

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



Б-21

121, -76

P4 - 9237

91/2-76

Е.Б.Бальбуцев, Б.Иргазиев, Л.Майлинг,
И.Н.Михайлов, Й.Ржизек

ОЦЕНКА СНИЗУ ЭНЕРГИИ
КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ МНОГИХ ТЕЛ

1975

P4 - 9237

Е.Б.Бальбуцев, Б.Иргазиев, Л.Майлинг,
И.Н.Михайлов, Й.Ржизек

ОЦЕНКА СНИЗУ ЭНЕРГИИ
КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ МНОГИХ ТЕЛ

Направлено в "Journal of Physics" (A)

1. Введение

Начиная с первой работы Вигнера^{1/} и вплоть до недавних работ Поста и Холла^{2/}, все оценки нижней границы энергии основного состояния системы $N > 2$ частиц основывались на сведении задачи к "эквивалентной проблеме двух тел". Успех, достигнутый на этом пути, оказывается весьма ограниченным, так как при увеличении числа частиц в изучаемой системе подобные оценки дают слишком низкие значения для нижнего предела энергии.

В последнее время были достигнуты большие успехи в решении задачи трех и четырех тел. Поэтому имеет смысл обобщить вышеуказанные методы, сводя задачу определения энергии N тел к эквивалентной проблеме трех и более частиц. Возможность такого обобщения, заложенная в работах Поста и Холла, рассматривается в главах 2,3 данной работы. Краткое обсуждение полученных результатов содержится в заключительной главе 4.

2. Обобщение метода Поста^{3/}

Перейдем от общего гамильтониана системы N частиц с двухчастичным взаимодействием

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i>j=1}^N v_{ij}$$

к гамильтониану, описывающему внутреннее движение системы:

$$H_{\text{вн}} = H - \frac{p^2}{2mN} = \sum_{i>j=1}^N \left\{ \frac{(p_i - p_j)^2}{2mN} + v_{ij} \right\},$$

где $P = \sum_i p_i$. Энергия основного состояния системы есть среднее $E_0 = \langle \Psi_0 | H_{\text{ВН}} | \Psi_0 \rangle$.

Здесь Ψ_0 - собственная функция гамильтониана $H_{\text{ВН}}$, соответствующая нижайшему собственному значению. Она должна быть антисимметричной /симметричной/, поскольку описывает систему тождественных фермионов /бозонов/. Пользуясь этим свойством волновой функции, нетрудно получить:

$$\begin{aligned}
 E_0 &= \frac{N(N-1)}{2} \langle \Psi_0 | \left\{ \frac{(p_1 - p_2)^2}{2mN} + v_{12} \right\} | \Psi_0 \rangle = \\
 &= \frac{N(N-1)}{K(K-1)} \langle \Psi_0 | \sum_{i>j=1}^K \left\{ \frac{(p_i - p_j)^2}{2mN} + v_{ij} \right\} | \Psi_0 \rangle \quad /1/ \\
 &= \frac{N-1}{K-1} \langle \Psi_0 | \mathcal{H}^{[K,N]} | \Psi_0 \rangle.
 \end{aligned}$$

Здесь через $\mathcal{H}^{[K,N]}$ обозначен видоизмененный гамильтониан внутреннего движения K частиц:

$$\mathcal{H}^{[K,N]} = \sum_{i>j=1}^K \left\{ \frac{(p_i - p_j)^2}{2mK} + \frac{N}{K} v_{ij} \right\}.$$

Представим теперь Ψ_0 в виде ряда:

$$\Psi_0 = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(r_1, \dots, r_K) f_n(r_{K+1}, \dots, r_N),$$

где ϕ_n - собственные функции $\mathcal{H}^{[K,N]}$ с собственными значениями $\epsilon_n^{[K,N]}$:

$$\mathcal{H}^{[K,N]} \phi_n(r_1, \dots, r_K) = \epsilon_n^{[K,N]} \phi_n(r_1, \dots, r_K).$$

Среднее $\langle \Psi_0 | \mathcal{H}^{[K,N]} | \Psi_0 \rangle$ в формуле /1/ не может быть меньше $\epsilon_0^{[K,N]} = \min \{ \epsilon_n^{[K,N]} \}$ и поэтому

$$E_0 \geq \frac{N-1}{K-1} \epsilon_0^{[K,N]} \quad /2/$$

При $K=2$ получается известный результат Поста^{/3/}.

Таким образом, энергию основного состояния системы N частиц можно оценить снизу, зная энергию основного состояния системы K частиц ($K < N$) с гамильтонианом $\mathcal{H}^{[K,N]}$. Аналогичное утверждение было сформулировано Калоджеро и Маркворо^{/4/}, но практически реализовано ими не было.

Собственные значения $\epsilon_0^{[K,N]}$ можно, в свою очередь, оценить, решив проблему с числом частиц $q < K$. Переход от гамильтониана $\mathcal{H}^{[K,N]}$ к гамильтониану $\mathcal{H}^{[q,(K,N)]}$ очевиден:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{[q,(K,N)]} &= \sum_{i>j=1}^q \left\{ \frac{(p_i - p_j)^2}{2mq} + \frac{K}{q} \left(\frac{N}{K} v_{ij} \right) \right\} = \\ &= \sum_{i>j=1}^q \left\{ \frac{(p_i - p_j)^2}{2mq} + \frac{N}{q} v_{ij} \right\} = \mathcal{H}^{[q,N]} \end{aligned}$$

Применяя описанную выше процедуру к оценке $\epsilon_0^{[K,N]}$ по нижайшему собственному значению $\mathcal{H}^{[q,(K,N)]}$, нетрудно получить систему неравенств:

$$E_0 \geq \frac{N-1}{K-1} \epsilon_0^{[K,N]} \geq \frac{N-1}{q-1} \epsilon_0^{[q,N]} \quad \text{если } N > K > q. \quad /3/$$

Тем самым доказано, что оценки энергии N частиц по системе K частиц более точны, чем по системе q частиц, если $K > q$. Следовательно, решая задачу трех или даже четырех тел, а не двух, как это делалось до сих пор, можно надеяться на получение более точных оценок.

Такие расчеты были проделаны для ${}^4\text{He}$ с потенциалами Малфлета-Тъёна /МТ/, Даревича-Грина /ДГ/, Эйкемейера-Хакенбройха /ЭХ/ и с простым потенциалом /ПП/, имеющим гауссову радиальную зависимость $V_0 = -37,44 \text{ МэВ}$, $b = .2669 \text{ Фм}^{-2}$. Потенциалы МТ^{/5/} и ДГ^{/6/} методом Бейтмана приводились к сепарабельному ви-

ду ^{17/} и затем решались уравнения Фаддеева в импульсном представлении. С потенциалами ЭХ^{18/} и ПП^{18/} задачи трех и четырех тел решались путем разложения волновой функции в ряд по осцилляторным функциям. Для сравнения энергия связи ⁴He оценивалась также и по двухчастичной системе. Полученные верхние границы для энергии связи ⁴He приведены в табл. 1.

Таблица 1

Вычисленные максимальные значения энергии связи ⁴He

К	Пот-л	МТ	ДГ	ПП	ЭХ
		МэВ	МэВ	МэВ	МэВ
2		48,6	67,9	34,37	37,2
3		34,3	39,4	33,27	31,8
4				32,8	

Напомним, что экспериментальное значение энергии связи ⁴He равно 28,2 МэВ. Так что налицо явное улучшение при переходе от двухчастичной системы к трехчастичной. Кроме того, видна довольно сильная зависимость результатов от потенциала. Следовательно, предлагаемая процедура оценки энергии N частиц снизу может быть использована как дополнительный критерий при отборе феноменологических потенциалов.

Указанные оценки полезно проделать для системы частиц, связанных осцилляторными силами. Здесь задача N тел решается точно, и можно непосредственно сравнить точные и приближенные решения. Пусть $v_{ij} = \kappa (r_i - r_j)^2$. Рассмотрим сначала одномерный случай. Для энергии основного состояния N фермионов справедлива формула^{19/}:

$$E_0 = (N^2 - 1) \sqrt{N \frac{\hbar^2 \kappa}{2m}}$$

Для энергии основного состояния K фермионов с гамильтонианом $\mathcal{H}^{[K,N]}$ можно сразу написать:

$$\epsilon_0^{[K,N]} = (K^2 - 1) \sqrt{K \frac{\hbar^2 \frac{N}{K} \kappa}{2m}} = (K^2 - 1) \sqrt{N \frac{\hbar^2 \kappa}{2m}}$$

Обозначим $\xi = \frac{N-1}{K-1} \epsilon_0^{[K,N]}$ и в качестве критерия точности

получаемых оценок возьмем отношение ξ к E_0 . В данном случае

$$\frac{\xi}{E_0} = \frac{K+1}{N+1}.$$

Из этого простого выражения хорошо видно, что чем больше K , тем ближе нижняя граница энергии к истинному значению E_0 , т.е. слабые (\geq) неравенства /3/ в этом случае являются сильными ($>$). Ясно также, что при $N \gg K$ такого рода оценки уже не представляют какой-либо практической ценности.

В аналогичной трехмерной задаче простую формулу для энергии основного состояния удастся написать только для отдельных, магических N . Имеем:

$$E_0 = \frac{3}{2} [N(n+1)-2] \sqrt{N} \frac{\hbar^2 \kappa}{2m},$$

где n - номер последней заполненной оболочки и $N = \frac{s}{6} n(n+1)(n+2)$, s - вырождение уровня. Возьмем K , соответствующее системе с последней заполненной оболочкой ℓ , так что $K = \frac{s}{6} \ell(\ell+1)(\ell+2)$ и

$$\epsilon_0^{[K,N]} = \frac{3}{2} [K(\ell+1)-2] \sqrt{N} \frac{\hbar^2 \kappa}{2m}.$$

Тогда

$$\frac{\xi}{E_0} = \frac{\frac{K}{K-1}(\ell+1) - \frac{2}{K-1}}{\frac{N}{N-1}(n+1) - \frac{2}{N-1}}.$$

Из этого выражения следует, что при достаточно больших

N и K , когда $\frac{K}{K-1} \approx \frac{N}{N-1} \approx 1$, отношение ξ/E_0 опре-

деляется отношением номеров оболочек, а не чисел частиц. Применяя эту формулу в ядерной физике, можно надеяться с большой точностью оценить энергию магического ядра по соседнему магическому ядру, даже если числа нуклонов в них заметно отличаются. Например, для соседних оболочек $n=4 / N=80$ и $\ell=3 / K=40$ отношение $\xi/E_0 = 0,8$, хотя число нуклонов в ядрах отли-

чается вдвое! Результат остается все еще в разумных пределах, $\epsilon/E_0 = 0,65$, даже при $n=2(N=16)$, $l=1(K=4)$, хотя здесь число частиц отличается вчетверс!

Однако расчет с реалистическим взаимодействием Бринка, Бэкера [13] не подтверждает этих прогнозов. Для верхней границы энергии связи ^{16}O , оцененной по энергиям систем с $K=2,3,4$, получилось, соответственно, 960; 858; 795 МэВ, тогда как вариационный расчет дает величину порядка 200 МэВ.

По-видимому, симметрия основного состояния ^4He слишком проста, чтобы дать достаточно полное описание основного состояния ^{16}O . Дополнительную информацию можно получить, приняв во внимание возбужденные состояния ^4He . Этой проблеме посвящена следующая глава.

3. Обобщение метода Холла

В работе Холла [10] был развит подход, позволивший привлечь для оценки нижней границы энергии основного состояния системы N тел не только основное, но и возбужденные состояния системы K частиц при $K=2$. Аналогичную процедуру нетрудно провести и при $K > 2$.

Для удобства перейдем к новой системе координат $\rho = \text{Вг}$, в которой явно выделена координата центра тяжести. Импульсы, соответствующие координатам ρ_i , получаются из импульсов p_i преобразованием $\pi = \tilde{\text{В}}^{-1} p$. Волновая функция основного состояния Ψ_0 , будучи собственной функцией трансляционно инвариантного гамильтониана, должна не зависеть от координаты центра тяжести ρ_1 :

$$\Psi_0 = \Psi_0(\rho_2, \rho_3, \dots, \rho_N).$$

Введем в рассмотрение антисимметризирующий проекционный оператор $A(1, 2, \dots, N)$. Так как Ψ_0 антисимметрична по всем частицам, она является собственной функцией A с единичным собственным значением:

$$A\Psi_0 = \Psi_0.$$

Представим Ψ_0 в виде ряда:

$$\Psi_0(\rho_2, \dots, \rho_N) = \sum_n c_n \phi_n(\rho_2, \dots, \rho_K) f_n(\rho_{K+1}, \dots, \rho_N),$$

выбрав ϕ_n собственными функциями гамильтониана

$$\tilde{H}^{[K,N]} = \sum_{i=2}^K \left(-\frac{\hbar^2}{2m\lambda} \right) \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} + \frac{N}{K} \sum_{i>j=1}^K v_{ij},$$

причем параметр λ , зависящий от конкретного вида координат ρ_i , определим из условия

$$\frac{1}{2mK} < \sum_{i>j=1}^K (\rho_i - \rho_j)^2 > = -\frac{1}{2m\lambda} < \sum_{i=2}^K \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} >.$$

Для энергии системы имеем выражение

$$E_0 = \frac{N-1}{K-1} \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \epsilon_n^{[K,N]},$$

где $\epsilon_n^{[K,N]}$ - собственные значения $\tilde{H}^{[K,N]}$. Из антисимметрии Ψ_0 следует, что

$$A(K+1, \dots, N) f_n(\rho_{K+1}, \dots, \rho_N) = f_n(\rho_{K+1}, \dots, \rho_N).$$

Пользуясь указанными свойствами Ψ_0 и f_n , можно оценить сверху коэффициенты $|c_n|^2$. Имеем:

$$|c_n|^2 = |\langle \phi_n f_n, \Psi_0 \rangle|^2 = |\langle \phi_n f_n, A(K, \dots, N) \Psi_0 \rangle|^2.$$

Оператор A эрмитов, поэтому

$$|c_n|^2 = |\langle A(K, \dots, N) \phi_n f_n, \Psi_0 \rangle|^2.$$

Используя неравенство Буняковского-Шварца, получаем:

$$|c_n|^2 \leq \langle A(K, \dots, N) \phi_n f_n, A(K, \dots, N) \phi_n f_n \rangle \langle \Psi_0, \Psi_0 \rangle. \quad /4/$$

Запишем $A(K, \dots, N)$ более подробно:

$$A(K, \dots, N) = \frac{1}{N-K+1} (1 - P_{K,K+1} - P_{K,K+2} - \dots - P_{K,N}) A(K+1, \dots, N).$$

Здесь $P_{i,j}$ - оператор перестановки частиц. Подставим это выражение в /4/. Учитывая, что $A^2 = A$, находим:

$$|c_n|^2 \leq \frac{1}{N-K+1} [1 - (N-K)\delta],$$

где $\delta = \langle \phi_n f_n, P_{K,K+1} \phi_n f_n \rangle$. Если наложить на координаты ρ_i легко выполнимое условие $P_{K,K+1} \rho_K = \rho_{K+1}$, то δ оказывается положительным.

$$\begin{aligned} \delta &= \int \dots \int d\rho_2 \dots d\rho_N \phi_n^*(\rho_2, \dots, \rho_K) f_n^*(\rho_{K+1}, \dots, \rho_N) \times \\ &\quad \times P_{K,K+1} \phi_n(\rho_2, \dots, \rho_K) f_n(\rho_{K+1}, \dots, \rho_N) = \\ &= \int \dots \int d\rho_2 \dots d\rho_{K-1} d\rho_{K+2} \dots d\rho_N \int \phi_n^*(\rho_2, \dots, \rho_K) \times \\ &\quad \times f_n(\rho_K, \rho_{K+2}, \dots, \rho_N) d\rho_K \Big|_{\geq}^2 0. \end{aligned}$$

Следовательно, независимо от величины δ , для $|c_r|^2$ справедливо неравенство

$$|c_n|^2 \leq \frac{1}{N-K+1}.$$

Отсюда, учитывая условие нормировки $\sum_n |c_n|^2 = 1$, получаем

$$\begin{aligned} E_0 &\geq \frac{N-1}{K-1} \left(\sum_{n=0}^{N-K} |c_n|^2 \epsilon_n^{[K,N]} + \epsilon_{N-K+1}^{[K,N]} \sum_{n=N-K+1}^{\infty} |c_n|^2 \right) = \\ &= \frac{N-1}{K-1} \left\{ \sum_{n=0}^{N-K} |c_n|^2 \left(\epsilon_n^{[K,N]} - \epsilon_{N-K+1}^{[K,N]} \right) + \epsilon_{N-K+1}^{[K,N]} \right\} \geq \\ &\geq \frac{N-1}{K-1} \left\{ \sum_{n=0}^{N-K} \frac{1}{N-K+1} \left(\epsilon_n^{[K,N]} - \epsilon_{N-K+1}^{[K,N]} \right) + \epsilon_{N-K+1}^{[K,N]} \right\} = \\ &= \frac{N-1}{K-1} \frac{1}{N-K+1} \sum_{n=0}^{N-K} \epsilon_n^{[K,N]}. \end{aligned}$$

/5/

Для того чтобы полностью определить энергии $\epsilon_n^{[K,N]}$ в формуле /5/, следует фиксировать параметр λ . Выбрав нормированные координаты Якоби

$$\rho_i = \frac{1}{\sqrt{i(i-1)}} \left[\sum_{j=1}^{i-1} x_j - (i-1)x_i \right]$$

для $i = 2, 3, \dots, K, K+2, \dots, N$ и положив

$$\rho_{K+1} = P_{K,K+1} \rho_K,$$

получаем тривиальным обобщением процедуры, описанной Холлом /10/,

$$\lambda = 1 + \frac{1}{(K-1)(K^2-1)}.$$

При $K=2$ воспроизводится результат Холла. В случае, когда число дискретных уровней q меньше, чем $N-K+1$, суммирование ограничивается только ими. Если же спектр $\mathcal{H}^{[K,N]}$ становится непрерывным при некотором отрицательном ϵ_d /в трехчастичной задаче, например, это соответствует двум связанным и одной свободной частицам/, то вместо /5/ имеем:

$$E_0 \geq \frac{N-1}{K-1} \frac{1}{N-K+1} \left\{ \sum_{n=0}^{q-1} \epsilon_n^{[K,N]} + \epsilon_d (N-K-q+1) \right\}.$$

Для примера рассмотрим систему односторонних гармонических осцилляторов в случае $K=3$. Здесь

$$\tilde{\mathcal{H}}^{[3,N]} = \sum_{i=2}^3 \left(-\frac{16}{17} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} + N \kappa \rho_i^2 \right).$$

Собственные значения этого гамильтониана известны:

$$\epsilon_\nu = 2 \sqrt{\frac{16}{17}} (a_\nu + b_\nu + 1) \sqrt{\frac{\hbar^2 \kappa N}{2m}}.$$

Каждый уровень ϵ_ν многократно вырожден. Число различных антисимметричных состояний s_ν , соответствующих уровню ϵ_ν , можно подсчитать, пользуясь известными свойствами симметрической группы /11/. В табл. 2 приведены величины s_ν для нескольких нижайших значений $a_\nu = a_\nu + b_\nu$.

При $a \geq 4$ величины s_ν вычисляются следующим образом. Если $\frac{a-4}{6} = n$ целое, то $s(a) = n$, $s(a+1) = s(a+2) = s(a+3) = s(a+4) =$

$=n+1, s(a+5)=n+2$. Обозначим правую часть неравенства /5/ через ξ и сравним отношения ξ/E_0 при $K=2$ /12/ и $K=3$. Результаты, приведенные в табл. 3, позволяют надеяться, что и для произвольных взаимодействий оценки по энергиям трехчастичных систем могут быть достаточно близки к энергиям фермионных систем с N в первом десятке.

Таблица 2

α_{ν}	0	1	2	3	4	5	6
s_{ν}	0	0	0	1	0	1	1

Таблица 3

N	3	4	5	6	7	8	16
ξ/E $K=2$	0,43	0,52	0,58	0,62	0,65	0,67	0,76
${}^0_{K=3}$		0,97	0,92	0,87	0,83	0,79	0,58

Расчет, проведенный для атомных ядер с реалистическим взаимодействием Брэнка, Бэкера¹³, в значительной мере оправдывает эти ожидания. Максимальные значения энергии связи ${}^{16}\text{O}$, полученные с $K=2,3,4$, равны, соответственно, 460,4; 412; 364 МэВ. Вариационный расчет дает величину порядка 200 МэВ.

Отметим, что в применении к задаче о ${}^4\text{He}$ формула /5/ не дает никакого улучшения по сравнению с формулой /2/. Причиной этого является многократное вырождение основных состояний в системах двух и трех нуклонов. На самом деле оценка по формуле /5/ в этом случае оказывается несколько хуже, чем по формуле /2/, из-за влияния на величину $\epsilon_0^{[K,N]}$ фактора λ .

4. Заключение

Описаны два метода определения нижней границы энергии основного состояния N тел, основанные на решении уравнения Шредингера для эквивалентной задачи $K < N$ тел. Данные, полученные при расчете энергий легчайших ядер, показывают следующее: 1/ нижние границы энергии поднимаются при увеличении K ;

2/ использование данных о возбужденных состояниях подсистем оказывается эффективным только в случае $K > 3$, когда параметр λ /см. гл. 3/ численно близок к единице.

В заключение авторы считают своим приятным долгом поблагодарить В.Б.Беляева за полезную дискуссию.

Литература

1. E. Wigner. *Phys.Rev.*, 43, 252 (1933).
2. R.L.Hall, H.R.Post. *Proc. Phys. Soc.*, 90, 381 (1967).
3. H.R.Post. *Proc. Phys. Soc.*, 69, 936 (1956).
4. F.Calogero, C.Marcioro. *J.Math. Phys.*, 10, 562 (1969).
5. R.A.Malfliet, I.A.Tjon. *Phys.Lett.*, 35B, 487 (1971).
6. G.Darewych, A.Green. *Phys.Rev.*, 164, 1324 (1967).
7. В.Б.Беляев, Е.Вжеционко. *ОИЯИ*, Р4-4144, Дубна, 1968.
8. H.Eikemeier, H.H.Hackenbroich. *Zeits.Phys.*, 195, 412 (1966).
T.K.Lim. *Nucl.Phys.*, A139, 149 (1969).
9. H.R.Post. *Proc.Phys.Soc.*, 66, 649 (1953).
10. R.L.Hall. *Proc.Phys.Soc.*, 91, 16 (1967).
11. В.В.Ванагас, Л.Ю.Сабалюскас. *Литовск.физ.сб.*, 8, 77 /1968/.
В.Ванагас. "Алгебраические методы в теории ядра". "Минтис", Вильнюс, 1971.
12. R.L.Hall. *J.Phys.*, 5, 608 (1972).
13. D.M.Brink, E.Boeker. *Nucl.Phys.*, A 91, 1 (1967).

Рукопись поступила в издательский отдел
22 октября 1975 года.