ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 4, № 2 (2000) с. 124–140

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No. 2 (2000) p. 124–140

ПРЕЦИЗІЙНІ ВАРІЯЦІЙНІ РОЗРАХУНКИ ЕНЕРҐЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ КУЛОНОПОДІБНИХ СИСТЕМ ТРЬОХ ТА ЧОТИРЬОХ ЧАСТИНОК

С. М. Бубін[1], І. В. Сименог[1,2]
[1] *Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, пр. Глушкова, 6, Київ, 03127, Україна*
[2] *Інститут теоретичної фізики імені М. М. Боголюбова НАН України, вул. Метрологічна, 14–б, Київ, 03143, Україна*
(Отримано 30 грудня 1999 р.)

На основі варіяційного методу Гальоркіна з ґауссовим базисом розглянуто зв'язані стани квантових кулоноподібних систем тотожних ґравітуючих частинок — трьох частинок з різними типами перестановної симетрії хвильових функцій та чотирьох частинок з повносиметричними функціями. Виконано якісний аналіз енерґетичних спектрів. Розглянуто внесок ястровських кореляцій до енергії основного стану трьох частинок. Проведено прецизійні розрахунки енерґій для основного й декількох збуджених станів із нульовим орбітальним моментом. Для різних енерґетичних станів проведено з високою точністю розрахунки й виконано аналіз розмірів систем, розподілів густин та формфакторів, парних кореляційних функцій та розподілів за імпульсами. Дано оцінку енерґетичних рівнів систем частинок з потенціялами взаємодії типу Юкави. Обговорено методику проведення високоточних варіяційних розрахунків, значну увагу звернуто на проблему вибору нелінійних варіяційних параметрів.

Ключові слова: квантова проблема декількох тіл, кулоноподібні системи, ґравітуючі частинки, ґауссовий базис, стохастичний варіяційний метод, енерґетичні спектри.

PACS numbers: 02.70.–c, 03.65.Ge, 31.15.Pf

ВСТУП

Останнім часом досягнуто суттєвого проґресу в ділянці теоретичних досліджень квантових систем декількох частинок різної природи. Це викликано двома обставинами: розробкою і практичним оволодінням ефективними методами розв'язків багатовимірних рівнянь Шредингера для невеликої кількости частинок та появою комп'ютерів з достатньо великою обчислювальною потужністю. Завдяки цьому з'являються цікаві можливості для прецизійних розрахунків й аналізу систем декількох частинок, які раніше були недосяжними, виявлення тонких фізичних ефектів у структурних особливостях енерґетичних станів, а також надійного обґрунтування точности та области застосовности традиційних наближених методів. Насамперед це стосується фізики різноманітних систем частинок з кулоновою взаємодією, зокрема легких атомів та молекул, мезомолекулярних задач, систем ґравітуючих частинок, а також малонуклонних та мультикваркових систем й таке інше. Для подібних систем з відносно невеликою кількістю ступенів вільности стало можливим знаходити всі основні їхні характеристики на основі фундаментальних квантово–механічних принципів без використання апріорних наближень.

Серед різноманітних наближених методів дослідження невеликої кількости частинок найбільшого поширення набули: варіяційний метод та його варіянти, такі, як метод осциляторного базису, гіперсферичних гармонік, метод ґауссового та експонентного базисів і наближення кореляційних факторів Ястрова; метод рівнянь Фадєєва; адіябатичне представлення; кластерні методи; різноманітні підходи типу стохастичного методу Монте–Карло. Кожний з цих методів має притаманні йому переваги, що залежать від специфіки обговорюваної задачі. У випадку зв'язаних станів систем частинок з достатньо довільними потенціялами взаємодії на особливу увагу заслуговують варіяційні методи [1,2]. Їм характерні відносна простота, висока ефективність, універсальність — тому саме з використанням варіяційних методів стало можливим проведення високоточних розрахунків [3].

Основою варіяційних методів є принцип Рітца — знаходження мінімуму енерґетичного функціонала

$$E = \min_{\psi} \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{1}$$

квантової системи з гамільтоніяном H при умовах ортогональности між собою пробних хвильових функцій ψ для різних станів, коли в остаточному підсумку можуть бути знайдені відповідні точні хвильові функції й енерґетичний спектр. Варіяційний принцип для енерґетичного спектра, коли хвильові функції різних станів автоматично ортогональні, реалізується в універсальній варіяційно–проекційній схемі Релея–Рітца–Тимошенка–Бубнова–Гальоркіна (РРТБГ) [1]. Якщо хвильову функцію записати як лінійну комбінацію

$$\psi = \sum_{i=1}^{\mathcal{K}} c_i \phi_i \tag{2}$$

із повного набору базисних функцій $\{\phi_i\}$ (ϕ — представлення), тоді реалізація принципу Рітца (1) зводиться до узагальненої алґебричної задачі на власні значення

$$Hc = ESc \,, \tag{3}$$

де c — $\mathcal{K}$–компонентний вектор коефіцієнтів c_i, а елементами матриць H і S є

$$H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle \,, \qquad S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \,. \tag{4}$$

Задача Гальоркіна (3) для повного базису з $\mathcal{K} \to \infty$ є точним матричним представленням (ϕ–представлення) рівняння Шредингера.

При виборі базисних функцій у розкладі (2) можливі два полярні підходи: 1) вибрати базисні функції, які б якомога ліпше апроксимували точну хвильову функцію найменшою кількістю доданків, хоча тоді матричні елементи не завжди можуть бути знайдені аналітично, а також можуть бути досить громіздкими, так що доведеться користуватися складними квадратурними формулами або використовувати стохастичні методи типу Монте–Карло; 2) вибирати базисні функції таким чином, щоб матричні елементи обраховувалися аналітично, але тоді необхідна кількість базисних функцій може бути доволі великою. У сучасних розрахунках переважає, як правило, другий підхід. А серед найпопулярніших базисів використовуються базиси гілерасового, експонентного (слетерового), ґауссового та осциляторного типу. Перші два типи базисів у застосуванні до кулоноподібних систем, хоча і є здебільшого привабливішими, однак для більш ніж трьох частинок спричиняють серйозні проблеми з отриманням аналітичних виразів для матричних елементів. Так, для експонентних базисних функцій метод розрахунку матричних елементів для чотиричастинкових систем є доволі складним і становить зміст окремих праць (див. [4,5]), а для випадку систем більшої кількости частинок подібні методи на сьогодні взагалі ще не розроблені. Осциляторний базис же часто виявляє дуже повільну збіжність, навіть при оптимальному відборі найважливіших базисних функцій [6]. Найбільш універсальним і достатньо ефективним є використання ґауссового варіяційного базису в задачах декількох частинок різної природи [7–15]. Розрахунок матричних елементів на цих функціях не становить труднощів для довільної кількости частинок і практично для довільної взаємодії. Це зумовлює широку популярність цього базису в розрахунках систем трьох, чотирьох та більшої кількости частинок. Вигляд базисних функцій ґауссового типу для системи частинок у випадку нульового момента кількости руху є таким:

$$\phi_i = \exp\left\{ -\sum_{k<l}^{N} a^i_{kl} r^2_{kl} \right\}. \tag{5}$$

Тут $r_{kl} = |\mathbf{r_k} - \mathbf{r_l}|$ — міжчастинкові відстані, а a^i_{kl} — так звані нелінійні варіяційні параметри (обернені квадрати характерних розмірів за кожною з відстаней між частинками). При наявності тотожних частинок функції (5) необхідно відповідним чином симетризувати. Кількість внутрішніх координат системи N частинок при $N \geq 3$ є $3(N-2)$, за винятком трьох координат центра мас та трьох кутів Ойлера для станів з нульовим повним орбітальним моментом. Відносних же відстаней r_{ij} повна кількість $N(N-1)/2$, і цього достатньо для повного опису внутрішньої динаміки.

Однією з найпростіших, і водночас нетривіяльних у теоретичному сенсі, є кулоноподібна система ґравітуючих частинок із парним ньютоновим потенціялом притягування (такі системи називають також системами самоґравітуючих частинок), яку ми і будемо тут досліджувати. У безрозмірних одиницях гамільтоніян цієї системи має вигляд:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \Delta_i - \sum_{i<j}^{N} \frac{1}{r_{ij}}. \tag{6}$$

Ця задача становить передусім значний методичний інтерес, як одна з еталонних фундаментальних й універсальних задач квантової механіки. За своїм значенням для загальної теорії ця задача може поступитися хіба що еталонній задачі про N–частинковий гармонічний осцилятор. Але навіть задача трьох ґравітуючих частинок не допускає точного аналітичного розв'язку. Тому досить важливим є дослідження таких еталонних систем сучасними наближеними методами. Окрім того, ця задача має й деякі прикладні застосування в астрофізиці [16,17], теорії поля [18], а також як основа наближення сильного зв'язку в ядерних системах [19] та мультикваркових системах [20].

Ми докладно дослідили найнижчі зв'язані стани систем трьох та чотирьох ґравітуючих частинок з нульовим орбітальним моментом. Для системи трьох частинок розглянули стани з усіма можливими типами симетрії хвильової функції. Було проведено високоточні варіяційні розрахунки всіх основних характеристик цих систем і встановлено нові закономірності щодо структури збуджених станів, а також дано якісний аналіз отриманих результатів.

I. ЯКІСНИЙ АНАЛІЗ І ТРАДИЦІЙНІ ВАРІЯЦІЙНІ ОЦІНКИ ЕНЕРҐІЇ ТРЬОХ ЧАСТИНОК

У випадку слабкозв'язаних систем щодо порога розвалу на простіші підсистеми якісну інформацію про структуру системи декількох частинок можна отримати на основі кластерних представлень. Такий аналіз кластерного наближення дає змогу порівняти ці якісні результати з результатами високоточних варіяційних розрахунків і дати оцінку якості кластерних наближень.

Для системи трьох ґравітуючих частинок з гамільтоніяном

$$H = -\frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3\right) - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} \qquad (7)$$

обмежимося спочатку розглядом станів з повністю симетричними за перестановками частинок хвильовими функціями (три ґравітуючі бозони). У кластерному наближенні виділимо підсистему з двох частинок (кластер типу воднеподібного атома). Третя ж частинка вважається слабкозв'язаною і знаходиться від нього достатньо далеко. Тоді в безполяризаційному кластерному наближенні варіяційну хвильову функцію системи можно зобразити як добуток двох функцій

$$\psi_\nu = \varphi_0(\xi) f(\eta), \qquad (8)$$

де φ_0 — хвильова функція зв'язаного стану підсистеми першої та другої частинки (кластер — основний стан воднеподібного атома), а f — функція, що описує рух третьої частинки в полі двох інших. Тут $\boldsymbol{\xi}$ та $\boldsymbol{\eta}$ — координати Якобі:

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \ , \quad \boldsymbol{\eta} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} - \mathbf{r}_3 \ . \qquad (9)$$

Гіперрадіус визначається як

$$\rho^2 = \frac{1}{2}\xi^2 + \frac{2}{3}\eta^2 \ . \qquad (10)$$

Слід зауважити, що функція (8) є симетричною лише за перестановками перших двох частинок і для повноти бажано симетризувати її за перестановками всіх частинок, щоб урахувати тотожність. Тут при якісному аналізі для спрощення розглянемо лише безполяризаційне наближення, коли симетризація не проводиться. Для збуджених станів, які відповідають великим середнім відстаням між частинками, обмін, а тому і симетризація, відіграє невелику роль.

Використавши пробну варіяційну функцію (8) та явний вигляд двочастинкової хвильової функції φ_0

$$\varphi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\, e^{-\xi/2},$$

з проекційного варіяційного принципу

$$\langle \varphi_0 | H - E | \psi_\nu \rangle = 0 \qquad (11)$$

отримуємо рівняння Шредингера для руху третьої частинки

$$\left[-\frac{3}{4}\Delta_{\boldsymbol{\eta}} + \left\langle \varphi_0(\xi) \middle| -\frac{1}{|\boldsymbol{\xi}/2 + \boldsymbol{\eta}|} - \frac{1}{|-\boldsymbol{\xi}/2 + \boldsymbol{\eta}|} \middle| \varphi_0(\xi) \right\rangle\right] |f(\eta)\rangle = \left(E - E_0^{(2)}\right) |f(\eta)\rangle. \qquad (12)$$

Тут енерґія двочастинкового порога розвалу $E_0^{(2)} = -1/4$. Для ефективного потенціялу взаємодії $V_{\mathrm{eff}}(\eta)$, створеного першими двома частинками, маємо

$$V_{\mathrm{eff}}(\eta) = -\frac{2}{\eta} + \frac{2}{\eta}(1+\eta)e^{-2\eta} \ . \qquad (13)$$

Цей потенціял не має синґулярности на малих відстанях (за рахунок "розмазаности" підсистеми) і має кулонову асимптотику, тоді в системі існує нескінченна кількість рівнів, які згущуються поблизу двочастинкового порога

$$E_n - E_0^{(2)} \cong -\frac{4/3}{(n+1)^2} \ , \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad (14)$$

Результати розрахунку повних енерґій основного та перших збуджених станів з нульовим орбітальним моментом $L=0$ задачі (12) безполяризаційного кластерного наближення наведено в таблиці 1. Цей енерґетичний спектр можна з урахуванням (14) феноменологічно екстраполювати і на довільні збуджені стани (тим точніше, чим вищий збуджений стан)

$$E_n \cong -\frac{1}{4} - \frac{4/3}{(n+1)^2} + \frac{0.927}{(n+1)^3} - \frac{0.358}{(n+1)^4} + \ldots \ . \qquad (15)$$

Подані в таблиці 1 результати для нульового орбітального моменту (та їх феноменологічна екстраполяція на високозбуджені стани) є верхньою варіяційною оцінкою таких енерґетичних станів. Зауважимо, що з (12) легко отримати й оцінку для рівнів з довільним орбітальним моментом. Підкреслимо, що для всіх орбітальних моментів енерґетичний спектр є безмежним.

Розглянемо тепер верхню оцінку енерґії основного стану трьох частинок у наближенні одночастинкового середнього поля. Як відомо [21–29], система ґравітуючих частинок з гамільтоніяном (6) належить до класу квантових систем, для яких наближення самоузгодженого середнього поля Гартрі–Фока є асимптотично точним розв'язком у границі $N \to \infty$. Тоді для повносиметричних станів системи (6) для енерґій основних станів з довільною кількістю частинок асимптотично точною верхньою оцінкою є [21,25]

$$E \cong -s(N-1)N^2 \tag{16}$$

(тут правильно враховано рух центра мас), де величина s визначається одночастинковим наближенням середнього поля Гартрі і її чисельне значення таке [18,17]:

$$s = 0.05426\ . \tag{17}$$

Тоді з (16) і (17) для енерґії основного стану трьох частинок маємо

$$E_0 \cong -0.9767\ , \tag{18}$$

що дещо точніше від результату з таблиці 1.

Стан	E
основний	-0.9292
1–й збудж.	-0.4881
2–й збудж.	-0.3682
3–й збудж.	-0.3203
4–й збудж.	-0.2965
5–й збудж.	-0.2830

Таблиця 1. Енерґетичний спектр системи трьох ґравітуючих бозонів з нульовим повним моментом у кластерному безполяризаційному наближенні.

Для основного повносиметричного стану системи трьох ґравітуючих бозонів цікаво розглянути точніші прості наближення. У праці [30] вказано на винятково високу якість пробних хвильових функцій експонентного типу в оцінках знизу для енерґії основного стану систем ґравітуючих бозонів. Це було підтверджено й результатами праць [31,32], де проведено прості варіяційні верхні оцінки на таких функціях для систем трьох та чотирьох частинок. Зупинимось докладніше на цих оцінках із використанням однієї експонентної функції. Їхня привабливість полягає ще й у тому, що їх можна провести в явному аналітичному вигляді, без якихось громіздких чисельних розрахунків. Використаємо пробну функцію

$$\Phi_\beta = e^{-\beta(r_{12}+r_{13}+r_{23})}, \tag{19}$$

що є частинним випадком функцій ястровського типу. Оптимальне значення параметра β та верхню оцінку $\overline{E}$ енерґії основного стану знаходимо з умови мінімуму енерґетичного функціонала (1). Розрахунок необхідних матричних елементів досить просто провести в периметричних координатах: $u = r_{12} + r_{13} - r_{23}$, $v = r_{12} - r_{13} + r_{23}$, $w = -r_{12} + r_{13} + r_{23}$. Обчислення середнього значення гамільтоніяна дає

$$\overline{E} = \frac{30}{7}\beta^2 - \frac{30}{7}\beta\ , \tag{20}$$

що при оптимальному значенні $\beta = 1/2$ становить

$$\overline{E} = -\frac{15}{4} = -1.07143\ . \tag{21}$$

Цей результат уже суттєво ліпший від наведеного в таблиці 1 у кластерному наближенні та від (18) і досить близький (див. далі) до “точного” варіяційного розрахунку енерґії основного стану, який становить

$$E_0 = -1.07177937297\ . \tag{22}$$

Відзначимо, що точність оцінки (21) становить чотири знаки і є достатньо добрим результатом, ураховуючи, що сама функція (19) має досить простий вигляд і всі розрахунки виконуються явно. Це вказує на високу якість пробної функції (19). Варіяційні верхні оцінки на інших простих пробних функціях такі: осциляторне наближення $\exp(-\rho^2)$ дає $E_0 = -3/\pi = -0.9549$; нульове наближення гіперсферичного базису $\exp(-\rho)$ дає $E_0 = -(16/5\pi)^2 = -1.0375$ [6] (тут ρ — гіперрадіус (10)).

Використаємо функцію (19) для оцінки енерґії основного стану знизу за формулою Темпла

$$E > \underline{E} = \langle H\rangle - \frac{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2}{E_1 - \langle H\rangle}\ , \tag{23}$$

тут E_1 — енерґія першого збудженого стану тої ж симетрії, що й основний стан. На перший погляд, це викликає деяку незручність, бо для оцінки енерґії основного стану треба знати енерґію першого збудженого. Але справа в тім, що точність, з якою необхідно знати E_1, може бути достатньо грубою, у нашому випадку 1–2 десяткові знаки, оскільки в чисельнику стоїть дисперсія гамільтоніяна, яка є малою і тим менша, чим ближче пробна хвильова функція до істинної. Власне, дисперсія гамільтоніяна і визначає якість пробної функції. У крайньому разі E_1 можна взяти з таблиці 1. Але оскільки ми намагаємось з'ясувати якість функції (19), то все ж таки візьмемо “точне” варіяційне значення для E_1 (див. наступні розділи). Для оцінки знизу остаточно матимемо такий вираз:

$$\underline{E} = \overline{E} - \frac{\left(\frac{240}{7}\pi^2 - \frac{2048}{7}\right)\beta^4 - 64\beta^3 + \frac{176}{7}\beta^2 - \overline{E}^2}{E_1 - \overline{E}}\ , \tag{24}$$

де $\overline{E}$ відповідає вираз (20). При значенні $\beta = 1/2$, яке є оптимальним для верхньої оцінки, із (24) отримаємо

$$\underline{E} = -1.0738 \, .$$

У точці максимуму (24) значення варіяційного параметра $\beta = 0.49465$ і для енергії оцінка знизу матиме таке значення:

$$\underline{E} = -1.07356 \, . \tag{25}$$

Ця величина теж, як і (21), достатньо близька до точної (22), хоча точність нижньої оцінки, як завжди, гірша (у (25) правильні лише три знаки) від верхньої оцінки з тою ж пробною функцією.

Розгляньмо також наближення для пробної хвильової функції основного стану у вигляді добутку так званих факторів Ястрова

$$\psi(r_{12}, r_{13}, r_{23}) = \chi(r_{12})\chi(r_{13})\chi(r_{23}), \tag{26}$$

де χ — деяка варіяційна функція. У загальному випадку хвильових функцій трьох частинок з нульовим повним моментом у координатах

$$x = r_{12} \, , \; y = r_{13} \, , \; z = r_{23}$$

рівняння Шредінґера для системи (7) може бути записано у вигляді

$$\left\{ -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{x^2}\frac{\partial}{\partial x}x^2\frac{\partial}{\partial x} + \frac{x^2+y^2-z^2}{2xy}\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\right] - \frac{1}{x} + \text{цикл. заміна} \right\}\psi = E\psi \, . \tag{27}$$

Це рівняння залишається все ж занадто складним для аналітичного дослідження. Його розв'язок на класі варіяційних функцій (26) може бути отримано чисельно — наближення ястровських факторів (26) часто застосовується, зокрема у ядерних задачах. Заслуговує на увагу те, що функція (19), у якості якої ми переконалися вище, є частинним випадком (26). Ми провели чисельні розрахунки з використанням такого наближення, коли функція записувалася у вигляді розкладу

$$\chi(r) = \sum_{i=1}^{K} C_i e^{-\alpha_i r} \, . \tag{28}$$

Параметри C_i та α_i варіювалися для досягнення мінімуму енерґії. Збіжність розкладу (28) є достатньо швидкою. Уже при $K = 3$ досягається значення для енерґії

$$\overline{E} = -1.071486 \, , \tag{29}$$

яке в наведених знаках при збільшенні K вже не змінюється. При цьому оптимальним ястровським фактором (повна функція (26) нормована на одиницю) є

$$\chi(r) = 1.2349\exp(-0.5142r) - 0.1008\exp(-0.8497r) + 0.0082\exp(-2.655r) \, . \tag{30}$$

Результат (29) дещо ліпший від (21). Ястровський фактор (30) відрізняється від точного на декілька одиниць у п'ятому знаці. Ястровський фактор (30) на малих і великих відстанях менший від простої експоненти з (19) і виявляється досить близьким до неї (у випадку $K = 1$ аналогічним чином нормований фактор Ястрова є $\chi(r) = (16/7)^{1/6}e^{-r/2}$). У загальному можна сказати, що ястровські кореляції значно вичерпують внесок в енерґію основного стану системи трьох ґравітуючих частинок.

II. ПРОБЛЕМА ВИБОРУ НЕЛІНІЙНИХ ВАРІЯЦІЙНИХ ПАРАМЕТРІВ. СТОХАСТИЧНИЙ ВАРІЯЦІЙНИЙ МЕТОД

Наявність великої кількости нелінійних варіяційних параметрів у базисних функціях та одноманітність базисних ґауссових функцій має великі можливості. Варіюванням за нелінійними параметрами досягається значне поліпшення якости апроксимації функцією (2) точної хвильової функції порівняно з випадком, коли варіюються лише лінійні варіяційні параметри та один нелінійний параметр, як це робиться при використанні осциляторних базисів. Варіювання лінійних параметрів забезпечує лише оптимальний вибір лінійної комбінації жорстко заданих функцій, тоді як потрібний підбір нелінійних параметрів допомагає базисові адаптуватися до умов кожної конкретної задачі. Варіювання нелінійних параметрів визначає, наскільки важливий опис малих чи великих відстаней у системі, наявність тих чи інших особливостей поведінки хвильової функції, а велика кількість нелінійних варіяційних параметрів забезпечує базисові необхідну гнучкість. Але водночас велика кількість параметрів варіювання приводить до виникнення деяких труднощів, пов'язаних з їх оптимальним вибором. Оптимальний вибір нелінійних параметрів становить основну проблему при реалізації високоточних варіяційних схем. Від розв'язку цієї проблеми багато в чому залежить ефективність проведення тих чи інших розрахунків.

Існує велика кількість можливих стратегій вибору нелінійних параметрів. Першим і найпростішим з них є випадковий вибір підряд усіх параметрів із заздалегідь заданої области. Такий вибір може застосовуватись, якщо значення параметрів, за допомогою яких можна достатньо точно описати істинну хвильову функцію, зосереджені у відносно невеликій області, яку достатньо щільно можна охопити реальною кількістю $\mathcal{K}$ базисних функцій. Цей підхід, як свідчить досвід, може бути ефективним у тричастинкових розрахунках в експонентному базисі [33]. Однак при використанні ґауссового варіяційного базису, де розкид оптимальних значень параметрів є досить великим і різко зростає зі збільшенням кількости базисних функцій, вибір підряд усіх нелінійних праметрів не ефективний. Він не забезпечує необхідної швидкости збіжности і потребує розрахунків у великих базисах, що своєю чергою може створити проблеми з чисельною нестійкістю розрахунків. Такий спосіб при розрахунках у ґауссовому базисі потребує суттєвої модифікації.

Другий можливий спосіб вибору нелінійних варіяційних параметрів полягає у знаходженні мінімуму одночасно за всіма параметрами. Повна оптимізація, хоча й дозволяє одержати результат з певною точністю за мінімально можливої розмірности базису, проте натрапляє на значні труднощі при необхідності отримати прецизійні результати. По–перше, це досить великі затрати машинного часу для розрахунків навіть при не дуже великих $\mathcal{K}$. По–друге, з ростом $\mathcal{K}$ сильно ускладнюється рельєф ефективного функціонала енерґії і, як правило, з'являється велика кількість локальних мінімумів у просторі нелінійних параметрів.

Знаходження ґлобального або хоча б просто достатньо глибокого мінімуму стає з розширенням базису все складнішим. Зокрема в тестах, які ми проводили для систем трьох ґравітуючих частинок, досягнення $\mathcal{K} \sim$ 12-15 вимагало вже значних зусиль, хоча відповідна кількість нелінійних параметрів функціонала становить 36–45 і не є дуже великою. Така кількість базисних функцій недостатня для прецизійних розрахунків у розгляданій задачі. Водночас для інших задач, зокрема ядерних, повна мінімізація може бути доцільною [14,15].

Окрім того, для збуджених станів при мінімізації часто виникає проблема "злипання" окремих функцій, тобто деякі базисні функції стають майже лінійно залежними. Таке "злипання" приводить до майже виродженості матриці перекриття S з (3) і, як наслідок, чисельної нестійкости розрахунку. Таким чином, одночасна оптимізація за всіма нелінійними параметрами з великими розмірностями базису містить у собі чимало проблем і перспективи такого підходу в нашому випадку залишаються доволі примарними. Хоча слід відзначити, що останнім часом з'являються праці, присвячені вдосконаленню цієї схеми [34,35]. Можливе обчислення ґрадієнта та матриці Гессе як функцій нелінійних параметрів з невеликими машинними затратами. Обрахунок усіх компонент ґрадієнта потребує менше часу, ніж одноразове обчислення енерґії, а обрахунок матриці Гессе — такого ж порядку, як і обчислення енерґії. А можливість швидкого обрахунку цих величин значно прискорює процес пошуку мінімуму.

Третім способом вибору нелінійних варіяційних параметрів є так званий стохастичний варіяційний метод (СВМ), який уперше був запропонований у працях [7,9]. Цей метод у поєднанні з використанням ґауссового варіяційного базису виявився досить потужним інструментом для проведення розрахунків різноманітних систем декількох частинок. Досить показовими в цьому плані є результати праць [12,13], де було проведено розрахунки енерґетичних станів деяких ядерних та кулонових систем, що складаються з 2–7 частинок. Тут базис розширюється поступово, крок за кроком. На кожному кроці, тобто при додаванні чергового члена в (2), ґенерується M випадкових K–вимірних точок $\alpha^{(i)}=(a_1^{(i)},a_2^{(i)},\ldots,a_K^{(i)})$, де K — кількість нелінійних варіяційних параметрів в одній базисній функції. Для кожної з цих M точок знаходиться відповідне їй значення енерґії. З усіх цих точок–кандидатів залишається та, яка дає найбільше пониження енерґії. Аналогічно робляться й інші кроки. Функція розподілу для ґенерації цих точок може бути заданою якимось апріорним чином, виходячи з фізичних міркувань, або конструюватися в процесі нарощування базису на основі розподілу найліпших точок, отриманих на всіх попередніх кроках. У принципі, на кожному кроці можна додавати навіть не по одній функції, а по декілька, хоча здебільшого ефективність методу від цього знижується. При використанні подібної стратегії система сама відбирає найбільш підхожі базисні функції. Причому якість відбору легко контролюється кількістю M випадкових точок–кандидатів на кожному кроці. Залежно від M буде змінюватись й кількість членів у розкладі (2), за наявности яких досягається потрібна точність. Але звичайно область для маневрування тут не необмежена. Використання СВМ забезпечує необхідну гнучкість і дозволяє отримувати результати з високою точністю в базисах не дуже великої розмірности. Щоправда, це досягається тим, що статистичні випробування здійснюються багато разів на кожному кроці, для чого потрібно багаторазово розв'язувати задачу на власні значення (3). Тому досить важливою є ефективна організація розрахунків. Не обов'язково при кожному випробуванні розв'язувати цю задачу з "нуля", а можна використовувати роботу, виконану на попередніх кроках, що дає суттєву економію машинного часу. У праці [12] наведено одну з таких економних схем розв'язку задачі (3). Однак у наших розрахунках ми використовували іншу схему. У ній потрібний власний вектор c знаходимо методом зворотних ітерацій [36]

$$(H-\varepsilon_0 S)c_{k+1}=Sc_k, \tag{31}$$

де ε_0 — наближення до шуканого власного значення. Як правило, достатньо чотирьох–п'яти ітерацій (при не досить грубому наближенні ε_0), тобто розв'язків системи лінійних алґебричних рівнянь (31), щоб отримати власний вектор з достатньою точністю. Для факторизації матриці $A=H-\varepsilon_0 S$ використано трохи змінену схему Холецького [37]

$$A=LDL^T\ ,$$

де L — нижня трикутна матриця з одиничною діягоналлю, D — діягональна матриця, L^T — транспонована до L матриця. Якщо користуватися таким типом факторизації, то при кожному випробуванні не потрібно заново факторизувати матрицю A, а лише необхідно знайти останню стрічку матриці L. Це потребує $\sim \mathcal{K}^2$ операцій, тоді як повна факторизація потребує $\sim \mathcal{K}^3$ операцій ($\mathcal{K}$ — порядок матриць). Знаходження власного вектора за допомогою зворотних ітерацій (31) теж потребує $\sim \mathcal{K}^2$ операцій.

У наших розрахунках ми зупинилися на використанні СВМ, як на найефективнішому методі. Це дозволило нам отримати з високою точністю результати, які в інших схемах навряд чи могли б бути досягнуті. Розподіл нелінійних варіяційних параметрів ми будували таким чином, що густина ймовірности на $N+1$–му кроці мала вигляд такої суми K–вимірних нормальних розподілів:

$$P(a_1, a_2, \dots, a_K) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \prod_{j=1}^{K} \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_j^{(i)})^2}} \times \exp\left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{a_j - \mu_j^{(i)}}{\sigma_j^{(i)}} \right)^2 \right\} , \tag{32}$$

де в ролі математичного очікування $\mu_j^{(i)}$ виступало $a_j^{(i)}$ — значення j–го нелінійного параметра функції, приєднаної до базису на i–му кроці методу. Відповідну дисперсію здебільшого теж брали рівною цій величині: $\sigma_j^{(i)} = a_j^{(i)}$. Щоправда, за таким законом деколи можуть ґенеруватися точки, що не задовольняють умову, згідно з якою базисна функція має бути квадратично інтеґровною. Але таких точок ґенерується загалом небагато, і вони одразу відкидалися як некоректні.

Перш ніж як безпосередньо проводити варіяційні розрахунки, необхідно обчислити матричні елементи перекриття кінетичної й потенціяльної енерґії, а також тих величин, середні значення яких треба знайти, на елементарних базисних функціях (5). Явні вирази для більшости потрібних матричних елементів для N частинок можна легко отримати і знайти в літературі [10,34]. Так, для матричного елемента перекриття відповідний вираз є таким:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \frac{\pi^{3(N-1)/2}}{D^{3/2}} , \tag{33}$$

де D — детермінант $(N-1) \times (N-1)$ матриці B, що для системи трьох частинок має вигляд

$$B^{(3)} = \begin{pmatrix} a_{12}+a_{13} & -a_{12} \\ -a_{12} & a_{12}+a_{23} \end{pmatrix} , \tag{34}$$

а для системи чотирьох частинок

$$B^{(4)} = \begin{pmatrix} a_{12}+a_{13}+a_{14} & -a_{12} & -a_{13} \\ -a_{12} & a_{12}+a_{23}+a_{24} & -a_{23} \\ -a_{13} & -a_{23} & a_{13}+a_{23}+a_{34} \end{pmatrix} , \tag{35}$$

де $a_{kl} = a_{kl}^i + a_{kl}^j$.

Матричний елемент довільної функції f, що залежить від модуля певної міжчастинкової відстані r_{kl}, обчислюється за формулою [10]

$$\langle \phi_i | f(r_{kl}) | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty f\left(t\sqrt{D_{kl}/D}\right) e^{-t^2} t^2 dt , \tag{36}$$

тут $D_{kl} \equiv \partial D / \partial a_{kl}$.

Для матричного елемента оператора кінетичної енерґії

$$K = -\frac{1}{2} \sum_{s=1}^{N} \Delta_s$$

вираз має такий вигляд:

$$\langle \phi_i | K | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \frac{3}{2D} \sum_{k,l,s=1}^{N} a_{ks}^i a_{ls}^j (D_{ks} + D_{ls} - D_{kl}) . \tag{37}$$

III. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ З ВИСОКОЮ ТОЧНІСТЮ СИСТЕМИ ТРЬОХ ҐРАВІТУЮЧИХ ЧАСТИНОК

Для системи трьох тотожних ґравітуючих частинок з гамільтоніяном (7) ми розглянули стани з усіма можливими типами симетрії хвильової функції стосовно перестановки частинок: повністю симетричні (бозони), з проміжною симетрією та повністю антисиметричні (ферміони). Цим симетріям щодо групи перестановок відповідають схеми Юнга [3], [21], [1^3]. Якісна картина розташування дискретних енерґетичних рівнів така: область додатних енерґій, а також від'ємні енерґії вище від порогових значень енерґій зв'язаних станів двох частинок належать до суцільного спектра, а дискретні рівні розташовуються нижче від двочастинкових порогів (для симетричних станів та станів з проміжною симетрією поріг становить $-1/4$, а для антисиметричних — $-1/16$) і монотонно згущуються за кулонівським законом (14) поблизу них. Якісний аналіз у розділі I показує, що у всіх випадках існує нескінченна кількість дискретних рівнів.

Для проведення розрахунків станів з певною симетрією необхідно використовувати базисні функції, що перетворюються за незвідними представленнями групи перестановок Π_3. Ці базисні функції отримують з елементарних базисних функцій ϕ_i з (5) так:

$$\varphi_i = (1 + P_{13} + P_{23})(1 + P_{12})\phi_i$$

— для повносиметричних станів та

$$\varphi_i = (1 - P_{13} - P_{23})(1 - P_{12})\phi_i$$

— для антисиметричних станів. Тут P_{kl} — оператор перестановки k–ї та l–ї частинок. У випадку проміжної симетрії (схема Юнга [21]) базисні функції є двокомпонентними:

$$\varphi_i = \begin{pmatrix} (1 - P_{12})(1 + P_{23})\phi_i \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(1 + P_{12})(1 + P_{23} - 2P_{13})\phi_i \end{pmatrix}. \tag{38}$$

Зауважимо, що можна побудувати також інші еквівалентні представлення для змішаної симетрії зі схемою Юнга [21], відмінні від (38).

Стан	E	ΔE	$\langle r_{ij} \rangle$	$\langle r_{ij}^2 \rangle$
основний	-1.07177937297	$2 \cdot 10^{-11}$	1.994120	5.101105
1–й збудж.	-0.57449221540	$4 \cdot 10^{-10}$	4.412716	25.26212
2–й збудж.	-0.39381649823	$1 \cdot 10^{-9}$	8.096199	90.15719
3–й збудж.	-0.33082419747	$9 \cdot 10^{-9}$	13.45114	265.2974
4–й збудж.	-0.30199256558	$3 \cdot 10^{-8}$	20.27769	627.9502
5–й збудж.	-0.28625287533	$2 \cdot 10^{-7}$	28.60918	1281.222

Таблиця 2. Результати розрахунку енерґії та міжчастинкових відстаней для системи трьох тотожних ґравітуючих бозонів з нульовим повним моментом за стохастичною схемою (розмірність базису — 300 функцій).

Стан	E	ΔE	$\langle r_{ij} \rangle$	$\langle r_{ij}^2 \rangle$
основний	-0.4528869754	$3 \cdot 10^{-10}$	5.641768	41.98945
1–й збудж.	-0.3595387446	$4 \cdot 10^{-9}$	9.968919	142.8359
2–й збудж.	-0.3167897461	$6 \cdot 10^{-9}$	15.84655	378.5920
3–й збудж.	-0.2947441034	$1 \cdot 10^{-7}$	23.24462	838.6774
4–й збудж.	-0.2820102558	$1 \cdot 10^{-6}$	32.14990	1634.279
5–й збудж.	-0.2740165869	$3 \cdot 10^{-6}$	42.55833	2899.067

Таблиця 3. Результати розрахунку енерґії та міжчастинкових відстаней з проміжною симетрією [21] для системи трьох ґравітуючих частинок з нульовим повним моментом за стохастичною схемою (розмірність базису — 300 функцій).

Стан	E	ΔE	$\langle r_{ij} \rangle$	$\langle r_{ij}^2 \rangle$
основний	-0.127544520838	$5 \cdot 10^{-12}$	17.79754	400.3189
1–й збудж.	-0.107698371021	$7 \cdot 10^{-12}$	24.74575	828.6225
2–й збудж.	-0.095065919047	$4 \cdot 10^{-11}$	33.34761	1574.868
3–й збудж.	-0.086952266946	$3 \cdot 10^{-10}$	43.56048	2778.382
4–й збудж.	-0.081502976958	$5 \cdot 10^{-9}$	55.30590	4591.176
5–й збудж.	-0.077681565396	$3 \cdot 10^{-8}$	68.56575	7189.634

Таблиця 4. Результати розрахунку енерґії та міжчастинкових відстаней для системи трьох тотожних ґравітуючих безспінових ферміонів (антисиметричні стани) з нульовим повним моментом за стохастичною схемою (розмірність базису для основного стану — 200 функцій, для першого збудженого — 250, для всіх інших — 300 функцій).

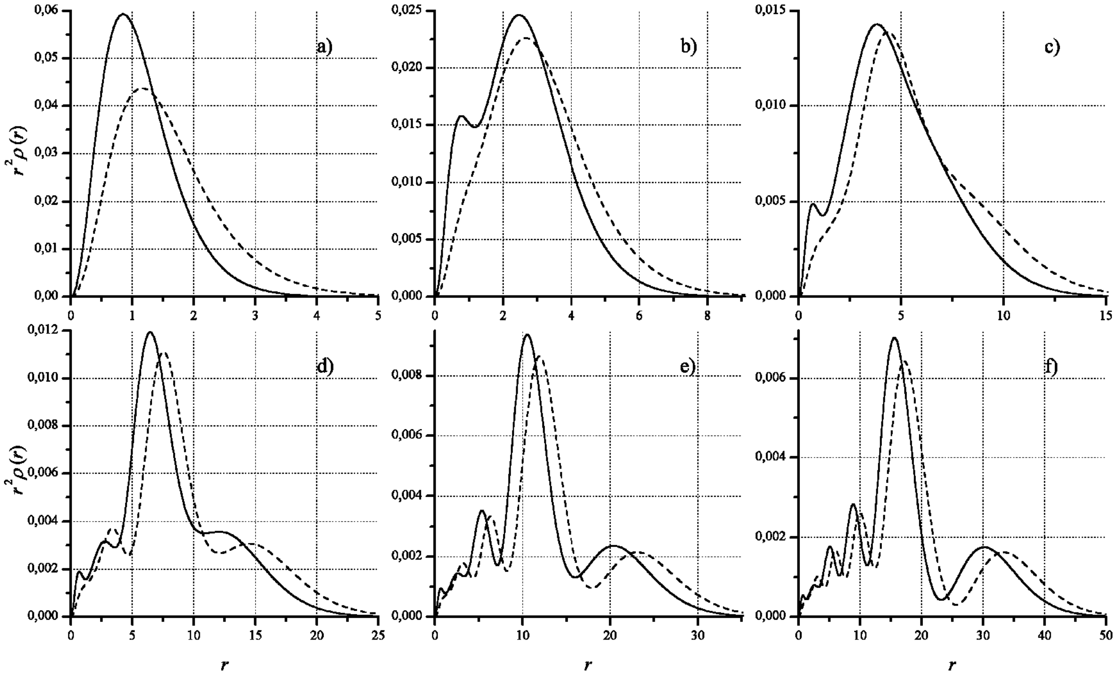

Рис. 1. Розподіли густини частинок для системи трьох ґравітуючих бозонів: a)–f) відповідно для основного та перших п'яти збуджених станів. Суцільні криві — високоточні варіяційні розрахунки, штриховані криві — кластерне безполяризаційне наближення.

Для всіх трьох типів симетрій ми провели розрахунок основного та перших п'яти збуджених станів з нульовим орбітальним моментом (нагадаємо, що для кожної з симетрій енерґетичний спектр безмежний). Для досягнення прийнятної точности виявилося достатнім обмежитися кількістю базисних функцій φ_i, що дорівнює $\mathcal{K}=300$. А для основного та першого збудженого стану з повністю антисиметричною хвильовою функцією через технічні причини (досягнута точність межує з похибками машинної арифметики та матричних обчислень) ми обмежилися навіть $\mathcal{K}=200$ та $\mathcal{K}=250$ базисними функціями відповідно. Окрім енерґії зв'язку, були розраховані середні міжчастинкові відстані, середні квадрати міжчастинкових відстаней та інші важливі характеристики. Енерґетичні рівні та середні відстані наведені в таблицях 2, 3 та 4 відповідно для повністю симетричних станів, станів з проміжною симетрією та антисиметричних станів. Ми наводимо також оцінку значень похибок, отриманих для енерґій результатів. Зазначимо, що збіжність значень енерґії зі збільшенням кількости враховуваних базисних функцій, особливо для основного стану, є достатньо швидкою. Для антисиметричних станів швидкість збіжности є навіть трохи більшою, ніж для симетричних — для антисиметричних функцій не важлива їхня поведінка в околі точок попарних зіткнень частинок, бо вони там зануляються. А симетричні функції в околі цих точок досягають максимуму, і така область при розрахунках з дуже великою точністю відіграє певну роль, оскільки в цих точках точна функція має гострий максимум (мається на увазі максимум по одній змінній). У цих точках істинна хвильова функція має "загострення" (залежить лінійно від r), а ґауссоїди (як функції r^2), за допомогою яких вона будується, — ні. Тому це й викликає деяке уповільнення збіжности, бо до базису під час його побудови необхідно час від часу включати все більше δ–подібних ґауссоїд з дуже малими радіусами. Збіжність результатів зі збільшенням кількости базисних функцій $\mathcal{K}$ при використанні СВМ є більш–менш монотонною. Це дозволяє провести екстраполяцію отриманих значень енерґії $E(\mathcal{K})$ на випадок $\mathcal{K} \to \infty$ за деякою достатньо розумною асимптотичною формулою. Можна сподіватися, що за такими формулами є можливість хоча б оцінити порядок різниці між точним значенням та варіяційним наближенням. У наших оцінках ми використовували просту формулу [33]

$$E(\mathcal{K}) = \mathcal{E}(\infty) + \frac{\alpha}{\mathcal{K}^{\gamma}} , \tag{39}$$

де $E(\infty)$ — точне значення енерґії, α та γ — константи, які не залежать від $\mathcal{K}$. Випробування формули (39) на прикладі системи $e^+e^-e^-$, для якої значення енерґії зв'язку відоме з екстремально високою точністю [38], свідчать, що така оцінка дійсно дає правдоподібні значення похибки розрахунку енерґії (мається на увазі порядок величини). Тому в таблицях 2, 3 та 4 ми поряд з варіяційним значенням енерґії наводимо зроблені вище вказаним чином оцінки величини $\Delta E = E(\mathcal{K}_{\max}) - \mathcal{E}(\infty)$, що є абсолютною похибкою розрахунку. Як і слід було очікувати, найбільша точність при заданій кількості базисних функцій досягається для основного стану, а найменша — для найбільш збудженого. Це пов'язано з тим, що хвильова функція високозбуджених станів ускладнюється, у неї з'являються нові осциляції, і для їх опису необхідно врахувати все більшу кількість базисних функцій. Наші результати є суттєво точнішими, ніж результати, наведені в працях [12,32] для основного симетричного стану трьох ґравітуючих частинок, та результати з праці [6] для основного і перших трьох збуджених станів, як симетричних, так і антисиметричних. У праці [6] запропоновано новий, достатньо універсальний оригінальний оптимізаційний підхід, що встановлює конфіґураційну ієрархію серед базисних функцій трьох частинок. Незважаючи на те що проведено відбір найістотніших осциляторних базисних функцій до ґлобального моменту $K = 24$ і при цьому досягнуто збіжности (була досягнута принципово ліпша точність, ніж при стандартному врахуванні всіх підряд осциляторних функцій до заданої розмірности), усе ж точність цих розрахунків виявилась невисокою. Невисокої точности досягається і в методі гіперсферичних функцій, якщо враховувати тільки ґлобальний момент до $K = 24$. Наші результати як за простотою, так і точністю виконання мають суттєві переваги.

Для системи трьох частинок були виконані з високою точністю розрахунки основних фізичних характеристик, що визначаються через отримані хвильові функції. Зокрема, це розподіл густини частинок у системі центра мас

$$\rho_k(\mathbf{r}) = \langle \psi | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k + \mathbf{R}) | \psi \rangle \ , \qquad (40)$$

тут k — номер частинки, $\mathbf{R}$ — координата центра мас, а ψ — нормована на одиницю хвильова функція відповідного стану. Для нульового орбітального моменту розподіл густини є сферично–симетричною функцією. Для тотожних частинок розподіли (40) з різним k збігаються. Графіки розподілів густин для всіх розрахованих повносиметричних станів наведено на рис. 1, а для антисиметричних станів — на рис. 2. Для більш наочного зображення цих величин ми подаємо їхні графіки домноженими на r^2, що безпосередньо визначає ймовірність знаходження частинки на відстані r від центра мас системи. На рис. 1 одночасно з "точними" розподілами густини бозонів наведені також аналогічні залежності кластерного безполяризаційного наближення (для більшої наочности кожному станові відведено окремий малюнок). Останні подані як усереднені за всіма трьома частинками

$$\rho(r) = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^{3} \rho_k(r) \ ,$$

оскільки кластерна функція (8) не враховує тотожности всіх частинок. Графіки розподілів для станів із симетрією [21] через обмежений обсяг статті ми не наводимо.

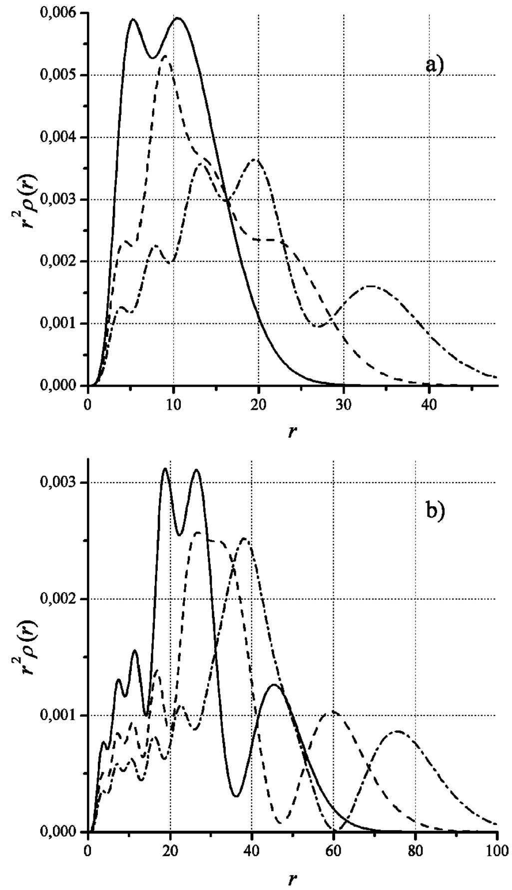

Рис. 2. Розподіли густини частинок в антисиметричних станах: a) суцільна крива — основний стан, штрихована — 1–й збуджений, штрих–пунктирна — 2–й збуджений стан; b) суцільна крива — 3–й збуджений, штрихована — 4–й збуджений, штрих–пунктирна — 5–й збуджений стан.

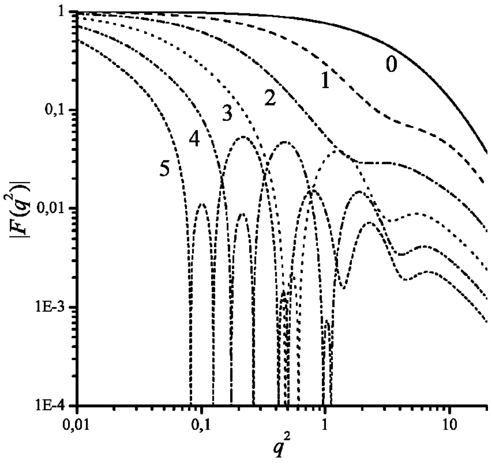

Рис. 3. Формфактори для системи трьох ґравітуючих бозонів: 0 — основний стан, 1 – 5 — відповідно 1 – 5–й збуджені стани.

Щодо наведених розподілів густини відзначимо, по–перше, що для кожного наступного стану в розподілах проявляється нова осциляція — це пов'язано з характерною осцилюючою структурою хвильових функцій для різних станів типу

$$\Psi_n \approx \Phi(-n,3;\rho^2)e^{-\rho^2/2}$$

(тут n — номер збудженого стану, Φ — вироджена гіпергеометрична функція; така хвильова функція є точною для тричастинкової задачі гармонічних осциляторів) за квадратом ґлобального радіуса. По–друге, для високозбуджених рівнів протяжність розподілів значно збільшується і проявляється ефект периферійного "гало". По–третє, в антисиметричних станах уже для основного стану присутня одна осциляція. Останнє пов'язано з тим, що антисиметрична хвильова функція навіть не є знакосталою у всьому просторі — має характерну поведінку осциляторних функцій

$$\Psi^{(a)} \approx (r_1^2-r_2^2)(r_1^2-r_3^2)(r_2^2-r_3^2)e^{-\rho^2/2}\ , \qquad (41)$$

і тому розподіл густини частинок, який є її усередненням, теж має складнішу структуру. Розподіл густини для основного стану системи зі схемою Юнга [21] має проміжний характер (через економію місця ми не подаємо цих результатів) між аналогічними залежностями для симетричних та антисиметричних станів. Як і у випадку повносиметричного стану, маємо лише один максимум на графіку $r^2\rho(r)$ для найнижчого стану, але цей розподіл не є монотонно спадаючим на графіку $\rho(r)$, а має невеликий провал на початку координат. Розподіл же "безспінових" ферміонів на графіку $\rho(r)$ узагалі зануляється на початку координат (наслідок повної антисиметричности хвильової функції (41)). Зі зростанням збудження для всіх типів симетрії хвильової функції збільшується і кількість осциляцій у розподілі, що природно відображає факт збільшення осциляцій у самої хвильової функції. Розподіл частинок для п'ятого збудженого стану, особливо для системи "безспінових" ферміонів, має вже достатньо складний вигляд.

Порівняння кривих для розподілів частинок системи бозонів на рис. 1 з аналогічними кривими, здобутими у кластерному безполяризаційному наближенні, говорить про те, що для основного стану цієї системи кластерне наближення ще погане. Але для п'ятого збудженого стану криві вже досить непогано узгоджуються. Крива в кластерному наближенні для високозбуджених станів досить гарно передає всі осциляції точної відповіді. Відмінністю є те, що вона трохи розтягнута в бік більших відстаней.

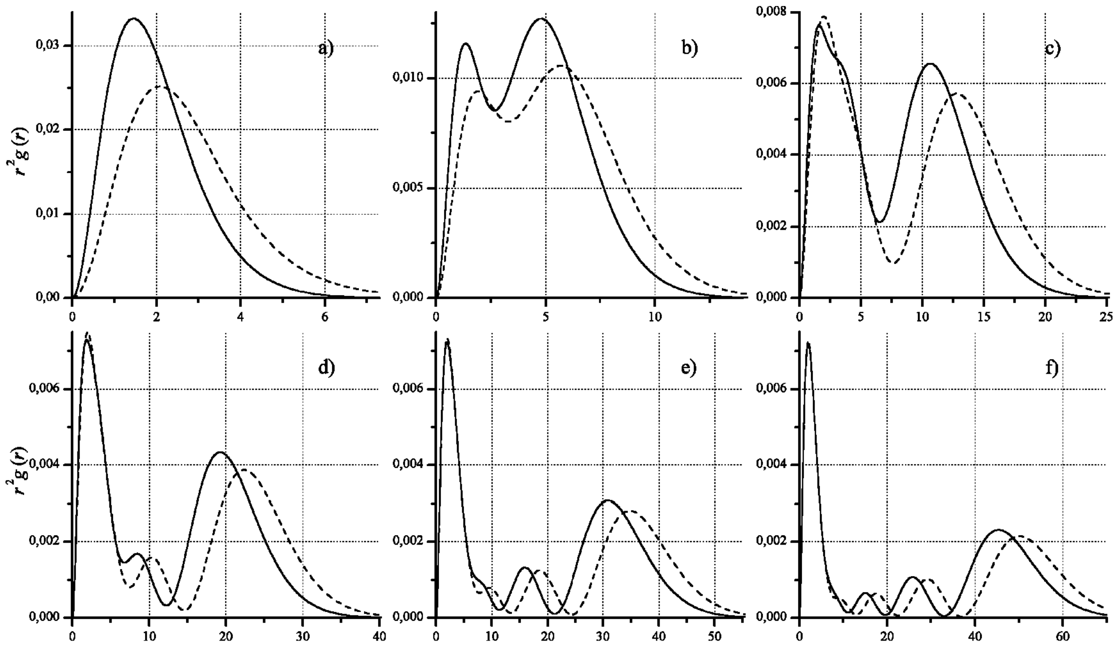

Рис. 4. Парні кореляційні функції для системи трьох ґравітуючих бозонів (позначення аналогічні до рис. 1).

Особливо тонкі деталі одночастинкових розподілів густини проявляються у формфакторах, які є компонентами Фур'є від розподілів

$$F(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r}\rho(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{qr})\Big/\int d\mathbf{r}\rho(\mathbf{r})\ . \qquad (42)$$

На рис. 3 зображені формфактори для повносиметричних станів. Відзначимо, що для квадратів переданих імпульсів, які не помістилися на рис. 3, формфактори $F(q^2)$ монотонно спадають до нуля і відсутні хоч якісь нереґулярності. При цьому для більш збуджених станів спадання формфакторів зі зростанням q^2 відбувається швидше, для малих же q^2 для більш збуджених станів формфактори спадають менше, оскільки розміри системи зростають для вищих збуджених станів. Основному станові (крива 0 на рис. 3) відповідає монотонно спадаючий формфактор, для першого і другого збуджених станів (криві 1,2) $F(q^2)$ додатні, але мають деякі незначні нереґулярності для відносно великих q^2, для третього збудженого стану $F(q^2)$ має два нулі для менших q^2 і одну нереґулярність для більших q^2, для наступних збуджених станів з'являються ще пари нулів для менших q^2 і нові нереґулярності для більших q^2. Усі особливості формфакторів досить тісно корелюють з відповідними осциляціями розподілів і відображають кластерний характер відповідних станів та периферійний ефект "гало". Підкреслимо, що в повносиметричних станах нулі формфакторів завжди з'являються парами і для великих переданих імпульсів усі формфактори додатні. Що стосується формфакторів в антисиметричних станах та станах проміжної симетрії трьох частинок (розрахунки формфакторів були виконані для всіх перших шести станів), то відзначимо, що кількість нулів у них завжди непарна — один нуль з'являється за рахунок занулення хвильової функції на малих відстанях навіть в основному стані. По–друге, крім нулів, формфактори мають додатково ще досить помітні нереґулярності, які проявляються, в основному, при менших q^2. По–третє, пара нулів формфакторів для більших збуджень відокремлюється і пересувається до малих q^2, що пов'язано з проявом кластерної структури збуджених станів та периферійним ефектом "гало".

Значний інтерес також становить парна кореляційна функція

$$g_{kl}(\mathbf{r}) = \langle\psi|\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_{kl})|\psi\rangle. \qquad (43)$$

Вона визначає ймовірність знаходження k–ї та l–ї частинок на відстані $\mathbf{r}$ між собою. Для станів з нульовим орбітальним моментом парна кореляційна функція, як і густина розподілу, є сферично симетричною. Ці розраховані тут величини зображені на рис. 4 та 5 відповідно для системи трьох ґравітуючих бозонів та трьох ґравітуючих "безспінових" ферміонів. Для бозонів ми також наводимо для порівняння на рис. 4 парні кореляційні функції, здобуті у кластерному безполяризаційному наближенні й усереднені по всіх парах частинок

$$g(r) = \frac{g_{12}(r)+g_{13}(r)+g_{23}(r)}{3}\ .$$

Слід відзначити, що зі зростанням збудження в парних кореляційних функцій чітко відокремлюється частина, пов'язана з підсистемою двох частинок (утворення кластера). Для симетричних станів та станів проміжної симетрії на графіку присутній горб поблизу початку координат, який з ростом збудження стабілізується в розмірах і для 3–го, 4–го та 5–го збудженого станів уже практично не змінює своєї форми. У кластерному безполяризаційному наближенні цей горб описується залежністю

$$r^2 g_{12}(r) = r^2\frac{e^{-r}}{8\pi}.$$

На рис. 4 видно, що в ділянці цього горба "точна" варіяційна крива збігається з кластерною.

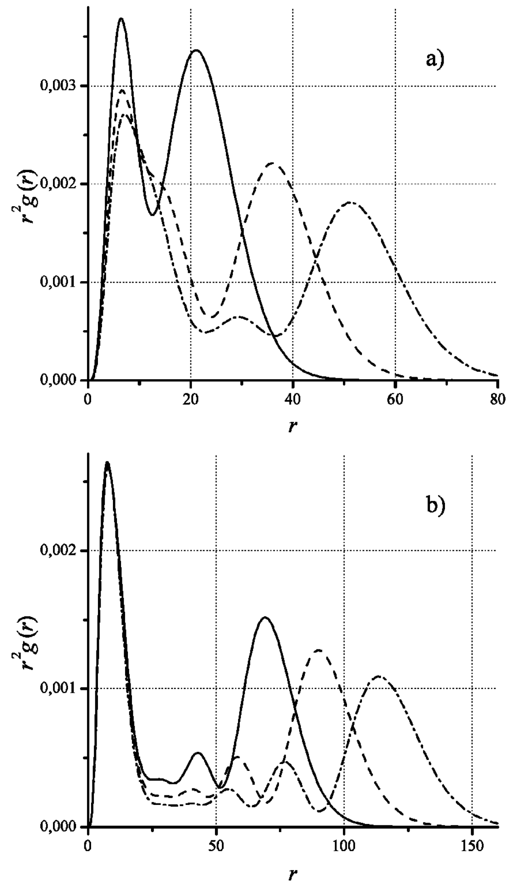

Рис. 5. Парні кореляційні функції в антисиметричних станах (позначення аналогічні до рис. 2).

Ми розрахували розподіл за імпульсами (в системі центра мас)

$$n_k(\mathbf{p}) = \langle\psi_{\mathbf{p}}|\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_k)|\psi_{\mathbf{p}}\rangle\ . \qquad (44)$$

Тут k — номер частинки, а $\psi_{\mathbf{p}}$ — хвильова функція в імпульсному представленні. Визначення розподілу за імпульсами (44) може бути зведено до стандартного визначення імпульсного розподілу через функцію Віґнера $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$. Розподіл за імпульсами є сферично симетричним у станах з нульовим орбітальним моментом. Для системи трьох ґравітуючих бозонів ця величина зображена на рис. 6. Характерною особливістю імпульсних розподілів для збуджених станів є поява осциляцій, які з ростом збудження збільшуються за амплітудою і зосереджуються поблизу початку координат. Цей факт пояснюється тим, що хвильова функція збуджених станів у конфіґураційному просторі стає все протяжнішою за рахунок близькости до порога (ефект типу "гало") і її осциляції відбуваються на все більших відстанях. Тому хвильова функція в імпульсному представленні з ростом збудження все більше зосереджується в нулі, де й осцилює.

Принципових відмінностей в імпульсних розподілів для систем ферміонів та проміжної симетрії від бозонних немає. Відзначимо, що вже для основного антисиметричного стану системи розподіл за імпульсами не є монотонним, а має на графіку, де відкладено $p^2n(p)$, два максимуми. Крім того, кількість осциляцій в імпульсних розподілах для систем з проміжною симетрією та ферміонів на одну–три більше, ніж для таких самих за номером збудження станів для системи бозонів.

IV. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ СИСТЕМИ ЧОТИРЬОХ ЧАСТИНОК

Система чотирьох частинок характеризується ще трьома додатковими ступенями вільности (всього 6), і в багатьох методах це часто призводить до непомірно великого зростання об'єму обчислень. Варіяційний метод є одним з небагатьох, де ці труднощі хоча і виникають, проте їх зростання зі збільшенням кількости частинок відбувається значно повільнішими темпами, ніж в інших методах. Особливо ефективним є застосування методики стохастичного варіяційного методу (СВМ) до таких розрахунків. З використанням цієї методики ми провели розрахунки зв'язаних станів чотирьох тотожних ґравітуючих частинок з повністю симетричними за перестановками частинок станами (бозонів) з нульовим орбітальним моментом.

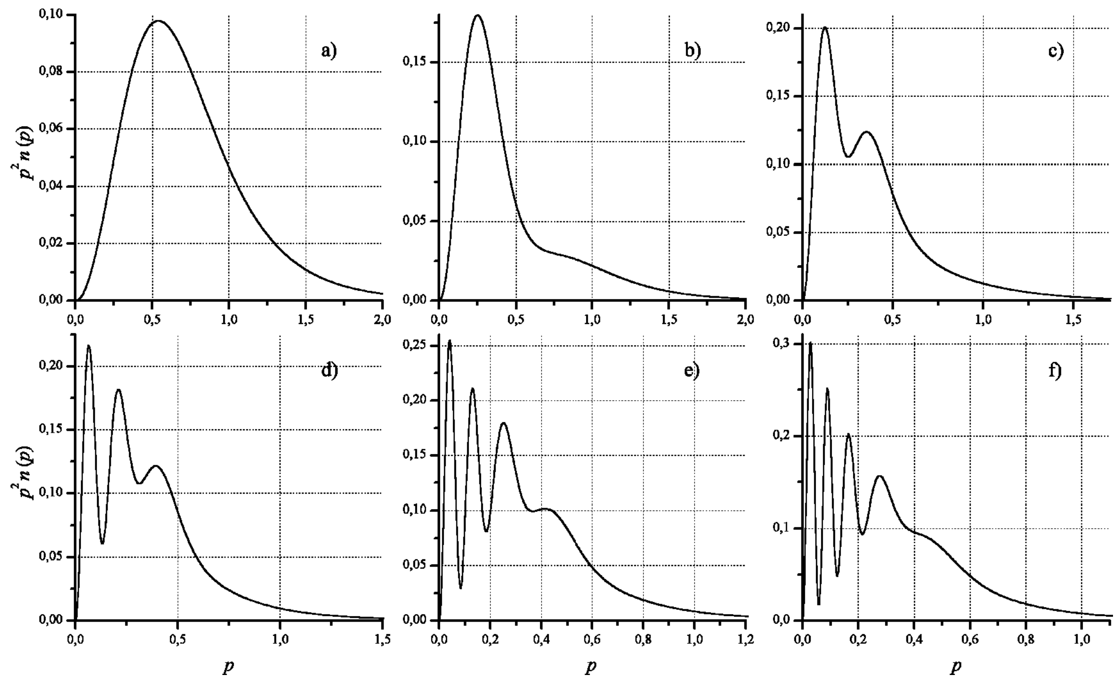

Рис. 6. Імпульсні розподіли для системи трьох ґравітуючих бозонів: a)–f) відповідно для основного та перших п'яти збуджених станів.

Варто відзначити, що для цієї системи в літературі, наскільки нам відомо, відсутні дані щодо прецизійних розрахунків навіть основного стану, якщо не брати до уваги результатів праць [12,22]. Точність же результатів у цих двох працях не дуже висока.

Базисні функції для розрахунку повносиметричних станів мають такий вигляд:

$$\varphi_i = (1 + P_{14} + P_{24} + P_{34})(1 + P_{13} + P_{23}) \times (1 + P_{12})\phi_i \ . \qquad (45)$$

Система чотирьох частинок в основному стані є дуже сильно зв'язаною, навіть у порівнянні з системами двох та трьох частинок. Швидке зростання енерґії зв'язку відображає той факт, що для системи N ґравітуючих бозонів в асимптотиці $N \to \infty$ справедливе наближення самоузгодженого середнього поля Гартрі [21,23] і енерґія основного стану асимптотично точно визначається співвідношенням (16)

$$E_0 \cong -s(N-1)N^2$$

з $s = 0.05426$. Це для $N = 4$ дає значення $E_0 = -2.604$, що відрізняється від результату з таблиці 5 всього на 7%. Відповідне наближення середнього поля для розмірів систем дає порядок

$$R \approx \mathrm{const}/(N-1)\ .$$

Оцінки положення збуджених станів N частинок у безполяризаційному кластерному наближенні, як і для трьох частинок (14), дозволяють отримати якісну картину розташування енерґетичного спектра (повносиметричні стани з нульовим орбітальним моментом)

$$E_n(N) \cong E_0(N-1) - \frac{(N-1)^3/2N}{(n+1)^2}\ . \tag{46}$$

Тут n — номер енерґетичного рівня, а для тричастинкового порога $E_0(3) = -1.0718$.

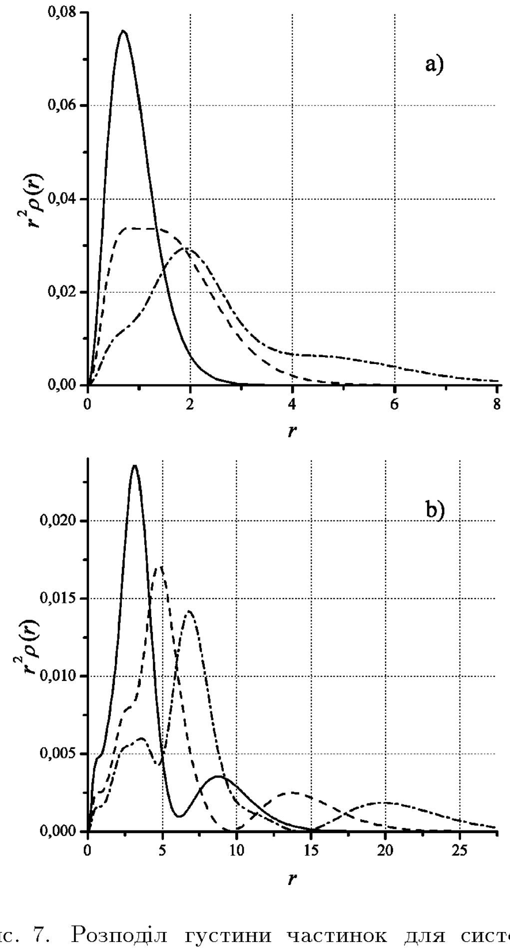

Рис. 7. Розподіл густини частинок для системи чотирьох частинок (повносиметричні стани): a) суцільна крива — основний стан, штрихована — 1–й збуджений, штрих–пунктирна — 2–й збуджений стан; b) суцільна крива — 3–й збуджений, штрихована — 4–й збуджений, штрих–пунктирна — 5–й збуджений стан.

У таблиці 5 наведені також розраховані середні міжчастинкові відстані та середні квадрати міжчастинкових відстаней. З цих даних видно, що система чотирьох ґравітуючих бозонів є компактнішою, ніж відповідна система трьох частинок. Середньоквадратичний радіус

$$\sqrt{\langle R^2\rangle} = \sqrt{\frac{N-1}{2N}\langle r_{ij}^2\rangle} \tag{47}$$

для основного симетричного стану системи трьох частинок становить 1.304, тоді як для $N=4$ — вже 1.027, що відповідають тенденції до колапсу [24] зі зростанням кількости частинок N.

Ми також провели розрахунок усіх структурних функцій для системи чотирьох ґравітуючих бозонів. На рис. 7 наведені результати для розподілу густини. Відзначимо тенденцію, дещо швидшу від випадку для трьох частинок, до збільшення протяжности розподілів для вищих збуджених станів. Хоча основний максимум розподілів зосереджений на менших відстанях, оскільки розміри в системі чотирьох частинок менші. На рис. 8 подані результати для парних кореляційних функцій. Як і для випадку трьох частинок, у парній кореляційній функції чітко відокремлюється на менших відстанях "кластерний" горб трьох частинок, місце положення якого досить стабільне для третього і вищих збуджених станів. Загалом же якісна поведінка парної кореляційної функції для системи чотирьох бозонів схожа на поведінку аналогічної характеристики для системи трьох бозонів.

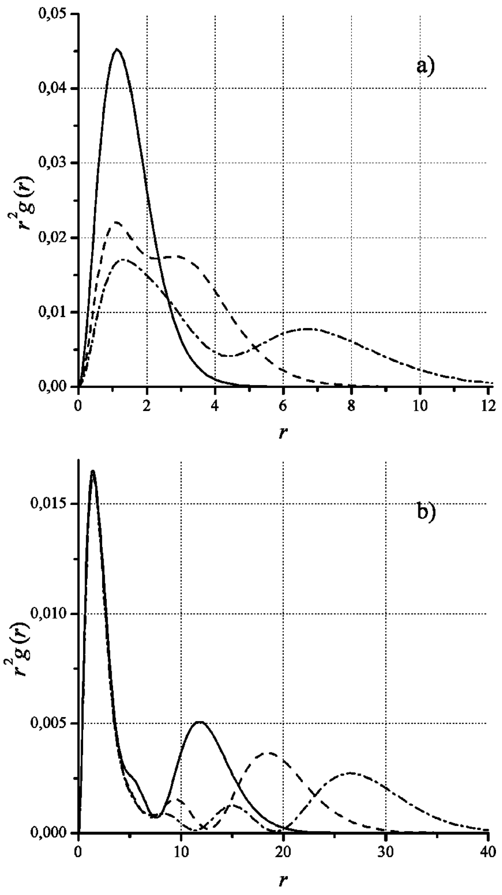

Рис. 8. Парні кореляційні функції для системи чотирьох частинок (позначення аналогічні до рис. 7).

Стан	E	ΔE	$\langle r_{ij}\rangle$	$\langle r_{ij}^2\rangle$
основний	-2.790732919	$9{\cdot}10^{-9}$	1.494446	2.814207
1–й збудж.	-1.847144953	$2{\cdot}10^{-7}$	2.626669	9.133528
2–й збудж.	-1.414437961	$7{\cdot}10^{-7}$	4.326888	27.83753
3–й збудж.	-1.271189584	$3{\cdot}10^{-6}$	6.579445	73.13865
4–й збудж.	-1.202894262	$8{\cdot}10^{-6}$	9.338141	161.3024
5–й збудж.	-1.164944425	$2{\cdot}10^{-5}$	12.52404	309.7477

Таблиця 5. Результати розрахунку енерґії та міжчастинкових відстаней для системи чотирьох тотожних ґравітуючих бозонів з нульовим повним моментом за стохастичною схемою (розмірність базису — 600 функцій).

V. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Зупинімось на застосуванні результатів прецизійних варіяційних розрахунків системи трьох та чотирьох ґравітуючих частинок до систем частинок з потенціялом типу Юкави. Системи ґравітуючих частинок можна розглядати як нульове наближення сильного зв'язку [19]. Розгляньмо систему N частинок з гамільтоніяном

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Delta_i - g\sum_{i<j}^{N}\frac{f(\mu r_{ij})}{r_{ij}}\ , \tag{48}$$

де функція f на малих відстанях може бути записана як

$$f(x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k x^k\ . \tag{49}$$

Зокрема для потенціялу Юкави $f(\mu r_{ij}) = e^{-\mu r_{ij}}$. Ефективна малість параметра μ (ефективно великий радіус взаємодії) має місце [19] як при великій інтенсивності взаємодії ($g \gg 1$ — сильний зв'язок), так і при великому характерному радіусі взаємодії. У цьому випадку суттєвим стає поведінка потенціялів взаємодії на малих відстанях. У рівнянні Шредингера

$$\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Delta_i - g\sum_{i<j}^{N}\frac{1}{r_{ij}} - g\sum_{i<j}^{N}\sum_{k=2}^{\infty}\alpha_k\mu^k r_{ij}^{k-1}\right]\psi = \left[E + g\alpha_1\mu_1\frac{N(N-1)}{2}\right]\psi \tag{50}$$

можна скористатися теорією збурень для знаходження рівнів енерґії E, використавши в ролі нульового наближення задачу про N ґравітуючих частинок. Тоді в першому порядку теорії збурень для n–го рівня енерґії маємо

$$E_n \cong g^2 E_n^{\rm grav} - \frac{N(N-1)}{2}g^2\left[\alpha_1\frac{\mu}{g} + \langle r_{ij}\rangle_n\,\alpha_2\left(\frac{\mu}{g}\right)^2 + \langle r_{ij}^2\rangle_n\,\alpha_3\left(\frac{\mu}{g}\right)^3\right]\ , \tag{51}$$

де $E_n^{\rm grav}$ — значення енерґії n–го рівня незбуреної задачі з гамільтоніяном (6). Для врахування членів розкладу потенціалу $\sim\mu^4$ і вище необхідно розглянути й другий порядок теорії збурень, що ми не маємо змоги зробити. Для аналізованого випадку $N = 3, 4$ частинок середні значення $\langle r_{ij}\rangle$ та $\langle r_{ij}^2\rangle$ наведені в таблицях 2 та 5. Відзначимо, що, використовуючи лише перший порядок теорії збурень, вдається врахувати дві поправки енерґії до членів $(\mu/g)^3$ включно. Співвідношення (51) з використанням таблиць 2 та 5 дає якісну поведінку енерґетичних рівнів (залежність типу $E \cong -C_{-2}\,g^2 + C_{-1}\,g + C_0 + C_1/g + \ldots$ [19]) в наближенні сильного зв'язку $g \gg 1$ для трьох та чотирьох частинок і широкого класу потенціялів типу Юкави. Зауважимо, що для задач трьох та чотирьох частинок з потенціялами Юкави тепер доступні й безпосередні високоточні розрахунки з використанням підходів цієї праці.

Виконані в праці дослідження показують, що для кулоноподібних систем трьох та чотирьох частинок у варіяційному методі РРТБГ з ґауссовим базисом досягається висока і контрольована точність розрахунків як енерґетичних спектрів, так і хвильових функцій. Це дозволило для "точних" розподілів густини, формфакторів, двочастинкових кореляційних функцій та імпульсних розподілів установити нові структурні закономірності. Зокрема, установлено нове явище осциляцій розподілів густини і формфакторів та кореляцію цих осциляцій з номером збудження. Аналіз отриманих "точних" двочастинкових кореляційних функцій показує також характерні структурні залежності від енерґетичного стану.

Отримані з високою точністю енерґетичні спектри та хвильові функції зручні для використання в дослідженнях різного типу ймовірностей переходів.

Порівняльний аналіз наближених якісних результатів для основних характеристик трьох та чотирьох частинок з отриманими в нашій роботі "точними" результатами дає змогу встановити точність стандартних підходів. Так, для систем декількох частинок подано обґрунтування точности безполяризаційного кластерного підходу, методу ястровських факторів, наближення середнього поля та сильного зв'язку.

Усі ці результати відкривають багатонадійні перспективи на отримання остаточних результатів і для інших складніших квантових систем: кулонових систем різної природи — йона та молекули позитронію, легких атомів, три– та чотиричастинкових систем мезомолекулярного типу, мультикваркових систем з потенційною взаємодією, різноманітних ядерних та кулонових систем з більшою ніж чотири кількістю частинок та більш реалістичною кулон–ядерною взаємодією.

Ця робота частково підтримана ДФФД Міністерства науки і технологій України — ґрант 2.4/678

[1] С. Г. Михлин, *Вариационные методы в математической физике* (Наука, Москва, 1970).

[2] S. H. Gould, *Variational Methods for Eigenvalue Problems* (University of Toronto Press, Toronto, 1966).

[3] *Abstract Booklet, 16–th European Conference on Few–Body Problems in Physics* (Grenoble, France, 1998).

[4] D. M. Fromm, R. N. Hill, Phys. Rev. A **36**, 1013 (1987).

[5] F. Harris, Rhys. Rev. A **55**, 1820 (1997).

[6] І. В. Сименог, О. М. Пушкаш, А. Б. Бестужева, Укр. фіз. журн. **40**, 1138 (1995).

[7] В. И. Кукулин, Изв. Акад. Наук СССР, сер. физ. **39**, 535 (1975).

[8] В. М. Краснопольский, В. И. Кукулин, Изв. Акад. Наук СССР, сер. физ. **39**, 543 (1975).

[9] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky, J. Phys. G **3**, 795 (1977).

[10] Н. Н. Колесников, В. И. Тарасов, Яд. физ. **35**, 609 (1982).

[11] K. Varga, Y. Suzuki, I. Tanihata, Phys. Rev. C **52**, 3013 (1995).

[12] K. Varga, Y. Suzuki, Phys. Rev. C **52**, 2885 (1995).

[13] K. Varga, Y. Suzuki, Phys. Rev. A **53**, 1907 (1996).

[14] Б. Є. Гринюк, І. В. Сименог, Укр. фіз. журн. **45**, 21 (2000).

[15] Б. Є. Гринюк, І. В. Сименог, Укр. фіз. журн. **45**, 625 (2000).

[16] P. Jetzer, Phys. Repts. **220**, 163 (1992).

[17] M. Membrado, A. F. Pacheco, J. Sanudo, Phys. Rev. A **39**, 4207 (1989).

[18] R. Ruffini, S. Bonazzola, Phys. Rev. **187**, 1767 (1969).

[19] И. В. Сименог, Яд. физ. **10**, 281 (1969).

[20] Н. П. Охрименко, И. В. Сименог, Яд. физ. **50**, 177 (1989)..

[21] І. В. Сименог, Укр. фіз. журн. **17**, 1906 (1972).

[22] І. В. Сименог, Укр. фіз. журн. **17**, 1911 (1972)..

[23] I. V. Simenog, Phys. Lett. B **40**, 53 (1972).

[24] И. В. Сименог, Теор. мат. физ. **15**, 266 (1973).

[25] Л. Г. Заставенко, Теор. мат. физ. **15**, 307 (1973).

[26] E. H. Lieb, B. Simon, Phys. Rev. Lett. **31**, 681 (1973).

[27] И. В. Сименог, Теор. мат. физ. **20**, 235 (1974).

[28] P. Hertel, W. Thirring, Commun. Math. Phys. **24**, 22 (1971).

[29] E. H. Lieb, B. Simon, J. Chem. Phys. **61**, 735 (1974).

[30] Т. К. Ребане, Журн. эксп. теор. физ. **99**, 1658 (1991).

[31] Т. К. Ребане, О. Н. Юсупов, Опт. спектроскоп. **73**, 875 (1992).

[32] Т. К. Ребане, О. Н. Юсупов, Журн. эксп. теор. физ. **102**, 1762 (1992).

[33] А. М. Фролов, Журн. эксп. теор. физ. **92**, 1959 (1987).

[34] D. B. Kinghorn, Int. J. Quantum Chem. **57**, 141 (1996).

[35] A. Kolakowska, J. D. Talman, Phys. Rev. E **53**, 4236 (1996).

[36] Б. Парлетт, *Симметричная проблема собственных значений* (Мир, Москва, 1983).

[37] Дж. Уилкинсон, К. Райнш, *Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра* (Машиностроение, Москва, 1976).

[38] A. M. Frolov, Phys. Rev. A **57**, 2436 (1998).

PRECISE VARIATIONAL CALCULATIONS OF ENERGY SPECTRA OF COULOMB–TYPE THREE– AND FOUR–PARTICLE SYSTEMS

S. M. Bubin[1], I. V. Simenog[1,2]
[1] *Department of Physics, Taras Shevchenko Kyiv National University, 6 Hlushkov Av., Kyiv, UA–03127, Ukraine*
e–mail: bubin@i.am
[2] *Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 14–b Metrologichna Str., Kyiv, UA–03143, Ukraine*
e–mail: isimenog@bitp.kiev.ua

We consider basing on the Galerkin variational method with the Gaussian basis, the bound states of the Coulomb–type quantum systems of gravitating identical particles. The approach is applied to the three–particle system with a varying permutational symmetry of wave functions and to the four–particle system with fully symmetrical wave functions. A qualitative analysis of the energy spectra is performed. The contribution of Jastrow's correlations to the ground–state energy of the three–boson system is studied. Precise calculations of the binding energies of the ground state and a few lowest states with zero angular momentum are carried out. The rms radii, density distributions and formfactors, pair correlation functions, and momentum distributions are calculated and analysed for different energy states. The energies of the systems with the Yukawa–type interaction potentials are estimated. Some methods of highly accurate variational calculations are discussed. A significant attention is given to the problem of selecting nonlinear variational parameters.