

**НОВЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ
МНОГИХ ТЕЛ В АТОМНОЙ, МОЛЕКУЛЯРНОЙ
И ЯДЕРНОЙ ФИЗИКЕ**



ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УНИТАРНОЕ ПРЕДПРИЯТИЕ
«РФЯЦ-ВНИИЭФ»

**НОВЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ
МНОГИХ ТЕЛ В АТОМНОЙ, МОЛЕКУЛЯРНОЙ
И ЯДЕРНОЙ ФИЗИКЕ**

Сборник научных статей

Под общей редакцией доктора физико-математических наук,
профессора А. А. Садового

Саров
2008

ББК 22.36

УДК 530.145 + 539.18 + 530.19 + 539.1

Н 76

Новые методы решения задачи многих тел в атомной, молекулярной и ядерной физике: Сборник научных статей / Под ред. А. А. Садового. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2008. – 500 с. – ил.

ISBN 978–5–9515–0111–0

По проблеме многих тел в атомной и молекулярной физике, где определяющим является кулоновское взаимодействие, представлены работы, связанные с развитием метода многомерных угловых кулоновских функций, позволяющего находить аналитическое решение многоэлектронных уравнений Шредингера и Дирака.

Для построения многонуклонной теории атомного ядра, где превалируют короткодействующие взаимодействия, собраны работы, посвященные развитию метода гипersферических функций. Причем основное внимание уделяется исследованию этим методом тяжелых и сверхтяжелых ядер.

Некоторые работы посвящены развитию теории атомных и ядерных реакций, численным методам решения проблемы собственных значений в различных задачах квантовой механики.

Сборник будет полезен студентам старших курсов, магистрам и аспирантам, а также работникам физических и физико-технических специальностей.

Предисловие

В предлагаемом читателю сборнике описаны новые методы решения задач многих тел в квантовой механике, развиваемые во ВНИИЭФ. В последнее время развито несколько методов, обладающих вариационными свойствами и позволяющих с заданной точностью решать разнообразные многочастичные задачи. В сборнике подробно представлен расчетный аппарат метода гиперсферических функций и интересные физические результаты, полученные на его основе. Многочисленными исследованиями было показано, что метод гиперсферических координат наиболее подходит для решения многонуклонных задач с короткодействующим ядерным потенциалом.

Для задач с дальнедействующим кулоновским взаимодействием во ВНИИЭФ развит метод многомерных угловых кулоновских функций. С помощью нерелятивистского варианта этого метода рассчитаны многие свойства атомов и ионов, содержащих до десятка электронов, а также предложен метод расчета свойств двухатомных молекул. Релятивистский вариант этого метода, базирующийся на аналитическом решении многоэлектронного уравнения Дирака, использован для изучения свойств гелиеподобных ионов трансурановых элементов.

Представленные методы учитывают корреляционные эффекты в многочастичных системах, поэтому могут использоваться в прецизионных расчетах. Примером использования этих методов в прикладных исследованиях может служить расчет свойств более трех десятков неоноподобных ионов, на переходах между определенными уровнями которых ожидается генерация мягкого рентгеновского излучения.

Материал в сборнике расположен так, что опубликованные результаты позволяют последовательно и подробно знакомиться с математическим аппаратом методов, использующим обобщенные функции, коллективные переменные и технику вычислений в многомерных пространствах.

Авторы посвящают раздел 1 памяти Юлия Борисовича Харитона, оказавшего поддержку новым методам на раннем этапе их развития.

Раздел 2 посвящен памяти Альфреда Ивановича Базя, благодаря усилиям которого во ВНИИЭФ была создана школа теоретической ядерной физики.

Содержание

Предисловие	3
Раздел 1. Метод многомерных угловых кулоновских функций в многоэлектронной теории атомов и молекул	
<i>Садовой А. А.</i> О многоэлектронной теории атома	4
<i>Садовой А. А., Голубев А. И.</i> Метод многомерных угловых кулоновских функций и многоэлектронная теория атома	9
<i>Дзюба Б. М., Козырев А. А., Садовой А. А., Сараева М. К., Чулков Н. М.</i> Описание возбужденных атомов методом многомерных угловых кулоновских функций	16
<i>Козырев А. А., Садовой А. А.</i> Волновые функции основных состояний гелиеподобных ионов и моменты атомных радиусов	23
<i>Дзюба Б. М., Повышев В. М., Садовой А. А.</i> Уточненный расчет элек- тронной плотности многозарядных ионов методом многомерных угло- вых кулоновских функций	33
<i>Дзюба Б. М., Козырев А. А., Садовой А. А.</i> О 0^+ -состояниях углеродопо- добных ионов как проблеме семи тел в методе МУКФ	39
<i>Дзюба Б. М., Повышев В. М., Садовой А. А.</i> О многоэлектронной тео- рии неоноподобных ионов	48
<i>Садовой А. А.</i> Новый метод исследования влияния сильных магнитных полей на свойства многоэлектронных атомов и ионов	61
<i>Садовой А. А., Чулков Н. М.</i> Электронные термы двухатомных молекул в методе многомерных угловых кулоновских функций. I. Молекула водорода	68
<i>Sadovoy A. A.</i> The multidimensional angular Coulomb function method in atomic and molecular physics	82
<i>Садовой А. А., Ульянов А. С.</i> Новый метод расчета свойств гелиеподоб- ных ионов трансурановых элементов	87
<i>Ульянов А. С., Садовой А. А.</i> Электронная плотность высокоионизован- ных ионов трансурановых элементов	107
Раздел 2. Ядерная физика. Метод гиперсферических функций в многонуклонной теории ядра	
<i>Рыбаченко В. Ф., Садовой А. А., Чулков Н. М.</i> Метод K -гармоник в jj -представлении. Расчет ядра C^{12}	117
<i>Рыбаченко В. Ф., Садовой А. А.</i> К расчету спектра нижних уровней положительной четности ядра O^{17}	130
<i>Рыбаченко В. Ф., Садовой А. А.</i> Энергия связи легких ядер и нуклон- нуклонные потенциалы	140
<i>Дзюба Б. М., Пустовалов В. В., Рыбаченко В. Ф., Садовой А. А., Эфрос В. Д.</i> Волновая функция и энергия связи ядер $H^3(He^3)$ с учетом тензорного взаимодействия нуклонов	150

<i>Рыбаченко В. Ф., Садовой А. А.</i> Зависимость энергии связи легких ядер от формы нуклон-нуклонного потенциала	163
<i>Садовой А. А., Симонов Ю. А.</i> Учет высших гармоник в методе гиперсферических функций	169
<i>Садовой А. А.</i> О вкладе различных типов ядерных взаимодействий в энергию связи ядер	187
<i>Симонов Ю. А., Садовой А. А.</i> Высшие гармоники для ядра O^{16}	199
<i>Садовой А. А., Симонов Ю. А.</i> О вкладе гармоник $K_{\min} + 2$ в энергию основного состояния ^{16}O	213
<i>Аверьянов И. К., Садовой А. А.</i> О роли высших гармоник МГСФ в расчете среднеквадратичных радиусов ядер	228
<i>Садовой А. А., Рыбаченко В. Ф., Аверьянов И. К.</i> К расчету энергий связи и среднеквадратичных радиусов сверхтяжелых ядер	231
<i>Аверьянов И. К., Садовой А. А., Чулков Н. М., Вахламова Л. Л.</i> О распределении вещества в ядрах	235
<i>Аверьянов И. К., Садовой А. А.</i> О плотности сверхтяжелых ядер	239
<i>Базь А. И., Аверьянов И. К., Голубев А. И., Садовой А. А.</i> Таблицы универсальных коэффициентов метода гиперсферических функций для центральных и кулоновских сил	242
<i>Аверьянов И. К., Голубев А. И., Садовой А. А.</i> Универсальные коэффициенты МГСФ для центральных NN -потенциалов, зависящих от относительного движения нуклонов, в jj - и LS -связи	249
<i>Голубев А. И., Аверьянов И. К., Садовой А. А.</i> Универсальные коэффициенты МГСФ для спин-орбитального взаимодействия нуклонов, зависящего от их относительного движения	252
<i>Аверьянов И. К., Голубев А. И., Садовой А. А.</i> Универсальные коэффициенты МГСФ для тензорного взаимодействия нуклонов	254
<i>Аверьянов И. К., Голубев А. И., Садовой А. А.</i> Схема расчета энергии нижайшей конфигурации легчайших ядер	256
<i>Садовой А. А.</i> Расчет ядерных форм-факторов методом гиперсферических функций	262
<i>Аверьянов И. К., Голубев А. И., Садовой А. А.</i> Зарядовый формфактор ядер 4He , ^{16}O , ^{40}Ca в основном приближении МГСФ	274
<i>Голубев А. И., Аверьянов И. К., Садовой А. А.</i> Зарядовый формфактор протона и распределение заряда в ядре	278
<i>Садовой А. А., Аверьянов И. К., Голубев А. И.</i> Об одной связи метода гиперсферических функций и модели оболочек	281
<i>Аверьянов И. К., Голубев А. И., Садовой А. А.</i> Нейтроноизбыточные ядра и нуклон-нуклонные потенциалы	289

Раздел 3. Теория рассеяния. Проблема многих тел в теории рассеяния

<i>Садовой А. А., Жмайло В. А.</i> Трехчастичная модель (NN) реакций	293
<i>Садовой А. А., Жмайло В. А., Иванов Н. Р.</i> Резонансы в трехчастичной модели (NN) реакций	304

<i>Дзюба Б. М., Садовой А. А.</i> О роли двухэлектронного экранирования в реакции $d + {}^3\text{He}$	315
<i>Аверьянов И. К., Дзюба Б. М., Иванов Н. Р., Садовой А. А.</i> Оптическая модель упругого рассеяния нуклонов с реальной частью оптического потенциала в виде однократной свертки	322
<i>Ульянов А. С., Садовой А. А.</i> Интегральное уравнение для резонансного рассеяния	328
<i>Садовой А. А., Ульянов А. С.</i> Новый метод расчета ширины автоионизационных состояний при рассеянии электронов на многоэлектронных ионах	332
<i>Садовой А. А.</i> Двухэлектронная ионизация гелиеподобных ионов электронным ударом в минимальном приближении метода МУКФ	344
<i>Дзюба Б. М., Повышев В. М., Садовой А. А.</i> Рассеяние электронов на многоэлектронном атоме в борн-кулоновском и борновском приближениях	359
<i>Дзюба Б. М., Садовой А. Л.</i> Электронная плотность многоэлектронных атомов и торможение низкоскоростных ионов	374

Раздел 4. Некоторые задачи проблемы многих тел в квантовой механике

<i>Рыбаченко В. В., Садовой А. А.</i> Новые методы исследования проблемы многих тел в ядерной, атомной и молекулярной физике	379
<i>Sadovoy A. A., Simonov Yu. A.</i> Multidimensional angular function methods in theoretical and applied physics	385
<i>Дзюба Б. М., Садовой А. А.</i> Метод функции Грина в теории трехчастичных мезомолекул	397
<i>Садовой А. А.</i> Многоэлектронная теория возмущений в многомерном пространстве	415
<i>Голубев А. И., Садовой А. А.</i> Штурмовское представление функции Грина невзаимодействующих частиц и метод многомерных угловых кулоновских функций	422
<i>Садовой А. А.</i> Штурмовское представление функции Грина произвольного числа частиц, взаимодействующих между собой по осцилляторному закону	432
<i>Садовой А. А.</i> Штурмовское представление функции Грина уравнения Дирака	441
<i>Садовой А. А.</i> Методы многомерных угловых функций в теоретической физике	448
<i>Голубев А. И., Повышев В. М., Садовой А. А., Сараева М. К.</i> О двух методах решения проблемы собственных значений системы дифференциальных уравнений второго порядка метода МУКФ	466

<i>Садовой А. А., Повышев В. М.</i> О решении проблемы собственных значений системы обыкновенных дифференциальных уравнений метода многомерных угловых кулоновских функций с использованием штурмовских разложений с выделенными асимптотиками	476
<i>Повышев В. М., Садовой А. А.</i> О некоторых методах решения проблемы собственных значений системы обыкновенных дифференциальных уравнений метода МУКФ	482
<i>Садовой А. А., Повышев В. М.</i> Квантово-механические расчеты свойств изотопов водорода в модели сферической ячейки	489

Новые методы решения задачи многих тел в атомной, молекулярной и ядерной физике

Сборник научных статей

Под общей редакцией д-ра физ.-мат. наук,
профессора А. А. Садового

Редактор *Л. В. Мазан*

Корректор *М. В. Кривова*

Компьютерная подготовка оригинала-макета *А. А. Ивлева*

Подписано в печать 01.08.2008. Формат 70×108/16.

Печать офсетная. Усл. печ. л. ~ 43. Уч.-изд. л. ~ 31.

Тираж 200 экз. Зак. тип. 2650-2007.

Отпечатано в ИПК ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»