

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»»  
(НИЯУ МИФИ)

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ТЕХНОЛОГИЙ  
КАФЕДРА №40 «ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ»

УДК 539.1.01

**ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА  
К БАКАЛАВРСКОЙ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЕ  
МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СТРУКТУРЫ ТЕМНЫХ АТОМОВ**

Студент \_\_\_\_\_ Д. Мвилама

Научный руководитель,  
д.ф.-м.н., проф. \_\_\_\_\_ М. Ю. Хлопов

Научный консультант \_\_\_\_\_ Д. О. Сопин

Москва 2026

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

**МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СТРУКТУРЫ ТЕМНЫХ АТОМОВ**

Студент	_____ Д. Мвилама
Научный руководитель, д.ф.-м.н., проф.	_____ М. Ю. Хлопов
Научный консультант	_____ Д. О. Сопин
Рецензент, к.ф.-м.н., доц.	_____ А. Г. Майоров
Секретарь ГЭК, к.ф.-м.н.	_____ А. А. Кириллов
Зав. каф. №40, д.ф.-м.н., проф.	_____ М. Д. Скорохватов

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>1 Обзор литературы и описание методов</b>	<b>6</b>
1.1 Темные атомы . . . . .	6
1.2 Альфа-кластерная структура легких ядер . . . . .	8
1.3 Бозонное приближение для многоальфа-систем . . . . .	11
1.4 Энергетический функционал и уравнение Хартри–Фока . . . . .	13
1.5 Потенциалы взаимодействия . . . . .	15
1.6 Численная схема и оценка погрешностей . . . . .	18
<b>2 Расчеты и обсуждение результатов</b>	<b>25</b>
2.1 Потенциал взаимодействия альфа частиц . . . . .	25
2.2 Система OHe . . . . .	30
2.3 Система OBe . . . . .	31
2.4 Система OC . . . . .	32
2.5 Обобщенные системы XBe и XC . . . . .	33
2.6 Физическая интерпретация и ограничения модели . . . . .	34
<b>Заключение</b>	<b>38</b>
<b>Список использованных источников</b>	<b>40</b>

## ВВЕДЕНИЕ

Природа скрытой массы остается одной из центральных нерешенных проблем современной физики. Наблюдательные данные убедительно указывают на наличие небарионной компоненты вещества, однако ее микроскопическая природа до сих пор не установлена. В течение многих лет одними из самых популярных кандидатов на роль скрытой массы были слабо взаимодействующие массивные частицы (WIMP). Отсутствие надежного сигнала в прямых поисках не исключает этот класс моделей, но делает необходимым рассмотрение и других возможностей, в том числе сценариев, в которых скрытая масса имеет составную структуру [1–3].

Одной из таких возможностей является модель темных атомов. В этих моделях предполагается, что тяжелые стабильные заряженные лептоны могут входить в состав электрически нейтральных или даже связанных заряженных состояний. Наиболее развитой реализацией этой идеи является сценарий  $X\text{He}$ , в частности  $O\text{He}$ , в котором тяжелая стабильная дважды отрицательно заряженная частица  $X^{-2N}$  ( $O^{--}$  при  $N = 1$ ) связывается с первичными ядрами гелия  ${}^4\text{He}$ , образовавшимися в ходе первичного нуклеосинтеза (Big Bang Nucleosynthesis, BBN), формируя нейтральные темные атомы [4–8]. Такие объекты могут вести себя как скрытая масса с ядерными взаимодействиями, поскольку их электронейтральность проявляется на больших расстояниях, тогда как на ядерных масштабах существенной становится их внутренняя структура.

Именно поэтому задача о темных атомах имеет не только космологический, но и ядерно-физический характер. Поскольку масса  $O^{--}$  в системе  $O\text{He}$  предполагается значительно больше массы ядра гелия, приведенная масса системы близка к массе  $\alpha$ -частицы, а характерный размер связанного состояния оказывается порядка нескольких фемтометров. Поэтому при взаимодействии  $O\text{He}$  с обычными ядрами необходимо учитывать конечный размер зарядового распределения  ${}^4\text{He}$ , и такую систему нельзя заранее рассматри-

вать как бесструктурную нейтральную частицу. Особенно важным остается вопрос о возможности образования связанных состояний  $OHe$  с ядрами. Если такие состояния образуются эффективно, в веществе могут возникать аномальные изотопы, что находится под строгими экспериментальными ограничениями [5, 9, 10]. Поэтому проблема ядерного захвата является одной из основных проверок моделей темных атомов.

Связанные состояния с участием тяжелых заряженных частиц важны и в другой близкой задаче — катализированном первичном нуклеосинтезе (Catalysed Big Bang Nucleosynthesis, CBBN). Долгоживущие заряженные частицы могут связываться с легкими ядрами и изменять вероятности ядерных реакций. Для дважды заряженных частиц этот эффект особенно заметен, поскольку кулоновское связывание оказывается сильнее, чем в случае однозарядных частиц, и могут открываться дополнительные каналы реакций [11, 12]. В настоящей работе эти процессы не рассчитываются напрямую, однако они задают физическую мотивацию для изучения энергий связи и характерных радиусов лептон-связанных ядерных конфигураций.

С этой точки зрения естественно рассмотреть системы, в которых тяжелая отрицательно заряженная частица связывает одну или несколько  $\alpha$ -частиц. Такой выбор связан с особой ролью ядра  ${}^4He$  в сценарии  $OHe$  и с известной  $\alpha$ -кластерной структурой легких ядер, прежде всего  ${}^8Be$  и  ${}^{12}C$  [13–16]. Эти ядра позволяют нам сначала смоделировать потенциал взаимодействия между альфа-частицами, а затем использовать ту же модель для систем, содержащих большой отрицательный заряд.

Целью данной работы является построение и применение эффективного бозонного описания многочастичных структур темных атомов. В статье рассматриваются системы  $OHe$ ,  $OBe$ ,  $OC$ , а также обобщенные системы  $XBe$  и  $XC$  для различных зарядов тяжелой частицы. Основное внимание уделяется энергиям связи и характеристическим радиусам, поскольку именно эти значения позволяют оценить, насколько сильно внешний отрицательный заряд изменяет структуру  $\alpha$  кластера.

Для решения этой задачи используется самосогласованное приближение Хартри-Фока, в котором альфа-частицы рассматриваются как эффективные бозонные степени свободы. Общий принцип заключается в следующем: сначала модель Хартри-Фока исследуется на чистых  $\alpha$  кластерных системах

для воспроизведения известных результатов на альфа-кластерных моделях, а именно энергий связи кластеров относительно свободных альфа-частиц, после чего она применяется к конфигурациям, связанным с лептонами, без дополнительной настройки. Такой порядок позволяет отделить собственно ядерную часть проблемы от влияния внешнего кулоновского центра.

Работа построена следующим образом. В разделе 1 приведены обзор литературы и описание используемых методов: рассматриваются модели темных атомов,  $\alpha$ -кластерная картина легких ядер, бозонное приближение, энергетический функционал, потенциалы взаимодействия и численная схема расчета. В разделе 2 представлены калибровка модели, расчеты для систем, связанных с лептонами и обсуждение полученных результатов. В заключении сформулированы основные выводы работы и указаны возможные направления дальнейшего развития модели.

# 1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ И ОПИСАНИЕ МЕТОДОВ

## 1.1 ТЕМНЫЕ АТОМЫ

Модели темных атомов относятся к классу сценариев составной скрытой массы. В отличие от подхода, в котором частица скрытой массы считается элементарной нейтральной частицей, рассматриваемый сценарий предполагает, что скрытая масса может состоять из связанных состояний. Заряженные компоненты в таком случае не наблюдаются как свободные стабильные частицы, а оказываются скрытыми внутри электрически нейтральных систем. Именно эта идея лежит в основе моделей составной скрытой массы с тяжелыми стабильными заряженными частицами [1–3].

Эта формулировка отличается от популярной WIMP не только выбором кандидата на скрытую массу, но и характером его взаимодействия с веществом. В сценариях WIMP предполагается, что частица скрытой массой электрически нейтральна и взаимодействует только посредством слабого взаимодействия. В моделях темного атома электронейтральность является результатом связывания заряженных компонентов. Следовательно, вопрос взаимодействия с обычной веществеом не может быть сведен только к слабым взаимодействиям. Необходимо учитывать внутреннюю структуру связанного состояния и то, как эта структура проявляется на ядерных расстояниях.

В этой работе мы обсудим реализацию этого подхода, связанного с частицами, имеющими четный отрицательный заряд. В общем случае тяжелая стабильная частица обозначается как  $X^{-2N}$ . После образования первичных ядер гелия во время BBN такая частица может связываться с ядром  ${}^4\text{He}$ , образуя темный атом  $X\text{He}$ . Частный случай  $N = 1$  соответствует частице  $O^{--}$  и системе  $O\text{He}$ . В этой терминологии обозначение  $O\text{He}$  относится конкретно к случаю начисления  $-2$ , тогда как для более общих начислений удобно

использовать обозначение  $X\text{He}$  [4, 5, 7].

Физическая причина образования таких состояний проста: между отрицательно заряженной тяжелой частицей и положительно заряженным ядром гелия действует кулоновское притяжение. Если частица  $X^{-2N}$  стабильна в течение космологического времени, то после появления достаточного количества  ${}^4\text{He}$  она может рекомбинировать с ядрами гелия в нейтрально связанные системы. В случае  $\text{OHe}$  приведенная масса двухчастичной системы близка к массе частицы  $\alpha$ , поскольку предполагается, что масса  $O^{--}$  намного больше. Следовательно, характерный масштаб кулоновского связанного состояния оказывается значительно меньше атомного и попадает в область ядерных расстояний. В дальнейшем именно это обстоятельство делает необходимым ядерно-физическое описание темных атомов.

При больших расстояниях  $\text{OHe}$  является электрически нейтральной системой. Однако электронейтральность сама по себе не означает, что взаимодействие с веществом можно описывать как взаимодействие бесструктурной частицы. Ядро гелия в  $\text{OHe}$  имеет конечный размер, а его зарядовое распределение участвует в формировании внешнего поля темного атома. При сближении с обычным ядром становятся важны поляризация системы, кулоновские силы и ядерное взаимодействие  $\alpha$ -частицы с ядром вещества. Поэтому свойства  $\text{OHe}$  в среде определяются не только космологическими параметрами, но и деталями ядерной динамики [5, 9].

Именно это делает темные атомы особенно чувствительными к задачам прямого поиска скрытой массы. В ряде работ  $\text{OHe}$  рассматривался как форма скрытой массы с ядерными взаимодействиями, которая может замедляться в земном веществе и поэтому не обязательно должна давать сигнал, характерный для упругого рассеяния WIMP на ядрах [6, 8, 9]. Такая картина требует отдельного анализа взаимодействия темных атомов с ядрами детектора и с окружающей средой. При этом любые выводы о возможном сигнале зависят от того, насколько корректно описаны связанные состояния и потенциальные барьеры в системе  $\text{OHe}$ –ядро.

В литературе отмечалось, что основная трудность сценария  $\text{OHe}$  связана не с самой возможностью образования нейтрального атома, а с последующим взаимодействием этого атома с обычными ядрами. Если при столкновении с ядром вещество эффективно захватывает  $\text{OHe}$  или если  $\text{OHe}$  образу-

ет более сложные связанные состояния без достаточного подавления таких процессов, это может привести к появлению аномальных изотопов [5, 10]. Поэтому для проверки сценария необходимо не только указать механизм образования ОНе в ранней Вселенной, но и понять структуру возможных ядерных конфигураций с участием тяжелой отрицательно заряженной частицы.

В более общем сценарии та же проблема возникает для систем ХНе с зарядом  $X^{-2N}$ . Увеличение модуля заряда тяжелой частицы усиливает кулоновское притяжение к альфа-частицам и эффективно изменяет характерные энергии связи и радиусы. Поэтому мы подробно исследуем эффекты переключения с ОНе на ХНе.

Следовательно, это подводит к конкретной задаче данной работы. Мы описываем конфигурации из нескольких альфа-частиц, которые могут возникать при наличии большого отрицательного заряда. Частицы  $\alpha$  рассматриваются как эффективные ядерные степени свободы, а влияние частицы  $X^{-2N}$  учитывается как внешнее кулоновское поле, принимая во внимание конечный размер распределения заряда  ${}^4\text{He}$ , при этом также учитываются взаимодействия между самими  $\alpha$ -частицами. Мы рассчитали энергии связи, чтобы показать, что такие конфигурации стабильны относительно распада на отдельные кластеры, а характерные радиусы позволяют нам оценить, насколько компактной становится система. Эти значения служат необходимой ядерной и физической основой для дальнейшего анализа процессов ядерного захвата, образования аномальных изотопов и возможной роли таких состояний в катализируемом первичном нуклеосинтезе.

## 1.2 АЛЬФА-КЛАСТЕРНАЯ СТРУКТУРА ЛЕГКИХ ЯДЕР

Перед построением расчетной модели необходимо уточнить, почему именно  $\alpha$ -частицы выбираются в качестве эффективных ядерных степеней свободы и в каких пределах такое описание является физически оправданным. Этот вопрос связан с хорошо известной  $\alpha$ -кластерной картиной легких ядер.

Ядро  ${}^4\text{He}$  обладает большой энергией связи, нулевым спином и нулевым изоспином. Благодаря этому во многих задачах оно может рассматри-

ваться как относительно устойчивый ядерный кластер. В  $\alpha$ -кластерном подходе легкое ядро описывается не как совокупность всех нуклонов по отдельности, а как система нескольких  $\alpha$ -частиц, между которыми действует эффективное взаимодействие. Такой подход не отменяет нуклонную структуру ядра, но позволяет выделить наиболее существенные коллективные степени свободы, если рассматриваемая система действительно имеет выраженный кластерный характер [14–16].

В настоящей работе рассматриваются конфигурации, содержащие одну, две или три  $\alpha$ -частицы. В чисто ядерном пределе этим случаям соответствуют ядро  ${}^4\text{He}$ , двух- $\alpha$ -система  ${}^8\text{Be}$  и трех- $\alpha$ -система  ${}^{12}\text{C}$ . Ядро  ${}^8\text{Be}$  является естественным примером двух- $\alpha$ -системы. Его основное состояние расположено очень близко к порогу распада на две  $\alpha$ -частицы, поэтому даже небольшое изменение эффективного  $\alpha\alpha$ -взаимодействия заметно влияет на положение этого состояния [17]. В этом смысле  ${}^8\text{Be}$  является удобной калибровочной системой для двухчастичной части модели.

Ядро  ${}^{12}\text{C}$ , в свою очередь, играет роль основной трех- $\alpha$ -системы. Его структура не сводится к простой геометрической конфигурации трех кластеров, однако  $\alpha$ -кластерные представления оказываются важными как для описания низколежащих состояний, так и для понимания природы состояния Хойла [18, 19]. Для настоящей работы это существенно потому, что система  $OC$  формально соответствует трем  $\alpha$ -частицам в поле тяжелой отрицательно заряженной частицы. Поэтому описание  ${}^{12}\text{C}$  используется не как внешняя тема, а как необходимая проверка того, насколько выбранная эффективная модель способна воспроизводить основные свойства трех- $\alpha$ -конфигурации без лептона.

При использовании  $\alpha$ -частиц как эффективных объектов необходимо помнить, что они не являются элементарными частицами. На малых расстояниях между двумя  $\alpha$ -кластерами становятся существенными эффекты перекрытия их нуклонных волновых функций. В полном нуклонном описании такие эффекты связаны с антисимметризацией и принципом Паули. В феноменологических  $\alpha\alpha$ -потенциалах они обычно проявляются как короткодействующее отталкивание. Поэтому эффективное взаимодействие между  $\alpha$ -частицами должно одновременно учитывать ядерное притяжение на промежуточных расстояниях, кулоновское отталкивание положительно заряжен-

ных кластеров и отталкивание при сильном перекрытии кластеров.

Именно поэтому перед расчетом систем с тяжелым отрицательным зарядом необходимо сначала выбрать и проверить эффективное описание взаимодействия между двумя  $\alpha$ -частицами. В такой модели реальное много-нуклонное взаимодействие не записывается явно, а заменяется эффективным  $\alpha\alpha$ -потенциалом, который должен воспроизводить основные свойства простейших кластерных систем. Если это не сделать, то дальнейший расчет  $OHe$ ,  $OBe$  и  $OC$  будет трудно интерпретировать: полученные энергии и радиусы могут отражать не влияние тяжелой частицы, а недостаточно согласованное описание самой  $\alpha$ -кластерной подсистемы. Поэтому в данной работе сначала рассматриваются чисто ядерные системы  ${}^8\text{Be}$  и  ${}^{12}\text{C}$ , и только после этого выбранное эффективное взаимодействие используется для лептон-связанных конфигураций.

Такой порядок имеет простой физический смысл. Система  ${}^8\text{Be}$  фиксирует баланс между притяжением и отталкиванием в двух- $\alpha$ -канале. Система  ${}^{12}\text{C}$  проверяет, можно ли с тем же двухчастичным взаимодействием получить разумное описание трех- $\alpha$ -конфигурации. Если эти две проверки не выполнены, то дальнейший расчет лептон-связанных систем теряет ясную интерпретацию: становится непонятно, связаны ли полученные энергии с действием тяжелого отрицательного заряда или с неверным описанием самой  $\alpha$ -кластерной части задачи.

В рамках настоящей работы  $\alpha$ -кластерная модель используется как эффективная, а не как полное микроскопическое описание легких ядер. Она не претендует на точное воспроизведение всей спектроскопии  ${}^8\text{Be}$  и  ${}^{12}\text{C}$  и не описывает явно все нуклонные корреляции. Ее роль более конкретна: дать согласованную ядерную основу для расчета систем, в которых тяжелый отрицательный заряд связывает одну, две или три  $\alpha$ -частицы. Поскольку  $\alpha$ -частица имеет целый спин, такая постановка естественным образом приводит к эффективному бозонному описанию много- $\alpha$ -систем. Это приближение и его ограничения рассматриваются в следующем разделе.

### 1.3 БОЗОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ МНОГОАЛЬФА-СИСТЕМ

После перехода к  $\alpha$ -кластерному описанию задача все еще остается многочастичной. Уже для системы  $^{12}\text{C}$  необходимо описывать три взаимодействующие  $\alpha$ -частицы, а при добавлении тяжелой отрицательно заряженной частицы возникает дополнительное внешнее поле. Поэтому для дальнейшего расчета требуется приближение, которое сохраняет основные особенности  $\alpha$ -кластерной картины, но при этом позволяет получить самосогласованное описание систем с разным числом кластеров.

В выбранной модели  $\alpha$ -частица рассматривается как эффективный бозон. Это связано с тем, что ядро  $^4\text{He}$  имеет целый спин, а в кластерном описании его внутренняя нуклонная структура не рассматривается явно. При этом слово «бозон» здесь не означает, что эффекты составной природы  $\alpha$ -частицы полностью исчезают из задачи. На малых расстояниях они уже учтены косвенно через эффективное  $\alpha\alpha$ -взаимодействие, о котором говорилось выше. Бозонное приближение относится прежде всего к симметрии многочастичной волновой функции по перестановке одинаковых  $\alpha$ -кластеров.

Для системы из  $K$  идентичных  $\alpha$  частиц используется упрощенная пробная функция, в которой все кластеры занимают одну и ту же орбиту одной частицы  $\phi(\mathbf{r})$ . В этом случае многочастичная волновая функция записывается в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_K) = \prod_{i=1}^K \phi(\mathbf{r}_i), \quad (1.1)$$

где  $\mathbf{r}_i$  — координата  $i$ -й  $\alpha$ -частицы относительно выбранного центра отсчета. В задачах с тяжелой отрицательно заряженной частицей этот центр удобно связывать с положением тяжелой частицы, поскольку ее масса предполагается значительно большей массы  $\alpha$ -частицы. Одночастичная орбиталь нормируется условием

$$\int |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = 1. \quad (1.2)$$

Произведение в формуле (1.1) является симметричным относительно перестановки любых двух  $\alpha$ -частиц, так как все они описываются одной и той же орбиталью. Поэтому такая пробная функция соответствует бозонно-

му варианту приближения Хартри. В обычном фермионном методе Хартри–Фока антисимметрия волновой функции приводит к обменным членам. В рассматриваемой эффективной бозонной постановке антисимметризация нуклонов между различными  $\alpha$ -кластерами явно не проводится, а ее влияние частично входит в параметры эффективного  $\alpha\alpha$ -потенциала. Поэтому далее термин «бозонное приближение Хартри–Фока» используется для самосогласованного среднеполевого описания системы тождественных  $\alpha$ -кластеров.

Смысл такого приближения состоит в том, что каждая  $\alpha$ -частица движется не в поле отдельных кластеров с заданными координатами, а в среднем поле, создаваемом плотностью остальных  $\alpha$ -частиц. Эта плотность имеет вид

$$\rho(\mathbf{r}) = |\phi(\mathbf{r})|^2. \quad (1.3)$$

Если в системе присутствует  $K$   $\alpha$ -частиц, то полная кластерная плотность пропорциональна  $K\rho(\mathbf{r})$ , тогда как среднее поле для одной  $\alpha$ -частицы создается только остальными  $K - 1$  частицами. Именно поэтому в дальнейшем в уравнении среднего поля возникает множитель  $K - 1$ , а не  $K$ .

Такое описание, конечно, не является точным решением многочастичной задачи. Оно не содержит явных корреляций между положениями разных  $\alpha$ -частиц и не позволяет описывать все возможные геометрические конфигурации кластеров. Например, в реальной трех- $\alpha$ -системе могут быть важны коррелированные состояния, которые не сводятся к произведению одинаковых одночастичных орбиталей. Однако для целей настоящей работы это приближение является полезным: оно позволяет единым способом рассматривать системы  $OHe$ ,  $OBe$  и  $OC$ , а также отслеживать изменение энергии и радиусов при изменении заряда тяжелой частицы.

Подобные бозонные среднеполевые постановки используются в задачах, где одинаковые бозонные частицы находятся в общем потенциальном поле и взаимодействуют между собой. В работах по бозонным атомам, например, рассматриваются системы, в которых привычная фермионная статистика электронов заменяется бозонной статистикой, что требует соответствующего изменения уравнений среднего поля [20, 21]. Настоящая работа не использует эти модели напрямую, поскольку речь идет не об электронных атомах, а об эффективных  $\alpha$ -кластерах. Тем не менее сама логика построения самосогласованного бозонного среднего поля оказывается близкой: симмет-

рия волновой функции задает форму пробной функции, а взаимодействие частиц входит через функционал энергии.

В выбранном приближении основная задача сводится к нахождению орбитали  $\phi(\mathbf{r})$ , минимизирующей полную энергию системы при условии нормировки (1.2). Для этого необходимо записать гамильтониан, построить энергетический функционал и выполнить вариацию по  $\phi^*(\mathbf{r})$ . Эти шаги приводят к нелинейному самосогласованному уравнению для одночастичной орбитали. Этот вывод сделан в следующем разделе.

## 1.4 ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ФУНКЦИОНАЛ И УРАВНЕНИЕ ХАРТРИ–ФОКА

Теперь перейдем к уравнению, которое используется в расчетах. Рассматривается система из  $K$   $\alpha$ -частиц и одной тяжелой отрицательно заряженной частицы  $X^{-2N}$ . Масса тяжелой частицы предполагается значительно большей массы  $\alpha$ -частицы, поэтому используется приближение неподвижного центра: частица  $X^{-2N}$  помещается в начало координат, а ее отдача при движении  $\alpha$ -частиц не учитывается.

При таком выборе системы отсчета гамильтониан записывается в виде

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^K \left[ -\frac{1}{2m_\alpha} \nabla_i^2 + V_X(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (1.4)$$

где  $m_\alpha$  — масса  $\alpha$ -частицы,  $V_X(\mathbf{r})$  — потенциал взаимодействия  $\alpha$ -частицы с тяжелой частицей  $X^{-2N}$ , а  $V_{\alpha\alpha}(r)$  — эффективный потенциал взаимодействия двух  $\alpha$ -частиц. Конкретный вид этих потенциалов задается в следующем разделе; здесь важно только то, что первый потенциал является внешним одночастичным полем, а второй описывает попарное взаимодействие между  $\alpha$ -кластерами.

Волновая функция системы берется в виде произведения одночастичных орбиталей (1.1). Тогда среднее значение гамильтониана (1.4) на этой вол-

новой функции задает энергетический функционал

$$E[\phi] = K \int \phi^*(\mathbf{r}) \left[ -\frac{1}{2m_\alpha} \nabla^2 + V_X(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + \frac{K(K-1)}{2} \iint |\phi(\mathbf{r})|^2 V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |\phi(\mathbf{r}')|^2 d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'. \quad (1.5)$$

Первое слагаемое в формуле (1.5) содержит кинетическую энергию  $\alpha$ -частиц и их взаимодействие с внешним полем тяжелого заряда. Множитель  $K$  появляется потому, что все  $\alpha$ -частицы описываются одной и той же орбиталью и дают одинаковый вклад в одночастичную часть энергии. Второе слагаемое описывает попарное  $\alpha\alpha$ -взаимодействие. Коэффициент  $K(K-1)/2$  равен числу различных пар  $\alpha$ -частиц и устраняет двойной счет взаимодействий.

Орбиталь  $\phi(\mathbf{r})$  определяется из условия минимума полной энергии при сохранении нормировки (1.2). Для этого вводится множитель Лагранжа  $\epsilon$  и варьируется функционал

$$\mathcal{F}[\phi] = E[\phi] - K\epsilon \left( \int |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} - 1 \right). \quad (1.6)$$

Условие стационарности по  $\phi^*(\mathbf{r})$  приводит к самосогласованному уравнению

$$\left[ -\frac{1}{2m_\alpha} \nabla^2 + V_X(\mathbf{r}) + (K-1) \int |\phi(\mathbf{r}')|^2 V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3\mathbf{r}' \right] \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r}). \quad (1.7)$$

Это уравнение имеет обычную структуру уравнения среднего поля. Первые два члена в квадратных скобках описывают движение одной  $\alpha$ -частицы во внешнем поле тяжелого заряда. Последний член является полем Хартри, создаваемым остальными  $\alpha$ -частицами. Множитель  $K-1$  возникает из самого числа частиц, взаимодействующих с выбранной  $\alpha$ -частицей. При  $K=1$  этот член исчезает, и система сводится к задаче *ОНе*. При  $K=2$  появляется поле одной второй  $\alpha$ -частицы, что соответствует системе *ОВе* при заряде тяжелой частицы  $-2$ . При  $K=3$  каждая  $\alpha$ -частица движется в среднем поле двух остальных кластеров, что используется для описания *ОС*.

Собственное значение  $\epsilon$  в уравнении (1.7) играет роль одночастичной энергии в самосогласованном поле, но полная энергия системы не равна про-

сто  $K\epsilon$ . Причина состоит в том, что в сумме одночастичных энергий вклад парного взаимодействия учитывается дважды. Поэтому после нахождения самосогласованной орбитали полная энергия вычисляется непосредственно по функционалу (1.5). Эквивалентно ее можно выразить через  $\epsilon$ :

$$E_{\text{total}} = K\epsilon - \frac{K(K-1)}{2} \iint |\phi(\mathbf{r})|^2 V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |\phi(\mathbf{r}')|^2 d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'. \quad (1.8)$$

Вычитаемое слагаемое удаляет лишний вклад попарного взаимодействия, уже включенный в самосогласованное поле. Такая поправка является стандартной особенностью среднеполевых методов [22].

В дальнейшем уравнение (1.7) решается численно для разных значений  $K$  и заряда тяжелой частицы. Для  $K = 1$  оно описывает простейший темный атом  $OHe$ . Для  $K = 2$  и  $K = 3$  оно задает много- $\alpha$ -системы в поле тяжелого отрицательного заряда. Чтобы применить это уравнение к конкретным расчетам, необходимо задать вид потенциалов  $V_X(\mathbf{r})$  и  $V_{\alpha\alpha}(r)$ . Это делается в следующем разделе.

## 1.5 ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В уравнение (1.7) входят два взаимодействия разного типа. Первое описывает притяжение  $\alpha$ -частицы к тяжелой отрицательно заряженной частице  $X^{-2N}$  и задает внешнее одночастичное поле. Второе описывает эффективное взаимодействие между двумя  $\alpha$ -частицами и входит в самосогласованное поле Хартри. В обоих случаях важно сразу зафиксировать используемые единицы. В дальнейшем расстояния выражаются в фемтометрах, энергии — в МэВ, а кулоновская константа записывается как

$$e^2 = 1.43975 \text{ MeV} \cdot \text{fm}. \quad (1.9)$$

В таком виде кулоновские слагаемые непосредственно имеют размерность энергии.

Потенциал взаимодействия  $X^{-2N}$  с  $\alpha$ -частицей задается сверткой кулоновского потенциала точечного отрицательного заряда с распределением

заряда  $\alpha$ -частицы, чтобы учесть ее конечный размер::

$$V_X(\mathbf{r}) = -2Ne^2 \int \frac{\rho_\alpha(\mathbf{s})}{|\mathbf{r} - \mathbf{s}|} d^3\mathbf{s}. \quad (1.10)$$

Здесь  $\rho_\alpha(\mathbf{s})$  — зарядовая плотность  $\alpha$ -частицы, нормированная на зарядовое число  $Z_\alpha = 2$ . При больших расстояниях такая форма переходит в обычный кулоновский потенциал взаимодействия зарядов  $-2N$  и  $+2$ .

Форма зарядовой плотности  $\alpha$ -частицы и ее численные параметры заимствованы из работы А. С. Бажина и В. В. Самарина, где такая параметризация используется в  $\alpha$ -кластерном описании ядра  ${}^9\text{Be}$  [13]. В настоящей работе она применяется для учета конечного размера ядра гелия в кулоновском взаимодействии с тяжелой отрицательно заряженной частицей:

$$\rho_\alpha(r) = \frac{\rho_1}{1 + 2 \exp\left(-\frac{b}{a}\right) \left[\cosh\left(\frac{r}{a}\right) - 1\right]} + \rho_2 \exp\left(-\frac{(r-c)^2}{d^2}\right), \quad (1.11)$$

где

$$\rho_1 = 0.112 \text{ fm}^{-3}, \quad \rho_2 = 0.0073 \text{ fm}^{-3}, \quad a = 0.367 \text{ fm}, \quad (1.12)$$

$$b = 1.32 \text{ fm}, \quad c = 0.762 \text{ fm}, \quad d = 0.5 \text{ fm}. \quad (1.13)$$

Таким образом, конечный размер  $\alpha$ -частицы не вводится как дополнительное произвольное предположение, а задается конкретной зарядовой плотностью, уже использованной в кластерной модели легкого ядра.

Взаимодействие между двумя  $\alpha$ -частицами описывается феноменологическим потенциалом Али–Бодмера. Исходно этот потенциал был введен для описания  $\alpha\alpha$ -рассеяния и свойств двух- $\alpha$ -системы [23]. В этой работе используется та же физическая идея: короткодействующая ядерная часть задается суммой гауссовых членов. Кроме того, добавляется кулоновское отталкивание между двумя положительно заряженными альфа-частицами. Принимая во внимание регуляризацию кулоновского члена, потенциал записывается в виде

$$V_{\alpha\alpha}(r) = v_1 \exp\left(-\frac{r^2}{a_1^2}\right) + v_2 \exp\left(-\frac{r^2}{a_2^2}\right) + \frac{4e^2}{r} \text{erf}(\beta r). \quad (1.14)$$

Один из гауссовых членов с положительной амплитудой (см. значения параметров 2.4) моделирует эффективное отталкивание между двумя  $\alpha$  класте-

рами из-за перекрытия волновых функций нуклонов и отталкивания Паули, которое становится значительным на малых расстояниях, перекрытия их волновых функций нуклонов и эффективного отталкивания Паули становятся значимым. Другой гауссовский член с отрицательной амплитудой (см. 2.5) моделирует область ядерного притяжения на промежуточных расстояниях. Что касается кулоновского члена отталкивания, то регуляризирующий коэффициент  $\text{erf}(\beta r)$  сглаживает кулоновский член для малых  $r$ ; такая регуляризация согласуется с использованием конечного распределения заряда частицы  $\alpha$  и используется в кластерных расчетах с не-сингулярное кулоновское взаимодействие [13].

В данной работе потенциал Али-Бодмера используется как функциональная форма эффективного взаимодействия. Параметры  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $a_1$  и  $a_2$  дополнительно определяются во время калибровки по той же схеме среднего поля, по которой рассчитываются системы с лептонной связью. Эта процедура необходима, поскольку волновая функция произведения (1.1) не содержит явных корреляций между  $\alpha$  частицами. В точных расчетах с низким содержанием частиц некоторые из этих эффектов описываются самой волновой функцией, тогда как в модели среднего поля они частично переносятся на эффективное взаимодействие. Поэтому параметры, полученные в одной схеме расчета, не должны автоматически переноситься в другую без проверки. Эта зависимость эффективного взаимодействия от выбранного метода хорошо известна при кластерных расчетах легких ядер [24, 25].

Для системы, состоящей из трех  $\alpha$ , одной только формы взаимодействия двух частиц недостаточно для воспроизведения энергии основного состояния  $^{12}\text{C}$  относительно свободных альфа-частиц в выбранном приближении. В  $\alpha$ -кластерных моделях ядра  $^{12}\text{C}$  введение эффективного взаимодействия трех тел является распространенным способом учета эффектов, выходящих за рамки простого попарного взаимодействия кластеров. В частности, в работах по трех- $\alpha$  описанию  $^{12}\text{C}$  используются дополнительные потенциалы трех тел для воспроизведения энергий низколежащих состояний и характерных размеров системы [26–28]. Следовательно, трехчастичный член в этой работе не является произвольным добавлением новой силы, а служит эффективной коррекцией, необходимой в рамках выбранной приближенной модели.

В используемой схеме этот вклад записывается в гауссовом виде:

$$V_{3b}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = W_0 \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 + |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|^2 + |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|^2}{B_3^2}\right). \quad (1.15)$$

Аргумент экспоненты зависит от взаимных расстояний между тремя альфа-частицами и, следовательно, описывает конфигурацию из трех частиц, а не сумму независимых парных вкладов. Параметры  $W_0$  и  $B_3$  не выбираются заранее: они определяются при калибровке трехфазной системы с использованием энергии связи  $^{12}\text{C}$ . Физически этот термин компенсирует некоторые недостающие корреляции и эффекты, связанные с неполнотой простой пробной функции Хартри-Фока для трех кластеров.

Таким образом, все потенциалы, использованные в работе, имеют конкретное происхождение. Кулоновский потенциал  $V_X$  основан на конечном распределении зарядов альфа-частиц из работы Бажина и Самарина. Парное взаимодействие  $V_{\alpha\alpha}$  основано на феноменологической форме Али-Бодмера с дополнительным регуляризованным кулоновским членом. Дополнительный трехчастичный вклад для  $^{12}\text{C}$  вводится в качестве эффективной поправки, аналогичной тем, которые используются в расчетах с тремя  $\alpha$ -кластерами. После калибровки в чисто ядерном пределе тот же набор взаимодействий используется для систем с большим отрицательным зарядом.

## 1.6 ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА И ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТЕЙ

Уравнение (1.7) является нелинейным, поскольку самосогласованное поле зависит от плотности  $|\phi(\mathbf{r})|^2$ . Поэтому орбиталь находится итерационно. В работе используется эволюция по мнимому времени: начальная нормированная пробная функция последовательно преобразуется неунитарным оператором эволюции, после чего снова нормируется. В результате компоненты с более высокой энергией подавляются быстрее, чем компонента основного состояния.

Это можно увидеть непосредственно из уравнения Шредингера

$$i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.16)$$

Подставляя  $t = -i\tau$ , мы переводим это в уравнение

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} = -\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, \tau), \quad \Psi(\tau) = \exp(-\tau\hat{H})\Psi(0). \quad (1.17)$$

Если начальная функция разложена по собственным состояниям гамильтониана,

$$\Psi(0) = \sum_n c_n \phi_n, \quad \hat{H}\phi_n = E_n \phi_n, \quad (1.18)$$

то после эволюции по мнимому времени получается

$$\Psi(\tau) = \sum_n c_n \exp(-E_n \tau) \phi_n. \quad (1.19)$$

После нормализации вклад состояния с наименьшей энергией становится доминирующим, если исходная функция имеет ненулевую проекцию на это состояние. В нелинейном уравнении Хартри-Фока этот аргумент применяется итеративно: на каждом шаге эффективный гамильтониан строится заново на основе плотности тока. Поэтому эволюция в мнимом времени используется не как физическая динамика, а как численный способ минимизации энергетического функционала при условии нормализации. Этот подход используется при решении стационарных уравнений Шредингера и самосогласованных задач о среднем поле [29–31].

Численная реализация выполнена в ядерных единицах: расстояния выражаются в фемтометрах, энергии и массы — в МэВ, а величина

$$\hbar c = 197.327 \text{ MeV} \cdot \text{fm} \quad (1.20)$$

сохраняется явно. Поэтому кинетический оператор в координатном пространстве имеет вид

$$\hat{T} = -\frac{(\hbar c)^2}{2\mu_{\text{eff}}} \nabla^2, \quad (1.21)$$

где  $\mu_{\text{eff}}$  задается в МэВ. В лептон-связанных расчетах используется приближение неподвижного тяжелого центра, поэтому в численном решении принято

$$\mu_{\text{eff}} = m_\alpha = 3727.379 \text{ MeV}. \quad (1.22)$$

Расчетная область представляет собой однородную трехмерную декар-

тову сетку. При реализации был использован куб

$$L_i = 25 - 40 \text{ fm}, \quad N_i = 128 - 180. \quad i = x, y, z \quad (1.23)$$

Соответствующий шаг сетки равен

$$h_i = \frac{L_i}{N_i} \text{ fm}. \quad (1.24)$$

Такая сетка используется для хранения орбиталей, вычисления плотностей, потенциалов, энергий и радиусов. Пространственные интегралы в численном методе вычисляются с использованием формулы Симпсона.

Эволюция в мнимом времени для орбитали одной частицы записывается в виде

$$-\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} = \left[ -\frac{(\hbar c)^2}{2\mu_{\text{eff}}} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, \tau) \right] \phi(\mathbf{r}, \tau). \quad (1.25)$$

Поскольку оператор в квадратных скобках имеет размерность энергии, шаг  $\Delta\tau$  имеет размерность  $\text{MeV}^{-1}$ . В расчетах использовалось значение

$$\Delta\tau = 0.015 \text{ MeV}^{-1}. \quad (1.26)$$

Эффективный потенциал включает внешнее поле тяжелой частицы, попарное поле Хартри и, при необходимости, трехчастичный вклад:

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, \tau) = V_X(\mathbf{r}) + (K - 1)V_H(\mathbf{r}, \tau) + V_{3H}(\mathbf{r}, \tau). \quad (1.27)$$

Попарное поле Хартри задается как

$$V_H(\mathbf{r}, \tau) = \int V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |\phi(\mathbf{r}', \tau)|^2 d^3\mathbf{r}'. \quad (1.28)$$

Для трех- $\alpha$ -системы добавляется вклад эффективного трехчастичного взаимодействия:

$$V_{3H}(\mathbf{r}, \tau) = \frac{(K - 1)(K - 2)}{2} \iint V_{3b}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}'') |\phi(\mathbf{r}', \tau)|^2 |\phi(\mathbf{r}'', \tau)|^2 d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r}''. \quad (1.29)$$

Для  $K < 3$  этот член равен нулю. В трех- $\alpha$ -расчете гауссова форма  $V_{3b}$  позволяет вычислять этот вклад через последовательность сверток с гауссовым яд-

ром, что уменьшает вычислительные затраты по сравнению с прямым двойным интегрированием.

Для одного шага по мнимому времени требуется применить оператор

$$\exp[-\Delta\tau(\hat{T} + V_{\text{eff}})].$$

Так как  $\hat{T}$  и  $V_{\text{eff}}$  не коммутируют, используется симметричное разложение Стрэнга:

$$\exp[-\Delta\tau(\hat{T} + V_{\text{eff}})] = \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}V_{\text{eff}}\right) \exp(-\Delta\tau\hat{T}) \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}V_{\text{eff}}\right) + O(\Delta\tau^3). \quad (1.30)$$

Это расщепление является схемой второго порядка для экспоненциального оператора и широко используется в спектральных методах решения уравнения Шредингера. [31, 32, 38, 39]. В расчете это дает шаг

$$\phi(\tau + \Delta\tau) \approx \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}V_{\text{eff}}\right) \exp(-\Delta\tau\hat{T}) \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}V_{\text{eff}}\right) \phi(\tau). \quad (1.31)$$

Потенциальные множители диагональны в координатном пространстве, а кинетический оператор диагонален в импульсном пространстве. Поэтому кинетический шаг выполняется после быстрого преобразования Фурье. Для дискретной сетки волновые числа задаются как

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z}, \quad (1.32)$$

где индексы  $n_i$  берутся в стандартном порядке дискретного преобразования Фурье, включая отрицательные частоты. В импульсном пространстве кинетический пропагатор имеет вид

$$\tilde{\phi}(\mathbf{k}, \tau + \Delta\tau) = \exp\left[-\Delta\tau \frac{(\hbar c)^2 k^2}{2\mu_{\text{eff}}}\right] \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \tau). \quad (1.33)$$

Численные процедуры, описанные выше, были реализованы с помощью кода на с++ с использованием библиотеки FFTW3 для прямого и обратного преобразований, основанной на алгоритмах быстрого преобразования Фурье [35, 37]. Применение спектрального кинетического оператора в задачах квантовой динамики и мнимого времени описано в работах [30, 38].

Свертка в поле Хартри также вычисляется с использованием FFT:

$$V_H(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1} [\mathcal{F} \{V_{\alpha\alpha}\} \mathcal{F} \{|\phi|^2\}] (\mathbf{r}). \quad (1.34)$$

При дискретном преобразовании Фурье свертка фактически становится циклической, что может привести к взаимодействию с периодическими копиями вычислительной области. Чтобы устранить этот артефакт, плотность свертки и ядро в программе дополняются нулями, чтобы удвоить размер сетки в каждом направлении. После обратного преобразования используется только физическая часть вычислительной области (см. [36, 37]).

Внешний потенциал тяжелого отрицательного заряда вычисляется отдельно как свернутый кулоновский потенциал конечного зарядового распределения  $\alpha$ -частицы. В программе используется кулоновская константа (1.9)

Для больших расстояний потенциал переходит к форме, соответствующей заряду ядра гелия  $Z_\alpha = 2$ , а знак задается зарядом тяжелой частицы. Кулоновская часть  $\alpha$ - $\alpha$ -потенциала реализована как

$$V_C(r) = a_C \frac{\text{erf}(b_C r)}{r}, \quad a_C = 5.759 \text{ MeV} \cdot \text{fm}, \quad b_C = 0.601 \text{ fm}^{-1}, \quad (1.35)$$

что соответствует  $a_C \simeq 4e^2$  для двух  $\alpha$ -частиц.

После каждого шага эволюции волновая функция нормируется:

$$\phi(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{\phi(\mathbf{r})}{(\int |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r})^{1/2}}. \quad (1.36)$$

Нормировка необходима потому, что оператор мнимого времени не является унитарным. Кроме того, в реализации выполняется коррекция положения центра плотности: по текущей плотности вычисляется среднее значение координаты, после чего центр внешнего потенциала и координатный отсчет для радиусов согласуются с этим положением. Это уменьшает численный дрейф плотности на конечной сетке и сохраняет расчет в системе, связанной с центром распределения.

Полная энергия вычисляется из отдельных вкладов. Для системы из  $K$

$\alpha$ -частиц структура подсчета имеет вид

$$E_{\text{total}} = KT_{\text{one}} + K\langle V_X \rangle + \frac{K}{2}\langle U_2 \rangle + \frac{K}{3}\langle U_3 \rangle. \quad (1.37)$$

Здесь  $T_{\text{one}}$  — кинетическая энергия одной орбитали,  $\langle V_X \rangle$  — вклад внешнего поля,  $\langle U_2 \rangle$  — среднеполевой двухчастичный вклад, а  $\langle U_3 \rangle$  — трехчастичный среднеполевой вклад. Множители  $K/2$  и  $K/3$  устраняют избыточный счет парных и трехчастичных взаимодействий, поскольку соответствующие средние поля уже включают число соседних кластеров.

Сходимость по мнимому времени контролируется по изменению полной энергии. В программе используется величина

$$d_E = \frac{|E^{(n)} - E^{(n-1)}|}{1 + |E^{(n)}|}, \quad (1.38)$$

и итерации останавливаются при условии

$$d_E < 10^{-10}, \quad n > 50. \quad (1.39)$$

Структурные характеристики вычисляются из нормированной орбитали. Для системы с тяжелой частицей характерный радиус орбитали определяется как

$$r_{X-\alpha} = \left( \int r^2 |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} \right)^{1/2}. \quad (1.40)$$

Для двух- $\alpha$ -системы среднеквадратичное расстояние между  $\alpha$ -частицами выражается через одночастичную плотность:

$$r_{\alpha-\alpha} = \sqrt{2} \left( \int r^2 |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} \right)^{1/2}. \quad (1.41)$$

Зарядовый радиус много- $\alpha$ -системы вычисляется с учетом конечного размера самой  $\alpha$ -частицы:

$$r_{\text{ch}} = \left( r_N^2 + \int r^2 |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} \right)^{1/2}. \quad (1.42)$$

В численной реализации использовалось значение

$$r_N = 1.67 \text{ fm}, \quad (1.43)$$

что соответствует экспериментальному зарядовому радиусу  $\alpha$ -частицы в пределах требуемой точности [40].

Оценка погрешностей проводилась отдельно для нескольких источников. Основной вклад связан с пространственной дискретизацией и конечным размером расчетной области. Для его оценки расчеты сравнивались при изменении сетки и размера области; в качестве ориентира использовалась экстраполяционная модель

$$Q(h) = Q_0 + Ch^p, \quad (1.44)$$

где  $Q(h)$  — вычисленная величина при шаге сетки  $h$ ,  $Q_0$  — значение в пределе  $h \rightarrow 0$ , а  $p$  — порядок сходимости. Этот подход соответствует идее экстраполяции Ричардсона для оценки остаточной ошибки выборки [41].

Проведенные проверки показали, что погрешность, связанная с минимальным временным шагом и итерационной сходимостью, меньше, чем вклад сетки. Для конечных значений энергий и радиусов используется консервативная абсолютная численная погрешность.

$$\Delta E_{\text{num}} = 0.05 \text{ MeV}, \quad (1.45)$$

и

$$\Delta r_{\text{num}} = 0.03 \text{ fm}. \quad (1.46)$$

Эти значения характеризуют точность решения выбранных уравнений. Они не учитывают неопределенность модели, связанную с простой функцией проверки продукта, выбором эффективного взаимодействия  $\alpha$ - $\alpha$  и отсутствием явной антисимметризации нуклонов между различными кластерами. В вычислительных ядерных задачах разница между численной погрешностью решения и теоретической неопределенностью модели существенна [34]; поэтому ограничения модели обсуждаются отдельно при интерпретации результатов.

## 2 РАСЧЕТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

### 2.1 ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЛЬФА ЧАСТИЦ

Прежде чем рассчитывать системы с тяжелой отрицательно заряженной частицей, необходимо зафиксировать ядерную часть модели. Это делается в отсутствие внешнего кулоновского поля частицы  $X^{-2N}$ .

Параметры потенциала (1.14) определяются с использованием энергий связи систем  ${}^8\text{Be}$  и  ${}^{12}\text{C}$ . Первая система фиксирует двухчастичный канал, вторая проверяет, как работает тот же двухчастичный потенциал в трехчастичной конфигурации.

Основное состояние  ${}^8\text{Be}$  является резонансным и расположено очень близко к порогу распада на две  $\alpha$  частицы. Экспериментальное значение энергии этого резонанса равно

$$E_R({}^8\text{Be}) = 0.0918 \pm 0.0005 \text{ MeV} \quad (2.1)$$

относительно порога  $2\alpha$  [17]. Такая малая энергия делает  ${}^8\text{Be}$  чувствительной проверкой баланса между короткодействующим отталкиванием, ядерным притяжением и кулоновским отталкиванием двух  $\alpha$ -частиц.

В рамках используемого приближения параметры потенциала Али–Бодмера в формуле (1.14) подбирались так, чтобы воспроизвести положение этого резонанса. Полученное значение полной энергии равно

$$E_{\text{total}}({}^8\text{Be}) = 0.092 \pm 0.001 \text{ MeV}. \quad (2.2)$$

Среднеквадратичное расстояние между двумя  $\alpha$ -частицами, вычисленное по

формуле (1.41), составляет

$$r_{\alpha-\alpha}(^8\text{Be}) = 3.51 \pm 0.02 \text{ fm}. \quad (2.3)$$

Этому результату соответствует следующий набор параметров двухчастичного потенциала:

$$v_1 = 126.61 \pm 0.08 \text{ MeV}, \quad a_1^2 = 0.831 \pm 0.012 \text{ fm}^2, \quad (2.4)$$

$$v_2 = -54.61 \pm 0.06 \text{ MeV}, \quad a_2^2 = 3.59 \pm 0.04 \text{ fm}^2. \quad (2.5)$$

Регуляризованный кулоновский член использовался с параметром

$$\beta = 0.601 \text{ fm}^{-1}. \quad (2.6)$$

Численные значения в формулах (2.4)–(2.5) не следует понимать как новый универсальный набор параметров потенциала Али-Бодмера. Они являются эффективными параметрами, совместимыми с конкретным подходом, основанным на среднем поле. В точных двух- и трехчастичных расчетах часть корреляций описывается самой волновой функцией, тогда как в приближении Хартри-Фока эти корреляции явно отсутствуют и переносятся на эффективное взаимодействие. Следовательно, перенормировка параметров при переключении на другую схему расчета или модель является ожидаемой особенностью такого описания [23–25].

На рисунок 2.1 показано сравнение нескольких вариантов эффективного потенциала  $\alpha\alpha$  взаимодействия. В дополнение к потенциалу в этой работе, в которой используется наш недавно найденный набор параметров, приведены потенциал, используемый в [13], и потенциал типа “fish-bone” основанный на точном многочастичном расчете [24]. Такое сравнение важно, поскольку оно показывает, что в рамках различных схем расчета одна и та же физическая задача может привести к различным эффективным формам потенциала. В то же время сам факт различия не является противоречием: он отражает тот факт, что в отличие от потенциалов взаимодействия, построенных на основе фундаментальных взаимодействий, эффективные потенциалы не универсальны, они чувствительны к модели, в которой моделируется проблема, и, следовательно, требуют калибровки в рамках этой модели (наша

текущая модель - это приближение среднего поля).

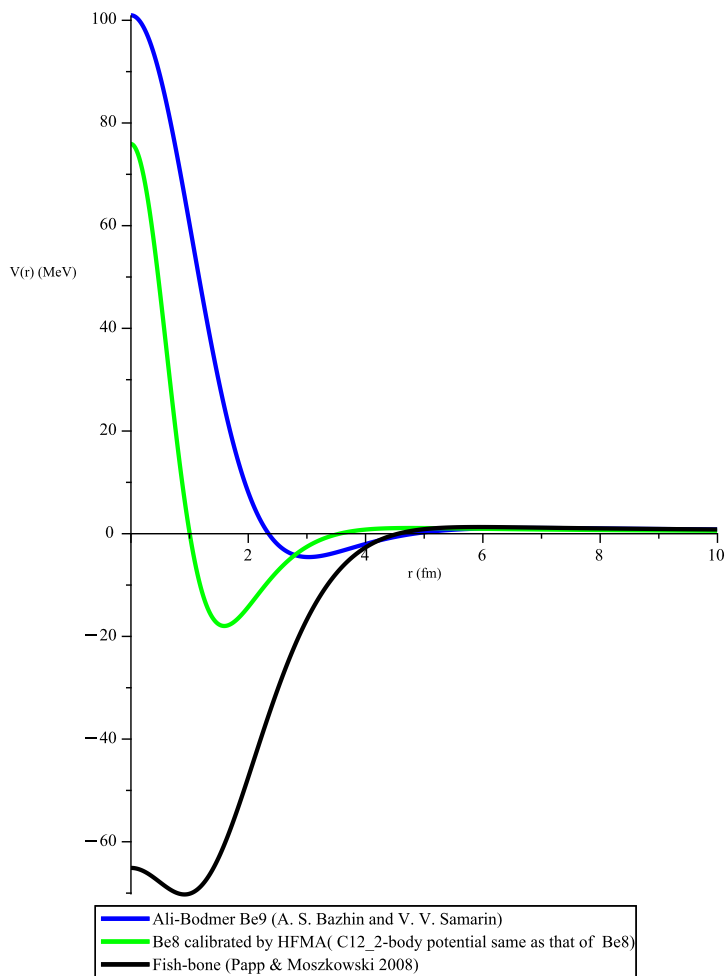


Рисунок 2.1 — Сравнение потенциала Али–Бодмера: потенциал, подобранный по фазовым сдвигам с использованием уравнений Фаддеева [13] (синий), потенциалы для  $^8\text{Be}$  и  $^{12}\text{C}$ , полученные в рамках подхода Хартри–Фока (зеленый), и потенциал типа “fish-bone”, определенный в точной многочастичной постановке [24] (черный).

После установления взаимодействия двух частиц проверяется система  $^{12}\text{C}$ . Используя только форму потенциала, полученную в чисто двухчастичном варианте, без дополнительного трехчастичного члена, расчет дает

$$E_{\text{total}}(^{12}\text{C}) = -7.482 \pm 0.002 \text{ MeV} \quad (2.7)$$

относительно порога в 3 альфа-частицы. Это значение соответствует немного большей энергии связи по сравнению с экспериментальной энергией ос-

нового состояния  $^{12}\text{C}$  относительно порога в 3 альфа-частицы. Следовательно, эффективный трехчастичный член (1.15) вводится при расчете системы из 3 альфа-частиц. Как обсуждалось выше, такой термин используется не как независимое фундаментальное взаимодействие, а как способ объяснить некоторые корреляции, которые отсутствуют в простой пробной волновой функции. Аналогичные эффективные трехчастичные поправки применяются в  $\alpha$ -кластерных моделях  $^{12}\text{C}$  [26–28].

Параметры  $W_0$  и  $B_3$  подбирались так, чтобы воспроизвести энергию основного состояния  $^{12}\text{C}$  относительно порога  $3\alpha$ . После добавления трехчастичного члена получено

$$E_{\text{total}}(^{12}\text{C}) = -7.275 \pm 0.002 \text{ MeV}, \quad (2.8)$$

что согласуется с экспериментальным значением  $-7.2747 \text{ MeV}$  [18]. Соответствующие параметры трехчастичной поправки равны

$$W_0 = 0.282 \pm 0.015 \text{ MeV}, \quad B_3 = 3.32 \pm 0.08 \text{ fm}. \quad (2.9)$$

Зарядовый радиус, рассчитанный по формуле (1.42), составляет

$$r_{\text{ch}}(^{12}\text{C}) = 2.53 \pm 0.02 \text{ fm}. \quad (2.10)$$

Экспериментальное значение зарядового радиуса  $^{12}\text{C}$  равно примерно  $2.470 \text{ fm}$  [40]. Разница между расчетным и экспериментальным значениями показывает ограниченность простого среднеполевого описания, но для данной работы важнее другое: модель воспроизводит правильный масштаб трех- $\alpha$ -системы и дает согласованную основу для дальнейшего расчета конфигураций с тяжелой отрицательно заряженной частицей.

Форма трехчастичного вклада показана на рис. 2.2. Приведенные сечения при фиксированных значениях  $r_{23}$  (расстояние между альфа-частицами 2 и 3) позволяют увидеть, в какой области конфигурационного пространства этот потенциал дает наибольший вклад. При сравнительно малых расстояниях между кластерами трехчастичный член заметнее влияет на энергию системы, тогда как при более разреженных конфигурациях его вклад быстро уменьшается. Это соответствует его роли как эффективной поправки, значи-

мой именно для компактной трех- $\alpha$ -структуры.

3-body Force Slice at fixed  $r_{23} = 2$  fm

3-body Force Slice at fixed  $r_{23} = 4$  fm

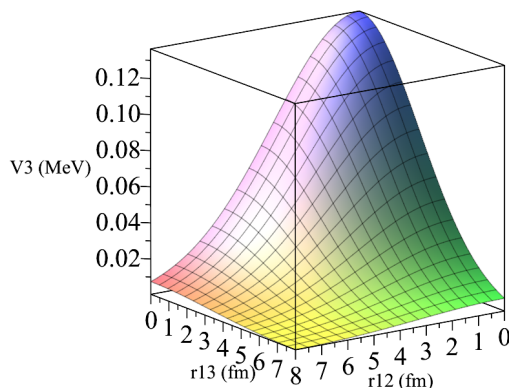
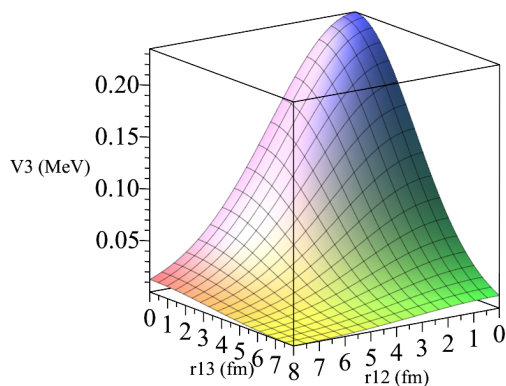


Рисунок 2.2 — Трехчастичный потенциал  $V_3(r_{12}, r_{13}, r_{23})$  в сечении при фиксированных значениях  $r_{23} = 2$  фм и 4 фм. Показана величина трехчастичного вклада (в МэВ) в зависимости от расстояний между двумя другими парами частиц.

Итоговые параметры, используемые далее без дополнительной подгонки, приведены в таблице 2.1. Значащие цифры в таблице выбраны в соответствии с указанными абсолютными погрешностями.

Таблица 2.1 — Откалиброванные параметры эффективного взаимодействия в чисто ядерном пределе

Параметр	$^8\text{Be}$	$^{12}\text{C}$
$v_1, \text{MeV}$	$126.61 \pm 0.08$	$126.61 \pm 0.08$
$a_1^2, \text{fm}^2$	$0.831 \pm 0.012$	$0.831 \pm 0.012$
$v_2, \text{MeV}$	$-54.61 \pm 0.06$	$-54.61 \pm 0.06$
$a_2^2, \text{fm}^2$	$3.59 \pm 0.04$	$3.59 \pm 0.04$
$W_0, \text{MeV}$	—	$0.282 \pm 0.015$
$B_3, \text{fm}$	—	$3.32 \pm 0.08$

Таблица 2.2 содержит основные наблюдаемые значения, по которым была выполнена калибровка. Для  $^8\text{Be}$  основной проверкой является положение резонанса относительно порога в  $2\alpha$ . Для  $^{12}\text{C}$  проверяются энергия основного состояния относительно порога в  $3\alpha$  и радиус заряда.

Таблица 2.2 — Проверка калибровки на чисто ядерных  $\alpha$ -кластерных системах

Величина	Расчет	Экспериментальное значение
$E_R(^8\text{Be}), \text{MeV}$	$0.092 \pm 0.001$	$0.0918 \pm 0.0005$
$r_{\alpha-\alpha}(^8\text{Be}), \text{fm}$	$3.51 \pm 0.02$	—
$E(^{12}\text{C}), \text{MeV}$	$-7.275 \pm 0.002$	$-7.2747$
$r_{\text{ch}}(^{12}\text{C}), \text{fm}$	$2.53 \pm 0.02$	$\approx 2.470$

Далее параметры из таблицы 2.1 сохраняются неизменными, и все изменения энергий и радиусов в системах  $OHe$ ,  $OBe$ ,  $OC$ ,  $XBe$  и  $XC$  относятся уже к действию тяжелого отрицательного заряда.

## 2.2 СИСТЕМА $OHe$

Простейшая лептон-связанная система в рассматриваемом классе соответствует одному  $\alpha$ -кластеру и одной частице  $O^{--}$ . Для нее  $K = 1$  и  $Z_X = -2$ . В этом случае отсутствуют как попарное  $\alpha\alpha$ -взаимодействие, так и трехчастичный вклад, поэтому расчет определяется только кулоновским притяжением тяжелого отрицательного заряда к конечному зарядовому распределению ядра  $^4\text{He}$ .

При  $K = 1$  уравнение (1.7) принимает вид

$$\left[ -\frac{1}{2m_\alpha} \nabla^2 + V_X(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Полная энергия системы в этом случае совпадает с собственным значением одночастичного уравнения:

$$E_{\text{total}}(OHe) = \epsilon. \quad (2.12)$$

Начало отсчета энергии выбрано на пороге  $O^{--} + ^4\text{He}$ .

Для основного состояния получено

$$E_{\text{total}}(OHe) = -1.17 \pm 0.05 \text{ MeV}. \quad (2.13)$$

Отрицательное значение энергии означает, что система связана относительно распада на свободную частицу  $O^{--}$  и ядро  $^4\text{He}$ . Среднеквадратичный ра-

диус орбитали, рассчитанный по формуле (1.40), равен

$$r_{O-\alpha} = 4.12 \pm 0.03 \text{ fm}. \quad (2.14)$$

Здесь и далее приведенные погрешности являются абсолютными численными погрешностями, оцененными по сеточной сходимости, шагу мнимого времени и устойчивости численного интегрирования.

Полученное значение  $r_{O-\alpha}$  превышает экспериментальный зарядовый радиус ядра  ${}^4\text{He}$ , который составляет около 1,67 fm [40]. Следовательно, в основном состоянии  $OHe$  ядро гелия не локализовано непосредственно вблизи точечного отрицательного центра и имеет боровскую атомную структуру.

## 2.3 СИСТЕМА $OBe$

Следующая система содержит две  $\alpha$ -частицы и одну тяжелую частицу  $O^{--}$ . Полный заряд такой конфигурации равен +2. В отсутствие лептонного заряда соответствующая двух-альфа-подсистема, связанная с ядром  ${}^8\text{Be}$ , нестабильна относительно порога распада на две  $\alpha$ -частицы. После добавления тяжелого отрицательного заряда структура задачи меняется: каждая  $\alpha$ -частица испытывает притяжение к  $O^{--}$ , но одновременно сохраняются кулоновское отталкивание и ядерное взаимодействие между самими  $\alpha$ -кластерами.

Для  $K = 2$  уравнение Хартри–Фока принимает вид

$$\left[ -\frac{1}{2m_\alpha} \nabla^2 + V_X(\mathbf{r}) + \int |\phi(\mathbf{r}')|^2 V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3\mathbf{r}' \right] \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

В отличие от  $OHe$ , здесь появляется поле Хартри, создаваемое второй  $\alpha$ -частицей. Полная энергия вычисляется по функционалу (1.5); при этом из суммы одночастичных энергий вычитается лишний вклад попарного взаимодействия, как в формуле (1.8).

Энергия системы отсчитывается от порога  $O^{--} + 2\alpha$ . В результате расчета получено

$$E_{\text{total}}((OBe)^{2+}) = -5.66 \pm 0.05 \text{ MeV}. \quad (2.16)$$

По сравнению с чистым альфа-кластером  ${}^8\text{Be}$ , расположенной выше поро-

га  $2\alpha$ , наличие частицы  $O^{--}$  приводит к образованию связанного состояния относительно порога  $O^{--} + 2\alpha$ .

Среднеквадратичный радиус орбитали  $\alpha$ -частицы относительно тяжелого отрицательного центра равен

$$r_{O-\alpha} = 2.40 \pm 0.03 \text{ fm}. \quad (2.17)$$

Соответствующее среднеквадратичное расстояние между двумя  $\alpha$ -частицами, вычисленное по формуле (1.41), составляет

$$r_{\alpha-\alpha} = 3.39 \pm 0.03 \text{ fm}. \quad (2.18)$$

Полученное значение  $r_{O-\alpha}$  заметно меньше радиуса орбиты в системе  $OHe$ . Это указывает на более компактное распределение частиц  $\alpha$  вокруг тяжелого отрицательного центра. В то же время расстояние между двумя альфа-частицами остается сравнимым с характерным размером двух- $\alpha$ -конфигурации в  ${}^8\text{Be}$  и не уменьшается до масштаба полного перекрытия кластеров. Такое поведение связано с балансом между притяжением к  $O^{--}$  и отталкивающей частью эффективного  $\alpha\alpha$ -потенциала на малых расстояниях.

## 2.4 СИСТЕМА $OC$

Система  $OC$  содержит три  $\alpha$ -частицы и одну тяжелую частицу  $O^{--}$ . Ее полный заряд равен  $+4$ . Для  $K = 3$  каждая  $\alpha$ -частица движется в поле тяжелого отрицательного заряда и в среднем поле двух остальных  $\alpha$ -кластеров. В уравнении Хартри–Фока это соответствует множителю  $K - 1 = 2$  перед попарным полем Хартри. Кроме того, в трех- $\alpha$ -конфигурации появляется вклад эффективного трехчастичного потенциала (1.15). В результате одночастичное уравнение можно записать в виде

$$\left[ -\frac{1}{2m_\alpha} \nabla^2 + V_X(\mathbf{r}) + 2V_H(\mathbf{r}) + V_{3H}(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r}), \quad (2.19)$$

где  $V_H(\mathbf{r})$  задается формулой (1.28), а  $V_{3H}(\mathbf{r})$  — формулой (1.29). Энергия отсчитывается от порога  $O^{--} + 3\alpha$ .

Для основного состояния получено

$$E_{\text{total}}((OC)^{4+}) = -16.85 \pm 0.05 \text{ MeV}. \quad (2.20)$$

Среднеквадратичный радиус орбитали  $\alpha$ -частицы относительно тяжелого центра составляет

$$r_{O-\alpha} = 1.80 \pm 0.03 \text{ fm}. \quad (2.21)$$

Зарядовый радиус системы, рассчитанный по формуле (1.42) с учетом конечного зарядового радиуса  $\alpha$ -частицы, равен

$$r_{\text{ch}} = 2.46 \pm 0.03 \text{ fm}. \quad (2.22)$$

Полученное значение  $r_{O-\alpha}$  ниже, чем в системах  $OHe$  и  $OBe$ . Это отражает более компактное распределение  $\alpha$  кластеров вокруг частицы  $O^{--}$ . В то же время радиус заряда остается близким к характерному размеру легкого ядра.

Основные результаты для трех систем с зарядом тяжелой частицы  $Z_X = -2$  собраны в таблице 2.3. Для  $OHe$  приведен радиус  $r_{O-\alpha}$ . Для  $OBe$  дополнительно указан межальфовый радиус  $r_{\alpha-\alpha}$ . Для  $OC$  указан зарядовый радиус  $r_{\text{ch}}$ , поскольку именно он характеризует пространственный размер трех- $\alpha$ -зарядового распределения.

Таблица 2.3 — Расчетные характеристики систем  $OHe$ ,  $(OBe)^{2+}$  и  $(OC)^{4+}$

Система	$K$	$E_{\text{total}}$ , MeV	$r_{O-\alpha}$ , fm	Дополнительный радиус, fm
$OHe$	1	$-1.17 \pm 0.05$	$4.12 \pm 0.03$	—
$OBe$	2	$-5.66 \pm 0.05$	$2.40 \pm 0.03$	$r_{\alpha-\alpha} = 3.39 \pm 0.03$
$OC$	3	$-16.85 \pm 0.05$	$1.80 \pm 0.03$	$r_{\text{ch}} = 2.46 \pm 0.03$

## 2.5 ОБОБЩЕННЫЕ СИСТЕМЫ $XBe$ И $XC$

Расчеты для  $OHe$ ,  $OBe$  и  $OC$  соответствуют фиксированному заряду тяжелой частицы  $Z_X = -2$ . В более общем случае можно рассмотреть частицы  $X^{-2N}$  с большим по модулю отрицательным зарядом. В этом случае обозначение  $O$  уже не используется: оно относится только к частице  $O^{--}$

при  $N = 1$ . Поэтому для зарядов  $Z_X < -2$  далее применяются обозначения  $XBe$  и  $XC$ .

При изменении  $Z_X$  ядерная часть модели не перенастраивается. Параметры  $\alpha\alpha$ -взаимодействия, найденные при калибровке по системам  ${}^8\text{Be}$  и  ${}^{12}\text{C}$ , сохраняются неизменными. Меняется только внешний кулоновский потенциал  $V_X(\mathbf{r})$ , поскольку его величина пропорциональна заряду тяжелой частицы. Такой расчет позволяет отделить влияние усиления внешнего кулоновского притяжения от собственно ядерной части задачи.

Таблица 2.4 — Зависимость энергии и характерных радиусов систем  $XBe$  и  $XC$  от заряда тяжелой частицы

Система	$Z_X$	$E_{\text{total}}$ , MeV	$r_{X-\alpha}$ , fm	Характерный радиус, fm
$OBe$	-2	-5.660	2.40	$r_{\alpha-\alpha} = 3.39$
$XBe$	-4	-11.85	1.90	$r_{\alpha-\alpha} = 2.68$
$XBe$	-6	-18.30	1.78	$r_{\alpha-\alpha} = 2.51$
$XBe$	-8	-24.94	1.68	$r_{\alpha-\alpha} = 2.38$
$XBe$	-10	-31.75	1.61	$r_{\alpha-\alpha} = 2.28$
$XBe$	-12	-38.69	1.55	$r_{\alpha-\alpha} = 2.20$
$OC$	-2	-16.85	1.80	$r_{\text{ch}} = 2.46$
$XC$	-4	-26.67	1.73	$r_{\text{ch}} = 2.41$
$XC$	-6	-36.68	1.67	$r_{\text{ch}} = 2.37$
$XC$	-8	-46.86	1.62	$r_{\text{ch}} = 2.33$
$XC$	-10	-57.18	1.57	$r_{\text{ch}} = 2.30$
$XC$	-12	-67.63	1.53	$r_{\text{ch}} = 2.28$
$XC$	-14	-78.20	1.50	$r_{\text{ch}} = 2.25$
$XC$	-16	-88.86	1.47	$r_{\text{ch}} = 2.23$
$XC$	-18	-99.62	1.44	$r_{\text{ch}} = 2.21$
$XC$	-20	-110.46	1.42	$r_{\text{ch}} = 2.20$

В обеих группах систем увеличение модуля заряда  $|Z_X|$  приводит к росту энергии связи. Однако изменение радиусов происходит не с той же скоростью. При переходе от  $Z_X = -2$  к  $Z_X = -4$  сжатие заметно выражено, особенно в системе  $XBe$ .

## 2.6 ФИЗИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ И ОГРАНИЧЕНИЯ МОДЕЛИ

Результаты показывают устойчивую тенденцию: сильный отрицательный заряд усиливает связывание  $\alpha$ -кластерных систем и уменьшает их характерные размеры. Для одной частицы  $\alpha$  система  $OHe$  имеет энергию  $-1,170$  МэВ

и радиус  $r_{O-\alpha} = 4,12 \text{ fm}$ . При переключении на две альфа-частицы энергия системы  $O\text{Be}$  становится равной  $-5,660 \text{ МэВ}$ , а радиус орбиты уменьшается до  $2,40 \text{ фм}$ . Для трех альфа-частиц в системе  $OC$  энергия достигает  $-16,850 \text{ МэВ}$ , в то время как  $r_{O-\alpha} = 1,80 \text{ fm}$ . Следовательно, добавление новых  $\alpha$  кластеров в поле с тем же зарядом  $O^{--}$  приводит не только к увеличению общей энергии связи, но и к более компактному распределению кластеров вокруг тяжелой частицы.

Эта картина не сводится к независимой привязке каждой частицы  $\alpha$  к частице  $O^{--}$ . Если бы взаимодействие между альфа-кластерами не играло существенной роли, энергия мульти-альфа-системы была бы близка к сумме индивидуальных вкладов, подобных  $O\text{He}$ . Расчеты дают другой результат. Уже для  $O\text{Be}$  энергия связи значительно превышает энергию  $O\text{He}$  в два раза, а для  $OC$  эффект становится еще более выраженным. Это связано с тем, что все  $\alpha$  частицы находятся в общем самосогласованном поле и одновременно взаимодействуют друг с другом. Следовательно, энергия определяется балансом внешнего кулоновского притяжения, кулоновского отталкивания альфа-частиц, ядерной частью альфа-потенциала и, для трех-альфа-системы, эффективным вкладом трех частиц.

Сжатие системы также имеет естественное ограничение. Увеличение модуля заряда  $Z_X$  увеличивает внешний потенциал, но радиусы не уменьшаются пропорционально  $|Z_X|$ . Это можно наблюдать в системах  $X\text{Be}$  и  $X\text{C}$ : энергия связи продолжает быстро расти, в то время как характерные радиусы изменяются гораздо медленнее после первоначального уменьшения. Такое поведение связано с увеличением кинетической энергии во время орбитальной локализации и с кратковременным отталкиванием между  $\alpha$  кластерами. В результате система становится более компактной, но при этом не переходит в состояние со сколь угодно малым размером.

Сравнение двух- $\alpha$ - и трех- $\alpha$ -систем показывает, что конфигурации из трех кластеров оказываются более связанными с одинаковым зарядом тяжелой частицы. Это согласуется с тем фактом, что ядро  ${}^8\text{Be}$  относительно нестабильно, в то время как ядро  ${}^{12}\text{C}$  стабильно.

Одно из ключевых ограничений модели связано с формой пробной волновой функции. Эта волновая функция (1.1) предполагает, что все частицы  $\alpha$  занимают одну и ту же одночастичную орбиту. Это делает возможным само-

согласованное описание систем с различным количеством кластеров, но исключает очевидные корреляции между их позициями. В реальных  $\alpha$  кластерных ядрах такие корреляции могут быть значительными, особенно в трех- $\alpha$  системах, где возможны различные пространственные конфигурации кластеров [14, 19, 28]. Следовательно, полученные энергии и радиусы являются результатами эффективного приближения среднего поля, а не точным микроскопическим решением полной ядерной задачи.

Второе ограничение связано с самой структурой кластеров.  $\alpha$ -частицы рассматриваются как эффективные степени свободы с заданным распределением внутреннего заряда. Этот подход оправдан до тех пор, пока сохраняется смысл описания системы с помощью отдельных  $\alpha$  кластеров. При сильном сжатии, особенно для больших  $|Z_X|$ , перекрытие кластеров становится более значительным, и простое описание с использованием эффективного потенциала  $\alpha\alpha$  может потерять точность. Следовательно, результаты для больших отрицательных зарядов следует понимать как экстраполяцию выбранной модели, полезную для выявления общей тенденции, но требующую дальнейшей проверки более детальными методами.

Следует проводить отдельное различие между числовой погрешностью и неопределенностью модели. Числовые погрешности, указанные в таблицах, характеризуют стабильность решения выбранных уравнений относительно сетки, шага по мнимому времени и вычисления интегралов. Они не включают ошибки, связанные с выбором пробной волновой функции, формой эффективного потенциала и отсутствием явной антисимметризации нуклонов между различными альфа-кластерами. Такое разделение соответствует общим вычислительным ядерным проблемам: точность численного решения и надежность самой модели - это разные вопросы [34].

Несмотря на эти ограничения, результаты дают непротиворечивую физическую картину в рамках поставленной задачи. Откалиброванная на  $^8\text{Be}$  и  $^{12}\text{C}$  модель показывает, что тяжелая отрицательно заряженная частица может существенно изменить энергетическую и пространственную структуру легких альфа-кластерных систем. Полученные энергии связи и радиусы являются исходными характеристиками возможных конфигураций, связанных с лептонами. Чтобы перейти от этих стационарных характеристик к динамическим процессам, потребуются отдельные расчеты вероятностей образования

таких состояний и соответствующих сечений, что выходит за рамки данной работы.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эта работа дает эффективное описание многочастичных структур темных атомов, содержащих отрицательно заряженную тяжелую частицу и одну или более альфа-частиц. Были исследованы системы  $ONe$ ,  $OBe$ ,  $OC$ , а также обобщение конфигураций  $XVe$  и  $XC$  с различными значениями отрицательного заряда тяжелой частицы. Основными расчетными характеристиками были энергии связи и характерные радиусы, которые позволяют изучать изменение структуры альфа-кластерных ядер под воздействием внешнего кулоновского центра.

Для решения задачи используется самосогласованное бозонное приближение Хартри-Фока. В рамках этого подхода альфа-частицы рассматривались как эффективные бозонные степени свободы, занимающие одну и ту же одночастичную орбиталь. Был записан гамильтониан системы из  $K$  альфа-частиц и тяжелой частицы  $X^{-2N}$ , построен функционал энергии и получено соответствующее самосогласованное уравнение. Взаимодействие тяжелой частицы с ядром гелия учитывалось через кулоновский потенциал с учетом конечного размера альфа-частицы.

Прежде чем приступить к расчету систем, связанных с лептонами, была исследована чистая альфа-кластерная часть модели. Параметры эффективного  $\alpha\alpha$ -взаимодействия были определены в рамках двух- $\alpha$ -системы  ${}^8\text{Be}$ , после чего в системе была проверена трех- $\alpha$ -конфигурация  ${}^{12}\text{C}$ . Чтобы воспроизвести известную энергию связи ядра  ${}^{12}\text{C}$ , состоящего из трех  $\alpha$ -частиц, был добавлен эффективный потенциал трех тел, компенсирующий дополнительное связывание, наблюдаемое в его отсутствие. В результате была получена единая схема, в которой подсистема  $\alpha$ -частиц сначала фиксируется, а затем используется без дополнительной настройки для систем с большим отрицательным зарядом.

Расчеты показали, что добавление тяжелой отрицательно заряженной частицы существенно изменяет свойства конфигураций кластеров  $\alpha$ . Про-

стейшая система  $OHe$  определяет масштаб кулоновской связи одной  $\alpha$  частицы с  $O^{--}$  частицей. С переходом на  $OBe$  и  $OC$  привязка увеличивается, и распределение кластеров  $\alpha$  становится более компактным. В то же время уменьшение размеров не является неограниченным: оно ограничено увеличением кинетической энергии и отталкивающей частью эффективного альфа-взаимодействия на малой дистанции.

Для обобщенных систем  $XBe$  и  $XC$  была исследована зависимость результатов от заряда тяжелой частицы. Увеличение модуля отрицательного заряда приводит к более глубокому связыванию, но характерные радиусы после первоначального сжатия изменяются заметно медленнее. Это показывает, что усиление внешнего кулоновского поля в основном влияет на энергию связи, в то время как пространственная структура много- $\alpha$ -частичной системы остается ограниченной внутренними ядерными эффектами.

Полученные результаты следует рассматривать в рамках выбранного эффективного описания. Приближение Хартри-Фока с упрощенной пробной волновой функцией не содержит явных корреляций между положениями альфа-частиц и не описывает антисимметризацию нуклонов между различными кластерами. Эти эффекты частично объясняются перенормировкой эффективного взаимодействия и трехчастичным членом в системе  $^{12}C$ , но не устраняют полностью неопределенность модели. Следовательно, численные погрешности, приведенные в этой работе, характеризуют точность решения выбранных уравнений, в то время как ограничения самой модели требуют отдельной физической оценки.

Основным результатом работы является то, что в рамках альфа-кластерной модели с калибровкой по известным ядрам со средним полем тяжелый отрицательный заряд способен стабилизировать и сжимать легкие много- $\alpha$  конфигурации. Построенная схема обеспечивает последовательный способ перехода от обычных альфа-кластерных систем к лептонно-связанным структурам темных атомов. Дальнейшее развитие этой работы должно быть связано с более точным рассмотрением кластерных корреляций, сравнением с методами с низким содержанием частиц и расчетом динамических характеристик образования таких связанных состояний.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Khlopov M. Yu. Cosmoparticle physics of dark matter // EPJ Web of Conferences. — 2019. — Vol. 222. — P. 01006. — arXiv:1910.12910.
2. Khlopov M. Yu. Composite dark matter from 4th generation // JETP Letters. — 2006. — Vol. 83. — P. 1–4. — arXiv:astro-ph/0511796.
3. Khlopov M. Yu., Kouvaris C. Composite dark matter from a model with composite Higgs boson // Physical Review D. — 2008. — Vol. 78. — P. 065040. — arXiv:0806.1191.
4. Cudell J.-R., Khlopov M. Yu., Wallemacq Q. Dark atoms and the positron-annihilation-line excess in the galactic bulge // Advances in High Energy Physics. — 2014. — Vol. 2014. — P. 869425. — arXiv:1401.5228.
5. Cudell J.-R., Khlopov M. Yu., Wallemacq Q. Some potential problems of OHe composite dark matter // Advances in High Energy Physics. — 2015. — Vol. 2015. — P. 231419. — arXiv:1412.6030.
6. Bikbaev T., Khlopov M. Yu., Sopin D. Dark atom solution for the puzzles of direct dark matter search // Physical Sciences Forum. — 2021. — Vol. 2, No. 1. — P. 3.
7. Beylin V. A., Bikbaev T. E., Khlopov M. Yu., Mayorov A. G., Sopin D. O. Dark atoms of nuclear interacting dark matter // Universe. — 2024. — Vol. 10, No. 9. — P. 368.
8. Belli P., Bernabei R., Beylin V., Bikbaev T., Kharakhashyan A., Khlopov M., Korchagin V., Mayorov A., Sopin D. A dark atom scenario for direct dark matter investigation // Universe. — 2026. — Vol. 12, No. 4. — P. 116.

9. Khlopov M. Yu. Physics of dark matter in the light of dark atoms // *Modern Physics Letters A*. — 2011. — Vol. 26. — P. 2823–2839. — arXiv:1111.2838.
10. Baliño M. I., Mwilima J., Sopin D. O., Khlopov M. Yu. Anomalous isotopes in dark atom models. — 2025. — arXiv:2512.09438.
11. Pospelov M. Particle physics catalysis of thermal Big Bang nucleosynthesis // *Physical Review Letters*. — 2007. — Vol. 98. — P. 231301. — arXiv:hep-ph/0605215.
12. Akhmedov E., Pospelov M. BBN catalysis by doubly charged particles. — 2024. — arXiv:2405.06019.
13. Bazhin A. S., Samarin V. V. Study of the structure of the  ${}^9\text{Be}$  nucleus in the alpha-cluster model by the method of hyperspherical functions // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. — 2024. — Vol. 88, No. 8. — P. 1177–1184.
14. Freer M., Horiuchi H., Kanada-En'yo Y., Lee D., Meißner U.-G. Microscopic clustering in light nuclei // *Reviews of Modern Physics*. — 2018. — Vol. 90. — P. 035004. — arXiv:1705.06192.
15. von Oertzen W., Freer M., Kanada-En'yo Y. Nuclear clusters and nuclear molecules // *Physics Reports*. — 2006. — Vol. 432. — P. 43–113.
16. Kanada-En'yo Y., Kimura M., Ono A. Antisymmetrized molecular dynamics and its applications to cluster phenomena // *Progress of Theoretical and Experimental Physics*. — 2012. — Vol. 2012. — P. 01A202.
17. Tilley D. R., Cheves C. M., Godwin J. L., Hale G. M., Hofmann H. M., Kelley J. H., Sheu C. G., Weller H. R. Energy levels of light nuclei  $A = 8, 9, 10$  // *Nuclear Physics A*. — 2004. — Vol. 745. — P. 155–362.
18. Freer M. et al. The Hoyle state in  ${}^{12}\text{C}$  // *Physical Review C*. — 2014. — Vol. 90. — P. 054324.
19. Tohsaki A., Horiuchi H., Schuck P., Röpke G. Alpha cluster condensation in  ${}^{12}\text{C}$  and  ${}^{16}\text{O}$  // *Physical Review Letters*. — 2001. — Vol. 87. — P. 192501.

20. Baumgartner B., Seiringer R. Atoms with bosonic electrons in strong magnetic fields // *Annales Henri Poincaré*. — 2001. — Vol. 2, No. 1. — P. 41–76. — arXiv:math-ph/0007007.
21. Amusia M. Ya., Chernysheva L. V. On the bosonic atoms // *JETP Letters*. — 2018. — Vol. 107, No. 2. — P. 91–95. — arXiv:1711.01415.
22. Ring P., Schuck P. *The Nuclear Many-Body Problem*. — Berlin: Springer, 1980.
23. Ali S., Bodmer A. R. Phenomenological  $\alpha$ - $\alpha$  potentials // *Nuclear Physics*. — 1966. — Vol. 80. — P. 99–112.
24. Papp Z., Moszkowski S. A. Two- and three-alpha systems with nonlocal potential. — 2008. — arXiv:0803.0184.
25. Descouvemont P., Baye D. The R-matrix theory // *Reports on Progress in Physics*. — 2010. — Vol. 73. — P. 036301.
26. Fedotov S. I., Kartavtsev O. I., Malykh A. V. Effective three-body interactions in the  $\alpha$ -cluster model for the  $^{12}\text{C}$  nucleus // *The European Physical Journal A*. — 2005. — Vol. 26. — P. 201–207.
27. Fedotov S. I., Kartavtsev O. I., Malykh A. V. Consistent  $\alpha$ -cluster description of the  $^{12}\text{C}(0_2^+)$  resonance. — 2010. — arXiv:1009.1726.
28. Filikhin I., Karoui A., Vlahovic B. Effective mass of  $\alpha$ -cluster in  $^{12}\text{C}$  nucleus // *International Journal of Modern Physics E*. — 2022. — Vol. 31, No. 10–11. — P. 2250098.
29. Lehtovaara L., Toivanen J., Eloranta J. Solution of time-independent Schrödinger equation by the imaginary time propagation method // *Journal of Computational Physics*. — 2007. — Vol. 221, No. 1. — P. 148–157.
30. Feit M. D., Fleck J. A., Steiger A. Solution of the Schrödinger equation by a spectral method // *Journal of Computational Physics*. — 1982. — Vol. 47, No. 3. — P. 412–433.
31. Bader P., Blanes S., Casas F. Solving the Schrödinger eigenvalue problem by the imaginary time propagation technique using splitting methods with

- complex coefficients // *The Journal of Chemical Physics*. — 2013. — Vol. 139. — P. 124117.
32. Strang G. On the construction and comparison of difference schemes // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 1968. — Vol. 5, No. 3. — P. 506–517.
  33. Pei J. C., Fann G. I., Harrison R. J., Nazarewicz W., Shi Y., Thornton S. Adaptive multi-resolution 3D Hartree–Fock–Bogoliubov solver for nuclear structure // *Physical Review C*. — 2014. — Vol. 90. — P. 024317.
  34. Schunck N., McDonnell J. D., Sarich J., Wild S. M., Higdon D. Error analysis in nuclear density functional theory // *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*. — 2015. — Vol. 42, No. 3. — P. 034024.
  35. Cooley J. W., Tukey J. W. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series // *Mathematics of Computation*. — 1965. — Vol. 19, No. 90. — P. 297–301.
  36. Hockney R. W., Eastwood J. W. *Computer Simulation Using Particles*. — New York: McGraw-Hill, 1981.
  37. Frigo M., Johnson S. G. The design and implementation of FFTW3 // *Proceedings of the IEEE*. — 2005. — Vol. 93, No. 2. — P. 216–231.
  38. Kosloff R., Kosloff D. A Fourier method solution for the time dependent Schrödinger equation as a tool in molecular dynamics // *The Journal of Chemical Physics*. — 1983. — Vol. 79, No. 4. — P. 1823–1833.
  39. Koch O., Neuhauser C., Thalhammer M. Error analysis of high-order splitting methods for nonlinear Schrödinger equations // *BIT Numerical Mathematics*. — 2013. — Vol. 53. — P. 185–201.
  40. Angeli I., Marinova K. P. Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. — 2013. — Vol. 99, No. 1. — P. 69–95.
  41. Roache P. J. Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics // *Annual Review of Fluid Mechanics*. — 1997. — Vol. 29. — P. 123–160.