

УДК 530.145;539.14

МЕТОД РЕДУЦИРОВАННОГО ГАМИЛЬТониАНА В ТЕОРИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ СИСТЕМ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ

Г.-П. П. Камунтавичюс

Институт физики АН ЛитССР,
Вильнюс

Уравнение Шредингера для системы тождественных частиц обладает скрытой симметрией, обусловленной неразличимостью частиц. Ее использование позволяет удалить из уравнения оператор антисимметризации и получить функционально-дифференциальные уравнения для компонент волновой функции. В этих уравнениях остается только редуцированный двухчастичный гамильтониан, который является минимальной существенной частью многочастичного. Обзор посвящен изложению следствий обнаруженной симметрии и методу решения функционально-дифференциальных уравнений для связанных состояний системы, основанному на разложении компонент по полному базису собственных функций редуцированного гамильтониана.

The Schroedinger equation for a system of identical particles possesses a hidden symmetry, conditioned by identity of particles. While employing such symmetry, antisymmetrization operator may be excluded from the equation as well as functional-differential equations for wave-function components may be obtained. In such equations there is presented only a reduced two-particle Hamiltonian. The review is devoted to describe simplifications following from this kind of symmetry employment. The method to solve functional-differential equations for bound states, based on components series-expansion in the basis of eigenfunctions of the reduced two-particle Hamiltonian, is presented.

ВВЕДЕНИЕ

Теория нерелятивистских систем взаимодействующих частиц начала развиваться практически со времен рождения квантовой механики и достигла за это время немалых успехов. Вместе с тем в связи с появлением конструкций не встречавшейся ранее сложности — реалистических межнуклонных потенциалов — традиционные методы решения уравнения Шредингера оказались плохо приспособленными для подобных задач. Традиционными следует здесь назвать все те методы решения многофермионной проблемы, когда антисимметричность модельных волновых функций обеспечивается вне зависимости от динамики, т. е. характера взаимодействия частиц, еще до решения самого уравнения Шредингера. Это включает в себя как разложения точной волновой функции по жесткофиксированному

базису, так и априорное построение пробной функции со свободными параметрами или даже фрагментами функции, в результате варьирования которых она наилучшим возможным способом подгоняется к точной. Характерный пример такого рода — это приближение Хартри — Фока, когда антисимметрию волновой функции, зависящей от одночастичных переменных, удается обеспечить до конкретизации радиальных функций. В осцилляторной модели оболочек [1—3] в принципе возможно как расширение фиксированного базиса, так и варьирование по параметрам волновых функций. В методе гиперсферических функций [4] и его обобщениях [5] антисимметрия функций обеспечивается фиксированной частью, зависящей от угловых и спин-изоспиновых переменных (гиперсферическими гармониками), а фрагменты функций, зависящие от коллективных переменных, определяются из динамических уравнений.

Можно даже провести некоторую классификацию методов такого рода по числу степеней свободы, функции от которых не фиксированы для упрощения антисимметризации, а остаются свободными и могут быть приспособлены к динамике конкретной задачи. Конечно, сюда следует отнести также свободные параметры, варьированием которых можно добиться аналогичного результата. Начать этот список следует с осцилляторной модели оболочек (один параметр) и метода гиперсферических функций (одна степень свободы). Дальше идет модель оболочек в деформированном среднем поле (два или три параметра), а еще дальше — метод обобщенных гиперсферических функций, в котором число степеней свободы такого типа может быть доведено до шести. Для сравнения следует отметить, что в методе Хартри — Фока для атома число радиальных функций, которые свободны с изложенной точки зрения, $\sim N^{2/3}$. Именно это и гарантирует высокое качество соответствующей волновой функции. В нашем случае, конечно, не всегда успех метода прямо пропорционален этому числу. Все зависит еще и от физики описываемого явления. Например, в методе резонирующих групп [6] обычно «работает» лишь одна степень свободы, но этого оказывается вполне достаточно для объяснения эффектов кластеризации.

В целом такие гибридные методы в теории ядра весьма эффективны, однако сходимость разложений, особенно для потенциалов с кулоновским кором (таким является потенциал Риды [7]), оставляет желать лучшего [8, 9.] Разобраться в причинах этого можно еще до выполнения каких-либо расчетов. Дело в том, что для реалистических межнуклонных потенциалов точная волновая функция должна соответствовать распределению плотности вероятности в системе, напоминающей, грубо выражаясь, распределение плотности в губке, т. е. волновая функция должна «выталкиваться» из областей конфигурационного пространства, соответствующих малым межнуклонным расстояниям. Инфраструктура же упомянутых модельных базисов скорее соответствует распределению плотности, если следовать принятой параллели, в луковиче. Поэтому неудивительно, что

решение задачи в таком случае требует очень длинных (для твердого тела бесконечных) разложений.

Более или менее убедительные методы решения этих трудностей, т. е. адекватного учета двухчастичных корреляций, удается построить только для ядерного вещества и тяжелых ядер [10, 11], т. е. для систем, где правомерно применение тех или иных упрощений иного характера и модельный базис оказывается исключительно простым. Для конечных ядер в последнее время наибольшим успехом пользуется способ расчета, основанный на применении вариационных методов для пробных функций с корреляционными множителями ястровского типа [12, 13]. Вряд ли можно считать это большим успехом теоретической физики. Сам метод известен давно, изменились только технические возможности реализации стохастических вычислительных алгоритмов для реальных систем. Суть метода состоит в том, что простая модельная волновая функция основного состояния системы (модели оболочек или метода гиперсферических функций), антисимметричность которой обеспечивается сравнительно легко, умножается на полностью симметричный множитель, равный, как правило, произведению одинаковых функций для каждой пары частиц. Эти функции — корреляционные множители, зависящие в первую очередь от относительной координаты пары, выбираются так, чтобы обеспечить упомянутое деформирование модельной волновой функции. Хотя такая пробная функция с виду довольно проста, при конкретном ее применении возникают не только технические, но и принципиальные, по-видимому, трудности, обусловленные той же антисимметричностью [12] (многофермионная волновая функция многократно меняет знак в конфигурационном пространстве, и это не позволяет прямо пользоваться алгоритмом Монте-Карло). С другой стороны, если бы даже этот метод удалось успешно применить для легких ядер, картина вряд ли стала бы более ясной, так как, во-первых, результат в какой-то мере зависит от того, насколько удачен выбор пробной функции, а во-вторых, — методы прямого интегрирования перерабатывают входную информацию таким способом, что заметить какую-либо явную связь между качеством полученной волновой функции и типом потенциала бывает весьма трудно. А ведь цель такого расчета, кроме всего прочего, состоит еще и в том, чтобы использовать ядерные данные для усовершенствования самого межнуклонного потенциала. Один из примеров такого рода — это давно замеченная почти линейная корреляция между характеристиками трех-, четырех- и двухнуклонных систем [14] (например, между энергией связи тритона и примесью D -волны в дейтроне, между энергиями связи тритона и α -частицы и т. д.). Эти явления отчетливо видны в многочисленных расчетах, но их возникновение не становится более ясным и не поддается однозначной и наглядной трактовке.

Таким образом, мы оказываемся как бы в безвыходном положении. Антисимметризация функции после решения уравнения Шре-

дингера становится совсем неудачной, так как приходится отсеивать большое число ложных (т. е. таких, при попытке антисимметризации которых волновая функция превращается в тождественный нуль) решений. Антисимметризация до решения динамической задачи уже обсуждалась выше. Ни одно, ни другое из них не приемлемо. К счастью, имеется еще одна альтернатива. Как известно, оператор антисимметризации коммутирует с гамильтонианом системы тождественных частиц, поэтому эту операцию можно проводить на любой стадии решения уравнения Шредингера, в том числе и одновременно с ним. Оказалось, и это будет показано ниже, что это уже практически давно делается при редукции уравнения Шредингера в уравнения Фаддеева [15] или Фаддеева — Якубовского [16]. Дело в том (для определенности будем говорить о дифференциальной форме этих уравнений), что неизвестной в этих уравнениях является компонента волновой функции, которая имеет меньшую степень антисимметрии. Сумма нужного количества таких компонент является антисимметричной и равна, с точностью до нормировки, волновой функции системы. Увы, структура операторов в этих уравнениях такова, что основным методом их решения является прямое численное интегрирование. С ростом числа частиц этот способ становится все менее удобным, и желательно построение гибридных методов, основанных не только на решении более простых уравнений, чем уравнение Шредингера, но также и на разложении компонент по базисам, приспособленным к реальной динамике и поэтому позволяющим лучше учесть парные корреляции.

Такую возможность как раз и представляют функционально-дифференциальные уравнения, в которых в качестве оператора присутствует двухчастичный редуцированный гамильтониан — конструкция, спектр и собственные функции которой могут быть легко определены. Разложения многочастичных волновых функций по такому базису как раз и составляют основу метода редуцированного гамильтониана.

1. ПЕРЕСТАНОВОЧНАЯ СИММЕТРИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СИСТЕМЫ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ФЕРМИОНОВ

Дифференциальные уравнения Фаддеева для системы трех тел [17, 18]

$$(H_0 + V_\alpha - E) \Phi_\alpha = -V_\alpha \sum_{\beta \neq \alpha} \Phi_\beta,$$

где использованы обозначения, применяющиеся в [18], как известно, представляют собой систему трех уравнений, соответствующих трем возможным разбиениям $\alpha = (1) (23); (2) (31) \text{ и } (3) (12)$. Формальный вывод этих уравнений состоит в представлении волновой функции Ψ в виде суммы компонент, каждая из которых имеет вид

$$\Phi_\alpha = -R_0 (E + i0) V_\alpha \Psi,$$

и действии на обе стороны этого выражения оператором $(H_0 - E)$. Это приводит к уравнению, удобному для дальнейших выкладок:

$$(E - H_0) \Phi_\alpha = V_\alpha \Psi.$$

Для разбиения $\alpha = (1) (23)$ присутствующий здесь V_α равен просто потенциальной энергии взаимодействия V_{23} между второй и третьей частицами.

Компоненты волновых функций в случае трех частиц однозначно определяются после задания асимптотических граничных условий.

Для четырех и большего числа частиц тоже можно определить разбиения такого типа (a_{N-1}) , соответствующие компоненты и систему уравнений для них

$$(E - H_0) \Phi_{a_{N-1}} = V_{a_{N-1}} \Psi. \quad (1)$$

В отличие от рассмотренного выше случая, для получения уравнений, эквивалентных компактным интегральным уравнениям для задач рассеяния, необходима дальнейшая редукция компонент, соответствующая другим типам разбиений.

Ввиду того что нас в основном интересуют задачи о связанных состояниях, ограничимся рассмотрением уравнений приведенного выше типа.

Каждое из уравнений (1) можно характеризовать определенной выделенной парой, а сумма всех $N(N-1)/2$ уравнений совпадает с уравнением Шредингера. Если частицы тождественны, все уравнения идентичны. Если бы уравнение такого типа оказалось эквивалентным уравнению Шредингера, это и было бы упрощением, упомянутым во введении.

Стоит обратить внимание еще на одну особенность этих уравнений. Как известно, волновая функция многофермионной системы должна быть антисимметричной. Если конкретизировать разбиение a_{N-1} так, чтобы выделялась пара $(N-1, N)$, тогда правая часть оказывается (из-за присутствия $V_{N-1, N}$) с испорченной антисимметрией — она антисимметрична только относительно перестановок переменных в наборах $(1, 2, \dots, N-2)$ и $(N-1, N)$ в отдельности. Из-за симметричности $(E - H_0)$ следует, что компонента тоже должна обладать симметрией, характерной для правой стороны, т. е., степень ее антисимметрии ниже, чем у волновой функции. Это и является ключом к дальнейшим упрощениям.

Прежде чем приступить к их изложению, введем более удобные здесь обозначения. Антисимметричную функцию системы N тождественных фермионов будем обозначать как $\Phi(1, 2, \dots, N)$, а компоненту с указанной выше антисимметрией как $\Phi(1, 2, \dots, N-2; N-1, N)$, т. е. точкой с запятой будем разделять группы одночастичных индексов, относительно перестановок внутри которых функция антисимметрична. В таких обозначениях последнее уравнение

принимает вид

$$(E - H_0) \Phi(1, \dots, N-2; N-1, N) = V_{N-1, N} \Phi(1, \dots, N). \quad (2)$$

Происхождение этого и других уравнений для компонент может быть также другим, отличным от приведенного формального вывода. Для демонстрации этого следует обратить внимание на связь между степенями антисимметрии компоненты и волновой функции. Оператор, который доантисимметризовывает компоненту в нашем случае, принадлежит к левым смежным классам по подгруппе $S_{N-2} \times S_2$ группы S_N [99]

$$X_{1, \dots, N-2; N-1, N} = \binom{N}{2}^{-1} \left\{ 1 + \sum_{p=1}^{N-2} (P_{pN-1} P_{pN} + P_{pN} P_{pN-1}) + \sum_{p_1, p_2=1}^{N-2} (p_1 < p_2) P_{p_1 N-1} P_{p_2 N} \right\}. \quad (3)$$

Здесь P_{ij} — операторы транспозиций, переставляющие все одночастичные переменные i -й и j -й частиц.

Его применение позволяет не только записать волновую функцию в виде суммы компонент

$$\Phi(1, \dots, N) = X_{1, \dots, N-2; N-1, N} \Phi(1, \dots, N-2; N-1, N), \quad (4)$$

но и представить многочастичный гамильтониан как

$$H_{1, \dots, N} = H_0 + \sum_{i, j=1}^N (i < j) v_{i, j} \equiv H_0 + X_{1, \dots, N-2; N-1, N} V_{N-1, N},$$

где

$$V_{N-1, N} = \binom{N}{2} v_{N-1, N}.$$

После подстановки последних выражений в уравнение Шредингера оно может быть представлено в виде

$$X_{1, \dots, N-2; N-1, N} \{ Q V_{N-1, N} \Phi(1, \dots, N-2; N-1, N) - (E - H_0) \Phi(1, \dots, N-2; N-1, N) \} = 0. \quad (5)$$

Появившийся в этом выражении оператор Q , как и X , является некоторой суммой операторов перестановок одночастичных переменных. Он определяется из условия

$$X_{1, \dots, N-2; N-1, N}^{(h)} X_{1, \dots, N-2; N-1, N}^{(\phi)} = X_{1, \dots, N-2; N-1, N} Q. \quad (6)$$

Здесь значки (\hbar) и (ϕ) у операторов означают, что они действуют на переменные в гамильтониане и в волновых функциях (или компонентах) соответственно. Отсутствие значков определяет оператор, действующий на переменные всех функций, находящихся справа от него. Уравнение (6) даже для трех частиц имеет несколько независимых решений [19]. Ценность представляют только те из них, которые сохраняют одинаковую перестановочную симметрию обоих членов из фигурной скобки выражения (5). Среди них при любом N есть решение

$$Q = X_{1, \dots, N-2; N-1, N}^{(\phi)} \quad (7)$$

Нетрудно заметить, что уравнение (2) получается из (5), если в последнее подставить это выражение для Q и убрать оператор X . Законность такой операции для функционально-дифференциальных уравнений будет доказана ниже. С первого взгляда эту операцию в рассматриваемом случае можно понять и обосновать следующим способом. Уравнение (5) схематически можно представить в виде

$$X_{1, \dots, N-2; N-1, N} \eta(1, \dots, N-2; N-1, N) = 0. \quad (8)$$

Значит, при попытке антисимметризации η получается нуль, а это может случиться только в двух случаях — либо когда η обладает некоей дополнительной симметрией, что противоречит определению компоненты, либо когда он тождественно равен нулю. Это и позволяет упростить уравнение Шредингера для системы тождественных частиц. Остальные, отличные от (7), решения для Q (см. [19]) приводят к уравнениям других типов, среди которых можно легко узнать различные варианты уравнений трехчастичного рассеяния.

Уравнения (2) при $N > 3$ дальнейшей редукцией симметрии компонент могут быть приведены к виду дифференциальных уравнений теории многочастичного рассеяния. Для четырех частиц такая редукция выполнена в цитируемой работе. Таким образом, упомянутые уравнения можно получить не только в результате хорошо известной методики (уравнение Шредингера — интегральные уравнения теории многочастичного рассеяния — дифференциальные уравнения для компонент), но также и прямо из уравнения Шредингера, основываясь исключительно на анализе ее симметрии и возможности представления в виде (5), т. е. опуская промежуточное звено. Конечно, при этом возникают две старые проблемы — определение асимптотических граничных условий для компонент и доказательство эквивалентности полученных уравнений исходному. Как известно, эквивалентность обычно доказывается именно на промежуточном этапе, поэтому для уравнений, формулируемых ниже, это оказывается нетривиальной задачей. Первую из упомянутых проблем ниже рассматривать не будем, так как ограничимся случаем связанных состояний, где она решается тривиально.

2. ФУНКЦИОНАЛЬНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Нетрудно заметить, что выражение (5) может быть еще упрощено разбиением на двухчастичные фрагменты также и H_0 , т. е. в результате представления

$$H_{1, \dots, N} = \sum_{i,j=1}^N (i < j) h_{i,j} \equiv X_{1, \dots, N-2; N-1, N} H_{N-1, N},$$

$$H_{N-1, N} = \binom{N}{2} h_{N-1, N}.$$

Это позволяет придать уравнению Шредингера еще более простой вид

$$X_{1, \dots, N-2; N-1, N} \{QH_{N-1, N} \Phi(1, \dots, N-2; N-1, N) - E\Phi(1, \dots, N-2; N-1, N)\} = 0.$$

Все сказанное выше об уравнениях типа (5) относится также и к этому уравнению, а это значит, что если приравнять нулю выражение из фигурных скобок и отсюда определить компоненту, то построенная из суммы этих компонент с переставленными одночастичными переменными [выражение (4)] волновая функция будет удовлетворять уравнению Шредингера для того же собственного значения E . В [19] рассмотрен частный случай (основное состояние системы трех одномерных частиц с осцилляторным взаимодействием) и получены решения этих уравнений для всех Q , удовлетворяющих уравнению (6). Интересно, что для разных Q получаются разные выражения для компонент, что естественно, так как представление (4) есть разбиение волновой функции на конечное число слагаемых. Взаимонезависимые разбиения такого типа определяются типом уравнений для компонент, который в свою очередь зависит от Q . Простейшее возможное решение уравнения (6) определено в выражении (7). Ниже мы будем пользоваться только им. Функционально-дифференциальные уравнения в таком случае имеют вид

$$H_{N-1, N} X_{1, \dots, N-2; N-1, N} \Phi(1, \dots, N-2; N-1, N) = E\Phi(1, \dots, N-2; N-1, N). \quad (9)$$

В сравнении с многочастичным уравнением Шредингера здесь вместо многочастичного появляется редуцированный двухчастичный гамильтониан, а в качестве неизвестной вместо многочастичной волновой функции выступает компонента, имеющая меньшую степень антисимметрии.

Перед тем как приступить к доказательству эквивалентности этих уравнений исходному уравнению Шредингера и исследованию свойств их решений, определим вид редуцированного гамильтониана для простейших систем и типы переменных, от которых зависит компонента.

Если задача такова, что нет необходимости выделять движение центра инерции системы и можно пользоваться одночастичными переменными, тогда каждое натуральное число i обозначает необходимые дискретные (спиновые, изоспиновые и т. п.) переменные i -й частицы, а также ее пространственные переменные. Если многочастичный гамильтониан

$$H_{1, \dots, N} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N U_i + \sum_{i, j=1 (i < j)}^N V_{i, j},$$

тогда редуцированный двухчастичный определяется как

$$H_{N-1, N} = \binom{N}{2} \left\{ \frac{1}{N-1} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_{N-1} + \Delta_N) + U_{N-1} + U_N \right] + V_{N-1, N} \right\}. \quad (10)$$

Для атома с неподвижным ядром в приближении простого электростатического взаимодействия в результате масштабного преобразования одночастичных переменных можно привести его к виду (с точностью до множителя) [20, 21] гамильтониана некоторого «двухэлектронного атома» с «зарядом ядра», равным $Z^* = Z/(N-1)$, где N — число электронов, а Z — заряд ядра.

Если же необходимо обеспечить трансляционную инвариантность волновой функции, будем считать, что $\Phi(1, \dots, N)$ представляет собой внутреннюю функцию, т. е. не зависит от координаты центра инерции системы. В качестве внутренних переменных будем пользоваться системой нормированных координат Якоби, определяемых по соответствующему дереву [19, 22] с $2N-1$ вершинами, из которых N вершин — первой степени. Их следует расположить на одной линии и пометить числами $1, 2, \dots, N$, которые соответствуют одночастичным координатам $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$. Остальные $(N-1)$ вершин (располагаемых ниже первой группы), порядок каждой из которых равен двум или трем, помеченные числами $1, 2, \dots, N-1$, обозначают координаты Якоби, находимые для i -й вершины по формуле [19]:

$$\xi_i = \sqrt{\frac{p_i q_i}{p_i + q_i}} \left[\frac{1}{p_i} \sum_{j \in \{p_i\}} \mathbf{r}_j - \frac{1}{q_i} \sum_{j \in \{q_i\}} \mathbf{r}_j \right],$$

где p_i — число вершин первой степени, которые могут быть достигнуты при движении от i -й вершины вверх по левому ребру; $\{p_i\}$ — множество их номеров; q_i — то же для правого ребра.

Такая система координат Якоби очень удобна потому, что если определить

$$\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j,$$

переход от одночастичных координат $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ к системе $\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_N$ задается ортогональной матрицей. Таким же образом определяется переход от одного набора координат Якоби к другому, получаемому после перестановки одночастичных координат.

После построения координат Якоби надо к каждой из них отнести некоторые спин-изоспиновые координаты (σ_i и τ_i), руководствуясь таким правилом [19]: сколько вершин первой степени непосредственно соединено с вершиной, соответствующей определенной координате Якоби, столько одночастичных спин-изоспиновых переменных и следует к ней отнести.

Наложим на все деревья Якоби, которые будут использованы ниже, одно общее условие — чтобы последние две вершины, соответствующие переменным \mathbf{r}_{N-1} и \mathbf{r}_N , были соединены непосредственно в вершину третьей степени, т. е. чтобы последняя координата Якоби имела вид

$$\xi_{N-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N).$$

В таком случае редуцированный двухчастичный гамильтониан особенно прост:

$$H_{N-1, N} = \binom{N}{2} \left[-\frac{\hbar^2}{mN} \Delta_{\xi_{N-1}} + V(\sqrt{2} \xi_{N-1}, \sigma_{N-1} \tau_{N-1} \sigma_N \tau_N) \right], \quad (11)$$

т. е. является одночастичным оператором гамильтонова типа. Следуя приведенным рекомендациям, переменные в компоненте такого типа будем группировать таким способом:

$$\Phi(\xi_1, \dots, \xi_{N-2}, \sigma_1 \tau_1 \dots \sigma_{N-2} \tau_{N-2}; \\ (\xi_{N-1}, \sigma_{N-1} \tau_{N-1} \sigma_N \tau_N).$$

Операторы перестановок одночастичных переменных при действии на координаты Якоби генерируют ортогональные их преобразования, поэтому конструкция в левой стороне выражения (9) имеет довольно сложный вид.

Ясности ради выпишем все упоминавшиеся уравнения в случае системы трех одномерных частиц с взаимодействием, не зависящим от спин-изоспиновых переменных. Кроме того, будем рассматривать случай, когда спин-изоспиновая часть волновой функции полностью симметрична. В таком случае уравнение Шредингера имеет вид

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + V(\xi_2) + V\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \xi_1 - \frac{1}{2} \xi_2\right) + \right. \\ \left. + V\left(\frac{\sqrt{3}}{2} \xi_1 - \frac{1}{2} \xi_2\right) \right\} \Psi(\xi_1, \xi_2) = E \Psi(\xi_1, \xi_2).$$

Волновая функция представляется как сумма трех компонент

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \Phi(\xi_1; \xi_2) + \Phi\left(-\frac{1}{2} \xi_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} \xi_2; -\frac{\sqrt{3}}{2} \xi_1 - \frac{1}{2} \xi_2\right) + \\ + \Phi\left(-\frac{1}{2} \xi_1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \xi_2; \frac{\sqrt{3}}{2} \xi_1 - \frac{1}{2} \xi_2\right).$$

Здесь координаты Якоби равны

$$\xi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 + x_2 - 2x_3), \quad \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_3).$$

Единственное условие для компонент состоит в том, что

$$\Phi(\xi_1; -\xi_2) = -\Phi(\xi_1; \xi_2).$$

В таком случае уравнение Фаддеева имеет вид

$$V(\xi_2) \Psi(\xi_1, \xi_2) = \left\{ E + \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} \right\} \Phi(\xi_1; \xi_2),$$

а функционально-дифференциальное уравнение —

$$\left\{ -\frac{2}{3} \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + V(\xi_2) \right\} \Psi(\xi_1, \xi_2) = E\Phi(\xi_1; \xi_2).$$

Как видно, действие оператора перестановок ведет к преобразованиям аргументов компонент, поэтому уравнения следует называть функционально-дифференциальными [23, 24]. Следует, однако, заметить, что их тип является весьма специальным, ранее не изучавшимся. Как раз это обстоятельство и обеспечивает наличие однозначных их решений по крайней мере в пространстве квадратично-интегрируемых функций.

Характерной особенностью уравнений (9) является наличие в них только одного простого оператора гамильтонова типа — редуцированного двухчастичного гамильтониана. Если бы взаимодействие между частицами было трехчастичным, это был бы редуцированный трехчастичный гамильтониан, и так далее. В любом случае он является минимальной существенной частью многочастичного гамильтониана, по которой последний может быть однозначно восстановлен. Нетрудно также соответствующим способом подобрать оператор X и прийти к аналогичным, но более сложным уравнениям [19]. В случае парного взаимодействия редуцированный гамильтониан, как уже отмечалось выше, исключительно прост, и его собственные значения и функции могут быть вычислены с любой точностью. Именно это обстоятельство и подсказывает способ решения уравнений, основанный на разложении компонент по этому базису [25], т. е. полной системе антисимметричных собственных функций задачи

$$[H_{N-1, N} - \varepsilon] \zeta_{\varepsilon\lambda\mu}(N-1, N) = 0. \quad (12)$$

Здесь λ обозначает набор точных квантовых чисел — собственных значений полной системы операторов, коммутирующих с двухчастичным редуцированным гамильтонианом. В случае реалистических межнуклонных взаимодействий, например, это будут квантовые числа $j\lambda st m_t$ (полный момент, четность, спиновый и изоспиновый моменты, а также проекция двухчастичного изоспина). μ — это проекции всех квантовых чисел типа моментов, от которых не зависят

собственные значения задачи ε (в приведенном примере это будет только проекция полного момента m_j , так как в зависимости от m_l меняется вид гамильтониана — в случае системы двух протонов необходимо учесть их кулоновское взаимодействие).

Вообще говоря, эта полная система будет состоять из функций как дискретного, так и непрерывного спектра. Можно, однако, облегчить дальнейшее рассмотрение и ограничиться квадратично-интегрируемыми функциями. Достаточно только вспомнить, что весь предлагаемый формализм предназначен для описания связанных состояний системы. Поэтому функции непрерывного спектра задачи (12) служат только для разложений квадратично-интегрируемых компонент. Вполне законно в таком случае введение другого краевого условия, позволяющего построить полный ортонормированный базис во внутренней области, состоящий из квадратично-интегрируемых функций. Для этого достаточно потребовать равенства нулю всех функций ζ на некотором межчастичном расстоянии R_0 . Его величину можно выбрать так, чтобы удовлетворялись следующие условия. Во-первых, R_0 должно быть значительно больше характерных размеров действия двухчастичного потенциала, а также всей системы в целом. Во-вторых, R_0 целесообразно выбрать так, чтобы значения отрицательных ε , рассчитанные с разумной точностью, не были чувствительны к дальнейшему его увеличению. Практическое обеспечение этих условий в любом случае не представляет больших трудностей.

Перед тем как приступить к разложению компонент, необходимо привести в порядок их обозначения. Простоты ради нигде выше ни у волновых функций, ни у их компонент мы не ставили идентификаторов исследуемого состояния системы, т. е. точных квантовых чисел. Теперь необходимо восполнить этот пробел, имея в виду, что каждая компонента должна характеризоваться теми же квантовыми числами, как и соответствующая волновая функция. Их набор будет разным для различных конкретных систем, так как зависит от типа частиц и характера их взаимодействия. В случае атомного ядра, например, это будут только момент, четность и проекция изоспина. Чем проще потенциал, тем богаче этот набор. Если обозначить все это одной буквой Λ , а все необходимые проекции квантовых чисел типа моментов — буквой M , полный набор идентификаторов состояния системы будет $E\Lambda M$.

В таком случае выражение для компоненты примет вид

$$\begin{aligned} & \Phi_{E\Lambda M}(1, \dots, N-2; N-1, N) = \\ & = \sum_{\varepsilon\lambda\mu} \chi_{E\Lambda M, \varepsilon\lambda\mu}(1, \dots, N-2) \zeta_{\varepsilon\lambda\mu}(N-1, N). \end{aligned}$$

Антисимметричные функции от первых $(N-2)$ якобиевых координат и дискретных переменных, появившиеся в этом разложении,

определяются как

$$\begin{aligned} & \chi_{E\Lambda M, \varepsilon\lambda\mu}(1, \dots, N-2) = \\ = & \sum_{\sigma_{N-1}\sigma_N\tau_{N-1}\tau_N} \int d\bar{\xi}_{N-1} \bar{\xi}_{\varepsilon\lambda\mu}^*(N-1, N) \Phi_{E\Lambda M}(1, \dots, N-2; N-1, N). \end{aligned}$$

Суммирование и интегрирование здесь производится по всем переменным функций ξ . Разложим их по любому полному ортонормированному базису квадратично-интегрируемых функций, зависящих от тех же переменных, по формуле

$$\chi_{E\Lambda M, \varepsilon\lambda\mu}(1, \dots, N-2) = \sum_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}\bar{M}} c_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}\bar{M}, \varepsilon\lambda\mu}^{E\Lambda M} \chi_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}\bar{M}}(1, \dots, N-2).$$

Здесь введено обозначение $\bar{\Gamma}$ для всех остальных квантовых чисел, необходимых для обеспечения полноты базиса. Коэффициенты этого разложения должны удовлетворять очевидному условию

$$c_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}\bar{M}, \varepsilon\lambda\mu}^{E\Lambda M} = c_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}, \varepsilon\lambda}^{E\Lambda} \begin{bmatrix} \bar{\Lambda} & \lambda & \Lambda \\ \bar{M} & \mu & M \end{bmatrix},$$

где правый множитель является произведением коэффициентов Клебша — Гордана для величин типа моментов и кронекеровских дельт — для четностей, проекций изоспина и т. п.

С учетом использованных разложений выражение для компоненты может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} & \Phi_{E\Lambda M}(1, \dots, N-2; N-1, N) = \\ = & \sum_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}, \varepsilon\lambda} c_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}, \varepsilon\lambda}^{E\Lambda} \Phi_{(\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}, \varepsilon\lambda)\Lambda M}^{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}}(1, \dots, N-2; N-1, N), \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} & \Phi_{(\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}, \varepsilon\lambda)\Lambda M}^{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}}(1, \dots, N-2; N-1, N) = \\ = & \sum_{\bar{M}, \mu} \chi_{\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}\bar{M}}(1, \dots, N-2) \zeta_{\varepsilon\lambda\mu}(N-1, N) \begin{bmatrix} \bar{\Lambda} & \lambda & \Lambda \\ \bar{M} & \mu & M \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

Если это выражение подставить в уравнение (9), умножить обе стороны на

$$\Phi_{(\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}, \varepsilon\lambda)\Lambda M}^*(1, \dots, N-2; N-1, N),$$

проинтегрировать по всем координатам Якоби и просуммировать по дискретным переменным, оно принимает вид обобщенной алгебраической проблемы на собственные значения [26]:

$$\mathbf{eXc} = \mathbf{cE}. \quad (15)$$

Строки и столбцы присутствующих в этом выражении матриц обозначаются набором квантовых чисел $(\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}\varepsilon\lambda)$.

Если размерность используемого базиса равна n , $\epsilon_{n \times n}$ является диагональной матрицей, построенной из собственных значений оператора $H_{N-1, N}$. Целесообразно расположить их в порядке неубывания. Это позволяет выбрать удобный порядок учитываемых базисных функций.

Матрица $X_{n \times n}$ является симметрической и действительной, а ее элементы определяются по формуле

$$\int d\Omega_N \Phi_{(\Gamma\Lambda, \epsilon\lambda)_{\Lambda M}}^* (1, \dots, N-2; N-1, N) \times \\ \times X_{1, \dots, N-2; N-1, N} \Phi_{(\bar{\Gamma}\bar{\Lambda}, \epsilon'\lambda')_{\Lambda M}} (1, \dots, N-2; N-1, N). \quad (16)$$

Очевидно, что она диагональна по Λ и не зависит от M .

Вектор-столбец $\epsilon_{n \times 1}$ состоит из неизвестных коэффициентов, присутствующих в выражении (13).

Сама же матрица X обладает целым рядом особенностей, исследование которых очень важно для дальнейшего.

Во-первых, оператор X , определенный выражением (3), является проектором, т. е. удовлетворяет условию

$$X_{1, \dots, N-2; N-1, N}^2 = X_{1, \dots, N-2; N-1, N}. \quad (17)$$

Убедиться в этом можно, если учесть, что каждый должным образом нормированный антисимметризатор

$$A_{1, \dots, N} = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \delta_P \cdot P$$

(δ_P — четность перестановки P) является проектором и содержит в себе антисимметризаторы всевозможных подсистем, т. е.

$$A_{p_1, \dots, p_k} A_{1, \dots, N} = A_{1, \dots, N},$$

если $k \leq N$, $1 \leq p_i \leq N$, $p_i \neq p_j$.

Теперь для доказательства (17) достаточно вспомнить, что

$$A_{1, \dots, N} = X_{1, \dots, N-2; N-1, N} A_{1, \dots, N-2} A_{N-1, N}. \quad (18)$$

Матрица такого оператора в используемом базисе из-за действительности и симметричности будет проекцией [26]. Это означает, что ее собственные значения могут быть равны только нулям или единицам, а собственные векторы y^α , соответствующие единичным собственным значениям, составляют ортонормированную систему. Поэтому сама X может быть представлена в виде

$$X = \sum_{\alpha=1}^r y^\alpha \cdot y^{\alpha+} = F \cdot F^+. \quad (19)$$

Здесь r — ранг матрицы, который просто равен ее следу. Матрица $F_{n \times r}$ образована из векторов y^α :

$$F = \| y^1 y^2 \dots y^r \|^.$$

Крест обозначает транспонирование. Кроме того,

$$F^+ \cdot F = 1. \tag{20}$$

Для некоторых выкладок в дальнейшем удобно построить матрицу ϵ таким образом, чтобы она была положительно определенной. Для достижения этой цели достаточно заметить очевидное свойство уравнений, заключающееся в том, что если к двухчастичному редуцированному гамильтониану прибавить какую-либо константу d , его собственные функции не изменятся, а все собственные значения сместятся на ту же величину. В частности, значение d можно подобрать так, чтобы все ϵ из (12) стали положительными. В результате такой операции спектр всей системы смещается на величину dN ($N - 1$)/2 и изменяются выражения для компонент, однако полная функция сохраняет свой вид.

Ниже будем считать, что в уравнении (15) уже сделана такая операция.

Для диагональной и положительно-определенной матрицы ϵ легко определить такие же матрицы $\epsilon^{1/2}$ и $\epsilon^{-1/2}$, а уравнение привести к виду простой алгебраической задачи на собственные значения:

$$\epsilon^{1/2} [\epsilon^{1/2} F F^+ \epsilon^{1/2} - E_\alpha] \epsilon^{-1/2} c^\alpha = 0.$$

Присутствующая в этом выражении $n \times n$ матрица $\epsilon^{1/2} F F^+ \epsilon^{1/2}$ является действительной симметрической, поэтому все ее собственные значения действительны. Среди них будет не менее чем $(n - r)$ нулевых, а остальные будут равны собственным значениям $r \times r$ матрицы $F^+ \epsilon F$ [26]. Обозначим диагонализующую ее ортогональную матрицу G , а диагональную матрицу собственных значений — E , т. е. определим

$$G^+ F^+ \epsilon F G = E. \tag{21}$$

Теперь уже нетрудно убедиться в том, что и E является положительно-определенной матрицей. Вернемся к исходной задаче

$$[\epsilon F F^+ - E_\alpha] c^\alpha = 0.$$

В скобках здесь присутствует $n \times n$ матрица, но, как мы только что выяснили, ценность представляют только ее собственные векторы, соответствующие ненулевым значениям E_α . Как нетрудно убедиться, они являются столбцами $n \times r$ матрицы $\epsilon F G$, т. е.

$$c^\alpha = (\epsilon F G)_{*\alpha}, \tag{22}$$

а соответствующее

$$E_\alpha = (G^+ F^+ \epsilon F G)_{\alpha\alpha}.$$

Система левых собственных векторов — это r строк матрицы $G^+ F^+$. После соответствующей нормировки можно добиться квази-биортогональности этих систем.

Неожиданно простым в таком формализме оказывается выражение для системы ортонормированных волновых функций. Эlemen-

тарное применение формулы (4) позволяет заключить, что они, как и должно быть, соответствуют той же матрице собственных значений (21) и являются столбцами матрицы

$$FG. \quad (23)$$

Каждая из этих функций антисимметрична, так как соответствует единичному собственному значению антисимметризатора всей системы. Это их свойство можно доказать, если воспользоваться выражением (18), свойствами используемого базиса (14) и тем, что

$$X \cdot FG = FF + FG = FG.$$

В антисимметричном базисе матрица гамильтониана системы эквивалентна матрице оператора

$$H_{N-1, N},$$

и поэтому (21) указывает на ее диагональность.

Это значит, что каждая из базисных функций — столбцов матрицы (23) — является собственной для гамильтониана системы.

Остается только показать, что уравнение Шредингера не имеет других решений, кроме определяемых этим выражением.

Если опустить несущественные здесь индексы и аргументы, уравнение для компонент может быть представлено в виде

$$hY\Phi_0 - E\Phi_0 = 0. \quad (24)$$

Здесь Y — оператор, находящийся в фигурных скобках (3).

Как показано выше, оно получается, если полное уравнение Шредингера записать как

$$Y(hY\Phi - E\Phi) = 0 \quad (25)$$

и потребовать равенства нулю выражения в скобках. Эта операция приводит к однозначному выражению для компоненты Φ_0 [решения уравнения (23)] и волновой функции, согласно определению равной

$$\Psi = Y\Phi_0.$$

Очевидно, что уравнение (25) вообще в принципе может иметь также и другие решения (компоненты волновой функции), для которых

$$hY\Phi_f - E\Phi_f = f; \quad (26)$$

$$Yf = 0. \quad (27)$$

Здесь f — любая функция с должной симметрией, соответствующей симметрии левой части (26), удовлетворяющая условию (27). Из-за положительности всех возможных E и упомянутого условия уравнение (26) может быть представлено в виде

$$hY \left(\Phi_f + \frac{1}{E} f \right) - E \left(\Phi_f + \frac{1}{E} f \right) = 0.$$

Таким образом, оно эквивалентно уравнению (24), решения которого однозначны

$$\Phi_0 = \Phi_f + \frac{1}{E} f.$$

Это означает, что для каждого возможного f получается другое выражение для компонент, однако все они соответствуют тем же собственным значениям уравнения Шредингера и той же волновой функции, так как

$$\Psi = Y\Phi_0 = Y\Phi_f.$$

Заканчивая изучение свойств решений функционально-дифференциальных уравнений, следует обратить внимание на некоторые существенные их особенности.

Ключевыми моментами при решении уравнений являются, очевидно, построение матрицы-проекции X и определение ее спектрального разложения (19). Эти операции в совокупности эквивалентны традиционной проблеме расчета генеалогических коэффициентов [27]. Связь с исходной динамической задачей обеспечивается здесь тем, что базис, в котором определена X , является собственным для редуцированного гамильтониана. Это позволяет в дальнейшем обойтись без каких-либо операций с гамильтонианом или его фрагментами. Ниже будут изложены эффективные методы определения как точных, так и приближенных спектральных разложений X . Что касается собственно ее расчета, то здесь возможны существенные упрощения, обусловленные в первую очередь тем, что базис $\chi_{\overline{GAM}}$ (1, ..., $N - 2$) остался неконкретизированным и его можно выбрать даже таким способом, чтобы недиагональные элементы матрицы гамильтониана стали минимальными. Если исходный базис, как обычно, не связан с динамикой конкретной системы, добиться такого результата на этом этапе невозможно. Единственное неудобство, которое при этом возникает, связано с необходимостью обеспечения антисимметричности соответствующих функций χ , зависящих от координат первых ($N - 2$) частиц. Удобнее всего решить эту проблему, воспользовавшись компонентами с минимальной антисимметрией и уравнениями для их нахождения, определенными в [19, 27]. Антисимметрия этих компонент задается деревом Якоби. Это значит, что базисы для их разложения не требуют практически никакой дополнительной антисимметризации, так как переменные оказываются разбитыми на подсистемы, каждая из которых содержит не более двух наборов одночастичных спин-изоспиновых переменных. Конечно, это сопровождается ростом размерности X , однако принципиальные трудности, обусловленные необходимостью доантисимметризации базиса, оказываются решенными. Уравнения для таких компонент получаются в результате удаления из уравнения Шредингера следующих фрагментов антисимметризатора, аналогично тому, как на первом этапе был удален оператор X . Удастся доказать существование однозначных решений этих уравнений и их однозначное соответствие решениям уравнения Шредингера [27].

3. РАЗЛИЧНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

Отправным пунктом при практическом применении изложенного метода является расчет спектра и собственных функций редуцированного двухчастичного гамильтониана. Проблема эта для оператора (11) может быть решена с любой точностью в результате прямого численного интегрирования (см. [28—30]). Для систем, находящихся во внешнем поле, она сложнее, и для достижения желаемой точности приходится пользоваться или вариационными функциями, или известной методикой, основанной на разложениях по фиксированному одночастичному базису. Второй метод, правда, ведет к худшей сходимости.

Ниже будут приведены аргументы, основанные на изучении физики конкретных систем, позволяющие надеяться, что для получения разумного результата для энергии многочастичной системы достаточно учесть небольшое число возбужденных состояний редуцированного гамильтониана, а сходимость при расширении их набора должна быть хорошей.

Вторая проблема — это построение матрицы X . С первого взгляда может создаться впечатление, что с ростом N число членов в выражении для оператора X станет катастрофически большим и расчет интегралов по формуле (16) будет утомительным. К счастью, это не так. Из-за того, что базис имеет высокую степень антисимметрии, интеграл от оператора X равен интегралу от оператора (см., например, [21]):

$$\binom{N}{2}^{-1} \left\{ 1 - 2(N-2)P_{N-2, N} + \binom{N-2}{2}P_{N-3, N-1}P_{N-2, N} \right\}.$$

Таким образом, в любом случае приходится рассчитывать не более чем два интеграла от различных операторов перестановок. Кроме того, матрица X является проекцией, т. е. обладает заранее известными характеристиками. Любой ее элемент по модулю не больше единицы, след равен рангу, и сумма квадратов всех элементов любой строки (столбца) равна диагональному элементу.

С другой стороны, ее размерность должна быть большой, а в практически наиболее интересных случаях может быть даже бесконечной, поэтому не может быть и речи о том, чтобы строить всю X , а потом искать ее спектральное разложение. Как будет показано, для этой цели достаточно ограничиться расчетом ее фрагментов.

Задача спектрального разложения X (19) состоит в отыскании ортонормированной системы [условие (20)] ее собственных векторов, соответствующих собственному значению, равному единице, или, иначе говоря, в расчете прямоугольной матрицы F размерностью $(n \times r)$, удовлетворяющей условию

$$XF = F.$$

Проекционность же самой X означает, что

$$X \cdot X = X, \quad X^+ = X,$$

а это значит, что каждый ее столбец является ее собственным вектором, соответствующим единичному собственному значению. Увы, они линейно зависимы и не нормированы, однако это является проблемами уже другого уровня сложности, и их решение довольно просто. Максимальное число линейно независимых векторов матрицы X равно r , это и позволяет ограничиться расчетом не более чем r линейно независимых ее строк, т. е. фрагмента размерностью $r \times n$, который можно обозначить как $(X_{11}X_{12})$, где X_{11} — квадратная матрица $r \times r$, а X_{12} — все остальное. Нетрудно заметить, что из-за проекционности матрицы X ее фрагмент X_{11} является определителем Грама этих r векторов. Как известно, для построения ортонормированного базиса достаточно диагонализировать этот грамиан, и простые выкладки приводят к результату

$$F = \begin{pmatrix} DZ_{11}^{1/2} \\ X_{12}^+ DZ_{11}^{-1/2} \end{pmatrix},$$

где D — матрица, диагонализующая грамиан (X_{11}) , а Z_{11} — диагональная матрица его положительных собственных значений, т. е.

$$D^+ X_{11} D = Z_{11}.$$

В таком случае матрица гамильтониана

$$F^+ \epsilon F,$$

собственные значения которой дают спектр многочастичного уравнения Шредингера, принимает вид

$$E = Z_{11}^{-1/2} D^+ \{ X_{11} \epsilon_- X_{11} + X_{12} \epsilon_+ X_{12}^+ \} DZ_{11}^{-1/2}. \quad (28)$$

В предыдущем выражении ϵ — это диагональная матрица собственных значений редуцированного гамильтониана, расположенных в порядке неубывания, в соответствии с порядком расположения базисных функций (14). Эта матрица может быть разбита на две диагональные подматрицы — ϵ_- , содержащую r минимальных собственных значений, и ϵ_+ , содержащую $(n - r)$ остальных.

После диагонализации (28) при помощи некоторой ортогональной матрицы G [размерности $(r \times r)$] получается спектр, содержащий r нижайших собственных значений уравнения Шредингера. Соответствующие собственные функции — это столбцы прямоугольной матрицы

$$f = \begin{pmatrix} DZ_{11}^{1/2} G \\ X_{12}^+ DZ_{11}^{-1/2} G \end{pmatrix}.$$

Эти результаты получаются в приближении конечного ранга матрицы X . При его росте даже расчет фрагмента $(X_{11}X_{12})$ может представлять большие трудности, поэтому необходимо рассмотреть различные приближения. Первое из них состоит в рассмотрении слу-

чая, когда удается рассчитать только m ($1 \leq m \leq r$) строк этого фрагмента, т. е. когда размерность \tilde{X}_{11} равна ($m \times m$). Дополним рассчитанную часть до матрицы-проекции, тогда

$$X = \begin{pmatrix} \tilde{X}_{11} & \tilde{X}_{12} \\ \tilde{X}_{12}^+ & \tilde{X}_{22} \end{pmatrix},$$

где \tilde{X}_{22} — неизвестная подматрица размерностью $(n-m) \times (n-m)$. Опять же, как и ранее, введем ортогональную матрицу ($m \times m$) \tilde{D} , которая диагонализует грамиан первых m строк, т. е. \tilde{X}_{11} . В результате этой операции получаем новую матрицу — проекцию

$$\begin{aligned} \tilde{Z} &= \begin{pmatrix} \tilde{D}^+ & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{X}_{11} & \tilde{X}_{12} \\ \tilde{X}_{12}^+ & \tilde{X}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{D} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \tilde{D}^+ \tilde{X}_{11} \tilde{D} & \tilde{D}^+ \tilde{X}_{12} \\ \tilde{X}_{12}^+ \tilde{D} & \tilde{X}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{Z}_{11} & \tilde{Z}_{12} \\ \tilde{Z}_{12}^+ & \tilde{Z}_{22} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (29)$$

Ее спектральное разложение может быть представлено в виде

$$\tilde{Z} = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{11}^+ & K_{21}^+ \\ K_{12}^+ & K_{22}^+ \end{pmatrix} = KK^+.$$

Размерности матриц здесь таковы: K_{11} — ($m \times m$), K_{12} — ($m \times (r-m)$), K_{21} — ($(n-m) \times m$), K_{22} — ($(n-m) \times (r-m)$). Если $m = r$, то $K_{12} = 0$, $K_{22} = 0$ и получаем, как в предыдущем случае.

Нетрудно заметить, что в выборе K имеется большая свобода, так как

$$KK^+ = (KR)(KR)^+ \equiv MM^+, \quad (30)$$

если преобразование ортогонально, т. е.

$$RR^+ = R+R = 1.$$

Это не противоречит условиям спектрального разложения, так как из-за

$$K+K = 1$$

получается, что также и

$$M+M = (KR)^+(KR) = 1. \quad (31)$$

Ортогональная матрица R размерностью ($r \times r$), как известно, имеет $r(r-1)/2$ свободных параметров. Этот факт позволяет произвольно зафиксировать столько же элементов в матрице M . Оптимальным является требование, чтобы верхний треугольник этой матрицы стал тождественным нулем. В таком случае $M_{12} = 0$, а верхние треугольники M_{11} и M_{22} должны быть заполнены нулями. В та-

ком случае условия (30), (31) ведут к результатам:

$$\mathbf{M}_{11} = \tilde{\mathbf{Z}}_{11}^{1/2}, \quad \mathbf{M}_{21} = \tilde{\mathbf{Z}}_{12}^+ \tilde{\mathbf{Z}}_{11}^{-1/2}, \quad (32)$$

$$\mathbf{M}_{21}^+ \mathbf{M}_{22} = 0. \quad (33)$$

Это позволяет представить матрицу гамильтониана в форме

$$\tilde{\mathbf{E}} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11}^+ \tilde{\mathbf{D}}^+ \tilde{\mathbf{e}}_- \tilde{\mathbf{D}} \mathbf{M}_{11} + \mathbf{M}_{21}^+ \tilde{\mathbf{e}}_+ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{21}^+ \tilde{\mathbf{e}}_+ \mathbf{M}_{22} \\ \mathbf{M}_{22}^+ \tilde{\mathbf{e}}_+ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22}^+ \tilde{\mathbf{e}}_+ \mathbf{M}_{22} \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Здесь аналогично тому, как делалось раньше, матрица \mathbf{e} разбита на подматрицы — $\tilde{\mathbf{e}}_-$, содержащую m минимальных собственных значений редуцированного гамильтониана, и $\tilde{\mathbf{e}}_+$, содержащую $(n - m)$ остальных.

Проведенный переход к матрице \mathbf{M} имеет глубокий физический смысл. Дело в том, что базисные состояния у нас расположены в порядке неубывания ϵ_i — соответствующих собственных значений редуцированного гамильтониана. Диагональность \mathbf{M}_{11} и то, что $\mathbf{M}_{12} = 0$, означает, что только m первых столбцов \mathbf{M} (каждый из них описывает конкретное состояние системы) характеризуются ненулевыми вероятностями m нижайших состояний редуцированного гамильтониана, что обеспечивает опускание вниз соответствующих собственных значений. Диагональные субматрицы $\tilde{\mathbf{E}}$ (34) оказываются четко разделенными по областям распределения их собственных значений, а недиагональные — подавленными из-за условия (33).

Это позволяет ограничиться диагонализацией не всей $\tilde{\mathbf{E}}$, а только ее $(m \times m)$ субматрицы. Если $m = r$, это приводит к точному результату (28), в других случаях, как показывают модельные расчеты, о которых будет упомянуто ниже, имеется неплохая сходимость. Другими словами, такое приближение соответствует предположе-

нию, что ранг матрицы-проекции $\tilde{\mathbf{X}}$ равен m , т. е. числу строк, которые удастся сосчитать. Таким образом, рассмотренный вариант является частным случаем первого. Оба они ведут к верхним границам для энергий. При $m \rightarrow r$ результаты сходятся к точным сверху, так как эта операция соответствует расширению базиса. Сам же точный результат в таком случае соответствует приближению конечного ранга r , что в свою очередь дает лишь верхнюю границу истинного, если задача на самом деле имеет бесконечный ранг.

Может быть, одной из важнейших особенностей метода является то, что он позволяет получить еще легче, чем верхние, сходящиеся к точным нижние границы для энергий, а также соответствующие волновые функции. Идея здесь очень проста. Для начала проиллюстрируем ее на конкретном примере выражения (28). Как выше сказано, собственные значения редуцированного гамильтониана в матрице \mathbf{e} расположены в порядке неубывания. Это значит, что любой

элемент в матрице ε_+ не меньше $(r + 1)$ -го собственного значения, т. е. ε_{r+1} . Приближение

$$\varepsilon_+ = \varepsilon_{r+1} \cdot 1$$

как раз и ведет к нижним границам. Более того, второй член в фигурных скобках в таком случае равен

$$\varepsilon_{r+1} X_{12} X_{12}^+ = \varepsilon_{r+1} (X_{11} - X_{11}^2).$$

Это верно для фрагментов любой матрицы-проекции. В конце концов получается, что в выражении для матрицы гамильтониана, приводящей к нижним границам, фигурирует только X_{11} , т. е. нижние границы могут быть определены для задач бесконечного порядка, когда X_{12} не может быть рассчитан даже в принципе, так как содержит бесконечное число элементов. Конечно, в таком случае нельзя определить полностью и X_{11} , так как и ранг матрицы X наверняка будет бесконечным. Нетрудно заметить однако, что даже в случае, когда определена лишь часть матрицы \tilde{X}_{11} , размерность которой равна $(m \times m)$ ($1 \leq m \leq r$), приближение

$$\tilde{\varepsilon}_+ = \varepsilon_{m+1} \cdot 1$$

ведет к точным нижним границам, так как из-за условия (33) недиагональные подматрицы матрицы \tilde{E} , определяемой выражением (34), равны нулям, а существенная ее часть с минимальными собственными значениями может быть записана в виде

$$\tilde{E}_{11} = \tilde{Z}_{11}^{1/2} \tilde{D}^+ \tilde{\varepsilon}_+ \tilde{D} \tilde{Z}_{11}^{1/2} + \varepsilon_{m+1} (1 - \tilde{Z}_{11}). \quad (35)$$

Чтобы получить разложение по использованным базисным состояниям соответствующих волновых функций, необходимо взглянуть на эту проблему с несколько иной точки зрения.

Все предыдущее рассмотрение, как нетрудно заметить, было основано на том факте, что матрица-проекция X или хотя бы некоторые ее строки уже построены. Разные приближения касались только спектрального ее разложения, если имеющейся информации недостаточно для получения точного результата. В последнем случае мы уже допустили, что известна только квадратная субматрица, размерность которой значительно меньше ранга X , который, кстати, тоже не известен. Теперь уже приходится прибегать к аппроксимациям самой матрицы-проекции (ее восстановлению по известному фрагменту), так как иначе применить развитый формализм нельзя. Итак, рассчитан фрагмент \tilde{X}_{11} размерностью $(m \times m)$. Он принадлежит матрице-проекции, поэтому должен обладать весьма специфическими свойствами. Во-первых, если какой-либо его диагональный элемент равен нулю, значит, также равна тождественным нулям вся строка, будь она хоть бесконечной, и весь столбец, на пересечении которых он стоит. Такая же картина должна наблюдаться и в том случае, когда диагональный элемент равен единице.

Первый случай (нуль на диагонали) означает, что это базисное состояние должно быть исключено из рассмотрения, так как не может появиться в разложении какой бы то ни было антисимметричной функции, а второй — что сама эта базисная функция уже антисимметрична и может рассматриваться отдельно. Если над матрицей-проекцией совершается ортогональное преобразование, эти свойства сохраняются, поэтому без ограничения общности можно считать, что все собственные значения субматрицы \tilde{X}_{11} больше нуля, но меньше единицы. Задача состоит в том, как простейшим образом определить субматрицы \tilde{X}_{12} и \tilde{X}_{22} , дополняющие \tilde{X}_{11} до матрицы-проекции, и найти ее спектральное разложение, т. е. простейшие недостающие фрагменты \tilde{X} и \tilde{F} , связанные соотношениями

$$\tilde{X} \equiv \begin{pmatrix} \tilde{X}_{11} & \tilde{X}_{12} \\ \tilde{X}_{12}^+ & \tilde{X}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{F}_1 \\ \tilde{F}_2 \end{pmatrix} (\tilde{F}_1^+ \tilde{F}_2^+) \equiv \tilde{F} \tilde{F}^+;$$

$$\tilde{F}^+ \tilde{F} = 1.$$

Эти условия уже включают в себя требование наипростейшего продолжения, так как ранг \tilde{X} задается равным рангу \tilde{X}_{11} , который согласно принятым ограничениям равен ее порядку, т. е. m . Удобно над \tilde{X} совершить преобразование типа (29), диагонализующее \tilde{X}_{11} . После этого из условия проекционности сразу же получаем, что

$$\tilde{Z}_{12} \tilde{Z}_{12}^+ = \tilde{Z}_{11} - \tilde{Z}_{11}^2.$$

Простейшее решение этого уравнения есть

$$\tilde{Z}_{12} = \tilde{Z}_{12}^+ = [\tilde{Z}_{11} (1 - \tilde{Z}_{11})]^{1/2}.$$

Далее элементарно получается, что

$$\tilde{F} = \begin{pmatrix} \tilde{D} \tilde{Z}_{11}^{1/2} \\ (1 - \tilde{Z}_{11})^{1/2} \end{pmatrix}.$$

Для матрицы гамильтониана получается уже известный результат (35). Если она приводится к диагональному виду при помощи ортогональной матрицы \tilde{G} , то ее собственные векторы являются столбцами матрицы

$$\tilde{f} = \begin{pmatrix} \tilde{D} \tilde{Z}_{11}^{1/2} \tilde{G} \\ (1 - \tilde{Z}_{11})^{1/2} \tilde{G} \end{pmatrix}. \tag{36}$$

Суть использованного приближения состоит в том, что точно известны только m первых базисных функций, а остальные не опре-

делены. Полученный результат позволяет заключить, что существует возможность так подобрать их, чтобы волновая функция стала антисимметричной. Единственное, что известно об этих дополнительных функциях — это то, что собственное значение редуцированного гамильтониана для каждой из них не ниже ε_{m+1} [первые m минимальных ε_i ($\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots \leq \varepsilon_m$) соответствуют учтенным базисным функциям]. Как раз этот факт и был использован для нахождения нижних границ собственных значений многочастичного уравнения Шрёдингера.

Как известно, методика получения нижних границ Холла — Поста [31, 32] основана в конечном счете на отказе от антисимметричности волновой функции. Наложение дополнительных условий на матрицу плотности [33] позволяет улучшить эти результаты, однако возможность построения сходящихся к точным значениям нижних границ появляется только в результате применения изложенного выше метода, в котором антисимметрия волновой функции обеспечивается, но часть базисных функций остается неопределенной. Важно, что выражение (36) позволяет вычислить суммарный вес этих функций, который задает количественную меру — степень ее неопределенности. Для i -го состояния (i -й столбец $\tilde{\mathbf{f}}$) она равна

$$g_i = \sum_{k=1}^m |\tilde{\mathbf{G}}_{ki}|^2 (1 - \tilde{\mathbf{Z}}_{11})_{kk}.$$

Вес известных базисных состояний равен $1 - g_i$, так как каждая волновая функция нормирована на единицу.

[4. НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В любом приближении изложенный метод решения многочастичного уравнения Шрёдингера ведет к очень простому выражению для энергии системы

$$E_{\Lambda} = \sum_i \varepsilon_i w_{i, \Lambda}. \quad (37)$$

Здесь ε_i — собственные значения редуцированного двухчастичного гамильтониана, а $w_{i, \Lambda}$ для связанных состояний удовлетворяют условиям

$$w_{i, \Lambda} \geq 0, \quad \sum_i w_{i, \Lambda} = 1$$

и поэтому могут быть истолкованы как вероятности заполнения различных i в состоянии системы Λ .

Стандартное выражение такого типа имеет вид

$$E_{\Lambda} = \sum_{i,j} t_{i,j} q_{j,i;\Lambda},$$

где $t_{i,j}$ — величины типа интегралов Тальми, а $q_{j,i;\Lambda}$ — коэффициенты, не поддающиеся столь простой трактовке.

Простота (37) в какой-то мере обманчива, так как если расчет ε_i представляет только некоторые технические трудности, то определение $w_{i,\Lambda}$, которые являются, если быть точным, диагональными матричными элементами редуцированной двухчастичной матрицы плотности системы в представлении собственных функций редуцированного двухчастичного гамильтониана, представляет немалую проблему. В разное время предпринимались неоднократные попытки ее решения [21, 34], однако только результаты, изложенные выше, позволяют более или менее приемлемо ответить на этот вопрос.

Чтобы убедиться в полезности этого выражения и метода в целом, рассмотрим два конкретных примера. Первый — это модель атомного ядра как системы реалистически взаимодействующих нуклонов. Свойства редуцированного гамильтониана в таком случае изучены в [29, 30]. Этот оператор описывает только относительное движение нуклонов, поэтому определение его собственных функций не сложнее соответствующей задачи для дейтрона; кроме того, он имеет очень важное свойство — приведенная эффективная масса в этой формальной структуре, не описывающей какой-либо реальной подсистемы, прямо пропорциональна N . При $N = 2$, когда он совпадает с обыкновенным гамильтонианом двухнуклонной системы, как известно, имеется только одно связанное собственное значение такого оператора в состоянии ${}^3S_1 - {}^3D_1$ — это дейтрон. При $N = 3$ все реалистические межнуклонные потенциалы обеспечивают появление связанного собственного значения в состоянии 1S_0 . При дальнейшем росте N начинают появляться связанные собственные значения также и в других состояниях, в которых сдвиги фаз нуклон-нуклонного рассеяния меняют знак или являются положительными, однако часть каналов, в которых сдвиги фаз отрицательны, остается «закрытой» при любом N . С другой стороны, из выражения (37) явствует, что отрицательные E_Λ возможны только для тех Λ , для которых $\omega_{i,\Lambda}$ велики для отрицательных ε_i (связанные состояния редуцированного гамильтониана) и малы для положительных ε_i , так как индекс суммирования в общем пробегает бесконечный набор значений. Этот набор состоит из всевозможных двухнуклонных состояний (${}^3S_1 - {}^3D_1, {}^1S_0, {}^3P_2 - {}^3F_2, {}^3D_2, {}^3P_0, {}^1D_2$ и т. д.), а также из всевозможных собственных значений редуцированного гамильтониана в этих состояниях. Оказывается, что можно ввести понятие минимального ранга двухчастичной редуцированной матрицы плотности [35], которое определяет набор значений i , соответствующих максимальным $w_{i,\Lambda}$ для каждого определенного состояния системы Λ . Этот набор определяется необходимостью обеспечения точных квантовых чисел для ядерных состояний. С ростом N он стремительно расширяется даже для основных состояний, в то время как появление новых отрицательных ε_i весьма ограничено. В конце концов это приводит к наблюдаемому уменьшению стабильности тяжелых ядер в отношении распада на более легкие фрагменты и обрыву дорожки

стабильности. Самая благоприятная в этом отношении ситуация по всем легчайшим ядрам оказывается для основных состояний простейших систем — t , ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$. Как уже упоминалось, при $N \geq 3$ для реалистических потенциалов имеются отрицательные собственные значения в каналах 1S_0 и ${}^3S_1 - {}^3D_1$. Одновременно для $N \leq 4$ при минимальных возможных J минимальный ранг позволил бы ограничиться только относительными s -состояниями, однако антисимметризовать такую функцию нельзя из-за примеси D -волны в редуцированном гамилтониане. Это заставляет привлечь следующий замкнутый с точки зрения точных квантовых чисел набор каналов, содержащий 3D_1 , который в свою очередь из-за примеси F -состояния в канале ${}^3P_2 - {}^3F_2$ приходится расширять далее, и т. п. Набор, необходимый для обеспечения антисимметрии волновой функции, оказывается бесконечным, однако, как показали точные расчеты [36], примесь высших состояний оказывается подавленной. На нашем языке это понять легко, так как каждое следующее поколение каналов входит с весом, пропорциональным примеси высших волн в состояниях типа ${}^3S_1 - {}^3D_1$, ${}^3P_2 - {}^3F_2$ и т. д. По этой причине вклад каждого следующего набора, грубо говоря, на порядок меньше вклада предыдущего, и в целом это ведет к неплохой сходимости, которая и отмечалась в цитируемой работе. Как явствует из изложенной постановки вопроса, достаточно учесть второе приближение, чтобы выяснить причину уже упомянутых прямых корреляций между различными характеристиками малонуклонных систем. Как и следовало ожидать, в нашем выражении сама примесь D -волны в дейтроне непосредственно не появляется. Вместо нее есть, вообще говоря, нелинейная зависимость от другого параметра — примеси D -волны в канале ${}^3S_1 - {}^3D_1$ соответствующего редуцированного гамилтониана. Оказывается [37], что обе зависимости почти линейны, и это из-за особой важности этого канала при описании малонуклонных систем ведет к упомянутой линейной корреляции. Здесь следует отметить, что изучение природы этих зависимостей очень важно в теории ядра, так как только выход за их рамки позволил бы надеяться на более или менее успешное описание конечных ядер при помощи единого нуклон-нуклонного потенциала. Для таких потенциалов, как потенциал Рида [7] или потенциалы со сверхмягким кором Орсееской группы [38, 39], уже во втором приближении удается воспроизвести тонкости волновой функции, получаемой в результате решения дифференциальных уравнений Фаддеева для тритона [36, 40]. Этот анализ основывается на использовании естественных базисов для разложения ядерных волновых функций [41] и рекуррентной схеме расчета генеалогических коэффициентов [42], поэтому его подробное изложение заняло бы здесь слишком много места, вследствие чего он опускается.

Что касается более тяжелых ядер, то начиная с $N = 5$ принцип Паули требует все возрастающей вероятности двухнуклонных состояний отрицательной четности (если $w_{\pi=-1} \geq 0,25$ для $N = 5$, то

для $N \rightarrow \infty$ уже $w_{\pi=-1} \approx 0,625$) [43]. В то же время для всех исследованных нами потенциалов новые связанные состояния возникают только при $N > 8$. Это позволяет объяснить, почему ни одно ядро с $N \leq 9$ не имеет более одного связанного возбужденного состояния. Более того, большинство из них вообще не имеет связанных состояний или имеет только одно основное такое состояние. Само собой разумеется, что речь здесь идет только о состояниях, которые связаны с точки зрения общепринятого нерелятивистского гамильтониана ядра, учитывающего лишь нуклон-нуклонные сильные и кулоновские взаимодействия. Заметный скачок числа связанных состояний и расстояния до ближайших порогов при $N = 10$ свидетельствуют об относительной устойчивости этих и некоторых более тяжелых ядер и объясняются появлением отрицательного собственного значения в канале ${}^3P_2 - {}^3F_2$. Для разных потенциалов это происходит при разных $8 < N < 10$, так как фазы в высших состояниях определены с большими погрешностями, что позволяет значительно различаться даже достаточно хорошим с точки зрения χ^2 потенциалам. По этой причине разработка эффективных методов расчета вероятностей $w_{i,\Delta}$ представляет очень большой интерес. Дело в том, что при росте энергии фазовый сдвиг все слабее и слабее чувствует тонкости поведения потенциала в области его минимума, в то время как в редуцированном гамильтониане (11) с ростом N уровни, играющие решающую роль при описании ядер, опускаются все глубже в яму и все существеннее зависят от тонкостей ее строения. По этой причине использование ядерных данных при таком подходе может стать действенным инструментом при уточнении самого межнуклонного потенциала.

Что касается других каналов, то связанные состояния в них появляются при дальнейшем росте числа нуклонов до $N = 20$ в выписанной выше последовательности. Более того, в этом интервале изменения N ни в каком двухчастичном состоянии не появляется более одного отрицательного ϵ . При росте j , конечно, разброс результатов для различных потенциалов еще больше, однако сохраняется общая тенденция — обеспечение нужного количества отрицательных ϵ реалистическими потенциалами существенно отстает от запросов стремительно расширяющегося множества состояний, существенно необходимых для обеспечения антисимметричности волновой функции, и поэтому суммарная вероятность состояний с $\epsilon_i > 0$ в выражении (37) становится больше суммарной вероятности связанных состояний в каналах. До поры до времени наличие стабильных ядер обеспечивается тем, что с ростом N нижайшие значения ϵ опускаются все глубже в соответствующие ямы, а положительные группируются около нуля в непрерывном спектре. Однако, как известно, упасть ниже дна невозможно, и поэтому тяжелые ядра либо слабо устойчивы, либо вообще не существуют.

В конце концов выражение (37) правильно передает зависимость энергии связи от числа нуклонов при больших N , так как редуциро-

ванный гамильтониан (11) по сути дела является одночастичным оператором и основной вклад вносят N его нижайших состояний, т. е. $w_{i,\Lambda} \sim N^{-1}$. С другой стороны, $\varepsilon_i \sim N^2$ и поэтому $E_\Lambda \sim N$.

Другой пример из упомянутых выше касается основного состояния (2S) трехэлектронного атома лития и ионов его изоэлектронной последовательности. Он очень важен в методологическом отношении, так как если приближенные собственные функции редуцированного двухэлектронного гамильтониана (10) строятся из некоторого определенного количества базисных одночастичных состояний, возможно как полное построение матрицы-проекции X в этом приближении и расчет «точного» спектра, так и проверка в том же случае метода приближенного решения и системы нижних границ. В рассматриваемом случае, когда двухчастичные функции построены из одночастичных, приходится решать только одну динамическую задачу, заключающуюся в диагонализации матрицы редуцированного гамильтониана. Качество результата при этом в первую очередь зависит от базиса одночастичных функций. Следуя рекомендациям [41], их выбрали как продолжение, дополняющее систему функций, являющихся собственными для некоторого интегрального оператора, ядро которого строилось из двухпараметрических вариационных функций. Если учитываются только одночастичные s -состояния, такой базис из четырех функций обеспечивает для полных энергий H^- и He (редуцированный двухэлектронный гамильтониан соответствует $Z^* = 3/2$, т. е. является промежуточным) следующие результаты (все ниже—абсолютные значения в атомных единицах энергии): 0,5141 и 2,8787 (в приближении Хартри—Фока получается соответственно 0,4879 и 2,8617, а радиальные пределы, т. е. лучшие результаты при учете только s -состояний, равны соответственно 0,5145 и 2,8790). Базисный набор для разложения компонент волновой функции трехэлектронного атома в таком случае содержит 64 функции. Это равно размерности матрицы X , ранг которой оказывается равным 20. Важно, что для расчета самой матрицы X , а также матрицы гамильтониана E (28) не приходится рассчитывать даже интегралы перекрытия базисных функций. Характерные окончательные результаты проиллюстрируем на примере атома лития. В приближении Хартри—Фока получается для полной энергии 7,433, а точный результат равен 7,478. Наши результаты в s -приближении равны — «точный» 7,454, а нижнее приближение к нему — 7,466. Из-за конечности ранга X оно не совпадает с «точным». Неопределенность соответствующей волновой функции составляет 1,4%.

Как хорошо известно, такие общепринятые методы расчета атомных ядер, как трансляционно-инвариантная модель оболочек или метод гиперсферических функций, оказываются малоприменимыми при попытке их непосредственного применения к расчету атомов [44, 45]. В то же время атом — это система электронов, взаимодействие между которыми характеризуется отталкивательным «кором» такого же

типа, как в потенциале Рида. Это обстоятельство роднит обе задачи, и полученные конкретные результаты указывают на важность учета специфики задачи уже на начальных этапах ее решения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Большое число интереснейших явлений в многофермионных системах, начиная со странностей малонуклонных ядер и кончая высокотемпературной сверхпроводимостью, обусловлено двухчастичными динамическими корреляциями, порождаемыми тонкостями характера взаимодействия. Кроме них существуют также, если можно так выразиться, кинематические корреляции, обусловленные необходимостью обеспечения антисимметричности волновой функции и точных квантовых чисел состояний системы. Пренебрежение ими, в отличие от динамических корреляций, вообще не допустимо, так как без точных квантовых чисел невозможна идентификация состояний, а необеспечение антисимметричности волновой функции ведет к появлению лишних, нефизических решений уравнения Шредингера. Наиболее трудоемкой оказывается именно последняя операция, и поэтому, как правило, техника генеалогических коэффициентов [2, 3, 46] всегда разрабатывалась вне связи с динамикой системы, а исходя в первую очередь из соображений упрощения расчета, доведение которого до конца всегда является непростой задачей. Большинство высших симметрий, удобных для классификации генеалогических коэффициентов, на поверку оказываются неработоспособными в условиях конкретной динамики. Более того, даже если какая-то из них является преобладающей, как правило, оказывается, что некоторые важные особенности системы определяются как раз малой примесью других состояний. Особенно резко эти противоречия проявляются в теории ядра, где динамические корреляции из-за присутствия кора играют особо важную роль. Иначе говоря, трудности, обойденные на стадии антисимметризации, выступают с новой силой при решении динамической задачи.

Изложенный выше метод по сути своей в конце концов сводится к построению расчетной схемы, в которой антисимметризация (расчет и спектральное разложение матрицы X) делается для базиса, приспособленного к конкретной динамике, так как применяется разложение по собственным функциям редуцированного двухчастичного гамильтониана. Именно этот этап и оказался наиболее трудоемким при такой постановке вопроса, однако методы, изложенные выше в разд. 3, позволяют его существенно упростить.

Оказывается, что затраченная работа окупается, так как вместо антисимметризации каждой базисной функции при традиционном подходе приходится антисимметризовать один раз всю волновую функцию, в которой полностью учтены динамические корреляции. Это последнее утверждение основано на том, что если используются собственные функции редуцированного двухчастичного гамильтониана-

на, больше не приходится совершать никаких операций с гамильтонианом системы или его фрагментами.

Существенной особенностью метода является характер сходимости собственных значений. Если, как принято, каждая базисная функция антисимметрична и применяется разложение по полному их набору, то при его расширении, если специально об этом позаботиться, собственные значения уравнения Шрёдингера сходятся к точным сверху. У нас используется базис функций, которые имеют степень антисимметрии компоненты, т. е. меньшую, чем у волновой функции. Если ранг волновой функции бесконечен, то для обеспечения ее антисимметричности необходимо привлечь бесконечное число таких базисных функций. Так как это практически неосуществимо, приходится пользоваться конечным набором и функция оказывается принадлежащей подпространству, которое несколько шире подпространства антисимметричных функций. Это позволяет в результате приложения специальных усилий обеспечить равномерную сходимость к точным значениям снизу. Если в общепринятом случае только, как правило, по характеру сходимости можно судить о близости результата к точному, то у нас для этой цели существует четкая численная мера. Ее происхождение обязано тому факту, что, каков бы ни был ранг волновой функции, она в любом случае оказывается нормированной. При использовании конечного числа базисных состояний можно легко определить суммарный вес, который в нормировку должны внести остальные, неопределенные. Это и названо степенью неопределенности. Из-за того, что базисные функции располагаются в определенной последовательности, знание этой величины позволяет делать заключение о возможной неопределенности других характеристик системы в изучаемом состоянии.

В конце концов метод редуцированного гамильтониана приводит к простейшим возможным выражениям для собственных значений уравнения Шрёдингера (37). Это тоже немаловажное обстоятельство, так как прозрачность и ясный физический смысл этого выражения позволяют увидеть обычно в результате расчета теряемую связь между характером двухчастичного потенциала и свойствами многочастичной системы и делать качественные, а иногда даже количественные заключения о ее свойствах на любом этапе расчета. Здесь напрашивается прямая аналогия с задачей системы не взаимодействующих фермионов. Общеизвестно, что собственными функциями такого многочастичного уравнения Шрёдингера являются определители, если они построены из одночастичных функций, собственных для соответствующего одночастичного (редуцированного одночастичного в применяемой терминологии) гамильтониана. В любом другом случае пришлось бы взять линейную комбинацию определителей, и решение задачи, а также выражения для собственных значений значительно усложнилось бы.

Заканчивая изложение, необходимо обратить внимание еще на одно обстоятельство. Внимательный читатель, возможно, уже давно

заметил, что в методе решения начисто исчезло понятие компоненты, а окончательные результаты, если хорошо поупражняться, можно воспроизвести, беря начало непосредственно от уравнения Шредингера. Так-то это так, но эта ясность наступает лишь после того, когда все выражения уже выписаны, и уравнения для компонент важны в том отношении, что указывают наиболее прямой и естественный путь для их получения. Несомненно, значение уравнений этим не ограничивается — приведенный вывод касается только метода редуцированного гамильтониана, т. е. весьма специфического метода их решения в частном случае связанных состояний, в котором выражения для компонент (22) оказываются даже сложнее выражений для волновых функций (23) и теряет смысл операция их промежуточного определения. При любом другом способе решения использование симметрии уравнения Шредингера для системы тождественных частиц ведет к существенным упрощениям задачи, так как редукция этого уравнения к уравнению для компонент. впервые совершенная в классической работе Фаддеева, как показано выше, означает не что иное, как удаление фрагментов антисимметризатора из многочастичного уравнения Шредингера.

Автор искренне благодарит В. Б. Беляева, Б. Н. Захарьева, С. П. Меркурьева, И. Н. Михайлова, В. Г. Неудачина, И. В. Сименога, Ю. А. Симонова, Ю. Ф. Смирнова, Я. А. Смородинского и Г. Ф. Филиппова за полезные обсуждения работы, а также К. М. Эриксона за помощь при проведении расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бор О., Моттelson Б. Структура атомного ядра: Пер. с англ. М.: Мир, 1971. Т. 1.
2. Неудачин В. Г., Смирнов Ю. Ф. Нуклонные ассоциации в легких ядрах. М.: Наука, 1969.
3. Ванас В. Алгебраические методы в теории ядра. Вильнюс: Минтис, 1971.
4. Симонов Ю. А. // ЯФ. 1966. Т. 3. С. 630—638.
5. Филиппов Г. Ф., Овчаренко В. И., Смирнов Ю. Ф. Микроскопическая теория коллективных возбуждений атомных ядер. Киев: Наукова думка, 1981.
6. Вильдермут К., Тан Я. Единая теория ядра: Пер. с англ. М.: Мир, 1980.
7. Reid R. V. // Ann. Phys. 1968. Vol. 50. P. 411—448.
8. Strayer M. R., Sauer P. U. // Nucl. Phys. 1974. Vol. A231. P. 1—12.
9. Pace E., Nunberg F., Proserpi D. // Few-body systems and electromagnetic interactions. (Lecture Notes in Physics. Vol. 86. Berlin, Springer, 1978). P. 256—287.
10. Бете Г. Теория ядерной материи: Пер. с англ. М.: Мир, 1974.
11. Соловьев В. Г. Теория сложных ядер. М.: Наука, 1971.
12. Helmbrecht U., Zabolitzky J. G. // Nucl. Phys. 1985. Vol. A442. P. 109—121.
13. Горбатов А. М., Бурсак А. В., Крылов Ю. Н., Рудяк Б. В. // ЯФ. 1984. Т. 40. С. 364—376.
14. Харченко В. Ф. // ЭЧАЯ. 1979. Т. 10. С. 884—936.
15. Фаддеев Л. Д. // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1459—1467.
16. Якубовский О. А. // ЯФ. 1967. Т. 5. С. 1312—1320.
17. Laverne A., Gignoux C. // Nucl. Phys. 1973. Vol. A203. P. 597—608.
18. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.

19. Kamuntavičius G. P.//Few-Body Systems. 1986. Vol. 1. P. 91—109.
20. Ворт F.//Z. Phys. 1959. Vol. 156. P. 348—359.
21. Coleman J. J.//Rev. Mod. Phys. 1963. Vol. 35. P. 668—687.
22. Смирнов Ю. Ф., Шитикова К. В.//ЭЧАЯ. 1977. Т. 8. С. 847—910.
23. Мышкис А. Д. Линейные дифференциальные уравнения с запаздывающим аргументом. М.: Наука, 1972.
24. Хейл Дж. Теория функционально-дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1984.
25. Камунтавичюс Г.-П. П.//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1987. Т. 51. С. 8—14.
26. Ланкастер П. Теория матриц: Пер. с англ. М.: Наука, 1978.
27. Камунтавичюс Г.-П. П.//ТМФ. 1988. Т. 74. С. 423—429.
28. Lovitch L., Rosati S.//Phys. Rev. 1965. Vol. 140B. P. 877—882.
29. Бернотас А. П., Камунтавичюс Г.-П. П.//Литовский физический сборник. 1981. Т. 21, № 5. С. 3—14.
30. Бернотас А. П., Камунтавичюс Г.-П. П.//Литовский физический сборник. 1981. Т. 21, № 6. С. 6—17.
31. Hall R. L., Post N. R.//Proc. Phys. Soc. 1967. Vol. 90. P. 381—396.
32. Hall R. L.//Proc. Phys. Soc. 1967. Vol. 91. P. 16—22.
33. Камунтавичюс Г.-П. П.//ЯФ. 1981. Т. 34. С. 661—670.
34. Местечкин М. М. Метод матрицы плотности в теории молекул. Киев: Наукова думка, 1977.
35. Бернотас А. П., Бичкуте А. В., Камунтавичюс Г.-П. П.//Литовский физический сборник. 1983. Т. 23. № 5. С. 10—21.
36. Laverne A., Gignoux C.//Nucl. Phys. 1973. Vol. A203. P. 597—608.
37. Kamuntavičius G. P.//XI European conference on few-body physics. Abstracts of contributed papers. Fontevraud. 1987. P. 26.
38. De Tourreil R., Sprung D. W. L.//Nucl. Phys. 1973. Vol. A201. P. 193—214.
39. De Tourreil R., Rouben B., Sprung D. W. L.//Nucl. Phys. 1975. Vol. A242. P. 445—460.
40. Payne G. L., Friar J. L., Gibson V. F., Afnan I. R.//Phys. Rev. C. 1980. Vol. 22. P. 823—831.
41. Камунтавичюс Г.-П. П.//Литовский физический сборник. 1986. Т. 26. С. 123—131.
42. Камунтавичюс Г.-П. П.//Литовский физический сборник. 1988. Т. 28. С. 135—147.
43. Бернотас А. П., Камунтавичюс Г.-П. П. Микроскопические расчеты легких ядер. Калинин: КГУ, 1981. С. 15—21.
44. Мошинский М. Гармонический осциллятор в современной физике: Пер. с англ. М.: Мир, 1972.
45. Эфрос В. Д. Препринт ИАЭ-3878/2. М., 1984.
46. Fano U., Racah G. Irreducible tensorial sets. N. Y.: AP, 1959.