

Аннотация цикла работ

“Исследование структуры малонуклонных и альфа-кластерных ядер на основе новых теоретических методов”,

представленного на конкурс научных работ ОИЯИ в области теоретической физики

Автор: В.В. Самарин

Лаборатория ядерных реакций им. Г. Н. Флерова, ОИЯИ

Низкоэнергетические реакции с участием легких ядер: гелия, трития, лития, бериллия, а также альфа-кластерных ядер углерода, кислорода, неона магния составляют значительную часть изученных и изучающихся в настоящее время ядерных реакций. Ядро ${}^3\text{He}$ с небольшой энергией связи 7.7 МэВ привлекательно возможностью исследования простейших процессов однейтронных передач, называемых реакциями срыва и подхвата. В реакциях передачи и слияния с участием ядра ${}^6\text{He}$ исследуется протяженное распределение (так называемое “гало”), образованное парой внешних нейтронов. Реалистичной моделью ядра ${}^6\text{He}$ служит конфигурация из альфа-кластера и двух нейтронов: $\alpha + n + n$. Ядро ${}^9\text{Be}$ можно представить в виде конфигурации $\alpha + n + \alpha$. Кластерная структура ядра ${}^9\text{Be}$ проявляется в реакциях передачи, исследующихся в ЛЯР ОИЯИ. Реакции с изотопами Be представляют значительный интерес с нескольких точек зрения. Радиоактивное ядро ${}^7\text{Be}$ является зеркальным по отношению к стабильному ядру ${}^7\text{Li}$, которое можно представить состоящим из α -кластера и тритонного кластера. Ядра ${}^{10}\text{Be}$ и более тяжелых изотопов бериллия могут быть представлены состоящими из двух α -кластеров и нескольких внешних (валентных) слабосвязанных нейтронов. Известно, что ряд легких ядер: ${}^{12}\text{C}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{20}\text{Ne}$, ${}^{24}\text{Mg}$, ${}^{28}\text{Si}$ могут быть представлены, как состоящие из трех и более альфа-частиц (альфа-кластеров); близкие к ним ядра имеют дополнительно внешние нуклоны.

Знание свойств и волновой функции основного состояния малонуклонных и альфа-кластерных ядер необходимо для теоретического описания реакций с их участием. К настоящему времени существенные успехи достигнуты в решении квантовой задачи трех тел. Уравнение Шредингера в рамках задачи трех тел с ортогональным проектированием впервые решено для ядер ${}^6\text{Li}$, ${}^6\text{He}$ и ${}^6\text{Be}$ Кукулиным, Ворончевым и Краснопольским. Ими же волновые функции системы трех тел были получены с помощью гауссового базиса и численного решения системы интегральных уравнений Хилла–Уилера. Жуковым, Данилиным и Федоровым уравнение Шредингера для трехтельной системы $\alpha + n + n$ было решено с помощью разложений по гиперсферическим функциям. Метод численного решения гиперрадиальных уравнений с помощью полиномов Лагранжа был предложен и использован, в том числе для системы $\alpha + n + \alpha$ в научной группе ряда авторов (P. Descouvemont и др.). Наряду с численным решением точных квантовых уравнений использовались и приближенные

вариационные методы. Решение квантовой задачи четырех тел оказывается существенно сложнее задачи трех тел. В частности, при использовании гиперсферического базиса число уравнений и размер матриц существенно превышает аналогичные значения для задачи трех тел. Для числа частиц, большего четырех, существующие методы практически не позволяют получить решение квантовой задачи для реалистических потенциалов взаимодействия нуклонов и альфа-кластеров. Это делает весьма актуальной разработку новых вычислительных методов, применимых для большого числа взаимодействующих частиц.

Известно, что основные результаты квантовой механики могут быть получены с использованием интегралов по траекториям (континуальных интегралов) Фейнмана. Такой подход является альтернативой и дополнением традиционному подходу, основанному на уравнении Шредингера. Возможность применения интегралов по траекториям во мнимом времени для определения энергии и волновой функции основного состояния системы N частиц без ограничений на число N была показана Шурыком примерно 35 лет назад. Однако, несмотря на развитие вычислительной техники, решение задачи для реалистических потенциалов взаимодействия нуклонов и альфа-кластеров превышало возможности компьютеров, реализующих последовательные вычисления и параллельные вычисления с небольшим числом потоков. Новые возможности предоставила технология CUDA параллельных вычислений на многоядерных графических процессорах.

Целью данного цикла работ явились разработка и применение нового подхода для теоретического описания структуры малонуклонных и альфа-кластерных ядер на основе интегралов по траекториям (континуальных интегралов) Фейнмана, параллельных вычислений на графических процессорах, а также развитие метода гиперсферических функций. Можно указать четыре области применения данного подхода. Во-первых, рассмотрение в одной модели сразу нескольких ядер позволяет более достоверно выбирать форму и определять значения параметров парных потенциалов взаимодействия нуклонов и α -кластеров. Во-вторых, анализ свойств полученных численным методом значений плотности вероятности для основного состояния системы позволяет подобрать аналитические аппроксимации, например, в виде произведения экспонент гауссова типа. В-третьих, знание плотности вероятности позволяет уточнить условия применимости и скорость сходимости методов, основанных на приближенном решении уравнения Шредингера для трех и четырех тел с помощью разложения по базисным функциям, например, гиперсферическим функциям. В-четвертых, результаты решения многотельной задачи могут быть использованы для уточнения модели независимых нуклонов в оболочечной модели сферических и деформированных ядер и модели независимых альфа-кластеров с последующим применением при описании низкоэнергетических ядерных реакций с участием легких ядер как в стационарном, так и в нестационарном подходах.

Численный метод расчета энергии и плотности вероятности основного состояния системы N взаимодействующих частиц был детально разработан в работах [8–10]. Он предусматривает вычисление методом Монте-Карло так называемого пропагатора во мнимом (евклидовом) времени, являющегося функционалом от потенциальной энергии системы частиц, которые могут

взаимодействовать как парными, так и многочастичными силами. Реализация параллельных вычислений была сделана первоначально на графических картах персональных компьютеров, а затем расчеты выполнялись на гетерогенном кластере HybriLIT ЛИТ ОИЯИ (<http://hybrilit.jinr.ru/>) при технической поддержке команды HybriLIT.

Предложенный подход был апробирован в работах [1, 4] на ряде точно решаемых многочастичных моделей от 2 до 7 взаимодействующих частиц и показал достаточную точность. Энергии и волновые функции основного состояния для малонуклонных ядер ${}^3\text{H}$ и ${}^3\text{He}$ в работе [1] были вычислены двумя методами: методом континуальных интегралов и с помощью разложения по гиперсферическим функциям. Для решения системы гиперрадиальных уравнений был предложен новый численный метод на основе интерполяции сплайнами. Этот метод позволяет увеличивать числа слагаемых в разложении и размерности матриц связи уравнений за счет использования меньшего числа узлов радиальной сетки и, таким образом, повышает точность расчетов. Были предложены новые формы зависящих от спинов парных потенциалов нуклон-нуклонного взаимодействия, аналогичные потенциалам Афнана-Танга (Afnan–Tang), которые дают лучшее согласие с экспериментальными данными по энергиям разделения на составляющие нуклоны. Волновые функции основного состояния ядер ${}^3\text{H}$, ${}^3\text{He}$ демонстрируют структуру с преимущественным расположением нуклонов в вершинах треугольника, близкого к правильному.

Расчеты для альфа-кластерных ядер ${}^{12}\text{C}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{20}\text{Ne}$, ${}^{24}\text{Mg}$, ${}^{28}\text{Si}$ выполнены в работах [1, 5] с помощью интегралов по траекториям, а для ядра ${}^{12}\text{C}$ еще и с решением системы гиперрадиальных уравнений новым численным методом на основе интерполяции сплайнами [1]. Была предложена новая форма парного потенциала взаимодействия альфа-кластеров, аналогичного потенциалу Али–Бодмера (Ali–Bodmer), которая дает лучшее согласие с экспериментальными данными по энергиям разделения ядер на составляющие альфа-частицы. Как и в случае нуклон-нуклонных потенциалов, введенные альфа-кластерные потенциалы не воспроизводят фазовые сдвиги s -рассеяния при больших энергиях (несколько сотен МэВ для нуклонов и несколько МэВ для альфа-частиц) в ходе сравнительно короткого времени взаимодействия. Однако взаимодействие медленных частиц, находящихся рядом в течение неограниченно большого времени вполне может отличаться от взаимодействия при быстрых столкновениях. Для альфа-кластеров это может быть обусловлено поляризационными и оболочечными эффектами [1]. Расчеты волновых функций основных состояний позволили установить геометрическую структуру перечисленных альфа-кластерных ядер. Так пространственная структура основных состояний ядер ${}^{12}\text{C}$ и ${}^{16}\text{O}$ соответствует простым геометрическим формам, правильного треугольника и тетраэдра, соответственно, с широкими альфа-кластерными облаками в их вершинах. Ядро ${}^{24}\text{Mg}$ в основном состоянии имеет форму пары равных правильных треугольников, также с широкими альфа-кластерными облаками в их вершинах. Показано, что для возбужденного состояния 0_2^+ ядра ${}^{12}\text{C}$ (состояния Хойла) наиболее вероятными являются две конфигурации: расположение альфа-кластеров в вершинах правильного треугольника и линейная двуйдерная конфигурация ${}^8\text{Be} + \alpha$. Состоянию Хойла может быть сопоставлено колебательное движение между конфигурацией

компактного правильного треугольника и линейной двуядерной конфигурацией вблизи вершины многомерного кулоновского барьера.

На примере нестабильного ядра ${}^8\text{Be}$ сформулировано условие применимости альфа-кластерной модели – наличие локальных пиков нуклонной плотности, образованных нейтронными и протонными парами. Расчеты в новой самосогласованной оболочечной модели подтвердили формирование двух таких пиков в ядре ${}^8\text{Be}$ и, следовательно, подтвердили применимость альфа-кластерной модели этого ядра с конфигурацией $\alpha + \alpha$ [1].

При расчетах для ядер, содержащих альфа-кластеры и нуклоны, введена новая форма псевдопотенциала для описания взаимодействия нуклонов с альфа-кластерами. Для этого были использованы расчеты основного состояния ядра ${}^9\text{Be}$ с решением системы гиперрадиальных уравнений новым численным методом на основе интерполяции сплайнами. В стабильном ядре ${}^9\text{Be}$ ($\alpha + n + \alpha$) взаимодействие нейтрона с альфа-кластером выступает дополнением к взаимодействию между альфа-кластерами, свойства которого были установлены при расчетах чисто альфа-кластерных ядер. Были выполнены расчеты энергий основных состояний с получением значений, близких к экспериментальным для ядра с одним альфа-кластером: ${}^{6,7}\text{Be}$ [4], с двумя альфа-кластерами: ${}^9\text{Be}$ [1, 4], ${}^{10}\text{Be}$ [1, 4, 5], ${}^{10,11}\text{B}$, ${}^{10,11}\text{C}$ [1, 3]; с тремя альфа-кластерами: ${}^{13,14}\text{C}$, ${}^{13,14}\text{N}$ и ${}^{14}\text{O}$ [2]. Волновые функции основных состояний перечисленных ядер указывают на их структуру как ядерных молекул с облаками валентных нуклонов: между двумя альфа-кластерами в ядрах: ${}^9,10\text{Be}$, ${}^{10,11}\text{B}$, ${}^{10,11}\text{C}$; в окрестности центра правильного треугольника, образованного альфа-кластерами, в ядрах: ${}^{13,14}\text{C}$, ${}^{13,14}\text{N}$ и ${}^{14}\text{O}$. Для ядра ${}^9\text{Be}$ наибольшую вероятность имеет конфигурация с валентным нейтроном между α -кластерами: $\alpha + n + \alpha$. Конфигурация $\alpha + {}^5\text{He}$ имеет меньшую вероятность; теоретическая оценка вероятности 0.27 согласуется с полученным в ЛЯР ОИЯИ при исследовании реакций кластерных передач экспериментальным значением 0.25 [4]. Для ядер ${}^{10}\text{B}$ и ${}^{10}\text{C}$ найдены энергии возбужденных состояний, близкие к экспериментальным значениям энергий развала ядер, ${}^{10}\text{B} \rightarrow {}^4\text{He} + {}^6\text{Li}$ и ${}^{10}\text{C} \rightarrow {}^4\text{He} + {}^6\text{Be}$. Для системы ($2\alpha + p + n$) определены плотности вероятности для возбужденных состояний с разделением на дейтрон и ядро ${}^8\text{Be}$, на ядра ${}^4\text{He}$ и ${}^6\text{Li}$ и на два ядра ${}^4\text{He}$ и дейтрон.

Представленный цикл работ выполнен в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Основные результаты, представленных на конкурс работ, сводятся к следующему:

1. Разработан и впервые применен в расчетах метод вычисления энергии и плотности вероятности для основного состояния системы нескольких (от 3 до 7) частиц, использующий параллельные вычисления на графических процессорах и интегралы по траекториям (континуальные интегралы) во мнимом времени [1–5]. Для точно решаемых задач (осцилляторных [1] и ряда других [4]) метод подтвердил достаточную точность.

2. Разработан и впервые применен в расчетах для систем трех частиц (${}^3\text{H}$, ${}^3\text{He}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{12}\text{C}$) новый эффективный метод решения системы гиперрадиальных уравнений на основе интерполяции сплайнами [1]. Метод позволяет вычислять трехтельные волновые функции при описании низкоэнергетических ядерных реакций с участием легких ядер как в стационарном, так и в нестационарном подходах. Метод может быть распространен и на случай четырех частиц.

3. Предложены новые формы нуклон-нуклонных, альфа-кластер-альфа-кластерных и нуклон-альфа-кластерных потенциалов, дающие согласие с экспериментальными данными для энергий разделения представительного ряда легких ядер на составляющие альфа-кластеры и нуклоны [1].

4. Впервые выполнены расчеты энергии и плотности вероятности основного состояния для альфа-кластерных ядер, представимых как системы 4, 5, 6 и 7 частиц (альфа-кластеров и нуклонов): альфа-кластерных ядер ^{16}O , ^{20}Ne , ^{24}Mg , ^{28}Si , ядер $^{6,7}\text{Be}$ и ядерных молекул ^{10}Be , $^{10,11}\text{B}$, $^{10,11}\text{C}$, $^{13,14}\text{C}$, $^{13,14}\text{N}$, ^{14}O ; определена пространственная структура основных состояний этих ядер, показано, что результаты альфа-кластерной модели для ядерных молекул сходны с результатами оболочечной модели [1–5].

5. Впервые для ядер ^{10}B ($2\alpha + p + n$) определены плотности вероятности для возбужденных состояний, которые соответствуют разделению системы на дейтрон и ядро ^8Be ; ядра ^4He и ^6Li ; два ядра ^4He и дейтрон [1, 3].

6. Впервые выполнены расчеты ядра ^8Be в новой самосогласованной модели деформированного ядра и показана взаимосвязь между одночастичной и альфа-кластерной моделями; предложен критерий применимости альфа-кластерной модели для описания легких ядер [1].

7. Подтверждены результаты ряда работ для систем трех частиц (^3H , ^3He , ^{12}C), полученные ранее для межчастичных потенциалов определенного вида. Это свидетельствует о достаточной точности новых предложенных методов [1].

Основные результаты работ прошли апробацию и были доложены на 13 международных конференциях и на семинаре в ЛТФ ОИЯИ 26.09.22.

1. International Workshop on Few-Body Systems (4 – 7 июля, 2016 г., ОИЯИ, Дубна, Россия);
2. XXVI International Symposium on Nuclear Electronics & Computing (NEC'2017) (25–29 September 2017, Budva, Montenegro);
3. 36th International Workshop on Nuclear Theory (25 June – 1 July 2017, Rila Mountains, Bulgaria);
4. 37th International Workshop on Nuclear Theory (24–30 June 2018, Rila Mountains, Bulgaria);
5. European Nuclear Physics Conference (2–7 September 2018, Bologna, Italy);
6. XXIII International school on nuclear physics, neutron physics and applications (22–28 September 2019, Varna, Bulgaria);
International Symposiums on Exotic Nuclei:
7. EXON 2014 (8–13 September 2014, Kaliningrad, Russia);
8. EXON 2016 (4–10 September 2016, Kazan, Russia);
9. EXON 2018 (10–15 September 2018, Petrozavodsk, Russia);
Международные конференции по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра:
10. NUCLEUS-2018 (12–15 июля 2018 г., Воронеж, Россия);
11. NUCLEUS-2019 (1–5 июля 2019 г., Дубна, Россия);
12. NUCLEUS-2020 (12–16 октября 2020 г., Санкт-Петербург, Россия);
13. NUCLEUS-2021 (20–25 сентября, 2021 г., Санкт-Петербург, Россия).

Результаты представленных исследований опубликованы в следующих работах:

1. *V.V. Samarin*, Study of spatial structures in α -cluster nuclei, *Eur. Phys. J. A*, 2022, 58, 117.
2. *В.В. Самарин*, Изучение основных состояний ядер $^{13,14}\text{C}$, $^{13,14}\text{N}$, ^{14}O методом фейнмановских континуальных интегралов, *Известия РАН. Серия физическая*, 2022, Т. 86, № 8, с. 1091–1098; *V.V. Samarin*, Studying the Ground States of $^{13,14}\text{C}$, $^{13,14}\text{N}$, and ^{14}O Nuclei Using Feynman's Continual Integrals, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2022, V. 86, N 8, p. 901–907.
3. *В.В. Самарин*, Изучение основных состояний ядер $^{10,11}\text{B}$, $^{10,11}\text{C}$ методом фейнмановских континуальных интегралов, *Известия РАН. Серия физическая*, 2021, Т. 85, № 5, с. 655–661; *V.V. Samarin*, Studying the Ground States of $^{10,11}\text{B}$, $^{10,11}\text{C}$ Nuclei Using Feynman's Continual Integrals, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2021, V. 85, N 5, p. 501–507.
4. *В.В. Самарин*, Изучение основных состояний ядер $^{6,7,9,10}\text{Be}$ методом фейнмановских континуальных интегралов, *Известия РАН. Серия физическая*, 2020, Т. 84, № 8, с. 1187–1196; *V.V. Samarin*, Study of the Ground States of $^{6,7,9,10}\text{Be}$ Nuclei Using Feynman Path Integrals, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2020, V. 84, N 8, p. 981–989.
5. *V.V. Samarin*, Study of Cluster Structure of Light Nuclei by Feynman's Continual Integrals and Hyperspherical Functions, *Journal Physics: Conference Series*, 2020, V. 1555, 012030.