волновая функция принимает вид $\mu_{\nu}^{J^{\pi}T}(r) = C_{\nu}^{J^{\pi}T}W_l(\eta_{\nu},\kappa_{\nu}r)$, где $W_l(\eta_{\nu},\kappa_{\nu}r)$ - функция Уиттекера в случае связанного состояния и $\mu_{\nu}^{J^{\pi}T}(r) = \frac{i}{2}\vartheta_{\nu}^{-1/2}[\delta_{\nu i}H_l^-(\eta_{\nu},\kappa_{\nu}r) - S_{J^{\pi}T}^{\nu i}H_l^+(\eta_{\nu},\kappa_{\nu}r)]$, где $H_l^{+-}(\eta_{\nu},\kappa_{\nu}r)$ - регулярная и нерегулярная функция Кулона для относительного движения кластеров и функции Неймана и Бесселя для нейтронного гало в случае когда рассматривается состояние непрерывного спектра. Сшивка между внутренней и внешней областью осуществляется путем решения уравнения Блоха-Шрёдингера:

$$(\hat{H} + \hat{L} - E) \begin{pmatrix} c \\ \chi \end{pmatrix} = \hat{L} \begin{pmatrix} c \\ \chi \end{pmatrix}, \qquad (1.55)$$

где \hat{L} - Блоховский оператор, равный в свою очередь

$$\hat{L} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2\mu_{\nu}} \delta(r-a)(\frac{d}{dr} - \frac{B_{\nu}}{r}) \end{bmatrix}.$$
(1.56)

Исходя из данного уравнения для каждого значения энергии находится значение S-матрицы и получается значение фазы смещения δ , что приводится



Рис. 1.3. Расчет фазы для системы ⁴He+n в методе SS HORSE для потенциалов JISP16 и Daejeon16. (из работы [58])

к получению функции $\delta(E_{kin})$. Исходя из данной функции $\delta(E_{kin})$ можно получить парциальную ширину данного резонанса. В итоге методы NCSM/RGM и NCSMC оказываются довольно универсальными и годятся для расчета как энергий связи основных и нижних возбужденных состояний, так и для получения парциальных ширин резонансов и реакций с участием легких ядер. Недостаток данного метода заключается в особенностях расчета матричных элементов обменного ядра и ядра гамильтониана, которые легко рассчитываются для системы содержащий легкий кластер или нуклонное гало, но довольно трудно реализуемые для систем с кластерами равной массой, подобным кластеризованной системе ⁸Be, которая представляет собой систему $\alpha + \alpha$. В данных случаях метод ССОFM имеет определенные преимущества.

Помимо описанного выше метода для описания непрерывного спектра и резонансных состояний существует метод SS-HORSE (Single State Harmonic

Oscillator Representation of Scattering Equations) [56, 57]. Этот метод базируется на анализе решений NCSM, сделанном в работах [59,60], где было показано, что NCSM модель может генерировать состояния непрерывного спектра. В качестве первого этапа в рамках этого метода получается зависимость собственных значений E_{ν} гамильтониана NCSM от модельных параметров - параметра обрезания базиса N и параметра осцилляторных функций $\hbar\omega$. Вторым этапом является нахождение S-матрицы в интервале энергий, полученном при вычислении собственных энергий NCSM E_{ν} для различных значений параметров базиса N_{max} и $\hbar\omega$. В ходе третьего этапа, основываясь на низкоэнергетическом приближении S-матрицы, вычисляются сдвиги фаз $\delta_l(E)$ и на основе их получаются значения энергий резонансов E_r и их ширин распада Γ .

Формализм данного метода заключается в следующем. В двухтельной задаче волновая функция относительного движения удовлетворяет радиальному уравнению Шрёдингера:

$$H^{l}\mu_{l}(k,r) = E\mu_{l}(k,r).$$
(1.57)

Решение этого уравнения ищется в виде разложения по бесконечному набору осцилляторных функций:

$$\mu_l(k,r) = \sum_{N=N_0, N_0+2, \dots} a_{Nl}(k) R_N^l(r).$$
(1.58)

Подстановка данного разложения в уравнение (1.57) приводит к бесконечной системе алгебраических уравнений:

$$\sum_{N'=N_0,N_0+2,\dots} (H^l_{N,N'} - \delta_{NN'}E)a_{N'l}(k) = 0, N = N_0, N_0 + 2, \dots$$
(1.59)

Во внешней области (при $N \ge N_r$) $V_{NN'}^l = 0$, тогда бесконечная система уравнений для $N \ge N_r$ приходит к виду:



Рис. 1.4. Расчет фазы для системы 4n в методе SS HORSE. (из работы [61]).

$$T_{N,N-2}^{l}a_{N-2,l}^{as}(k) + (T_{NN}^{l} - E)a_{Nl}^{as}(k) + T_{N,N+2}^{l}a_{N+2,l}^{as}(k) = 0.$$
(1.60)

Исходя из данных уравнений получается формула для сдвига фаз рассеяния:

$$tg\delta_l(E) = -\frac{S_{Nl}(E) - G_{NN}(E)T_{N,N+2}^l S_{N+2,l}(E)}{C_{Nl}(E) - G_{NN}(E)T_{N,N+2}^l C_{N+2,l}(E)},$$
(1.61)

где

$$G_{NN}(E) = -\sum_{\nu=0}^{N} \frac{\langle \nu | Nl \rangle \langle Nl | \nu \rangle}{E_{\nu} - E}.$$
(1.62)

Отметим, что уравнение для $G_{NN}(E)$ включает в себя сумму по всем собственным энергиям с данными значениями спина и четности, то есть миллионы состояний в современных расчетах в NCSM. К сожалению, невозможно ограничиться небольшим набором состояний даже при энергии Е близкой к E_{ν} , так как вклад некоторых высоколежащих состояний может оказаться существенным. Для преодоления этих трудностей производят вычисления сдвига фаз только при значении энергии $E = E_{\nu}$, тогда уравнение для фазы принимает вид: $tg\delta_l(E) = -\frac{S_{N+2,l}(E)}{C_{N+2,l}(E)}$. Таким образом получается в явном виде функция $tg\delta_l(E)$, основываясь на которой получаются значения энергии резонанса и его ширины. Данный метод применялся для расчета рассеяния нейтрона на альфа-частице с суммарным спином J = $3/2^{-}$ [58]. Результаты представлены на рис. 1.3. Для потенциалов JISP16 и Daejeon16 были получены энергии резонанса $3/2^{-}$ 0.89 МэВ и 0.68 МэВ, при экспериментальном значении энергии в 0.8 МэВ [82]. Ширина данного резонанса получается равной 0.99 МэВ и 0.55 МэВ, соответственно, при экспериментальном значении в 0.65 МэВ.

Метод SS-HORSE применялся для расчета резонанса 4n. В экспериментальной работе [62] был получен намек на возможное существование тетранейтрона с энергией $E_R = 0.83$ МэВ и шириной $\Gamma = 2.6$ МэВ. Данный результат был получен в процессе исследования реакции ⁸He + ⁴He \rightarrow 4n + ⁸Be. В перспективе на базе ускорителя RIKEN планируются дальнейшие эксперименты по поиску тетранейтрона в реакциях ⁸He + ⁴He и ⁸He + p.

Результаты теоретического расчета резонансов тетранейтрона с помощью метода SS-HORSE приведены в работе [61]. NCSM расчеты волновой функции резонанса в этой работе проводились на осцилляторном базисе вплоть до $N_{max}^* = 18$. Результаты этих расчетов представлены на рис. 1.4. Согласно этим результатам существуют 2 резонанса с энергиями 0.3 МэВ и 0.8 Мэв, с ширинами, соответственно, 0.85 и 1.3 МэВ. Ширина и положение второго резонанса хорошо согласуется с полученными экспериментальными данными. Метод SS-HORSE показал свою состоятельность для расчета низколежащих резонансных состояний и активно применяется в подобных расчетах на данный момент. Данный метод имеет ряд ограничений. Например, так как он использует низко-

энергетическое приближение формулы S-матрицы, то он способен рассчитывать только низколежащие резонансы, также он не способен корректно описывать характеристики резонансов имеющих более одного открытого распадного канала, что тоже снижает область его применимости.

В итоге, рассмотрение аналогичных методов показывает, что каждый из существующих методов ab initio описания структуры состояний легких ядер и реакций с их участием имеет свою область применимости. Из этого следует необходимость дальнейших теоретических работ в этой области по пути совершенствования единого описания структуры и реакций с участием легких ядер.

1.5. Выводы

В данной главе был проведен подробный обзор современных ab initio методов расчетов структур легких ядер и реакций с их участием. Большинство этих методов базируются на модели NCSM. В данной модели решение А-нуклонного уравнения Шрёдингера ищется в виде линейной комбинации базисных векторов, которые являются всеми возможными при заданных ограничениях А-нуклонными детерминантами Слейтера, что приводит к быстрому росту размерности базиса при увеличении числа нуклонов или при увеличении числа используемых оболочек. Данная модель позволяет получать в явном виде волновые функции основных и нижних возбужденных состояний, а также ряд функций из непрерывного спектра. Недостаток связанный с огромным ростом базиса несколько нивелируется в более поздних моделях, созданных на основе NCSM: IT-NCSM, SU(3)-NCSM, Monte-Carlo NCSM. К явным недостаткам данной модели помимо выше указанных относится неправильное описание дальней асимптотики волновых функций и сложность при вычислении кластерных характеристик состояний. Созданная автором модель CCOFM (Cluster Channel Orthogonal Functions Model) используется как раз для этих целей.

Для любых ab initio расчетов используются реалистические нуклон-нук-

лонные потенциалы. Нуклон-нуклонные потенциалы могут основываться на традиционной теории мезонного обмена (NijmegenX, CD Bonn), обратной теории рассеяния (JISP16) и на следствиях из квантовой хромодинамики (Daejeon16, N^xLO NN). Все эти потенциалы с успехом применяются для расчетов волновых функций основных и нижних возбужденных состояний легких ядер.

Существует ряд моделей, 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.

Одним из них является метод, реализованный в моделях NCSM/RGM и NCSMC. В них одновременно используются как вектора, полученные в NCSM модели, так и вектора МРГ. Данные модели оказываются довольно универсальными и годятся для расчета как энергий связи основных и нижних возбужденных состояний, так и для получения парциальных ширин распадов резонансов и реакций с участием легких ядер. Недостаток их заключается в особенностях расчета матричных элементов обменного ядра и ядра гамильтониана, которые легко рассчитываются для системы содержащий легкий кластер или нуклонное гало, но довольно трудно реализуемые для систем, содержащих кластеры подобные 3 H, 4 He.

Помимо этого метода для описания непрерывного спектра и резонансных состояний был создан метод SS-HORSE, который базируется на анализе решений NCSM. Данный метод заключается в нахождении S-матрицы в интервале энергий, полученном при вычислении собственных энергий NCSM E_{ν} для различных значений параметров базиса N_{max} и $\hbar\omega$. Основываясь на низкоэнергетическом приближении S-матрицы получаются сдвиги фаз $\delta_l(E)$ и на основе их получаются значения энергий резонансов E_r и их ширин распада Г. Данный метод имеет ряд ограничений. В том числе, так как он использует низкоэнергети-

48

ческое приближение формулы S-матрицы, то он способен рассчитывать только низколежащие резонансы. Также он не способен корректно описывать характеристики резонансов имеющих более одного открытого распадного канала, что тоже снижает область его применимости.

Ввиду серьезных ограничений, имеющихся у созданных ранее методов ab initio расчета кластеризованных состояний легких ядер, автором была создана модель ортогональных функций кластерного канала (ССОFМ). Она базируется на ортонормированном базисе трансляционно-инвариантных волновых функций кластерных каналов. Созданная модель применяется для решения задач двух типов.

Во-первых, с ее помощью возможен анализ роли кластерных компонент в решениях А–нуклонного уравнения Шрёдингера с реалистическими NN–потенциалами и уточнение NCSM расчетов кластеризованных состояний.

Во-вторых, в рамках *ab initio* подходов, причем как учитывающих, так и не учитывающих в явном виде кластерные базисные компоненты, можно проводить вычисления спектроскопических факторов (СФ) и кластерных и нуклонных формфакторов. Эти величины характеризуют меру кластеризации исследуемых состояний [65] и могут быть использованы в расчетах их асимптотических характеристик и сечений ядерных реакций с их участием. В следующих главах приводятся результаты расчетов полных энергий связи, кластерных и асимптотических характеристик с применением модели ССОFM для основных и нижних возбужденных состояний ядер ⁹Ве, ⁹В, ⁷Li, ⁸Ве и ⁵He.

Глава 2

Применение модели ортогональных функций кластерных каналов для расчетов полных энергий связи и спектроскопических факторов основных и низколежащих состояний легких ядер

2.1. Введение

Данная глава посвящена теоретическому исследованию кластеризованных состояний легких ядер ⁷Li, ⁸Be, ⁹Be и ⁹B. В рамках данного исследования проводились расчеты этих состояний с применением потенциалов JISP16 и Daejeon16 в рамках чисто кластерного, NCSM и комбинированных базисов. Особенность кластерных состояний заключается в ярко выраженной неэквивалентности различных конфигураций нуклонов в микроскопических расчетах, поэтому применение кластеризованных компонент базиса представляется оправданным.

Особенность базиса модели ортогональных функций кластерного канала (ССОFМ) заключается в возможности применения в качестве кластерных компонент базиса волновых функций с фрагментами как в минимальной оболочечной конфигурации, так и полученными в реалистических расчетах NCSM с ограничением на суммарное число осцилляторных квантов $N \leq N_{max}^{(i)}$. Данное обстоятельство позволяет также анализировать роль точности описания волновых функций кластеров, а также учитывать в общем базисе кластерные каналы с кластерами не только в основном, но и в возбужденных состояниях. Таким образом в кластерном базисе можно учитывать все физически разумные кластерные каналы.

Исследование роли кластерных компонент в ВФ кластеризованных состояний можно проводить путем анализа решений А-нуклонного уравнения Шредингера в кластерном, NCSM и комбинированных базисах и путем оценки общей меры кластеризации этих ядерных состояний.

Решение последней задачи требует большого внимания. Очевидно, что анализ статистического веса кластерных компонент содержащихся в исходной ВФ возможен только при условии, что эти компоненты не только нормированы, но и ортогональны друг другу. Базис кластерных ВФ является полным только при условии если все каналы c_{κ} фрагментации $A_1 + A_2$ представлены в нем. Процедура ортогонализации данного базиса приводит к смешиванию функций каналов, с непредсказуемым результатом. Поэтому возможность сравнения вкладов отдельных кластерных каналов сомнительна в принципе. Тем не менее, существует возможность ввести понятие совокупной меры кластеризации для выбранного набора каналов. Для этой задачи определение спектроскопического фактора канала, данное в предыдущей главе, может быть обобщено до совокупной меры кластеризации (МК) выбранного списка каналов. Данная величина определяется сходным способом с одноканальным спектроскопическим фактором, как сумма квадратов перекрытий исходной ВФ Ψ_A с набором ортонормированных функций кластерных каналов c_{κ} . Эти волновые функции определяются с помощью диагонализации правой-нижней субматрицы матрицы (1.32) без введения ограничения на использование единственного канала $\kappa = \kappa'$. Будучи несущественной для теории ядерных реакций, эта величина позволяет определять обобщенную меру кластеризации выбранного состояния.

Чтобы продемонстрировать еще раз гибкость применяемого подхода, отметим, что выбор характеристик кластерного канала, то есть максимального значения числа осцилляторных квантов относительного движения, значений максимальных суммарных чисел осцилляторных квантов A_1- , A_2- волновых функций может быть различно для расчета ВФ ядерного состояния и для расчета спектроскопических факторов и совокупной меры кластеризации. В текущей главе вначале описываются результаты расчетов основных и нижних возбужденных состояний ядер ⁹Ве и ⁹В, потом представлены расчеты полных энергий связи, спектроскопических факторов и мер кластеризации ядер ⁸Ве, ⁷Li. Для NCSM расчетов систем ⁹Ве, ⁹В и ⁸Ве применялся хорошо известный оболочечный код Antoine [83], который в ряде более масштабных расчетов был заменен более совершенным кодом Bigstick [84], который из-за примененных в нем технологий распараллеливания OpenMP и MPI лучше подходит для расчетов на вычислительных кластерах. Для расчетов с применением кластерных компонент использовался разработанный автором код.

2.2. Расчет девятинуклонных систем ⁹Ве и ⁹В

Ярко выраженными кластерными характеристиками обладают основные состояния ядер ⁹Ве и ⁹В. В ряде кластерных теоретических расчетов эти ядра рассматриваются как системы трех частиц: $\alpha + \alpha + p(n)$ [85,86]. На текущем уровне развития модель CCOFM приспособлена для работы с двухкластерными системами, соответственно, для описания ядер ⁹Ве и ⁹В использовалась шестиканальная модель с каналами ⁸Be+n и ⁸Be+p фрагментации ядер. Эти каналы содержат $0_1^+, 0_2^+; 1_1^+, 1_2^+; 2_1^+, 2_2^+$ состояния ⁸Ве. Параметр обрезания $N_{max}^{(9)}$ для проделанных NCSM расчетов был выбран равным 9, значение параметра обрезания для ⁸Ве во всех кластерных каналах было выбрано равным 4, т. е. рассматривалась нижайшая конфигурация кора в канальных волновых функциях, что не позволяет качественно описывать внутреннюю структуру ⁸Ве. Зато большое количество квантов выделенное на описание относительного движения нуклона и ⁸Ве должно было относительно неплохо описывать энергию нейтронного(протонного) резонанса. Результаты расчетов представлены в таблице 2.1. Для расчетов применялся нуклон-нуклонный потенциал Daejeon16 и оболочечный код Antoine.

Данный базис применялся также для расчетов спектра нижних возбуж-

	NCSM($N_{max}^{(9)} = 9$)	$n_{max} = 5$	$n_{max} = 7$	$n_{max} = 9$	Exp.
E_{9Be}	53.51	37.66	37.74	37.76	58.16
E_n	1.34	1.46	1.54	1.56	1.66
E_{9B}	51.58	35.74	35.84	35.91	56.31
E_p	-0.59	-0.47	-0.37	-0.29	-0.19
ΔE	1.93	1.93	1.90	1.85	1.85

Таблица 2.1. Полные и однонуклонные энергии связи (МэВ) ядер ⁹Ве, ⁹В и кулоновские разности энергий.

денных состояний ⁹Ве. Расчеты проводились для разных значений параметра обрезания $N_{max}^{(9)}$ в чисто кластерном, NCSM и комбинированном базисах. Результаты расчетов приведены в таблице 2.2.

Результаты расчета девятинуклонной системы показывают, что вычисления, использующие кластерный базис содержащий относительно низкие конфигурации кора, приводят к существенной недооценке полных энергий связи. В тоже время «разностные» величины: энергии связи нуклонов и резонансные энергии (E_n и E_p), кулоновские разности энергий изобарических мультиплетов ΔE воспроизводятся лучше, чем при NCSM расчете с меньшим суммарным главным квантовым числом. При расчетах спектров нижних возбужденных состояний использование кластерного базиса приводит к сравнимым результатам по сравнению с NCSM расчетами при базисе с меньшим значением параметра обрезания. Также при сравнении результатов расчетов на базисах разных типов, исходя из скорости сходимости к экспериментальным значениям энергий возбуждения, можно делать вывод о степени кластеризации нижних возбужденных состояний ядер.

Таким образом при расчетах на относительно коротких базисах ДС, с малым значением суммарного осцилляторного кванта, для систем ${}^{9}B$, ${}^{9}Be$ было

NCSM $(N_{max}^{(9)} = 5)$		Кластерный расчет с $n_{rel}=9$			Эксп.	
$3/2$ - $(E_{9Be};E^*)$	37.22; 0.0	37.76; 0.0		58.1	58.16; 0.0	
1/2 +	8.094	5.900		1.68	84	
5/2-	2.425	2.627		2.42	29	
1/2-	6.221	4.645		2.78	30	
5/2 +	8.936	8.180	3.049		49	
7/2-	6.222	6.915		6.760		
$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i$		Расчет с N ⁽⁹⁾ _{max} =7,	NCSM		Расчет с	
	ax = 1)	$n_{rel}=5$	$(N_{max}^{(9)}=9)$		$N_{max}^{(9)}=9, n_{rel}=7$	
$3/2-(E_{9Be};E^*)$	47.56; 0.0	47.76; 0.0	53.51; 0.0		53.78;0.0	
1/2 +	5.988	6.068	4.598		_	
5/2-	3.021	3.157	2.708		2.689	
1/2-	6.186	6.186	5.563		5.792	
5/2 +	7.270	7.369	5.956		_	
7/2-	7.465	7.659	7.258		7.486	

Таблица 2.2. Энергии нижних возбужденных состояний (E^*) ядра ⁹Ве.

показано слабое влияние кластерных компонент на полную энергию связи кластеризованных состояний, но определенные преимущества использования кластерных компонент для описания «разностных» величин. Полученные результаты являются крайне полезными для расчетов кластеризованных состояний более тяжелых ядерных систем с $A \approx 16$, где вычисления по модели NCSM даже с применением самых мощных суперкомпьютеров не могут достичь больших значений суммарного числа осцилляторных квантов.

2.3. Расчеты полных энергий связи и мер кластеризации состояний ядра ⁸Ве

Одними из наиболее хорошо известных легких систем с ярко выраженной кластеризацией являются нижние резонансные состояния 0^+ , 2^+ , 4^+ системы ⁸Be. 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. С помощью разработанной автором модели ССОFM были получены значения полных энергий связи системы (ПЭС), спектроскопических факторов (СФ) и совокупных мер кластеризации (МК) этих состояний. Для NCSM расчетов внутренних волновых функций кластеров и поляризационных членов применялся тот же код Antoine, что и в предыдущих расчетах. В расчетах применялись реалистические потенциалы Daejeon16 и JISP16.

Полная энергия связи нижнего состояния системы ⁸Ве рассчитывалась с применением нескольких типов базисов. Во всех случаях максимальный суммарный осцилляторный квант N_{tot}^{max} определялся как основной параметр расчета наряду с параметром $\hbar\omega$ одночастичного осцилляторного базиса. Базисы были определены следующим образом.

Во-первых, использовался обычный базис NCSM, обозначенный как *mod1*. Во-вторых, применялись два типа кластерных базисов. Один из них со-



Рис. 2.1. ПЭС ядра ⁸Ве, рассчитанная с помощью потенциала JISP16. Красные столбцы – *mod1*, зеленые – *mod2*, синие – *mod3*. Горизонтальной линией обозначено экспериментальное значение ПЭС.

держал волновые функции α -кластеров в нижней оболочечной конфигурации, так что суммарный осцилляторный квант равнялся $N_{tot} = n_{rel}$. Второй же использовал реалистические волновые функции 0_1^+ и 0_2^+ состояний ⁴He. 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 их них включает поляризационный член, расчитанный в NCSM, ограниченный $N_{pol}^{max} = N_{tot}^{max} - 2$, в качестве основного компонента. Дополнительные кластерные члены с $N = N_{tot}^{max}$, соответствующие базисам mod2 and mod3, были включены в версии mod4 and mod5 соответственно.

Для случая каждого потенциала подбиралось значение осцилляторного параметра $\hbar \omega$, обеспечивающее наилучшую сходимость значения полной энергии связи в NCSM расчетах. Результаты, выполненные в рамках NCSM расчетов, непосредственно сравнивались с данными группы Университета штата Айова и показали хорошее согласие, что подтверждает полученные результаты.

ПЭС ядра ⁸Ве, вычисленная с применением базисов *mod1*, *mod2* и *mod3*, как функция максимального суммарного числа осцилляторных квантов N_{tot}^{max} представлена на гистограммах, показанных на рисунках (2.1,2.2). Первая из них содержит результаты расчетов с применением потенциала JISP16 и значением параметра $\hbar\omega = 22.5$, вторая – с применением потенциала Daejeon16 и параметра $\hbar\omega = 15.0$ MeV.

Несмотря на существенную разницу между свойствами двух рассмотренных потенциалов, расчеты показывают очень похожую качественную картину. Кластерные компоненты соответствующие минимальному значению N_{tot} 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 энергии связи, хотя рассматриваемая система является сильно кластеризованной. Данный результат не зависит от того, рассматривается ли волновая функция кластера в минимальной конфигурацией *mod2* или в реалистической кластерной модели *mod3*. Количественные результаты, полученные с применением данных потенциалов несколько расходятся. Потенциал Daejeon16 будучи по существу более "мягким" чем JISP16, вносит больший вклад кластерных компонентов в ПЭС чем JISP16. Этот тренд подтверждается, если принять в расчет результаты работы [87]. NN-потенциал, применяемый там, является "сверхмягким"из-за малого значения регуляризующего параметра $\lambda = 1.5~{
m fm}^{-1}$. Тем не менее, в тех расчетах вклад некластеризованных компонент в полную энергию связи ⁸Ве остаётся существенным, хотя он значительно меньше чем вклад, полученный в вычислениях с применением более распространенных ab initio по-



Рис. 2.2. ПЭС ядра ⁸Ве, рассчитанная с помощью потенциала Daejeon16. Обозначения аналогичны используемым на Рис. (2.1).

тенциалов.

Для более детального анализа взаимосвязи между вкладами кластеризованных и некластеризованных компонент в ПЭС, мы провели расчеты значений ПЭС для ядра ⁸Ве в версиях базисов *mod4* и *mod5*. Эти расчеты позволяют сравнить вклад волновых функций этих двух типов при фиксированных значениях N_{tot} . Результаты представлены в таблицах 2.3, 2.4. При больших значениях N_{tot} разница между результатами применения базисов *mod4* и *mod5* оказывается минимальной. Но наиболее информативным является анализ разницы в значениях ПЭС, вычисленных в смешанных базисах версий *mod4* или *mod5* с параметром обрезания N_{tot} и в NCSM базисах (*mod1*) с параметрами обрезания $N_{tot} - 2$ и N_{tot} . Во всех этих случаях расширение NCSM базиса с параметром обрезания $N_{tot} - 2$ путем добавления полного набора оболочечных волновых функций вплоть до N_{tot} приводила к значительно более сильному уточнению полной энергии связи состояния чем добавление исключительно кластерных

mod	N=4	N=6	N=8	N=10	N=12
mod1	22.21	34.93	44.62	49.68	52.25
mod4		27.07	36.27	45.02	
mod5		24.14	35.08	44.78	

Таблица 2.3. ПЭС ядра ⁸Be, рассчитанная с применением потенциала JISP16. $\hbar\omega$ = 22.5 MeV.

Таблица 2.4. ПЭС ядра ⁸Ве, рассчитанная с применением потенциала Daejeon16. $\hbar\omega$ = 15.0 MeV.

mod	N=4	N=6	N=8	N=10	N=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	

компонент с тем же N_{tot} . При больших значениях N_{tot} 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 некластеризованных компонент при вычислении полной энергии связи в этой области значений N_{tot} доминирует. Более того, их относительный вклад растет с увеличением N_{tot} .

Тот факт, что при добавлении одноканальной компоненты значение ПЭС оказывается выше чем при добавлении трехканальной компоненты mod5 не является ошибкой, так как волновая функция, соответствующая mod4, в SU(3)-представлении содержит "вытянутые"компоненты, связанные с неприводимыми представлениями ($\lambda\mu$) с ($\lambda \gg \mu$) с большим статистическим весом и, соот-

mod	N=4	N=6	N=8	N=10	N=12		
Состояние 0 ⁺							
one-ch	0.582	0.406	0.801	0.833	0.843		
two-ch	0.871	0.829	0.807	0.846			
three-ch	0.923	0.856	0.827	0.847			
	(Состоян	ние 2 ⁺				
one-ch		0.222	0.730	0.786	0.802		
two-ch		0.731	0.734	0.792			
three-ch		0.743	0.746	0.792			
Состояние 4 ⁺							
one-ch			0.610	0.701	0.723		
two-ch			0.611	0.712			
three-ch			0.611	0.713			

Таблица 2.5. Мера кластеризации ядра ⁸Ве. JISP16. hw=22.5 MeV.

вественно, лучше описывает функцию относительного движения α-частиц. В соответствии с результатами расчетов в SU(3)-NCSM модели, описанной в первой главе, представленными в работах [36–38, 88], именно эти представления являются критически важными в расчетах полной энергии связи основных состояний и ядерных спектров. По всей видимости, именно этот факт является причиной большего вклада в ПЭС основного состояния одноканальной волновой функции базиса *mod4* по сравнению с трехканальными базисами *mod5*.

Мера кластеризации, будучи одноканальной или совокупной, является прямой мерой содержания кластерных компонент в волновых функциях ядерных состояний. Расчеты данных величин проводились в этой работе следующим способом. Волновая функция основного состояния исходного ядра ⁸Ве рассчитывалась в рамках NCSM с применением потенциалов JISP16 и Daegeon16. Волновые функции кластерных каналов (1.20) содержали функции внутреннего движения α кластера, которые были рассчитаны в расчетах NCSM с ограничением $N^{max} = 2$. Каналы соответствующие основным состояниям кластеров рассматривались одновременно с каналами содержащими одну или обе α -частицы в 0_2^+ состоянии. Более высокие по энергии состояния ⁴Не обладают большими ширинами распада, поэтому не могут рассматриваться как реалистические кластеры. Таким образом, в случае ядра ⁸Ве рассматривались 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^+ . Поэтому в таблицах 2.5 and 2.6 представлены значения одноканальной меры кластеризации для α -частиц в основном состоянии и совокупных канальных мер для двухи трехканальных случаев для нижних резонансных состояний ⁸Ве.

Таблицы демонстрируют быструю сходимость значений данных мер для всех нижних резонансных состояний ⁸Ве. Точность их определения, достаточная для использования в расчетах ядерных реакций достигется при N_{tot}=10. Результаты расчетов одноканальных МК с применением реалистических волновых функций кластеров вместе с результатами, опубликованными в работе [87], подтверждают представления о том, что рассматриваемые системы сильно кластеризованы. Это подтверждает применимость многочисленных микроскопических моделей "ядерной кластерной геометрии" таких как методы Антисимметризованной Молекулярной Динамики [16], Фермионной Молекулярной Динамики [17,18] и THSR-подход [13], которые используют модельные волновые функции кластеров и эффективные NN-потенциалы для описания динамики. Стоит однако заметить, что в таких подходов предпочтительно применение квазиреалистических внутренних волновых функций кластеров. Тем не менее, следствием полученных результатов является тот факт, что использование реалистических NN-потенциалов приведет к существенной недооценке полной энергии связи основного состояния. В задачах подобного рода могут применяться только эффективные NN-потенциалы.

mod	N=4	N=6	N=8	N=10	N=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			
	(Состоян	ние 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			

Таблица 2.6. Мера кластеризации ядра ⁸Ве. Daejeon16. hw=15 MeV.

В тоже время, полученные результаты содержат несколько неожиданных моментов.

В первую очередь, рассмотрим связь между значениями мер кластеризации в одно- и многоканальных режимах. Для всех состояний рассматриваемого ядра в области насыщения значений одноканальной МК значение совокупной МК незначительно больше значения одноканальной МК. Сильная неортогональность ВФ описываемых нами каналов и высокое значение спектроскопического фактора канала с α-частицами в основном состоянии является причиной малой добавки в значение совокупной меры кластеризации из-за введения дополнительных членов.

Еще один момент был обнаружен при сравнительном анализе значений ПЭС и МК. Обозначим совокупную МК как *B*, можно определить статистически вес некластеризованных компонент как $\bar{B} = 1 - B$. Вводя отношение $\delta E = (E^{mod1} - E^{mod2(3)})/E^{mod1}$, можно определить меру вклада некластеризованных компонент в ПЭС. Сравнение этих величин, полученных из соответствующих таблиц, показало, что $\delta E > \bar{B}$ для больших значений N_{tot} . Соответственно, отношение вклада некластеризованных компонент к их статистическому весу больше чем такое же соотношение для кластеризованных. Эта тенденция особенно ярко проявляется при больших значениях N_{tot} .

Результаты этих *ab initio* расчетов нижних резонансных состояний ядра ⁸Ве заключается в том что вклад некластеризованных компонент базиса в полную энергию связи велик даже в столь ярко выраженной 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 увеличени
и N_{tot}^{max} функция относительного движения кластеров точнее описывается на больших расстояниях. Таким образом, один из главных аспектов идеи кластеризации – разделение нуклонной системы на подсистемы, которые определяют геометрию и свойства ядра во внутренней системе координат [13, 16] – соответствует истине только при относительно малых N_{tot} (низких компонентах ВФ). Добавление каналов содержащих возбужденные состояния кластеров с физически разумной шириной распада играет незначительную роль и не может изменить общей картины. В итоге начинает вырисовываться более полная картина кластеризованного состояния, как чисто кластерной волновой функции, погруженной в "море" диффузных некластерных конфигураций.

2.4. Расчеты полных энергий связи и спектроскопических факторов основного и нижних возбужденных состояний ядра ⁷Li

В рамках продолжения работ по теоретическому исследованию кластеризованных состояний рассчитывалась полная энергия связи, спектр нижних уровней и кластерные характеристики основного и нижних состояний ядра ⁷Li как системы α +t. Для анализа кластерных эффектов использовалось несколько типов базисов, аналогичных представленным ранее. Как и в обычной NCSM, во всех представленных ниже случаях величина N_{tot}^{max} (параметр обрезания), равная для кластерных компонент $N_{tot}^{max(A1)} + n^{max} + N_{tot}^{max(A2)}$, рассматривалась как основной параметр расчетной схемы. Величина осцилляторного параметра $\hbar\omega$ была выбрана равной 22.5 МэВ, как для потенциала Daejeon16, так и для потенциала JISP16.

Базисы определялись аналогичным расчетам ⁸Ве образом.

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

Во-вторых, рассматривались два типа кластерных базисов. Компоненты первого из них (mod2) содержат ВФ основных состояний ³H 1/2⁺ и ⁴He 0⁺ в их нижних оболочечных конфигурациях. Компоненты второго (mod3) – реалистические ВФ основного состояния ³H и уровней 0⁺₁ и 0⁺₂ ⁴He с параметром обрезания N_{tot}^{max} =2. Таким образом mod3-базис является двухканальным. При использовании потенциала Daejeon16 энергия связи ядра ⁴He оказывается равной 27.26 МэВ. а ³H – 6.96 МэВ, т. е. кластеры оказываются недосвязанными всего на 1 – 1.5 МэВ. При использовании потенциала JISP16 со значением параметра $\hbar\omega$ равным 22.5 МэВ энергия связи ядра ⁴He оказывается равной 24.40 МэВ. а ³H – 5.279 МэВ, то есть энергии связи кластеров значительно недооценены, но на расчет спектроскопических факторов этот факт влияет мало.



Рис. 2.3. Полная энергия связи ядра ⁷Li для потенциала Daejeon16. Сплошная линия – *mod1*, точечная – *mod2*, штрих-пунктирная – *mod3*, штриховая – *mod4*. Горизонтальной линией обозначено экспериментальное значение ПЭС.



Рис. 2.4. Полная энергия связи ядра ⁷Li для потенциала JISP16. Сплошная линия – *mod1*, точечная – *mod2*, штрих-пунктирная – *mod3*, штриховая – *mod4*. Горизонтальной линией обозначено экспериментальное значение ПЭС.

В-третьих, был построен комбинированный базис mod4, созданный по аналогичному принципу, что и комбинированный базис для ⁸Ве. Помимо поляризационных членов он включает в себя кластерные члены mod2 базиса. Полная энергия связи ядра ⁷Li, вычисленная в рамках указанных базисов как функция величины N_{tot}^{max} для потенциала Daejeon16 представлена на рис. 2.3, а для потенциала JISP16 на рис. 2.4.

Рисунок 2.3 показывает следующее. Расчеты в рамках NCSM, как и в случае расчетов для ядра ⁸Be, демонстрируют довольно быструю сходимость, для N_{tot}^{max} =11 отклонение от экспериментального значения составляет всего 1.2 МэВ. Использование базиса *mod2* приводит к значительно более сильной недооценке энергии связи, чем в случае ⁸Be, хотя рассматриваемая система остается сильно кластеризованной, что демонстрируют значения спектроскопических факторов нижнего состояния (см. табл. 2.7, 2.8). Для малых значений N_{tot}^{max} расчеты в базисе *mod3* приводят к еще большей недооценке полной энергии связи – размерность базиса волновых функций относительного движения влияет на результат сильнее, чем размерности базисов волновых функций внутреннего движения кластеров. Для N_{tot}^{max} =11 величины полной энергии связи практически сравниваются, но остаются примерно на 8 МэВ меньше полученных в NCSM расчетах.

Также стоит заметить, что при больших значениях N_{tot}^{max} график, демонстрирующий результаты расчетов в комбинированном базисе, практически точно совпадает с графиком NCSM расчетов при сдвиге влево на две единицы. Дело в том, что относительный вклад дополнительных кластерных компонент в полную энергию связи системы в этой области близок к 10^{-3} в то время как вклад остальных "некластерных"ВФ с тем же N_{tot}^{max} – не меньше 3 процентов. Этот результат качественно совпадает с данными, полученными в расчетах ⁸Ве с использованием комбинированных базисов, представленными в таблицах 2.3, 2.4.

Расчеты с применением потенциала JISP16 (рис. 2.4) показывают анало-

гичную картину, разве что только более резко выраженную за счет того, что потенциал JISP16 значительно более "жесткий" чем потенциал Daejeon16. Также использование чисто кластерного базиса приводит к сильной недооценке полной энергии связи основного состояния, которая составляет порядка 15 МэВ, также применение гибридного базиса показывает малое влияние кластерных компонент на полную энергию связи. В целом, складывается картина аналогичная полученной для системы ⁸Ве, что является еще одним доказательством того, что чисто кластерный базис недостаточен для описания кластеризованных ядерных состояний.

Еще раз стоит отметить, что это обстоятельство не находит отражения в подавляющем большинстве работ, посвященных кластерной тематике. Почти всегда рассмотрение ограничивается только кластерными компонентами, а согласие с экспериментальными данными достигается использованием эффективных NN-потенциалов. Следует отметить, однако, что выводы, касающиеся пороговых энергий распада ⁷Li, а также ПЭС ядра ⁶He, близкие по смыслу к представленному, содержатся в работах [18,53] соответственно.

Проанализируем в деталях степень кластеризации нижних уровней ядра ⁷Li. Для этих уровней были выполнены *ab initio* расчеты энергии возбуждения и спектроскопические факторы канала α + t, содержащего α и t в основных состояниях. Волновые функции Ψ_A были получены в базисе *mod1*, а функции кластеров – в NCSM расчетах с $N_{tot}^{max}=2$. Результаты расчета приведены в таблицах 2.7, 2.8.

Для интерпретации полученных величин нужно напомнить, что максимальное значение "нового" спектроскопического фактора [63] ограничено единицей, и, как было показано в работах [80,81], сумма спектроскопических факторов всех состояний с фиксированными J^{π} на интервале ~ $2\hbar\omega$ равна в среднем 1. Таблицы 2.7 и 2.8 демонстрируют, что значения спектроскопического фактора всех нижайших уровней с фиксированными J^{π} , за исключением второго уровня 5/2-, оказываются больше 0.5, т. е. эти состояния обладают ярко вы-

Таблица 2.7. Энергии возбуждения (МэВ) и СФ основного и нижних возбужденных состояний ⁷Li, рассчитанные с помощью потенциала Daejeon16. В четвертом столбце приведены экспериментальные значения энергии уровней и ширин 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	0/0.85	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	9.67/89

раженными кластерными свойствами. В итоге проделанные *ab initio* расчеты подтверждают выводы работ [80,81] полученные в рамках оболочечной модели с кором.

Интересны свойства второго, если исходить из данных эксперимента, уровня 5/2. Несмотря на более высокую энергию он имеет малую ширину распада в α +t канал, т. е. характеризуется крайне малым значением СФ. Расчеты с использованием потенциала Daejeon16 и, еще более, JISP16 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 срыва кластера на этот уровень. Хорошая иллюстрация этого – данные таблиц, где для только для расчетов на больших оболочечных базисах порядок уровней начинает совпадать с экспериментальными результатами. Также надо отметить, что для расчетов с потенциалом Daejeon16 значения спектроскопических факторов состояний 5/2- для больших значений N_{tot}^{max} сходятся друг к другу, таким образом анализ значений спектроскопических факто-

N_{tot}^{max}	7	9	11	13	15
$3/2^{-}$	0/0.80	0/0.79	0/0.78	0/0.811	0/0.809
$1/2^{-}$	1.53/0.79	1.08/0.78	0.90/0.77	0.7/0.79	0.63/0.80
$7/2^{-}$	4.78/0.64	5.13/0.67	5.26/0.67	5.294/0.69	5.304/0.69
$5/2^{-}_{>}$	10.7/0.60	9.09/0.58	8.46/0.69	7.861/0.71	7.597/0.70
$5/2^{-}_{<}$	8.63/0.062	8.70/0.15	8.71/0.024	8.541/0.011	8.438/0.012

Таблица 2.8. Величины, аналогичные представленным в табл. 2.7, рассчитанные с помощью потенциала JISP16.

ров указывает на определенные проблемы потенциала Daejeon16, возникающие при расчетах спектров возбужденных состояний ядер.

В итоге, ab initio расчеты основного и нижних возбужденных состояний ядра ⁷Li подтвердили полученный в расчетах основного состояния ⁸Be результат, что вклад некластеризованных компонент базиса в полную энергию связи велик даже в сильно кластеризованных системах. Как следствие этого, утверждение о том, что кластеризованное состояние, на самом деле, представляет собой чисто кластерную волновую функцию, погруженную в "море"диффузных некластерных конфигураций, становится более обоснованным. Также был проведен анализ степеней кластеризации нижних уровней ядра ⁷Li, хорошо согласующийся с экспериментальными результатами и работами предыдущих групп.

2.5. Выводы

Во второй главе было проведено теоретическое исследование сильно кластеризованных состояний легких ядер. Исследование было проведено на базе разработанного метода ССОFМ и на его основе проводились вычисления как полных энергий связи кластеризованных состояний, так и их спектроскопических факторов и мер кластеризации. Расчеты полных энергий связи проводились как на чисто кластерном базисе и базисе NCSM, так и на комбинированном, включающим в себя вектора как кластерного, так и NCSM базиса. Было проведено вычисление спектров низших состояний ядер ⁹Be, ⁹B, ⁸Be и ⁷Li, обладающих ярко выраженной кластеризацией.

В результате сравнения результатов расчетов на кластерном и оболочечном базисах в числе прочих результатов было получено преимущество кластерного базиса для описания «разностных» величин, подобных энергиям связи нуклонов, резонансным энергиям, кулоновским разностям энергий изобарических мультиплетов, особенно для случая расчетов с относительно малым суммарным числом осцилляторных квантов.

Основным же результатом является надежно доказанный факт, что вклад некластеризованных компонент базиса в полную энергию связи велик даже в столь типичных кластеризованных системах, как ⁸Be и ⁷Li. Более того, относительная роль некластеризованных компонент, в отличие от того, что можно было ожидать, с ростом базиса увеличивается, хотя при увеличении N_{tot}^{max} функция относительного движения кластеров точнее описывается на больших расстояниях. Добавление же каналов содержащих возбужденные состояния кластеров с физически разумной шириной распада играет незначительную роль и не может изменить общей картины. В итоге совершенных ab initio расчетов получается, что волновая функция кластеризованного состояния не является чисто кластерной волновой функцией, а представляет собой кластерную волновую функцию, погруженную в "море"диффузных некластерных компонент.

Глава З

Применение модели ортогональных функций кластерных каналов для расчетов асимптотических характеристик легких ядер

3.1. Введение

Разработанная модель CCOFM позволяет рассчитывать как значения полной энергии связи и спектроскопические факторы кластеризованных состояний, так и их кластерные формфакторы. На их основе ab initio рассчитываются следующие асимптотические характеристики: парциальные ширины распадов резонансных состояний и асимптотические нормировочные коэффициенты связанных состояний.

В предыдущей главе был проведен анализ кластеризованных состояний ряда легких ядер, произведенный на основе вычислений полных энергий связи их основных и нижних резонансных состояний на кластеризованном, комбинированном и NCSM базисах. Результаты этих расчетов показали недостаточность чисто кластерного базиса для описания даже сильно кластеризованных систем, подобных ⁸Be. Также в этой главе приводились результаты ab initio расчетов спектроскопических факторов и мер кластеризации этих состояний. В этой главе проводятся ab initio расчеты асимптотических характеристик связанных и резонансных состояний этих же ядерных систем и анализ полученных результатов.

Методология расчетов асимптотических характеристик подробно описана в главе 1. Исходная волновая функция состояния может быть рассчитана в рамках ССОFM модели, NCSM модели или любой другой модели, чье решение представляет собой суперпозицию А-нуклонных детерминантов Слейтера. В осуществленных расчетах для вычисления волновых функций ядерных состояний используется модель NCSM. Движение центра масс системы в этой модели соответствует нулевым колебаниям $\Phi_{000}(\mathbf{R})$, поэтому в соответствующем решении A-нуклонного уравнения Шрёдингера Ψ_A^{SM} содержится полная информация о трансляционно-инвариантном решении Ψ_A , которая при расчете матричных элементов и интегралов перекрытия легко извлекается. Осцилляторный базис, используемый в этой модели, 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 главе, использован максимально возможный для расчетов на вычислительном кластере базис NCSM модели. Для ядра ⁷Li этот базис ограничен параметром обрезания $N_{tot}^{max}=15$ и имеет размерность примерно $2.5 \cdot 10^8$. В случае расчетов ядра ⁵Не параметр обрезания равен 17, а для ядра ⁸Ве параметр обрезания, в свою очередь, равен 14. Результаты расчетов на базисах меньшей размерности использовались только для анализа сходимости результатов.

3.2. Результаты расчета нижнего резонанса $3/2^-$ ядра ${}^5{ m He}$

Наиболее легкой системой, обладающей явными кластерными характеристиками, является ядро ⁵He. Нижнее состояние $3/2^-$ этого ядра является резонансным состоянием системы ⁴He+n. Экспериментальное значение резонансной энергии данного состояния равняется 890 кэВ, ширина распада - 600 кэВ [82], для этого состояния открыт единственный распадный канал в ⁴He+n с орбитальным моментом l=1. Поэтому теоретический расчет парциальной ширины
	ovp	$N_{max}=15$	$N_{max}=15$	$N_{max}=15$	$N_{max} = 17$	$N_{max}=17$	$N_{max} = 17$
	exp.	$\hbar\omega = 12.5$	$\hbar\omega = 15$	$\hbar\omega = 17.5$	$\hbar\omega = 12.5$	$\hbar\omega = 15$	$\hbar\omega = 17.5$
E_{tot}	27.406	27.268	27.214	27.137	27.335	27.279	27.209
SF	_	0.91499	0.9521	0.9653	0.9148	0.9523	0.9658

Таблица 3.1. Полная энергия связи и спектроскопический фактор состояния 3/2⁻ ядра ⁵He.

распада исследуемого канала должен с хорошей точностью совпадать с экспериментальным значением.

Расчеты проводились с применением потенциала Daejeon16 для набора значений осцилляторного параметра $\hbar \omega$ - 12.5, 15, 17.5 МэВ. Подсистема ⁴Не рассиитывалась с параметром обрезания вплоть до $N_{4He}^{max} = 4$. Для значения осцилляторного параметра $\hbar \omega = 12.5$ МэВ $E_{4He} = 26.778$ МэВ, $\hbar \omega = 15$ МэВ - $E_{4He} = 27.784$ МэВ, а для $\hbar \omega = 17.5$ - $E_{4He} = 28.102$ МэВ. В свою очередь, доля минимальной конфигурации $0s_{1/2}^4$ составляет от 89 до 97%. Данные значения показывают, что подсистема ⁴Не описывается с данным параметром обрезания на хорошем уровне, так как значения полной энергии связи состояния сходятся медленней, чем другие наблюдаемые величины.

В таблице 3.1 показаны значения полной энергии системы ⁵Не и значения спектроскопического фактора канала ⁴Не+n. Как следует из этой таблицы, при данных значениях параметров обрезания для всех значений параметров осцилляций $\hbar\omega$ достигается сходимость к экспериментальному значению энергии. Значения спектроскопических факторов показывают слабую зависимость от изменения значения параметра $\hbar\omega$. Значение спектроскопического фактора медленно растет с ростом параметра $\hbar\omega$, что согласуется с ростом полной энергии связи ⁴Не с параметром обрезания $N_{4He}^{max} = 4$.

	n=0	n=1	n=2	n=3	n=4	n=5	n=6	n=7
$N_{^4He}^{max}=0$	0.792	-0.154	0.277	-0.135	0.112	-0.067	0.038	-0.016
$N_{^4He}^{max}=2$	0.859	-0.198	0.305	-0.148	0.123	-0.073	0.040	
$N_{^{4}He}^{max}=4$	0.888	-0.207	0.302	-0.153	0.127	-0.075		

Таблица 3.2. Осцилляторные амплитуды нейтронного формфактора состояния $3/2^-$ ядра ⁵Не для $\hbar\omega = 15$ МэВ.

В таблице 3.2 показаны значения осцилляторных амплитуд нейтронного формфактора состояния $3/2^-$ ядра ⁵Не для $\hbar\omega = 15$ МэВ. Как следует из данной таблицы, разница для большинства осцилляторных амплитуд составляет не более 10% для всех уровней описания кластера ⁴Не, от минимальной конфигурации вплоть до N_{4He}^{max} =4. Разница между значениями осцилляторных амплитуд нейтронного формфактора для N_{4He}^{max} =2 и N_{4He}^{max} =4 составляет порядка 3%. Из этого следует, что параметр обрезания равный двум достаточен для точного описания нейтронного формфактора.

Полученные осцилляторные амплитуды нейтронного формфактора позволяют построить нейтронные формфакторы в явной форме как функции относительного движения. На рисунке 3.1 представлены нейтронные формфакторы состояния $3/2^-$ для разных значений осцилляторного параметра. Как видно из графиков для случаев расчетов с разными параметрами $\hbar\omega$ нейтронный формфактор остается практически постоянным. Различие между формфакторами для разных значений параметра обрезания N_{4He}^{max} также незначительно и уменьшается с ростом значения осцилляторного параметра.

Для ab initio расчета ширин резонансов проводится сшивка точного решения с двухтельным, которое является верным для больших расстояний между кластерами, при которых можно пренебречь сильным взаимодействием и обменными эффектами между ними, за исключением перенормировки обменным ядром МРГ, учитываемой формулой (1.38). Для нейтронного резонанса асимп-



Рис. 3.1. Нейтронные формфакторы состояния 3/2^{- 5}Не для, соответственно, $\hbar\omega=12.5,\,15,\,17.5$ МэВ.



Рис. 3.2. Функции Неймана и Бесселя для нейтронного резонанс
а $3/2^-$ ядра $^5\mathrm{He}$ с энергией 890 кэ
B.

тотическим решением являются функции Неймана и Бесселя.

Для резонанса $3/2^-$ с энергией 890 кэВ графики этих функций представлены на рисунке 3.2. Как следует из данных графиков для всех точек интересующей нас области имеет смысл соотношение $F_l(\rho_{in}) \ll G_l(\rho_{in})$, то есть функцией Бесселя можно пренебречь.

Графики логарифмических производных нейтронных формфакторов и функции Неймана представлены на рисунке 3.3. Как следует из данных графиков равенство логарифмических производных достигается при 3.6 фм для $N_{He}=2$, а для $N_{He}=0$, 4 равенство достигается при 4.0 фм.

На рисунке 3.4 представлено соотношение между формфактором и функцией Неймана в окрестности точки сшивки. Как следует из данного графика, в окрестности точки сшивки данное соотношение выходит на константу, что означает правильность определения точки сшивки и достаточность использованного оболочечного базиса для высококачественного вычисления формфактора.



Рис. 3.3. Графики логарифмических производных нейтронных формфакторов и функции Неймана состояния 3/2⁻ ядра ⁵He.



Рис. 3.4. Соотношение в окрестности точки сшивки между нейтронным формфактором $F_A^{c_\kappa}(\rho)$ и внешним решением $n_l(r)$ состояния $3/2^-$ ядра ⁵Не.

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

Таблица 3.3. Результаты расчета резонанса $3/2^{-5}$ Не для различных значений N_{max} и $\hbar\omega$.

Соотношение между формфактором и функцией Неймана, представленное на рисунке 3.4, использовалось для расчета ширины распада резонанса по формуле (1.42). Результаты расчетов представлены в таблице 3.3. Как следует из этих расчетов 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 надежность созданного метода.

3.3. Связанные и резонансные состояния ядра ⁷Li

В ходе работ по анализу асимптотических характеристик легких ядер проводилось теоретическое исследование основного и нижних возбужденных состояний ядра ⁷Li канала α +t. Для связанных состояний рассчитывались асимптотические нормировочные коэффициенты (AHK), для резонансных - парциальные ширины распадов. Для расчетов волновых функций ядра ⁷Li, альфа-частицы и тритона в рамках NCSM модели использовался оболочечный код Bigstick, удобный для использования на многопроцессорных компьютерных кластерах, что позволило при расчетах энергии и волновых функций уровней ядра ⁷Li выйти на указанный уровень параметра обрезания базиса N_{tot}^{max} =15. Величина осцилляторного параметра $\hbar\omega$ была выбрана равной 20.0 МэВ для потенциала Daejeon16 и 22.5 МэВ для потенциала JISP16.

АНК и ширины распада резонансных состояний, согласно выражениям (1.42) и (1.43), зависят от величин КФФ канала α +t в точках сшивки. Коэффициенты его разложения по осцилляторным функциям (амплитуды КФФ) $\Phi_{AA_1A_2}^{nl=1}$ для состояния $3/2^-$ и случая применения потенциала Daejeon16 представлены в таблице 3.4. Содержащиеся в таблице данные показывают, что уже для параметра обрезания базиса N_{tot}^{max} =13 достигается сходимость доминирующих амплитуд КФФ, а выбор параметра обрезания базисов волновых функций кластеров N_{cl}^{max} слабо влияет на эти величины. Мерой сходимости может служить суммарное среднеквадратичное отклонение амплитуд КФФ в разных вариантах расчета. Если не учитывать вариант, в котором N_{tot}^{max} =13, а N_{cl}^{max} =4, где размера базиса не хватает для вычисления амплитуды, характеризующейся значением n=7, это отклонение оказывается меньше 1 процента. В силу этого можно выбрать любой из представленных вариантов за исключением указанного.

Амплитуды кластерных формфакторов использовались для получения кластерных формфакторов как функций от относительного движения кластеров. Эти функции представлены на рисунках 3.5 и 3.6 для потенциалов Daejeon16 и JISP16, соответственно. По сравнению с каналом $\alpha+n$ при тщательном описании волновых функций кластеров из-за ограничения по суммарному осцилляторному кванту наблюдается недостаточность описания функции относительного движения. В качестве примера, для состояния $7/2^-$ для значений $N_{tot}^{max}=15$ и $N_{He}=4$, $N_t=4$ относительное движение описывается тремя осцилляторными функциями, что явно недостаточно. Это демонстрируется на рисунке 3.5. Как следует из графиков формфакторов описания $N_{cl}^{max}=0,2$ мало отличаются друг от друга, в отличие от описания с $N_{cl}^{max}=4$. По этой причине для расчетов в этой работе был выбран вариант соответствующий $N_{tot}^{max}=15$, а $N_{cl}^{max} \leq 2$.

80



Рис. 3.5. Кластерные формфакторы состояний $3/2^-$, $1/2^-$, $7/2^-$, $5/2^-$ ядра ⁷Li, рассчитанные с применением потенциала Daejeon16 с осцилляторным параметром $\hbar\omega$ =20 МэВ.



Рис. 3.6. Кластерные формфакторы состояний 3/2-, 1/2-, 7/2-, 5/2- ядра ⁷Li, рассчитанные с применением потенциала JISP16 с осцилляторным параметром $\hbar\omega$ =22.5 МэВ.



Рис. 3.7. Значение асимптотического нормировочного коэффициента для состояний 3/2-(красная линия), 1/2-(зеленая линия) ядра ⁷Li в окрестности точки сшивки для потенциала Daejeon16.

Таблица 3.4. Значения амплитуд КФФ $\Phi_{AA_1A_2}^{nl=1}$ канала ⁷Li \rightarrow ⁴He+³H состояния 3/2⁻ для различных вариантов базисов, используемых при расчетах ВФ ядра и кластеров. Расчет проводился для потенциала Daejeon16.

N_{tot}^{max}	N_{cl}^{max}	n=1	n=3	n=5	n=7
13	0	0.0	0.745	-0.419	0.262
	2	0.007	0.752	-0.435	0.271
	4	0.092	0.753	-0.440	0.0
15	0	0.0	0.729	-0.421	0.273
	2	0.006	0.736	-0.436	0.282
	4	0.090	0.737	-0.443	0.288

J^{π}	$3/2^{-}$	$ 1/2^{-}$
$E^{tot}(th)$	39.110	38.279
$E^{tot}(exp)$	39.245	38.767
$E^*(th)$	0	0.831
$E^*(exp)$	0	0.478
$E_{\alpha+t}(th)$	-2.405	-1.569
$E_{\alpha+t}(exp)$	-2.467	-1.989
$S_{\alpha+t}(th)$	0.859	0.835
$ ho_{match}$	4.41	4.42
$A^{\alpha+t}(th)$	3.44	2.95
$A^{\alpha+t}(exp)$	3.57 ± 0.15	3.00 ± 0.15

Таблица 3.5. Энергии возбуждения (МэВ) и АНК (фм^{-1/2}) связанных состояний ядра ⁷Li, рассчитанных с помощью потенциала Daejeon16.

Таблица 3.6. Энергии возбуждения (МэВ) и ширины распада (кэВ) резонансных состояний ядра ⁷Li, рассчитанных с помощью потенциала Daejeon16.

J^{π}	$7/2^{-}_{1}$	$5/2^{-}_{1}$	$5/2_{2}^{-}$
$E^*(th)$	4.700	7.497	8.294
$E^*(exp)$	4.630	6.680	7.459
$E_{\alpha+t}(th)$	2.295	5.092	5.889
$E_{\alpha+t}(exp)$	2.163	4.213	4.992
$S_{\alpha+t}(th)$	0.722	0.402	0.359
$ ho_{match}$	4.34	4.34	4.36
$\Gamma(th)$	65	564	797
$\Gamma(exp)$	93 (69)	880	89

J^{π}	$3/2^{-}$	$1/2^{-}$
$E^{tot}(th)$	37.929	37.29
$E^*(th)$	0	0.639
$E_{\alpha+t}(th)$	-1.50	-0.861
$S_{\alpha+t}(th)$	0.810	0.797
$ ho_{match}$	4.08	4.08
$A^{\alpha+t}(th)$	2.84	2.421
$A^{\alpha+t}(exp)$	3.57 ± 0.15	3.00 ± 0.15

Таблица 3.7. Энергии возбуждения (МэВ) и АНК (фм^{-1/2}) связанных состояний ядра ⁷Li, рассчитанных с помощью потенциала JISP16.

Таблица 3.8. Энергии возбуждения (МэВ) ширины распада (кэВ) резонансных состояний ядра ⁷Li, рассчитанных с помощью потенциала JISP16.

J^{π}	$7/2_{1}^{-}$	$5/2^{-}_{1}$	$5/2_{2}^{-}$
$E^*(th)$	5.304	7.597	8.438
$E_{\alpha+t}(th)$	3.804	6.097	6.938
$S_{\alpha+t}(th)$	0.697	0.701	0.012
$ ho_{match}$	4.08	4.03	4.04
$\Gamma(th)$	34.8	438	9.71
$\Gamma(exp)$	93~(69)	880	89

Полученные в расчетах с потенциалом Daejeon16 величины полной энергии связи нижних уровней ядра ⁷Li, представленные в таблицах 3.5, 3.6, 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. Расчеты с потенциалом JISP16, представленные в таблицах 3.7, 3.8, воспроизводят пороговые энергии с несколько меньшей точностью, ввиду того, что данный потенциал более жесткий и расчеты с его применением медленнее сходятся к экспериментальным значениям. Исключением является разность энергий между уровнями $3/2^-$ и $1/2^-$, которая в расчетах с JISP16 описывается значительно лучше.

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. Так, значение асимптотического нормировочного коэффициента состояния $3/2^-$, энергия развала которого, представленная в таблице 3.5, весьма точно воспроизводится в теоретических расчетах, меняется с 3.44 до 3.30 (на 3 процента) при замене экспериментальной энергии на теоретическую, т. е при изменении энергии на 62 кэВ. Для состояния $1/2^-$ энергия развала которого не достаточно точно воспроизводится как в нашем, так и во всех других расчетах с потенциалом Daejeon16 – это недостаток потенциала, а не базиса – отличие составляет 24 процента. По той причине, что воспроизвести с должной точностью малые по отношению к полной энергии связи ядра ⁷Li и суммарной энергии связи кластеров разности энергий для возбужденных состояний ядер на данном этапе развития ab initio расчетов невозможно, в наших расчетах использовались экспериментальные значения энергии развала,



Рис. 3.8. Отношение КФФ($\Phi_l(r)$) и нерегулярной кулоновской функции($G_l(\eta, kr)$) в окрестности точки сшивки для состояний 7/2⁻ (красная линия), 5/2⁻(1) (зеленая), 5/2⁻(2) (синия) ядра ⁷Li для потенциала Daejeon16.

как для потенциала Daejeon16, так и для потенциала JISP16. Результаты расчетов представлены в таблицах 3.5 и 3.6 для потенциала Daejeon16 и в таблицах 3.7 и 3.8 для потенциала JISP16.

Большие значения СФ связанных состояний указывают на высокую степень кластеризации системы в исследованных состояниях. Для этих состояний точки сшивки практически совпадают. Важно отметить также то обстоятельство, что в области этой единой точки соотношение (1.43) для обоих состояний почти не изменяется, это демонстрирует рисунок 3.7. Данный факт подтверждает устойчивость используемой процедуры вычисления АНК. Величины АНК, рассчитанные с потенциалом Daejeon16, находятся в хорошем согласии со значениями, извлеченными из эксперимента, подтверждая его. Результаты полученные с применением потенциала JISP16 показывают несколько худшее согласие с экспериментом.

Точки сшивки КФФ с асимптотическими волновыми функциями резонанс-

ных состояний также практически совпадают. Они находятся в подбарьерной области и, поэтому, удовлетворяют условию $F_l(\rho_{in}) \ll G_l(\rho_{in})$. Как и в случае связанных состояний, для всех трех исследованных резонансных уровней в области точки сшивки отношение КФФ и нерегулярной кулоновской функции почти не изменяется, что демонстрирует рисунок 3.8.

Состояние 7/2⁻ является сильно кластеризованным. Вычисленное значение его распадной ширины находится в очень хорошем согласии с экспериментальным значением, полученным в работе [89] (в таблице 3.6 указано в скобках). В стандартных спектроскопических таблицах это значение приводится как альтернативное к общепринятой величине ширины – 93 кэВ [82]. Учитывая высокую стабильность наших расчетов мы рассматриваем полученный результат как серьезный аргумент в пользу версии работы [89]. Результаты полученные с применением потенциала JISP16 оказываются в худшем соотношении с экспериментом, как и в случае связанных состояний.

На фоне успешного описания асимптотических характеристик трех указанных уровней наблюдается резкое несоответствие вычисленной с потенциалом Daejeon16 ширины второго уровня $5/2^-$ экспериментальной. Причинами этого несоответствия являются свойства используемого потенциала и малое расстояние (~800 кэВ) между двумя уровнями $5/2^-$ по сравнению уровнями, соответствующими другим J^{π} , что приводит к высокой чувствительности ВФ к небольшим изменениям параметров взаимодействия. Расчеты спектроскопических факторов и распадных ширин с помощью потенциала JISP16 дали совсем иную картину. Суммарный СФ в расчетах уровней $5/2^-$ с потенциалами Daejeon16 и JISP16 оказывается довольно близким по величине, в то же время отношение спектроскопических факторов радикально отличается. Большое значение СФ состояния $5/2^-_2$ определяется, очевидно, вкладом компонент со спином S = 1/2. Избыток этих компонент, получающийся в расчетах состояния $5/2^-_2$ с потенциалом Daejeon16, и, соответственно, их недостаток в состоянии $5/2^-_1$ указывает на какие-то особенности описания спин-зависимых (спин-орбитальных и тензорных) сил этим потенциалом. Величины распадных ширин состояний $5/2^-$, рассчитанных с потенциалом JISP16, являются заниженными по сравнению с экспериментом, хотя качественно соотношение между ними можно рассматривать как соответствующее эксперименту, в отличие от соотношения, полученного с потенциалом Daejeon16. Действительно, в любых расчетах статистический вес малых компонент трудно с хорошей точностью воспроизвести количественно, а именно примесь таких компонент со спином S = 1/2 определяет СФ канала α +t.

В результатах расчетов состояний ⁷Li показана перспективность разработанного метода для теоретических расчетов асимптотических характеристик состояний с кластерами подобными ⁴He и ³H, особенно в случае применения реалистического нуклон-нуклонного потенциала Daejeon16. Также показывается, что для узких дублетов состояний с одним и тем же спином и четностью их асимптотические характеристики весьма чувствительны к выбору используемого в расчетах нуклон-нуклонного потенциала. Эта особенность позволяет также рассматривать развитый подход как дополнительный тест качества потенциальной модели.

3.4. Расчеты ширин нижних резонансных состояний ядра ⁸Ве

При продолжении этого теоретического исследования легких ядер был проведен расчет ширин распадов нижних резонансных состояний ядра ⁸Be, а именно ротационной серии 0⁺, 2⁺, 4⁺. Расчет этих состояний уже приводился в предыдущей главе, там в рамках разработанной методики получались полные энергии связи и меры кластеризации этих состояний. Там же был получен любопытный результат, что даже эти состояния не являются чисто кластерными. Теперь с помощью разработанной методики в рамках той же модели с теми же потенциалами исследуются асимптотические характеристики этих состояний.



Рис. 3.9. Кластерные формфакторы состояний 0⁺, 2⁺, 4⁺ ядра ⁸Ве, рассчитанные для потенциала Daejeon16 с параметром $\hbar\omega$ =15 МэВ (левые графики) и для потенциала JISP16 с $\hbar\omega$ =22.5 МэВ (правые графики).

Расчеты производились с помощью того же программного обеспечения, что и расчеты ядра ⁷Li, но для проверки их устойчивости расчеты проводились для целого набора осцилляторных параметров: $\hbar\omega$ =12.5, 15, 17.5 MэB для потенциала Daejeon16 и $\hbar\omega$ =20, 22.5, 25 MэB для потенциала JISP16. Суммарное число осцилляторных квантов системы в этих расчетах достигало значения 14, размер базиса детерминантов Слейтера в таком случае равнялся 1.87*10⁸.

Как следует из таблиц 3.9, 3.10 для расчетов как с потенциалом Daejeon16, так и с потенциалом JISP16 при такой размерности базиса обеспечивается сходимость значений полных энергий связи этих состояний к экспериментальным значениям, энергии возбуждения уровней 2^+ и 4^+ также показывают хорошее согласие с экспериментом. Тем не менее, воспроизводимость резонансных энергий с должной точностью для их использования в расчетах асимптотики не достигается, как и в случае с расчетом уровней ⁷Li.

Для осуществления сшивки кластерного формфактора с двухтельным решением в рамках нашей методики необходимо выполнение условия малости регулярного решения двухтельного уравнения по сравнению с нерегулярным: $F_l(\rho_{in}) << G_l(\rho_{in})$. На рисунке 3.10 для экспериментальных значений энергий представлены Кулоновские функции для состояний 0⁺, 2⁺, 4⁺. Как следует из графиков для состояния 0⁺ во всей значимой области регулярной функцией можно пренебречь, для состояния 2⁺ равенство регулярной и нерегулярной функций достигается при 6.5 фм, а для состояния 4⁺ при 5.3 фм. Таким образом при расчетах асимптотических характеристик состояния 4⁺ необходимо обратить внимание на положение точки сшивки в свете необходимости условия малости регулярной функции.

Кластерные формфакторы состояний 0⁺, 2⁺, 4⁺ рассчитываются по формуле (1.38), по методике аналогичной примененной для ядер ⁵He, ⁷Li. Коэффициенты их разложения по осцилляторным функциям (амплитудам КФФ) $\Phi_{AA_1A_2}^{nl=0,2,4}$

J^{π}	Е	E*	$ ho_{match}$	$S_{\alpha+\alpha}$	Γ	
	ЭК	спериме	нтальнь	ле значе	ния	
0+	56.500	0.0	_	_	5.6(6.8) эВ	
2^{+}	53.460	3.040	_	_	1.5 МэВ	
4^{+}	45.100	11.40	_	_	3.5 МэВ	
тес	ретичес	кий рас	чет с N_t	_{ot} =12, ħ	$\omega=20~{ m M}$ эВ	
0+	52.130	0.0	3.39	0.8384	6.836 эВ	
2^+	48.373	3.757	3.39	0.800	1.086 МэВ	
4^+	39.341	12.789	3.41	0.7237	1.506 МэВ	
теој	ретическ	кий расч	ет с N_{to}	_t =12, ħω	$\nu = 22.5 \text{ M}$ əB	
0+	52.354	0.0	3.26	0.8427	7.1 эВ	
2^+	48.622	3.732	3.27	0.8014	1.107 МэВ	
4^{+}	39.672	12.682	3.27	0.7237	1.399 МэВ	
тес	оретичес	кий рас	чет с N_t	_{ot} =12, ħ	$\omega=25~{ m M}$ эВ	
0+	52.112	0.0	3.15	0.8434	7.36 эВ	
2^+	48.391	3.721	3.15	0.7987	1.100 МэВ	
4^{+}	39.495	12.615	3.15	0.7201	1.283 МэВ	
теој	теоретический расчет с N_{tot} =14, $\hbar\omega$ = 22.5 МэВ					
0^+	53.776	0.0	3.53	0.8417	6.719 эВ	
2^+	50.112	3.664	3.54	0.8038	1.083 МэВ	
4^+	41.277	12.499	3.59	0.7291	1.646 МэВ	

92

Таблица 3.10. Энергии возбуждения (МэВ), ширины распада резонансных состояний ядра $^8{\rm Be},$ рассчитанные с помощью потенциала Daejeon16.

J^{π}	Е	E*	$ ho_{match}$	$S_{\alpha+\alpha}$	Γ	
	ЭК	спериме	нтальны	ые значе:	ния	
0^+	56.500	0.0	_	-	5.6(6.8) эВ	
2^+	53.460	3.040	_	_	1.5 МэВ	
4^+	45.100	11.40	_	_	3.5 МэВ	
теој	ретичесь	кий расч	ет с N_{to}	_t=12, ħω	$\nu = 12.5 \text{ M}$ əB	
0+	55.270	0.0	4.05	0.8366	6.913 эВ	
2^+	51.805	3.465	4.06	0.8089	1.239 МэВ	
4^{+}	43.397	11.873	4.31	0.7571	2.964 МэВ	
тес	ретичес	кий рас	чет с N _t	$h_{ot}=12, \hbar$	ω = 15 ΜэΒ	
0^+	55.720	0.0	3.89	0.8759	8.13 эВ	
2^+	52.245	3.475	3.89	0.8414	1.421 МэВ	
4^{+}	43.783	11.937	3.98	0.7656	2.843 МэВ	
теој	ретичесь	кий расч	ет с N_{to}	_t=12, ħω	$\nu = 17.5 \text{ M} \Rightarrow \text{B}$	
0^+	55.605	0.0	3.88	0.8294	6.605 эВ	
2^+	52.100	3.505	3.91	0.8215	1.150 МэВ	
4^+	43.542	12.063	4.2	0.7785	2.38 МэВ	
тес	теоретический расчет с N _{tot} =14, $\hbar\omega = 15~{ m M} m sB$					
0^+	56.241	0.0	4.23	0.8797	7.293 эВ	
2^+	52.840	3.401	4.27	0.8497	1.306 МэВ	
4^+	44.617	11.624	4.56	0.7920	3.24 МэВ	



Рис. 3.10. Кулоновские функции для нижних состояний ядра ⁸Ве и графики логарифмических производных кластерных формфакторов ядра ⁸Ве и нерегулярной Кулоновской функции для потенциала JISP16.



Рис. 3.11. Соотношение в окрестности точки сшивки между кластерным формфактором и внешним решением для состояний 0^+ , 2^+ , 4^+ ядра ⁸Ве для потенциала JISP16.

для разных значений параметра обрезания базисов волновых функций кластеров N_{cl}^{max} мало отличаются для всех использованных значений осцилляторных параметров как для случая использования потенциала Daejeon16, так и для случая потенциала JISP16. Этот результат полностью аналогичен результату, полученному при расчетах осцилляторных амплитуд нижних состояний ядра ⁷Li. Поэтому для расчетов ширин распадов достаточно использовать параметр обрезания N_{cl}^{max} равный двум.

Графики кластерных формфакторов состояний 0⁺, 2⁺, 4⁺ представлены на рисунке 3.9. Значения спектроскопических факторов показаны в таблицах 3.9 и 3.10. Расчеты проводились для максимального значения суммарного осцилляторного кванта $N_{tot}^{max} = 14$ и значений осцилляторного параметра $\hbar\omega = 22.5$ для JISP16 и $\hbar\omega$ =15 для Daejeon16. Как следует из этих графиков, функции кластерных формфакторов мало отличаются для случаев N_{cl}^{max}=0,2, что подтверждает факт малых отличий осцилляторных амплитуд и достаточность осцилляторного базиса для описания относительного движения кластеров. Также графики кластерных формфакторов состояний 0^+ и 2^+ для потенциалов Daejeon16 и JISP16 показывают неплохую степень сходства. Это сходство подтверждается меньшими различиями значений спектроскопических факторов состояний 0⁺ и 2⁺ чем для случая состояния 4⁺. Спектроскопический фактор состояния 0⁺ равняется 0.84, а состояния 2^+ - 0.8, в случае применения потенциала JISP16. Расчеты спектроскопических факторов также демонстрируют устойчивость относительно изменений значений параметра обрезания и осцилляторного параметра. Графики кластерных формфакторов состояния 4⁺ показывают более серьезные различия для расчетов с потенциалами JISP16 и Daejeon16, значения спектроскопических факторов также отличаются сильнее, для JISP16 он равен 0.72, а для Daejeon16 - 0.79.

Графики логарифмических производных представлены на рисунке 3.10. Точки сшивки указаны в таблицах 3.9 и 3.10 и для потенциала JISP16 лежат в пределах от 3.15 до 3.55 фм, а для потенциала Daejeon16 от 3.89 до 4.5 фм. В области точки сшивки соотношение между регулярной и нерегулярной Кулоновскими функциями в большинстве случаев не превышает 0.1, что означает применимость условия малости регулярного решения и возможность использования разработанного метода для расчета ширин резонансов 0⁺, 2⁺, 4⁺.

Соотношение в окрестности точки сшивки между кластерным формфактором и внешним решением для состояний 0^+ , 2^+ , 4^+ ядра ⁸Ве для потенциала JISP16 представлено на рисунке 3.11. Точка сшивки для всех состояний равняется примерно 3.5 фм и в окрестности точки сшивки ± 0.2 фм соотношение между кластерным формфактором и внешним решением остается стабильным, что означает достаточность описания кластерного формфактора в асимптотической области, в окрестности точки сшивки.

Результаты расчетов ширин распада состояний 0⁺, 2⁺, 4⁺ для потенциала JISP16 представлены в таблице 3.4, наиболее подробный расчет был проведен для осцилляторного параметра $\hbar\omega = 22.5 \text{ M} \cdot \text{B} - \text{максимальный суммарный}$ осцилляторный квант равен 14, расчеты при меньшем значении суммарного осцилляторного параметра проводились для проверки устойчивости решения. Теоретический расчет ширины состояния 0⁺ равняется 6.719 эВ, что показывает хорошее согласие с общепринятым экспериментальным значением ширины этого состояния – 6.8 эВ, согласно данным [82]. Надо отметить, что в недавной экспериментальной работе [90] приведено другое значение – 5.6 эВ. Именно это значение представлено в современных базах данных [91]. Устойчивость полученного теоретического значения служит, по нашему мнению, аргументом в пользу более раннего результата. Теоретический расчет состояния 2⁺ показывает несколько худшее согласие с экспериментальном значением – 1.083 и 1.5 МэВ, а для состояния 4⁺ теоретическое значение оказывается недооцененным – 1.646 МэВ при экспериментальном значении 3.5 МэВ. Расчеты при меньшем суммарном главном квантовом числе для разных значений параметра $\hbar\omega$ показывают устойчивость произведенного расчета как для значения спектроскопического фактора, так и для ширины распада резонансных состояний.

Для случая применения потенциала Daejeon16 также проводились расчеты для набора осцилляторных параметров $\hbar\omega$ =12.5, 15, 17.5 МэВ. Наиболее подробный расчет был проделан для максимального суммарного кванта равного 14 и $\hbar\omega$ =15 МэВ. Теоретический расчет ширины состояния 0⁺ равняется в таком случае 7.293 эВ, что также хорошо согласуется с указанным выше экспериментальным значением. Теоретический расчет ширины состояния 2⁺ приводит к значению 1.306 МэВ и лучше согласуется с экспериментальными данными, чем в случае с потенциалом JISP16. А для случая состояния 4⁺ теоретическое значение ширины равняется 3.24 МэВ, что очень хорошо согласуется с экспериментом. Следует однако отметить что ввиду дальнего расположения точки сшивки состояния 4⁺ отношение регулярного решения к нерегулярному составляет порядка 10-20%, что снижает точность примененного метода.

В итоге разработанный метод подтвердил свою эффективность в расчете асимптотических характеристик и в случае ядра ⁸Ве. Причем, в отличие от случая дуплета уровней 5/2⁻ ядра ⁷Li наблюдается хорошее согласие между расчетами с потенциалами Daejeon16 и JISP16, и с экспериментом.

3.5. Выводы

В третьей главе представлено теоретическое исследование асимптотических характеристик сильно кластеризованных состояний легких ядер. Исследование этих характеристик было проведено с помощью разработанной модели ССОFМ. Были получены значения асимптотических нормировочных коэффициентов связанных состояний и ширин распадов резонансных состояний. Вычисления исходных волновых функций кластеризованных состояний проводились на основе модели NCSM с применением оболочечного кода Bigstick, позволяющего проводить параллельные вычисления с использованием технологий орептр и mpi. Кластерный базис и асимптотические характеристики вычислялись в модели ССОFM согласно алгоритму, рассмотренному в главе 1. Асимптотические характеристики вычислялись для основных и нижних резонансных состояний ядер ⁵He, ⁷Li, ⁸Be с применением реалистических нуклонпон-нуклонных потенциалов Daejeon16 и JISP16.

Расчеты системы ⁵Не проводились на большом осцилляторном базисе вплоть до значения суммарного осцилляторного кванта равного 17, что позволяет получить достаточно точное описание асимптотики, которая представляет собой функцию Неймана. Эти расчеты выполнялись для разных значений осцилляторного параметра $\hbar \omega$. Полученные значения показывают высококачественное согласие с экспериментом и хорошую устойчивость вычислений относительно изменения параметров.

Расчеты связанных и резонансных состояний ядра ⁷Li за исключением дублета уровней $5/2^-$ также показывают хорошее согласие с экспериментом, особенно в случае применения потенциала Daejeon16. Сильное расхождение между теоретическими расчетами и экспериментальными результатами для узкого дублета состояний $5/2^-$ (разница энергий 800 кэВ между ними) может быть обусловлено как недостаточностью осцилляторного базиса, так и недостатками нуклон-нуклонных потенциалов.

Расчеты ротационной серии ядра ⁸Be – состояний 0⁺, 2⁺, 4⁺ показывают хорошее согласие ширин резонансов с экспериментальными данными в случае применения обоих потенциалов, но результаты расчета состояния 4⁺ показывают лучшее согласие с экспериментом в случае применения потенциала Daejeon16.

В итоге модель ССОFМ показала свою применимость для расчета асимптотических характеристик низколежащих возбужденных состояний как в случае расчетов состояний с однонейтронным гало, так и в случае кластеризованных состояний с кластерами подобными ³H, ⁴He. Можно полагать, что из-за сложностей экспериментального расчета асимптотических нормировочных коэффициентов, полученные теоретические значения этих величин являются одними из наиболее обоснованных на данный момент результатов. Также расчет хорошо установленных асимптотических характеристик с помощью данной модели

98

может оказаться еще одним тестом для оценки качества предлагаемых реалистических нуклон-нуклонных потенциалов, наряду с расчетами полных энергий связи основных и нижних возбужденных состояний, моментов ядер и амплитуд электромагнитных переходов.

Заключение

В итоге проведенных теоретических исследований создана модель ортогональных функций кластерных каналов CCOFM (Cluster Channel Orthogonal Functions Model), предназначенная для ab initio описания кластеризованных состояний и асимптотических характеристик кластерной фрагментации легких ядер. Математический аппарат модели основывается на базисе трансляционноинвариантных волновых функций кластерных каналов (1.20). Эти волновые функции выражаются в явном виде как линейные комбинации детерминантов Слейтера с помощью формализма кластерных коэффициентов и формализма коэффициентов Тальми-Мошинского. Разработанный метод имеет ряд преимуществ по сравнению с разработанными ранее методами NCSMC и SS-HORSE. По сравнению с методом NCSMC модель ССОFM позволяет рассчитывать кластеризованные состояния с более тяжелыми кластерами, которые могут находиться не только в основном, но и в возбужденных состояниях. По сравнению с методом SS-HORSE модель CCOFM позволяет рассчитывать не только низколежащие, но и резонансы с большей энергией и асимптотические нормировочные коэффициенты связанных состояний. Также он способен корректно описывать характеристики резонансов имеющих более одного открытого распадного канала и одновременно рассчитывать не только асимптотические, но и прочие характеристики, подобные полной энергии связи и степени кластеризации.

Метод ССОFМ применяется для двух задач. Во-первых, с его помощью возможен анализ роли кластерных компонент в решениях А-нуклонного уравнения Шрёдингера с реалистическими NN-потенциалами и уточнение NCSM расчетов кластеризованных состояний путем решения уравнения Шредингера на базисе кластерных компонент или на комбинированном базисе. Во-вторых, с его помощью можно проводить вычисления спектроскопических факторов, кластерных и нуклонных формфакторов, которые характеризуют меру кластеризации и могут быть использованы в расчетах асимптотических характеристик ядерных состояний и сечений ядерных реакций.

Проведены расчеты полных энергий связи и мер кластеризации спектров низших состояний ядер ⁹Be, ⁹B, ⁸Be и ⁷Li, обладающих ярко выраженной кластеризацией. В результате сравнения результатов расчетов на кластерном и оболочечном базисах было показан ряд преимуществ кластерного базиса, в том числе для описания «разностных» величин: энергий связи нуклонов, резонансных энергий, энергий изобарических мультиплетов и т.п.

Основным результатом расчетов полных энергий связи и спектроскопических факторов кластеризованных состояний является надежно доказанный факт, что вклад некластеризованных компонент базиса в полную энергию связи велик даже в сильно кластеризованных (характеризующихся близким к единице значением спектроскопического фактора) системах, таких как ⁸Be и ⁷Li. Более того, относительная роль некластеризованных компонент, в отличие от того, что можно было ожидать, с увеличением базиса увеличивается, хотя при увеличении максимального суммарного осцилляторного кванта N_{tot}^{max} функция относительного движения кластеров точнее описывается как на дальних, так и на ближних расстояниях. Добавление же дополнительных каналов содержащих возбужденные состояния кластеров с физически разумной шириной распада играет незначительную роль и не может изменить представленной общей картины. В итоге получается, что волновая функция кластеризованного состояния на самом деле представляет собой набор чисто кластерных волновых функций, погруженный в "море"диффузных некластерных конфигураций.

Представлены результаты расчетов асимптотических характеристик для основных и нижних резонансных состояний ядер ⁵He, ⁷Li, ⁸Be с применением реалистических нуклон-нуклонных потенциалов Daejeon16 и JISP16. Расчеты системы ⁵He проводились на большом осцилляторном базисе вплоть до значения суммарного осцилляторного кванта равного 17, что позволило получить достаточно точное описание асимптотики для разных значений осцилляторного параметра $\hbar\omega$. Полученные значения показывают высококачественное согласие

101

с экспериментом и хорошую устойчивость вычислений относительно изменения параметров. Расчеты связанных и резонансных состояний ядра ⁷Li за исключение дублета уровней 5/2⁻ также показывают хорошее согласие с экспериментом, особенно в случае применения потенциала Daejeon16. Сильное расхождение между теоретическими расчетами и экспериментальными результатами для узкого дублета состояний 5/2⁻ (разница энергий между ними составляет примерно 800 кэВ) может быть обусловлено как недостаточностью осцилляторного базиса, так и недостатками нуклон-нуклонных потенциалов. Расчет же ротационной серии ядра 8 Be – состояний 0⁺, 2⁺ показывают хорошее согласие ширин резонансов с экспериментальными данными в случае применения обоих потенциалов. Для состояния 4⁺ хорошее согласие с экспериментальными данными дает лишь потенциал Daejeon16. Представляется, что с учетом сложностей экспериментального определения асимптотических нормировочных коэффициентов связанных состояний, предложенный в данной работе метод расчета АНК для легких ядер является одним из наиболее обоснованных на данный момент методик.

В итоге метод ССОFM доказал свою применимость для расчета как полных энергий связи и мер кластеризации, так и асимптотических характеристик кластеризованных состояний, как в случае расчетов состояний с однонейтронным гало, так и в случае кластерных каналов с кластерами ⁴He. Его применение привело к ряду интересных теоретических результатов, касающихся структуры кластеризованных состояний и их асимптотических характеристик, указанных выше. Ab initio расчеты спектроскопических факторов и асимптотических характеристик связанных и резонансных состояний играют огромную роль в развитии теории ядерных реакций и астрофизики. С их помощью можно проводить реалистические расчеты дифференциальных сечений реакций на легких ядрах, связанных с передачей нуклона или кластера, реакций идущих через резонанс, астрофизических S-факторов и т.п.

В заключении выражаю признательность и искреннюю благодарность на-

учному руководителю, профессору, ведущему научному сотруднику Лаборатории теории атомного ядра ОФАЯ НИИЯФ МГУ Юрию Михайловичу Чувильскому за постановку диссертационных задач и активную помощь при выполнении их. Также хочу поблагодарить коллектив лаборатории радиационной и ядерной физики Центра Фундаментальных и Прикладных Исследований (ЦФ-ПИ) и руководство ЦФПИ Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н. Л. Духова за создание благоприятной атмосферы и консультации в ходе выполнения данной работы.

Список публикаций по теме диссертации

- A1. Rodkin D. M., Tchuvil'sky Yu. M. Ab initio calculation of onenucleon halo states // Journal of Physics: Conference Series (2018) vol. 966, 012022-1-012022-6;
- А2. 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;
- АЗ. 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;

А5. 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 литературы

- 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.
- Wheeler J. A. Molecular viewpoints in nuclear structure. On mathematical description of light nuclei by method of resonating group structure. II // Phys. Rev. 1937. Vol. 52. P. 1107.
- Wildermuth K., Tang Y. C. A Unified Theory of the Nucleus. Veiweg, 1977. 502 p.
- 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.
- Solovyev A., Igashov S., Tchuvil'sky Y. M. Study of the Radioactive Capture Reaction T+α → ⁷Li+γ in the Algebraic Version of the Resonating Group Method // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2014. Vol. 78. P. 433.
- 6. Solovyev A., Igashov S., Tchuvil'sky Y. M. Describing Radiative Capture Reactions Using Algebraic Versions of the Resonating Group Model and the Orthogonality Conditions Model // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2016. Vol. 80. P. 290.
- 7. Solovyev A., Igashov S., Tchuvil'sky Y. M. Microscopic Calculation of Astrophysical S-factor and Branching Ratio for the $3H(\alpha, \gamma)7Li$

Reaction // EPJ Web of Conferences. 2015. Vol. 86. P. 00054.

- Solovyev A., Igashov S., Tchuvil'sky Y. M. Radiactive Capture Processes in Multi-Scale Algebraic Version of Resonating Group Model // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Vol. 863. P. 012015.
- Horiuchi H. Kernels of GCM, RGM and OCM and their calculation methods // Prog. Theor. Phys. Suppl. 1977. Vol. 62. P. 90.
- 10. Adahchour A., Descouvement P. Microscopic cluster model of ⁵H and ⁵He (T=3/2) // Nucl. Phys. A. 2008. Vol. 813. P. 252.
- Descouvement P., Baye D. ¹²Be molecular states in a microscopic cluster model // Phys. Lett. B. 2001. Vol. 505. P. 71.
- Arai K., Descouvemont P., Baye D., Catford W. Resonance structure of ⁹Be and ⁹B in a microscopic cluster model // Phys. Rev. C. 2003. Vol. 68. P. 014310.
- Tohsaki A., Horiuchi H., Schuck P., Roepke G. Alpha Cluster Condensation in ¹²C and ¹⁶O // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 192501.
- 14. Funaki Y., Tohsaki A., Horiuchi H. et al. Inelastic formfactors to alpha-particle condensate state in ¹²C and ¹⁶O: What can we learn? // European Physical Journal A. 2006. Vol. 28. P. 259.
- Funaki Y., Horiuchi H. et al. Concepts of nuclear α-particle condensation // Phys. Rev. C. 2009. Vol. 80. P. 064326.

- Kanada-En'yo Y., H.Horiuchi. Structure of Light Unstable Nuclei with Antisymmetrized Molecular Dynamics // Prog. Theor. Phys. Suppl. 2001. Vol. 142. P. 205.
- 17. Neff T., Feldmeier H. Cluster and shell structures in the fermionic molecular dynamics approach // Int. J. Mod. Phys. E. 2008. Vol. 17. P. 2005.
- Neff T. Microscopic Calculation of the ³He (α, γ) ⁷Be and ³H (α, γ) ⁷Li Capture Cross Sections Using Realistic Interactions // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106. P. 042502.
- Pudliner B. S., Pandharipande V. R., Carlson J. et al. Quantum Monte Carlo calculations of nuclei with A ≤ 7 // Phys. Rev. C. 1997. Vol. 56. P. 1720.
- 20. Wiringa R. B., Pieper S. C., Carlson J., Pandharipande V. R. Quantum Monte Carlo calculations of A = 8 nuclei // Phys. Rev. C. 2000. Vol. 62. P. 014001.
- Pieper S. C., Wiringa R. B. Quantum Monte Carlo Calculations of Light Nuclei // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 2001. Vol. 51. P. 53.
- 22. Pieper S. C., Varga K., Wiringa R. B. Quantum Monte Carlo calculations of A = 9,10 nuclei // Phys. Rev. C. 2002. Vol. 66.
 P. 044310.
- Epelbaum E., Krebs H., Lee D., Meissner U. G. Ab initio calculation of the Hoyle state // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106.
P. 192501.

- 24. Klein N., Elhatisari S. et al. The Tjon Band in Nuclear Lattice Effective Field Theory // European Physical Journal A. 2018. Vol. 54. P. 7.
- 25. Navratil P., Vary J. P., Barrett B. R. Properties of ¹²C in the Ab Initio Nuclear Shell Model // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. P. 5728.
- 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.
- 27. Maris P., Vary J., Shirokov A. M. Ab initio no-core full configuration calculations of light nuclei // Phys. Rev. C. 2009. Vol. 79. P. 014308.
- Maris P., Shirokov A., Vary J. Ab initio nuclear structure simulations: The speculative ¹⁴F nucleus // Phys. Rev. C. 2010. Vol. 81. P. 021301.
- 29. Maris P., Vary J. P. Ab initio nuclear structure calculations of p-shell nuclei with JISP16 // Int. J. Mod. Phys. E. 2013. Vol. 22. P. 1330016.
- 30. Barret B. R., Navratil P., Vary J. P. Ab initio no-core shell model // Progr. Part Nucl. Phys. 2013. Vol. 69. P. 131.
- 31. Negoita G. A., Vary J. P., Luecke G. R. et al. Deep Learning:

Extrapolation Tool for Ab Initio Nuclear Theory // arXiv preprint. 2018. no. 1803.03215.

- 32. Stump C., Braun J., Roth R. Importance-Truncated Large-Scale Shell Model // Phys. Rev. C. 2016. Vol. 93. P. 021301.
- Roth R. Importance Truncation for Large-Scale Configuration Interaction Approaches // Phys. Rev. C. 2009. Vol. 79. P. 064324.
- 34. Koonin S. E., Deand D. J., Langanke K. Shell Model Monte Carlo Methods // Phys. Reports. 1997. Vol. 278, no. 1. P. 1.
- 35. Draayer J. P., Dytrych T., Sviratcheva K. D., Bahri C. Symplectic ab initio no-core shell model // REVISTA MEXICANA DE FISICA. 2008. Vol. 54, no. 3. P. 36.
- 36. Dytrych T., Sviratcheva K. D., Bahri C. et al. Dominant role of sympletic symmetry in ab initio no-core shell model results for light nuclei // Phys. Rev. C. 2007. Vol. 76. P. 014315.
- 37. Dreyfuss A. C., Launey K. D., Dytrych T. et al. Hoyle state and rotational features in Carbon-12 within a no-core shell model framework // Phys. Lett. B. 2013. Vol. 727. P. 511.
- Tobin G. K., Ferriss M. C., Launey K. D. et al. Sympletic no-core shell-model approach to intermediate-mass nuclei // Phys. Rev. C. 2014. Vol. 89. P. 034312.
- 39. Varga K., Liotta R. J. Shell model on random Gaussian basis // Phys. Rev. 1994. Vol. 50. P. 1697.

- 40. Rijken T. A., Polinder H. Extended-soft-core NN potentials in momentum space. II. Meson-pair exchange potentials // Phys. Rev. C. 2002. Vol. 66. P. 044009.
- 41. Machleidt R. The high-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential (CD-Bonn) // Phys. Rev. C. 2000. Vol. 63. P. 024001.
- 42. Shirokov A. M., Mazur A. I. et al. Nucleon-nucleon interaction in the J-matrix inverse scattering approach and few-nucleon systems // Phys. Rev. C. 2003. Vol. 70. P. 044005.
- 43. Shirokov A. M., Mazur A. I. et al. Novel NN interaction and the spectroscopy // Physics Letters B. 2005. Vol. 621, no. 1. P. 96.
- 44. Shirokov A. M., Kulikov V. A. et al. NN interaction JISP16: Current Status and Prospect // EPJ Web of Conferences. 2010. Vol. 3, no. 05015.
- 45. 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.
- 46. Entem D. R., Machleidt R., Nosyk Y. High-quality two-nucleon potentials up to fifth order of the chiral expansion // Phys. Rev. C. 2017. Vol. 96. P. 024004.
- 47. Fadeev L. D. Scattering theory for a three-particle system // Soviet Physics JETP. 1960. Vol. 12. P. 1014–1019.

- 48. Minlos R. A., Fadeev L. D. Comment on the problem of three particles with point interactions // Soviet Physics JETP. 1961. Vol. 41. P. 1850.
- 49. Leidemann W., Orlandini G. Modern ab initio approaches and applications in few-nucleon physics with A ≥ 4 // Prog. Part. Nucl. Phys. 2013. Vol. 68. P. 158.
- 50. Efros V., Leidemann W., Orlandini G. The Lorentz integral transform (LIT) method and its applications to perturbation-induced reactions // J. of Phys. G. 2007. Vol. 34, no. 12. P. 459.
- 51. Efros V., Leidemann W., Deflorian S. Determination of S-Factors with the LIT Method // Few-Body Systems. 2016. Vol. 58. P. 27.
- Quaglioni S., Navratil P. Ab initio many-body calculations of nucleon-nucleus scattering // Phys. Rev. C. 2009. Vol. 79. P. 044606.
- 53. 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 ⁷He // Phys. Rev. C. 2013. Vol. 87. P. 034326.
- Langhammer J., Navratil P., Quaglioni S. et al. Continuum and three-nucleon force effects on ⁹Be energy levels // Phys. Rev. C. 2015. Vol. 91. P. 021301.
- 55. Dohet-Eraly J., Navratil P., Quaglioni S. et al. ³He (α,γ) ⁷Be and ³H (α,γ) ⁷Li astrophysical S factors from the no-core shell model with continuum // Phys. Lett. B. 2016. Vol. 757. P. 430.

- 56. 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.
- 57. Shirokov A. M., Mazur A. I., Vary J. P., Mazur I. A. Shell model states in the continuum // Phys. Rev. C. 2016. Vol. 94. P. 064320.
- 58. Shirokov A. M., Mazur A. I., Vary J. P., Mazur I. A. Description of Resonant States in the Shell Model // Phys. Part. Nucl. 2017. Vol. 48, no. 1. P. 84.
- 59. Shirokov A. M., Mazur A. I., Vary J. P., Mazur E. A. Inverse scattering J-matrix approach to nucleon-nucleus scattering and the shell model // Phys. Rev. C. 2009. Vol. 79. P. 014610.
- 60. Shirokov A. M., Mazur A. I., Vary J. P., Mazur E. A. No-Core Shell Model and Continuum Spectrum States of Light Nuclei // Appl. Math Inf. Sci. 2009. Vol. 3, no. 3. P. 245.
- Shirokov A. M., Papadimitriou G., Mazur A. I. et al. Prediction for a Four-Neutron Resonance // Phys. Rev. Lett. 2016. Vol. 117. P. 182502.
- 62. Kisamori K., Shimoura S., Miya H. et al. Candidate Resonant Tetraneutron State Populated by the ⁴He(⁸He, ⁸Be) Reaction // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 116. P. 252501.
- 63. Fliessbach T., Mang H. J. On absolute values of α-decay rates // Nucl. Phys. A. 1976. Vol. 263. P. 75.

- 64. Blendowske R., Fliessbach T., Walliser H. Microscopic calculations of the ¹⁴C decay of Ra nuclei // Nucl. Phys. A. 1987. Vol. 464. P. 75.
- 65. Lovas R. G., Liottaa R. J., Insolia A. et al. Microscopic theory of cluster radioactivity // Phys. Rep. 1998. Vol. 294. P. 265.
- 66. Kadmensky S. G., Kurgalin S. D., Tchuvil'sky Y. M. Cluster states in atomic nuclei and cluster-decay // Phys. Part. Nucl. 2007. Vol. 38. P. 699.
- 67. Smirnov Y. F., Tchuvil'sky Y. M. Cluster spectroscopic factors for the p-shell nuclei // Phys. Rev. C. 1977. Vol. 15. P. 84.
- 68. Smirnov Y. F., Tchuvil'sky Y. M. The cluster spectroscopic factors of the clusterized nuclei and nuclei of the 2s-1d shell and the quasi-elastic knock-out processes // Czech. J. Phys. 1983. Vol. 33. P. 1215.
- 69. Tchuvil'sky Y. M., Kurowsky W. W., Sakharuk A. A., Neudatchin V. G. Quasi-elastic knockout of clusters from p-shell nuclei by 1 GeV protons: Spectroscopic amplitudes of virtually excited clusters and the eikonal approximation // Phys.Rev. C. 1995. Vol. 51. P. 784.
- 70. Nemets O. F., Neudachin V. G., Rudchik A. E. и др. Nuclear Clusters in Atomic Nuclei and Multinucleon Transfer Reactions. Naukova Dumka, Kiev, 1988.

- 71. Baroni S., Navratil P., Quaglioni S. Ab Initio Description of the Exotic Unbound ⁷He Nucleus // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 110. P. 022505.
- 72. Dehesa J. S. Lanczos method of tridiagonalization, jacobi matrices and physics // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1981. Vol. 7, no. 4. P. 249.
- 73. Epelbaum E., Golak J. et al. Few- and many-nucleon systems with semilocal coordinate-space regularized chiral two- and three-body forces // arXiv. 2019. no. 1807.02848.
- 74. Abe T., Maris P., Otsuka T. et al. Monte Carlo Shell Model for ab initio nuclear structure // EPJ Web of Conferences. 2014. Vol. 66, no. 02001.
- 75. Draayer J. P., Dytrych T., Sviratcheva K. D., Bahri C. Symplectic Symmetry and the Ab Initio No-Core Shell Model // REVISTA MEXICANA DE FISICA. 2007. Vol. 53, no. 6.
- 76. Barret B. R., Navratil P., Vary J. P. New-generation Monte Carlo shell model for the K computer era // Progr. Part Nucl. Phys. 2013. Vol. 69. P. 131.
- 77. Smirnov Y. F. Talmi transformation for particles with different masses(II) // Nucl. Phys. 1962. Vol. 39. P. 346.
- Kurdyumov I., Smirnov Y. F., Shitikova K., Samarai S. E. Translationally invariant shell model // Nucl. Phys. A. 1970. Vol. 145.

P. 593.

- 79. Avila M. L., Rogachev G. V., Goldberg V. Z. et al. α-cluster structure of ¹⁸O // Phys. Rev. C. 2014. Vol. 90. P. 024327.
- Volya A., Tchuvil'sky Y. M. Nuclear clustering using a modern shell model approach // Phys. Rev. C. 2015. Vol. 91. P. 044319.
- Volya A., Tchuvil'sky Y. M. Quantitative properties of clustering within modern microscopic nuclear models // Phys. At. Nucl. 2016. Vol. 79. P. 772.
- Firestone R. B., Shirley V. S. Table of Isotops, Eight edition. John Wiley Sons, 1996. 14193 p.
- Caurier E. Present status of shell model techniques // Acta Physica Polonica B. 1998. Vol. 30, no. 3. P. 705.
- Johnson, Calvin W. BIGSTICK: A flexible configuration-interaction shell-model code // arXiv. 2018. no. 1801.08432.
- 85. Descouvement P. 9Be and 9B nuclei in a microscopic three-cluster model // Phys. Rev. C. 1989. Vol. 39, no. 4. P. 1557.
- Rocca V. D. Cluster shell model: I. Structure of 9Be, 9B // Nuclear Physics A. 2018. Vol. 973. P. 1.
- Kravvaris K., Volya A. Study of Nuclear Clustering from Ab Initio Perspective // Phys. Rev. Lett. 2017. Vol. 119. P. 062501.
- B. Dytrych T., Launey K. D., Draayer J. P. et al. Collective Models in Light Nuclei from First Principles // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol.

111. P. 252501.

- 89. 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.
- 90. Tilley D. R., Kelley J. H., Godwin J. L. et al. Energy levels of light nuclei A = 8, 9, 10 // Nuclear Physics A. 2004. Vol. 745. P. 155.
- 91. Sonzogni A. Interactive Chart of Nuclides. https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/, 2019.