

УДК 539.12

## КАРКАСНЫЕ ФУНКЦИИ В РАСЧЕТАХ КУЛОНОВСКИХ И ЯДЕРНЫХ СИСТЕМ

А.Г. Дончев, Н.Н. Колесников, В.И. Тарасов

(кафедра теоретической физики)

E-mail: nkolesn@mail.ru

Для вариационных расчетов трехчастичных кулоновских двухцентровых систем предлагается использовать базисные функции в виде экспоненты, показатель которой имеет квадратичную зависимость от межчастичных расстояний с максимумом при некотором расстоянии между тяжелыми частицами. Показывается, что матричные элементы гамильтониана выражаются в замкнутом виде. Использование таких «каркасных» функций позволяет рассчитывать двухцентровые системы при меньшем на порядки числе функций с точностью, сравнимой или превышающей точность других методов. Эффективность метода иллюстрируется расчетами кулоновских систем  $\mu\mu e$ ,  $ppe$ ,  $dde$ ,  $tte$ . На примере гиперядра  ${}^9\Lambda\text{Be}$  показывается, что предлагаемый метод может быть успешно применен для расчета ядерных систем.

### Введение

Среди существующих в настоящее время квантовомеханических методов расчета нерелятивистских связанных систем вариационный метод выделяется как метод наиболее универсальный в смысле применимости и в атомных и в ядерных задачах, а также как обеспечивающий возможность нахождения не только верхней, но и нижней оценки энергии. Имеются многочисленные примеры уникальных по точности расчетов систем трех и более частиц, в частности, для трехчастичных кулоновских систем точность расчета энергии доведена уже до двух десятков значащих цифр.

В вариационном методе пробная функция обычно представляется в виде суперпозиции:

$$\psi = \sum_a C_a |a\rangle \quad (1)$$

и успех вариационных расчетов определяется прежде всего тем, насколько оптимален выбор базисных функций  $|a\rangle$ . Пробная функция должна быть достаточно общей. Кроме того, она не должна приводить к сложностям при вычислении матричных элементов, а также (в зависимости от особенностей рассматриваемой системы) должна содержать достаточное число размерных параметров. И при всем при том важна еще и процедура минимизации.

Исторически вариационное разложение в трехчастичной атомной проблеме впервые было предложено Хиллераасом в виде экспоненты, умноженной на полином, содержащий целые положительные степени периметрических координат [1], а позже в такие «полиномиальные» функции были включены члены с отрицательными и дробными степенями [2, 3] и введены логарифмические члены [4]. Все это позволило с хорошей точностью рассчитать атомные одноцентровые системы. Однако функции полиномиального и полиномиально-логарифмического базиса оказались практически непригодными (даже

при большом числе вариационных параметров) для расчета систем частиц с одинаковыми или близкими массами, например позитронно-электронной системы  $e^+e^-e^-$ . Это относится не только к атомным, но и к ядерным системам. Для описания таких кулоновских и ядерных систем были с успехом применены чисто экспоненциальные, а также гауссовские базисные функции. В случае центральных сил волновую функцию основного состояния (а также и возбужденных состояний с нулевым орбитальным моментом) можно представить в виде комбинации базисных функций вида

$$|a\rangle = \exp\left(-\sum_{p=1}^3 \alpha_p^a R_p^n\right), \quad (2)$$

где  $n = 1$  для экспоненциального базиса и  $n = 2$  для гауссовского базиса. Как было показано в работах [5] и [6], все матричные элементы, необходимые для нахождения не только верхней, но и нижней оценки энергии, выражаются для обычно используемых потенциалов (кулоновского, экспоненциального, юкавского, гауссовского, прямоугольной ямы) через элементарные функции, интегралы ошибок и дилוגарифмы. Если точность расчета ограничена 10–12 значащими цифрами, то, как показал проведенный нами анализ, функции экспоненциального и гауссовского базиса могут конкурировать с полиномиальными и полиномиально-логарифмическими функциями и в расчете одноцентровых атомных систем, обеспечивая такую же точность при меньшем числе параметров.

Однако в другом предельном случае, когда масса одной из частиц становится на порядки меньше, чем двух других — тяжелых частиц, сходимость вариационных оценок энергии на экспоненциальном или гауссовском базисе становится все хуже и практически не удается достичь точности расчета выше, чем 3–4 значащие цифры. Причина состоит

в том, что вероятность относительного положения тяжелых частиц имеет острый максимум при некотором межчастичном расстоянии (тем более узкий, чем больше массы тяжелых частиц), что трудно аппроксимировать с помощью экспонент или гауссоид. Это иллюстрируется на рис. 1 для системы  $ppp$ , где показаны результаты расчетов с экспоненциальными функциями. По мере увеличения числа функций  $N$  и соответствующего повышения точности расчета максимум становится более узким, но он все же шире, чем это соответствует точному расчету (в данном случае с каркасными функциями — кривая  $K$  на рис. 1).

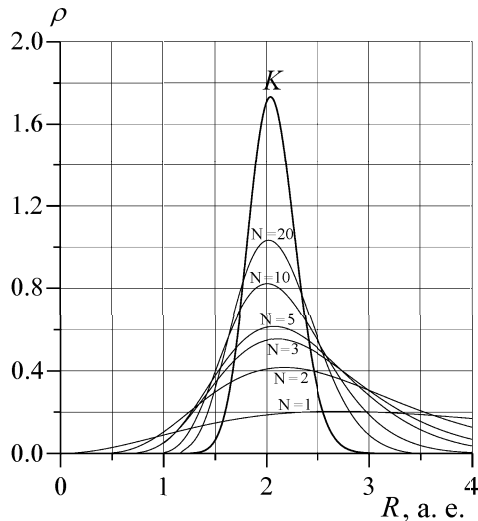


Рис. 1. Зависимость плотности вероятности нахождения тяжелых частиц на расстоянии  $R$  друг от друга при различном числе базисных функций  $N$ ; кривая  $K$  соответствует расчету с каркасными функциями

Для улучшения пробной функции при расчете двухцентровых (адиабатических) систем было предложено модифицировать экспоненциальную пробную функцию путем добавления тригонометрических функций [7] или, что эквивалентно, использовать комплексные нелинейные параметры (параметры  $\alpha_p$  в показателях экспонент) [8]. Использование экспоненциально-тригонометрических функций позволило при большом числе параметров повысить точность расчета адиабатических систем почти до величины, достигнутой в рамках адиабатического приближения, однако это все же ниже, чем точность, достигнутая при расчете одноцентровых систем. Другой вариант преодоления трудностей при расчете двухцентровых систем — использование пробных функций вида  $R_3^n \exp(-\alpha R_3)$  [9], где  $R_3$  — расстояние между тяжелыми частицами. Это позволило при  $n = 10$  рассчитать энергию  $H_2^+$  с точностью до 7 значащих цифр, однако дальнейшее повышение точности требует увеличения  $n$  до 30, что оказывается, согласно [9], практически нереализуемым. Наконец, для расчета двухцентровых систем используется приближение Борна–Оппенгеймера [10] (или его модификации [11, 12]), возможности

которого ограничены, так как не учитывается связь между движением электронов и ядер [13].

В настоящей работе предлагается весьма эффективный метод расчета двухцентровых систем, основанный на использовании каркасных пробных функций. Такой подход был предложен в работе [14] в связи с расчетом ядерных систем, содержащих частицы, взаимодействие которых включает короткодействующий притягивающий потенциал, переходящий на самых малых расстояниях в мощное отталкивание (кор). В этих случаях волновая функция имеет достаточно острые максимумы при некоторых межчастичных расстояниях и, таким образом, образуется нечто вроде каркаса, относительно которого размывается положение частиц. В случае двухцентровых кулоновских (трех- или четырехчастичных) систем каркас образуется только по одной связи — между тяжелыми частицами. Трехчастичную базисную функцию с треугольным каркасом можно представить в виде

$$|a\rangle = \exp\left(-\sum_{p=1}^3 \beta_p^a (R_p - R_p^a)^2\right), \quad (3)$$

где  $\beta_p^a$  и  $R_p^a$  — вариационные параметры. Такие функции являются более общими, чем чисто экспоненциальные или чисто гауссовские функции, и переходят в последние при специальном выборе параметров. Поэтому функции (3) с таким же успехом, как функции (2), применимы для расчета одноцентровых систем и систем частиц одинаковых масс, но притом они хорошо описывают двухцентровые системы даже при небольшом числе вариационных параметров. Для проведения численных расчетов существенно, что в случае одной каркасной связи все матричные элементы гамильтониана, необходимые для нахождения верхней оценки энергии, выражаются через элементарные функции и интегралы ошибок при использовании всех наиболее употребительных потенциалов, а в случае трех каркасных связей — также через одномерные интегралы (см. ниже).

Что касается процедуры выбора вариационных параметров, то наибольшую сложность представляет оптимизация по нелинейным параметрам (показателям экспонент  $\alpha_p^a$ ,  $\beta_p^a$  и  $R_p^a$ ). Для этих целей нами использовалась специальная процедура глобального стохастического поиска, согласно которой при каждом Монте-Карло-бросании выбиралась случайная точка в пространстве нелинейных параметров в соответствии с предварительно найденной функцией распределения. Далее проводился покоординатный спуск, сначала стохастический, затем детерминированный. При этом определялись наиболее перспективные точки, которые использовались для более детальной оптимизации. Функции распределения выбирались аналогично тому, как это сделано в работе [5]. Линейные параметры  $C_a$  в разложении (1) волновой функции по базисным функциям

вычислялись путем диагонализации энергетической матрицы и переопределялись на каждом этапе нахождения нелинейных параметров.

Использование предлагаемого метода позволило даже при сравнительно небольшом числе функций получить результаты, превышающие по точности все полученные другими методами.

### 1. Матричные элементы в общем случае трех каркасных связей

В качестве координат выберем расстояния между частицами, а также углы Эйлера. Если  $i, j, k$  — числа 1, 2, 3 или их циклическая перестановка, то условимся понимать под  $R_i$  расстояние между частицами  $j$  и  $k$ . Ниже будет рассматриваться случай центральных сил, когда каркасную волновую функцию можно записать в виде (3).

При использовании каркасных функций матричные элементы гамильтониана  $H$  выражаются через интегралы вида

$$I_{klm}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \beta_1, \beta_2, \beta_3) \equiv \equiv 8\pi^2 \int_0^\infty R_1^k dR_1 \int_0^\infty R_2^l dR_2 \int_{|R_1-R_2|}^{R_1+R_2} R_3^m dR_3 \times \times \exp\left(-\sum_{p=1}^3 \{\alpha_p R_p + \beta_p R_p^2\}\right).$$

Так, матричный элемент оператора кинетической энергии  $T$  между состояниями  $a$  и  $b$  записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle a|T|b\rangle = & \left(\frac{\alpha_1^a \alpha_1^b}{2\mu_{23}} + \frac{\alpha_2^a \alpha_2^b}{2\mu_{31}} + \frac{\alpha_3^a \alpha_3^b}{2\mu_{12}}\right) I_{111} + \\ & + \frac{\alpha_1^a \beta_1^b + \beta_1^a \alpha_1^b}{\mu_{23}} I_{211} + 2 \frac{\beta_1^a \beta_1^b}{\mu_{23}} I_{311} + \frac{\alpha_2^a \beta_2^b + \beta_2^a \alpha_2^b}{\mu_{31}} I_{121} + \\ & + 2 \frac{\beta_2^a \beta_2^b}{\mu_{31}} I_{131} + \frac{\alpha_3^a \beta_3^b + \beta_3^a \alpha_3^b}{\mu_{12}} I_{112} + 2 \frac{\beta_3^a \beta_3^b}{\mu_{12}} I_{113} + \\ & + \frac{\alpha_2^a \alpha_3^b + \alpha_3^a \alpha_2^b}{4m_1} (I_{120} + I_{102} - I_{300}) + \\ & + \frac{\alpha_2^a \beta_3^b + \beta_3^a \alpha_2^b}{2m_1} (I_{121} + I_{103} - I_{301}) + \\ & + \frac{\alpha_3^a \beta_2^b + \beta_2^a \alpha_3^b}{2m_1} (I_{130} + I_{112} - I_{310}) + \\ & + \frac{\beta_2^a \beta_3^b + \beta_3^a \beta_2^b}{m_1} (I_{131} + I_{113} - I_{311}) + \\ & + \frac{\alpha_3^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_3^b}{4m_2} (I_{012} + I_{210} - I_{030}) + \\ & + \frac{\alpha_3^a \beta_1^b + \beta_1^a \alpha_3^b}{2m_2} (I_{112} + I_{310} - I_{130}) + \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{\alpha_1^a \beta_3^b + \beta_3^a \alpha_1^b}{2m_2} (I_{013} + I_{211} - I_{031}) + \\ & + \frac{\beta_3^a \beta_1^b + \beta_1^a \beta_3^b}{m_2} (I_{113} + I_{311} - I_{131}) + \\ & + \frac{\alpha_1^a \alpha_2^b + \alpha_2^a \alpha_1^b}{4m_3} (I_{201} + I_{021} - I_{003}) + \\ & + \frac{\alpha_1^a \beta_2^b + \beta_2^a \alpha_1^b}{2m_3} (I_{211} + I_{031} - I_{013}) + \\ & + \frac{\alpha_2^a \beta_1^b + \beta_1^a \alpha_2^b}{2m_3} (I_{301} + I_{121} - I_{103}) + \\ & + \frac{\beta_1^a \beta_2^b + \beta_2^a \beta_1^b}{m_3} (I_{311} + I_{131} - I_{113}), \end{aligned}$$

где  $m_i$  — масса  $i$ -й частицы, а  $\mu_{ij}^{-1} = m_i^{-1} + m_j^{-1}$ .

Все интегралы  $I_{klm}$  находятся путем дифференцирования основного (базисного) интеграла  $I_{000}$  по параметрам  $\alpha_p$ :

$$I_{klm} = \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha_1}\right)^k \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha_2}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha_3}\right)^m I_{000}. \quad (5)$$

Матричные элементы потенциальной энергии в случае общеупотребительных потенциалов также выражаются через интегралы  $I_{klm}$ . Например, в случае кулоновского взаимодействия  $V_p = 1/R_p$ :  $\langle a|V_1|b\rangle = I_{011}$ ,  $\langle a|V_2|b\rangle = I_{101}$ ,  $\langle a|V_3|b\rangle = I_{110}$ .

Базисный интеграл  $I_{000}$  сводится в общем случае к одномерному интегралу. Действительно,

$$\begin{aligned} I_{000} = & \int_0^\infty \exp(-\alpha_1 R_1 - \beta_1 R_1^2) dR_1 \times \\ & \times \int_0^\infty \exp(-\alpha_2 R_2 - \beta_2 R_2^2) dR_2 \times \\ & \times \int_{|R_1-R_2|}^{R_1+R_2} \exp(-\alpha_3 R_3 - \beta_3 R_3^2) dR_3 \equiv \\ & \equiv \int_0^\infty \exp(-\alpha_1 R - \beta_1 R^2) J(R) dR = \\ & = \left[ J(R) \int_0^R \exp(-\alpha_1 R_1 - \beta_1 R_1^2) dR_1 \right]_0^\infty - \\ & - \int_0^\infty \frac{dJ}{dR} \int_0^R \exp(-\alpha_1 R_1 - \beta_1 R_1^2) dR_1 dR = \\ & = - \int_0^\infty \frac{dJ}{dR} dR \int_0^R \exp(-\alpha_1 R_1 - \beta_1 R_1^2) dR_1. \end{aligned}$$

Последнее равенство в этой цепочке справедливо в силу того, что  $J(0) = J(\infty) = 0$ . При этом

$$\begin{aligned} \frac{dJ(R)}{dR} = & \int_0^\infty \exp(-\alpha_2 x - \alpha_3 x - \alpha_3 R - \beta_2 x^2 - \beta_3 (R+x)^2) dx - \\ & - \int_0^R \exp(-\alpha_2 x + \alpha_3 x - \alpha_3 R - \beta_2 x^2 - \beta_3 (R-x)^2) dx + \\ & + \int_R^\infty \exp(-\alpha_2 x - \alpha_3 x + \alpha_3 R - \beta_2 x^2 - \beta_3 (x-R)^2) dx = \\ & = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}} \times \\ & \times \left\{ \exp\left(-\alpha_3 R - \beta_3 R^2 + \frac{(\alpha_2 + \alpha_3 + 2\beta_3 R)^2}{4(\beta_2 + \beta_3)}\right) \times \right. \\ & \quad \times \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 + \alpha_3 + 2\beta_3 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) + \\ & \quad + \exp\left(-\alpha_3 R - \beta_3 R^2 + \frac{(\alpha_2 - \alpha_3 - 2\beta_3 R)^2}{4(\beta_2 + \beta_3)}\right) \times \\ & \quad \times \left[ \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 - \alpha_3 + 2\beta_2 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) - \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 - \alpha_3 - 2\beta_3 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) \right] + \\ & \quad + \exp\left(\alpha_3 R - \beta_3 R^2 + \frac{(\alpha_2 + \alpha_3 - 2\beta_3 R)^2}{4(\beta_2 + \beta_3)}\right) \times \\ & \quad \left. \times \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 + \alpha_3 + 2\beta_2 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Учитывая это, находим:

$$\begin{aligned} I_{000} = & \frac{\pi}{4\sqrt{\beta_1}\sqrt{\beta_2 + \beta_3}} \exp\left(\frac{\alpha_1^2}{4\beta_1}\right) \times \\ & \times \int_0^\infty \left\{ \exp\left(-\alpha_3 R - \beta_3 R^2 + \frac{(\alpha_2 + \alpha_3 + 2\beta_3 R)^2}{4(\beta_2 + \beta_3)}\right) \times \right. \\ & \quad \times \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 + \alpha_3 + 2\beta_3 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) + \\ & \quad + \exp\left(-\alpha_3 R - \beta_3 R^2 + \frac{(\alpha_2 - \alpha_3 - 2\beta_3 R)^2}{4(\beta_2 + \beta_3)}\right) \times \\ & \quad \times \left[ \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 - \alpha_3 + 2\beta_2 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) - \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 - \alpha_3 - 2\beta_3 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) \right] + \\ & \quad + \exp\left(\alpha_3 R - \beta_3 R^2 + \frac{(\alpha_2 + \alpha_3 - 2\beta_3 R)^2}{4(\beta_2 + \beta_3)}\right) \times \\ & \quad \times \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_2 + \alpha_3 + 2\beta_2 R}{2\sqrt{\beta_2 + \beta_3}}\right) \left. \right\} \times \\ & \times \left\{ \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_1 + 2R\beta_1}{2\sqrt{\beta_1}}\right) - \operatorname{Erfc}\left(\frac{\alpha_1}{2\sqrt{\beta_1}}\right) \right\} dR. \end{aligned} \quad (6)$$

## 2. Случай одной каркасной связи

**Каркасно-экспоненциальный базис.** В случае одной каркасной связи (двухцентровые системы) каркасно-экспоненциальную базисную функцию можно записать в виде

$$|a\rangle \equiv \phi_a = \exp\left(-\sum_{p=1}^3 \alpha_p^a R_p - \beta_3^a R_3^2\right), \quad (7)$$

где  $\alpha_p^a$  и  $\beta_3^a$  — нелинейные параметры, которые определяют масштабность базисной функции  $|a\rangle$ . Выражения для матричных элементов в этом случае можно получить из общих весьма громоздких выражений (4)–(6). Однако проще это сделать исходя из выражения (7).

Для удобства записи матричных элементов операторов  $T$  и  $V$  введем обозначения

$$t_p \equiv \cos \beta_p,$$

$$T_{p0} \equiv \langle a|t_p|b\rangle, \quad T_{p1} \equiv \langle a|t_p R_3|b\rangle, \quad G_p \equiv \langle a|R_p^{-1}|b\rangle,$$

$$N_0 \equiv \langle a|b\rangle, \quad N_1 \equiv \langle a|R_3|b\rangle, \quad N_2 \equiv \langle a|R_3^2|b\rangle,$$

где  $\beta_p$  — угол при  $p$ -й частице в треугольнике, составленном частицами 1, 2, 3.

Тогда для матричного элемента оператора  $T$  между состояниями  $a$  и  $b$  получаем

$$\begin{aligned} \langle a|T|b\rangle = & \left(\frac{\alpha_1^a \alpha_1^b}{2\mu_{23}} + \frac{\alpha_2^a \alpha_2^b}{2\mu_{31}} + \frac{\alpha_3^a \alpha_3^b}{2\mu_{12}}\right) N_0 + \frac{\alpha_3^a \beta^b}{\mu_{12}} N_1 + \\ & + 2\frac{\beta^a \beta^b}{\mu_{12}} N_2 + \frac{\alpha_2^a \alpha_3^b + \alpha_3^a \alpha_2^b}{4m_1} T_{10} + \frac{\alpha_3^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_3^b}{4m_2} T_{20} + \\ & + \frac{\alpha_1^a \alpha_2^b + \alpha_2^a \alpha_1^b}{4m_3} T_{30} + \frac{\alpha_2^a \beta^b + \beta^a \alpha_2^b}{2m_1} T_{11} + \frac{\alpha_3^a \beta^b + \beta^a \alpha_3^b}{2m_2} T_{21}. \end{aligned} \quad (8)$$

Расчет матричных элементов потенциальной энергии в случае общеупотребительных потенциалов сводится к вычислению тех же интегралов, что и для матричных элементов оператора кинетической энергии. В частности, для кулоновского взаимодействия  $V_p = 1/R_p$ :  $\langle a|V_p|b\rangle = G_p$ .

Базисный интеграл  $I_{000}$  (через который согласно (5) выражаются все  $I_{klm}$ ) представляется в виде комбинации интегралов ошибок:

$$\begin{aligned} I_{000} = & 8\pi^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha_3 R_3 - \beta_3 R_3^2) dR_3 \times \\ & \times \int_0^\infty \exp(-\alpha_2 R_2) dR_2 \int_{|R_3 - R_2|}^{R_3 + R_2} \exp(-\alpha_1 R_1) dR_1 = \\ & = \frac{16\pi^2}{\alpha_2^2 - \alpha_1^2} \int_0^\infty \exp(-\alpha_3 R - \beta_3 R^2) \times \\ & \quad \times \{\exp(-\alpha_1 R) - \exp(-\alpha_2 R)\} dR = \end{aligned}$$

$$= -\frac{16\pi^2}{\sqrt{\beta_3}} \frac{F\left(\frac{\alpha_1+\alpha_3}{2\sqrt{\beta_3}}\right) - F\left(\frac{\alpha_2+\alpha_3}{2\sqrt{\beta_3}}\right)}{\alpha_1^2 - \alpha_2^2},$$

где  $F(z) \equiv \exp z^2 \int_z^\infty \exp(-t^2) dt$ .

В дальнейшем для удобства во всех интегралах опускается общий несущественный числовой множитель  $16\pi^2$ .

Если ввести обозначения

$$A = \frac{1}{\alpha_1 + \alpha_2}, \quad a_1 = \frac{\alpha_1 + \alpha_3}{2\sqrt{\beta_3}}, \quad a_2 = \frac{\alpha_2 + \alpha_3}{2\sqrt{\beta_3}},$$

$$d = a_1 - a_2, \quad k = \frac{1}{2\sqrt{\beta_3}},$$

$$S_n = \frac{1}{d} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial a_1} \right)^{n-1} F(a_1) - \left( \frac{\partial}{\partial a_2} \right)^{n-1} F(a_2) \right],$$

$$Z_n = \frac{2}{d^2} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial a_1} \right)^{n-2} F(a_1) + \left( \frac{\partial}{\partial a_2} \right)^{n-2} F(a_2) - 2S_{n-2} \right],$$

то основной интеграл переписывается как  $I_{000} = -\frac{A}{2\beta_3} S_1$ , а нормировочный множитель  $N_0$ , а также функции  $G_p$ ,  $N_1$ ,  $N_2$ ,  $T_{p0}$ ,  $T_{p1}$  в (8) — следующим образом:

$$G_1 = \frac{A^2}{2y} k S_2 - \frac{A}{8y} k^2 (2S_3 - Z_4 d),$$

$$G_2 = \frac{A^2}{2y} k S_2 - \frac{A}{8y} k^2 (2S_3 + Z_4 d),$$

$$G_3 = -\frac{A^3}{y} S_1 + \frac{A^2}{2y} k S_2 - \frac{A}{4y} k^2 Z_3,$$

$$N_0 = \frac{A^3}{y} k S_2 - \frac{A^2}{2y} k^2 S_3 + \frac{A}{4y} k^3 Z_4,$$

$$N_1 = -\frac{A^3}{y} k^2 S_3 + \frac{A^2}{2y} k^3 S_4 - \frac{A}{4y} k^4 Z_5,$$

$$N_2 = \frac{A^3}{y} k^3 S_4 - \frac{A^2}{2y} k^4 S_5 + \frac{A}{4y} k^5 Z_6,$$

$$T_{10} = -\frac{A^3}{y} k Z_3 d - \frac{A^2}{2y} k^2 (2Z_3 - Z_4 d) + \frac{A}{2y} k^3 Z_4,$$

$$T_{20} = \frac{A^3}{y} k Z_3 d - \frac{A^2}{2y} k^2 (2Z_3 + Z_4 d) + \frac{A}{2y} k^3 Z_4,$$

$$T_{30} = \frac{2A^3}{y} k S_2 - \frac{A^2}{y} k^2 S_3 - \frac{A}{2y} k^3 Z_4,$$

$$T_{11} = \frac{A^3}{y} k^2 Z_4 d + \frac{A^2}{2y} k^3 (2Z_4 - Z_5 d) - \frac{A}{2y} k^4 Z_5,$$

$$T_{21} = -\frac{A^3}{y} k^2 Z_4 d + \frac{A^2}{2y} k^3 (2Z_4 + Z_5 d) - \frac{A}{2y} k^4 Z_5.$$

В случае, когда  $|d/a| \ll 1$ , где  $a = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}$ , для вычисления  $S_n$  и  $Z_n$  полезно воспользоваться раз-

ложениями

$$S_n = \sum_{k=0,2,\dots}^{\infty} \left( \frac{\partial}{\partial a} \right)^{n+k} F(a) \left( \frac{d}{2} \right)^n \frac{1}{(n+1)!},$$

$$Z_n = \sum_{k=0,2,\dots}^{\infty} \left( \frac{\partial}{\partial a} \right)^{n+k} F(a) \left( \frac{d}{2} \right)^n \frac{n+2}{(n+3)!}.$$

В численных расчетах эти формулы использовались при  $|d/a| < 10^{-4}$ .

**Каркасно-гауссовский базис.** При использовании гауссовского каркасного базиса разобьем базисную функцию на две части:

$$|a\rangle = |a'\rangle - |a''\rangle,$$

$$|a'\rangle = \exp\left(-\sum_{p=1}^3 \alpha_p^a R_p^2 - \beta_3^a R_3\right),$$

$$|a''\rangle = \exp\left(-\sum_{p=1}^3 \alpha_p^a R_p^2 + \beta_3^a R_3\right),$$

где  $\alpha_p^a$  и  $\beta_3^a$  — нелинейные параметры, которые определяют масштабность базисной функции и положение максимума функции  $|a\rangle$ .

Для дальнейшего удобно ввести обозначения:

$$N \equiv \langle a|b\rangle, \quad N' \equiv \langle a'|b'\rangle + \langle a''|b''\rangle + \langle a'|b''\rangle + \langle a''|b'\rangle,$$

$$G_p \equiv \langle a|R_p^2|b\rangle, \quad G'_p \equiv \langle a'|R_p^2/R_3|b'\rangle - \langle a''|R_p^2/R_3|b''\rangle,$$

$$G''_p \equiv \langle a'|R_p^2/R_3|b''\rangle - \langle a''|R_p^2/R_3|b'\rangle.$$

Несложные вычисления приводят к следующему выражению для матричного элемента оператора  $T$  между состояниями  $a$  и  $b$ :

$$\begin{aligned} \langle a|T|b\rangle = & \\ = & \frac{\hbar^2}{m_1} \left\{ (2\alpha_3^a \alpha_3^b + \alpha_3^a \alpha_2^b + \alpha_2^a \alpha_3^b) G_3 + \right. \\ & \left. + (2\alpha_2^a \alpha_2^b + \alpha_3^a \alpha_2^b + \alpha_2^a \alpha_3^b) G_2 - (\alpha_3^a \alpha_2^b + \alpha_2^a \alpha_3^b) G_1 \right\} + \\ & \frac{\hbar^2}{m_2} \left\{ (2\alpha_3^a \alpha_3^b + \alpha_3^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_3^b) G_3 + \right. \\ & \left. + (2\alpha_1^a \alpha_1^b + \alpha_3^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_3^b) G_1 - (\alpha_3^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_3^b) G_2 \right\} + \\ & \frac{\hbar^2}{m_3} \left\{ (2\alpha_2^a \alpha_2^b + \alpha_2^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_2^b) G_2 + \right. \\ & \left. + (2\alpha_1^a \alpha_1^b + \alpha_2^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_2^b) G_1 - (\alpha_2^a \alpha_1^b + \alpha_1^a \alpha_2^b) G_3 \right\} + \\ & + \left( \frac{\hbar^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2}{2m_3} \right) \beta_3^a \beta_3^b N' + \\ & + \frac{\hbar^2}{2m_2} \left\{ \beta_3^a (2\alpha_1^b + \alpha_3^b) + \beta_3^b (2\alpha_1^a + \alpha_3^a) \right\} G'_1 + \\ & + \frac{\hbar^2}{2m_3} \left\{ \beta_3^a (2\alpha_1^b + \alpha_2^b) + \beta_3^b (2\alpha_1^a + \alpha_2^a) \right\} G'_1 - \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left\{ \beta_3^a (2\alpha_1^b + \alpha_3^b) - \beta_3^b (2\alpha_1^a + \alpha_3^a) \right\} G''_1 - \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_3} \left\{ \beta_3^a (2\alpha_1^b + \alpha_2^b) - \beta_3^b (2\alpha_1^a + \alpha_2^a) \right\} G''_1 + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\hbar^2}{2m_2} \left\{ \beta_3^a \alpha_3^b + \beta_3^b \alpha_3^a \right\} G'_3 - \frac{\hbar^2}{2m_3} \left\{ \beta_3^a \alpha_2^b + \beta_3^b \alpha_2^a \right\} G'_3 - \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left\{ \beta_3^a \alpha_3^b - \beta_3^b \alpha_3^a \right\} G''_3 + \frac{\hbar^2}{2m_3} \left\{ \beta_3^a \alpha_2^b - \beta_3^b \alpha_2^a \right\} G''_3 - \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left\{ \beta_3^a \alpha_3^b + \beta_3^b \alpha_3^a \right\} G'_2 + \frac{\hbar^2}{2m_3} \left\{ \beta_3^a \alpha_2^b + \beta_3^b \alpha_2^a \right\} G'_2 + \\
& + \frac{\hbar^2}{2m_2} \left\{ \beta_3^a \alpha_3^b - \beta_3^b \alpha_3^a \right\} G''_2 - \frac{\hbar^2}{2m_3} \left\{ \beta_3^a \alpha_2^b - \beta_3^b \alpha_2^a \right\} G''_2.
\end{aligned}$$

Расчет матричных элементов потенциальной энергии в случае кулоновских потенциалов сводится к вычислению интегралов:  $V_p \equiv \langle a | 1/R_p | b \rangle$ .

Вычисление матричных элементов гамильтониана и нормировки проводится в соответствии с техникой, разработанной в статье [6]. Нормировка каркасных функций на основе гауссоид эквивалентна матричному элементу потенциальной энергии на обычном гауссовском базисе, а матричные элементы кулоновской энергии — среднему от функции двух переменных на гауссовском базисе. Остальные матричные элементы определяются стандартным для гауссовского базиса методом: вычислением частных производных по вариационным параметрам (см. [5] и [6]).

Вычисление необходимых для нахождения верхней вариационной оценки интегралов  $N$ ,  $N'$ ,  $G_p$ ,  $G'_p$ ,  $G''_p$ , а также  $V_p$  приводит к следующим результатам:

$$\begin{aligned}
N &= 2 \langle a | b \rangle \left\{ (1 + 2\xi^2) \exp(\xi^2) - (1 + 2\chi^2) \exp(\chi^2) \right\}, \\
N' &= 2 \langle a | b \rangle \left\{ (1 + 2\xi^2) \exp(\xi^2) + (1 + 2\chi^2) \exp(\chi^2) \right\}, \\
G_p &= \langle a | b \rangle \frac{D_p}{D} \left\{ (3 + 12\xi^2 + 4\xi^4) \exp(\xi^2) - \right. \\
&\quad \left. - (3 + 12\chi^2 + 4\chi^4) \exp(\chi^2) \right\} - \\
&- \langle a | b \rangle \frac{D_{p3}}{D_3} \left\{ (6\xi^2 + 4\xi^4) \exp(\xi^2) - (6\chi^2 + 4\chi^4) \exp(\chi^2) \right\}, \\
G'_p &= - \langle a | b \rangle \frac{D_p}{D} (\beta_3^a + \beta_3^b) (3 + 2\xi^2) \exp(\xi^2) + \\
&\quad + 2 \langle a | b \rangle \frac{D_{p3}}{D_3} (\beta_3^a + \beta_3^b) \xi^2 \exp(\xi^2), \\
G''_p &= - \langle a | b \rangle \frac{D_p}{D} (\beta_3^a - \beta_3^b) (3 + 2\chi^2) \exp(\chi^2) + \\
&\quad + 2 \langle a | b \rangle \frac{D_{p3}}{D_3} (\beta_3^a - \beta_3^b) \chi^2 \exp(\chi^2), \\
V_p &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \langle a | b \rangle \sqrt{\frac{D}{D_p}} \left\{ \Omega(\xi; g_{p3}) - \Omega(\chi; g_{p3}) \right\}, \\
\text{где } \xi &= \frac{\beta_3^a + \beta_3^b}{2} \sqrt{\frac{D_3}{D}}, \quad \chi = \frac{\beta_3^a - \beta_3^b}{2} \sqrt{\frac{D_3}{D}}, \quad g_{pq}^2 = 1 - \frac{DD_{pq}}{D_p D_q}, \\
\Omega(x; g) &= \exp[(1 - g^2)x^2] \left\{ 1 + \frac{\sqrt{\pi}x}{g} e^{g^2 x^2} \text{Erf } gx \right\}, \quad D = \\
&= \sum_{p>q=1}^3 (\alpha_p^a + \alpha_p^b)(\alpha_q^a + \alpha_q^b), \quad D_p = \frac{\partial D}{\partial(\alpha_p^a + \alpha_p^b)}, \quad D_{pq} = \\
&= \frac{\partial^2 D}{\partial(\alpha_p^a + \alpha_p^b) \partial(\alpha_q^a + \alpha_q^b)}, \quad \langle a | b \rangle = \pi^3 D^{-3/2}.
\end{aligned}$$

Формулы, полученные для каркасно-гауссовских функций, и матричные элементы гамильтониана, выведенные для системы трех частиц, обобщаются на случай системы любого числа частиц с одной каркасной связью.

### 3. Результаты численных расчетов

Ниже в качестве иллюстрации предлагаемого метода представлены результаты расчетов двухцентровых кулоновских систем  $\mu\mu e$ ,  $ppe$ ,  $dde$ ,  $tte$ , а также системы ядерного типа — гиперядра  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ .

Расчеты проводились со сравнительно небольшим числом пробных функций (не более 50), однако точность расчета соответствует уровню самых лучших из опубликованных результатов или даже выше. Использование всего одной базисной функции позволяет рассчитать энергии рассматриваемых двухцентровых систем с точностью до трех значащих цифр, т.е. такой же, как с сотней экспоненциальных или гауссовских функций. Даже по сравнению с экспоненциально-тригонометрическим базисом каркасный базис обеспечивает ту же точность расчета при меньшем на порядок числе функций. Это иллюстрируется в табл. 1, где приведены результаты расчетов с каркасно-экспоненциальными функциями при различном числе пробных функций для кулоновских систем  $\mu\mu e$ ,  $ppe$ ,  $dde$ ,  $tte$ . Там же для сравнения приведены лучшие на сегодняшний день результаты расчетов с экспоненциально-тригонометрическими функциями [8], а также в рамках метода Борна–Оппенгеймера [12].

Т а б л и ц а 1

Верхние оценки энергии  
двухцентровых кулоновских систем и  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

Система	N	$E_U$ , а.е.	Примечания
$\mu\mu e$	1	-0.583 356	В работе [8] (с применением комплексных параметров при N = 500) $E_U = -0.585 126 097 176$
	5	-0.585 112 990	
	10	-0.585 125 383 5	
	50	-0.585 126 095 200	
$ppe$	1	-0.596 426	В работе [8] (N = 500) $E_U = -0.597 139 063 107 6$ . В работе [12] (в приближении Борна–Оппенгеймера) $E = -0.597 139 063 123$
	5	-0.597 136 342	
	10	-0.597 138 947 7	
	50	-0.597 139 063 059	
$dde$	1	-0.598 230	В работе [8] (N = 500) $E_U = -0.598 788 783 890$
	5	-0.598 786 749	
	10	-0.598 788 727 9	
	50	-0.598 788 783 941	
$tte$	1	-0.599 016	В работе [8] (N = 500) $E_U = -0.599 506 909 80$
	5	-0.599 504 934	
	10	-0.599 506 864 7	
	50	-0.599 506 909 911	
${}^9_{\Lambda}\text{Be}$	1	-4.810 9	Для ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ энергия приведена в МэВ, расчет проведен с потенциалом (9)
	5	-6.494 6	
	10	-6.540 1	
	50	-6.546 5	

В качестве системы ядерного типа было выбрано гиперядро  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$ , при расчете которого была использована кластерная модель  $\alpha + \alpha + \Lambda$ , и были рассмотрены два варианта потенциалов: 1) жесткие  $\alpha$ - $\alpha$ - и  $\Lambda$ - $\alpha$ -потенциалы и 2) мягкие  $\alpha$ - $\alpha$ - и  $\Lambda$ - $\alpha$ -потенциалы. В первом из этих вариантов в качестве  $\alpha$ - $\alpha$ -потенциала был использован потенциал  $d_0$  Али-Бодмера [15], а  $\Lambda$ - $\alpha$ -потенциал находился при использовании наиболее реалистического знакопеременного  $\Lambda$ - $N$ -потенциала [16] путем усреднения по плотности распределения нуклонов в  $\alpha$ -частице, которая выбиралась в форме гауссоиды со среднеквадратичным радиусом 1.5 фм. В результате интегрирования  $\Lambda$ - $\alpha$ -потенциал привелся к виду

$$V_{\Lambda\alpha} = 17.7717 \exp(-0.6491r^2) + 19.5640 \exp(-0.5963r^2) - 83.0069 \exp(-0.5024r^2) \text{ МэВ} \quad (9)$$

и обеспечивал в рамках модели  $\Lambda + \text{остов}$  правильную энергию связи гиперядра  ${}^5_{\Lambda}\text{He}$ . Характер сходимости результатов расчетов иллюстрируется в той же табл. 1.

В другом варианте расчета  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$  использовались мягкие  $\alpha$ - $\alpha$ - и  $\Lambda$ - $\alpha$ -потенциалы работы [17]. Расчеты показали, что значение полной энергии в этой работе значительно занижено. Без учета кулоновского взаимодействия при  $N = 50$  было найдено, что  $E = -10.2425$  МэВ. Этот результат для верхней оценки был убедительно подтвержден расчетом нижней оценки (в соответствии с техникой расчета работы [5]):  $E_L = -10.2427$  МэВ. При учете кулоновского взаимодействия  $\alpha$ -частиц, рассматриваемых как точечные заряды, было получено  $E_U = -8.3876$  МэВ. При учете пространственного распределения заряда в  $\alpha$ -частице найдено  $E_U = -8.4586$  МэВ.

Как видно из табл. 1, точность вариационных оценок для всех рассматриваемых кулоновских систем быстро растет при увеличении числа базисных

функций  $N$ . Если характеризовать ее величиной  $\delta_U = -\lg\left(\frac{E_0 - E_U}{E_0}\right)$  (число правильных десятичных знаков), то  $\delta_U$  растет примерно как  $4 \lg N$ . Для системы  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$  величина  $\delta_U$  растет как  $3 \lg N$ .

Проведенные расчеты показали, что «каркасный эффект» оказался для рассмотренной ядерной системы менее значительным, чем для типично двухцентровых кулоновских систем. Также ниже и точность расчета, особенно для варианта жестких  $\alpha$ - $\alpha$ - и  $\Lambda$ - $\alpha$ -потенциалов, что связано с более сложным знакопеременным характером этих потенциалов.

При фиксированном числе функций, как видно из рис. 2, точность расчета двухцентровых систем растет при увеличении отношения масс тяжелой и легкой частиц  $\xi = m_1/m_3$ . Каркасный характер функции проявляется при  $\xi \geq 10$ ; при меньших  $\xi$  базис вырождается в чисто экспоненциальный. При  $\xi < 0.2$  точность расчета практически не зависит от отношения масс частиц. В промежуточной

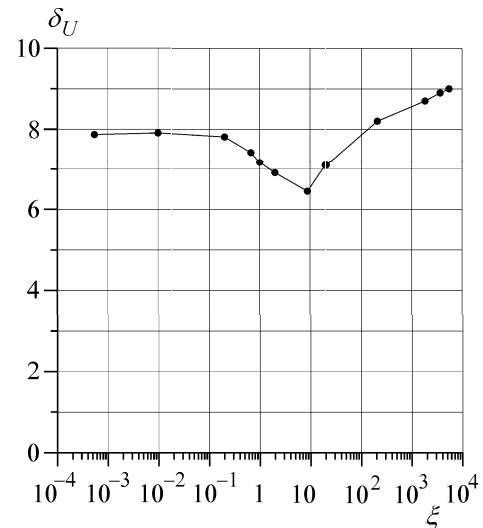


Рис. 2. Зависимость точности расчета верхней энергии системы типа  $X^\pm X^\pm Y^\mp$  от отношения масс частиц  $\xi = m_1/m_3$  при 30 базисных функциях

Т а б л и ц а 2

Различные характеристики двухцентровых кулоновских систем

Характеристики	$\mu e$	$p p e$	$d d e$	$t t e$
$m_1/m_3$	206.768 262	1836.152 701	3670.483 014	5496.921 58
$E_U$ , а.е.	-0.585 126 095 2	-0.597 139 063 1	-0.598 788 783 9	-0.599 506 909 9
$\langle V_1 \rangle$ , а.е.	-0.820 339 791	-0.842 492 962	-0.845 615 398	-0.846 981 674
$\langle V_3 \rangle$ , а.е.	0.470 427 360	0.490 707 798	0.493 653 238	0.494 949 536
$\langle T \rangle$ , а.е.	0.585 126 126	0.597 139 062	0.598 788 774	0.599 506 903
$\langle V \rangle$ , а.е.	-1.170 252 220	-1.194 278 126	-1.197 577 558	-1.199 013 814
$\eta \times 10^9$	30	0.7	8	6
$\langle R_1 \rangle$ , а.е.	1.769 302 287	1.692 966 210	1.682 346 558	1.677 707 696
$\sqrt{\langle R_1^2 \rangle}$ , а.е.	1.984 554 669	1.886 477 654	1.872 839 866	1.866 882 152
$\delta_1$ , %	50.81	49.16	48.92	48.81
$\langle R_3 \rangle$ , а.е.	2.205 214 958	2.063 913 868	2.044 070 059	2.035 386 060
$\sqrt{\langle R_3^2 \rangle}$ , а.е.	2.244 233 456	2.076 845 190	2.053 203 130	2.042 844 719
$\delta_3$ , %	18.89	11.21	9.46	8.57

области  $1 < \xi < 10$  точность расчета наименее высокая.

В дополнение к результатам, приведенным в табл. 1, для тех же кулоновских систем в табл. 2 приведены рассчитанные при  $N = 50$  средние значения полной, кинетической и потенциальной энергии (соответственно  $\langle T \rangle$  и  $\langle V \rangle$ ), потенциальной энергии взаимодействия легкой и тяжелой частиц  $\langle V_1 \rangle$ , взаимодействия тяжелых частиц  $\langle V_3 \rangle$ , а также средние и среднеквадратичные расстояния между легкой и тяжелой частицами:  $\langle R_1 \rangle$  и  $\sqrt{\langle R_1^2 \rangle}$  и между тяжелыми частицами:  $\langle R_3 \rangle$  и  $\sqrt{\langle R_3^2 \rangle}$ . В табл. 2 указана также дисперсия  $\delta_{1,3} = \frac{\sqrt{\langle R_{1,3}^2 \rangle - \langle R_{1,3} \rangle^2}}{\langle R_{1,3} \rangle}$ , характеризующая степень отклонения от жесткой каркасной структуры. Как и следовало ожидать,  $\delta_3$  значительно меньше, чем  $\delta_1$ , и быстро убывает с увеличением массы тяжелых частиц. Наконец, в табл. 2 показано отклонение результатов расчетов от требований вириальной теоремы  $\eta = \left| 1 + \frac{2\langle T \rangle}{\langle V \rangle} \right|$ , которое коррелировано с точностью расчета.

Т а б л и ц а 3

Различные характеристики ядерной системы  ${}^9\text{Be}$ 

Характеристики	С кулон. взаим.	Без кулон. взаим.
$E_U$ , МэВ	-6.5465	-8.2760
$\langle T \rangle$ , МэВ	14.4714	14.8758
$\langle V \rangle$ , МэВ	-21.0179	-23.1518
$\langle V_{\alpha\Lambda} \rangle$ , МэВ	-8.8137	-8.9717
$\langle V_{\alpha\alpha} \rangle$ , МэВ	-3.3905	-5.2084
$\langle V_{\alpha\alpha}^{Coul} \rangle$ , МэВ	1.7125	0.0000
$\sqrt{\langle R_{\alpha\Lambda}^2 \rangle}$ , фм	3.1244	3.0609
$\sqrt{\langle R_{\alpha\alpha}^2 \rangle}$ , фм	3.7093	3.6160

В табл. 3 для  ${}^9\text{Be}$  приведены средние значения операторов кинетической и потенциальной энергии и среднеквадратичные расстояния между частица-

ми, найденные при  $N = 50$  как с учетом кулоновского взаимодействия, так и без него.

Авторы выражают глубокую благодарность В.Б. Беляеву, участникам семинара в ЛТФ ОИЯИ, а также В.И. Кукулину, П.П. Захарову и В.С. Ростовскому за обсуждение результатов работы и ценные замечания.

#### Литература

1. *Hylleraas E.A.* // Z. f. Physik. 1929. **54**. P. 347.
2. *Kinoshita T.* // Phys. Rev. 1957. **105**. P. 1490.
3. *Schwartz C.* // Phys. Rev. 1962. **128**. P. 1146.
4. *Frankowski K., Pekeris C.L.* // Phys. Rev. 1966. **146**. P. 46.
5. *Дончев А.Г., Колесников Н.Н., Тарасов В.И.* // Ядерная физика. 2000. **63**. С. 419.
6. *Колесников Н.Н., Тарасов В.И.* // Ядерная физика. 1982. **35**. С. 609.
7. *Ребане Т.К., Юсупов О.Н.* // ЖЭТФ. 1990. **98**. С. 1870.
8. *Frolov A.M.* // Phys. Rev. 1998. **A57**. P. 2436; *Frolov A.M., Smith Jr. V.H.* // J. Phys. 1995. **B28**. P. L449.
9. *Bhatia A.K.* // Phys. Rev. 1998. **A58**. P. 2787.
10. *Born M., Oppenheimer J.R.* // Ann. of Phys. (N. Y.). 1927. **84**. P. 457.
11. *Ponomarev L.I.* // J. Phys. 1981. **B14**. P. 591.
12. *Gretauud B., Dominique D., Billy N.* // J. Phys. 1998. **B31**. P. 383.
13. *Зотев В.С., Ребане Т.К.* // Ядерная физика. 2000. **63**. С. 44.
14. *Захаров П.П., Колесников Н.Н., Тарасов В.И.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1983. №5. С. 34.
15. *Ali S., Bodmer A.R.* // Nucl. Phys. 1966. **80**. P. 99.
16. *Колесников Н.Н., Копылов В.А.* // Изв. вузов. Физика. 1983. №5. С. 36; *Колесников Н.Н., Тарасов В.И.* // Там же. 1997. **40**. С. 19.
17. *Филихин И.Н., Яковлев С.Л.* // Ядерная физика. 2000. **63**. С. 402.

Поступила в редакцию  
24.07.01

УДК 536.75

## ТЕПЛОЕМКОСТЬ $\gamma$ -ФАЗЫ ТВЕРДОГО КИСЛОРОДА

П.Н. Николаев

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

E-mail: nikolaev@qs.phys.msu.ru

Рассчитана теплоемкость  $\gamma$ -фазы твердого кислорода на основе корреляционной теории кристаллического состояния. Определены классы движений молекул в каждой из двух неэквивалентных позиций.

#### Введение

До настоящего времени остается проблемой строгое количественное описание зависимости теплоемкости  $\gamma$ -фазы твердого кислорода от температуры. Как известно, калорические свойства существ-

венным образом зависят от характера движения составляющих кристалл частиц: если для описания термических свойств во многих случаях достаточно знать структуру решетки и использовать самые общие представления о движении молекул, то для