

РОЗРАХУНКИ ЗВ'ЯЗАНИХ СТАНІВ У СТОХАСТИЧНОМУ ВАРІАЦІЙНОМУ МЕТОДІ З НЕСИМЕТРИЗОВАНИМИ БАЗИСАМИ

І.В. СИМЕНОГ, М.В. КУЗЬМЕНКО, В.М. ХРЯПА

УДК 530.145
©2010

Інститут теоретичної фізики НАН України
(Вул. Метрологічна, 14b, Київ 03143; e-mail: ivsimenog@bitp.kiev.ua)

Досліджено можливості встановлення симетрійних властивостей енергетичних станів в системах трьох та чотирьох частинок з нульовим кутовим моментом у стохастичних варіаційних розрахунках без попередньої симетризації станів за координатами тотожних частинок. Виявлено, що у стохастичних варіаційних розрахунках енергетичні спектри включають рівні всіх можливих для даної системи симетрій, якщо це дозволено суперпозицією базисів, що використовуються. Запропоновано локальні та інтегральні схеми встановлення перестановної симетрії за результатами розрахунків зв'язаних станів. Показано, що для енергетичних станів квантових систем декількох частинок нижче найнижчого порога розвалу на підсистеми перестановної симетрії (схеми Юнга) можуть бути встановлені з високою точністю. Стани ж вище найнижчого порогу розвалу, якщо він навіть заборонений, можна розглядати лише на відповідно симетризованих базисах.

На практиці важливо відповісти на питання – при яких умовах можливо у стохастичних варіаційних методах (СВМ) з використанням базисів без заданої симетрії відновити дану симетрію і крім того, чи доцільно це робити з практичної точки зору. Більше того, чи завжди доцільним є спочатку встановити симетрію, а вже потім робити розрахунки на базисах даної симетрії?

У даній роботі на прикладі деяких три- та чотирьохчастинкових кулонівських систем з використанням прецизійних схем варіаційних стохастичних методів дану задачу розв'язано відносно встановлення перестановних властивостей багаточастинкових хвильових функцій.

1. Вступ

Успіхи варіаційних досліджень квантових систем декількох частинок різної природи (див. [1–8]) відкривають можливості порівняння різних схем побудови базисів та встановлення симетрійних властивостей енергетичних станів у результаті прецизійних розрахунків. Більше того, актуальним є питання, чи є в сучасних варіаційних підходах можливість встановлення в результаті розрахунків різноманітних прихованих симетрій та симетрійного виродження енергетичних спектрів і чи може бути конкурентним такий підхід у порівнянні зі стандартною схемою, коли симетрія багаточастинкових задач встановлюється аналітично до розрахунків. Такі підходи можуть бути перспективними як для кінематичних симетрій типу заданих орбітальних моментів для сферично симетричних, або частково симетричних, потенціалів взаємодії, та для заданих перестановних симетрій для тотожних частинок, або частинок з близькими властивостями, так і для встановлення квазісиметрій, породжених динамічними особливостями задач.

2. Формулювання проблеми з порушеною симетрією у СВМ

Використання варіаційних методів у розрахунках зв'язаних станів квантових систем різної природи зі значною кількістю частинок наштовхується, крім всього іншого, ще й на трудність у побудові хвильової функції (х.ф.) заданої симетрії за координатами тотожних частинок, коли число доданків х.ф. зростає як $n!$ для n тотожних частинок. Це може приводити, за рахунок помилок округлення, до погіршення точності обчислення матричних елементів гамільтоніанів і поганої зумовленості енергетичних матриць, які входять у лінійні алгебраїчні рівняння на власні значення, та унеможливлення подальших розрахунків. Водночас використання певних схем СВМ, що вже давно зарекомендувало себе як один з найбільш перспективних підходів [5], відкриває можливість встановлення симетрійних властивостей енергетичних станів у процесі їх отримання із принципу мінімуму енергій для кожного зі зв'язаних станів.

У варіаційному методі Гальборкіна хвильові функції зв'язаних станів мають вигляд

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i, \quad (1)$$

де c_i – лінійні варіаційні параметри, що визначають ймовірність присутності певної конфігурації ϕ_i (базисної функції); N – розмірність базису, а в ролі базисних функцій для нульового повного кутового моменту будемо використовувати базис гаусового типу:

$$\phi_i = \exp\left(-\sum_{k<l}^n a_{kl}^i \mathbf{r}_{kl}^2\right), \quad (2)$$

як один з найпростіших і достатньо універсальний. Тут n – кількість частинок; a_{kl}^i – нелінійні варіаційні параметри; $r_{kl} = |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l|$ – міжчастинкові відстані, яких достатньо для опису внутрішніх станів систем n частинок. Варіаційна задача зводиться до розв'язання систем лінійних рівнянь по відношенню до c_i (дискретне алгебраїчне представлення для рівняння Шрьодінгера):

$$\sum_{j=1}^N \{\langle \hat{S}\phi_i | \hat{H} - E | \hat{S}\phi_j \rangle\} c_j = 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad (3)$$

де у стандартному підході оператор симетризації \hat{S} фіксує певну схему Юнга відносно перестановок тотожних частинок для гамільтоніана \hat{H} . У результаті розрахунку стандартних лінійних систем алгебраїчних рівнянь (3) окремо для кожної заданої перестановки симетрії (схеми Юнга) отримуються енергетичні рівні E_α та відповідні взаємно ортогональні хвильові функції.

Головною і досить громіздкою проблемою варіаційного методу є знаходження оптимальних (найнижчих) значень енергетичних рівнів E_α відносно нелінійних варіаційних параметрів a_{kl}^i , для чого найбільш універсальним є стохастичний варіаційний метод, коли реалізуються випадкові виборки для масиву нелінійних варіаційних параметрів. У той же час у СВМ навіть без використання попередньої симетризації за тотожними частинками енергетична матриця $\langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$ містить в загальному випадку різноманітні блоки, які наближено ефективно реалізують всі можливі перестановки симетрії відповідних станів. Тим самим ми маємо можливість дослідити ефективність такої схеми, коли сама варіаційна процедура стохастичної оптимізації може реалізувати як надійний розрахунок енергетичного спектра, так і встановити

належну перестановку симетрію хвильових функцій (це питання піднімалось також в роботі [9]).

Розглянемо вираз для матричних елементів (інтегралів перекриття) $\Lambda_\alpha^{(P)} = \langle \Psi_\alpha | P \Psi_\alpha \rangle$, де P – оператори перестановки координат тотожних частинок. Величини $\Lambda_\alpha^{(P)}$ для стану α по всім перестановкам координат частинок можуть бути мірою симетрії даної хвильової функції. Для k тотожних частинок всього буде $k!$ таких перестановок, що утворюють групу перестановок P_k . Обчислення цих величин дають можливість виявити в загальному випадку симетрію, тобто до якого незвідного представлення групи P_k належить хвильова функція Ψ_α . Так, у випадку двох тотожних частинок 1 і 2, якому відповідає група перестановок P_2 , існують два одновимірні представлення – симетричне і антисиметричне, для яких величини $\Lambda_\alpha^{(21)}$ набувають, відповідно, двох значень 1 і -1 . У випадку трьох тотожних частинок таких схем Юнга, очевидно, вже три – одновимірне повносиметричне представлення [3], повністю антисиметричне представлення [1³] і двовимірне представлення [21] групи перестановок P_3 .

3. Розрахунки енергетичних спектрів і встановлення перестановки симетрії

3.1. Атом гелію

Як найпростіший приклад розглянемо розрахунок енергетичного спектра атома гелію з варіаційними функціями (1) для нульового кутового моменту без попередньої симетризації відносно координат тотожних електронів. Гамільтоніан такої тричастинкової системи (в а.о.)

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{2M} + \frac{1}{r_{12}} - Z \left(\frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \right), \quad (4)$$

де заряд ядра He (α -частинки) $Z = 2$ і маса в одиницях електронної маси $M = 7294, 299537$. Зауважимо, що енергетичний спектр гамільтоніана (4) безмежний для заданого кутового моменту і з різних точок зору досліджений вже давно. Крім того, симетричні (парагелій) та антисиметричні (ортогелій) стани відносно перестановки координат ($1 \leftrightarrow 2$) чергуються (див. обговорення у [8]). Метою наших розрахунків у цій задачі є досягнення надійної точності обчислення енергетичного спектра і зосередження головної уваги на симетричних властивостях х.ф. відносно перестановки двох електронів ($1 \leftrightarrow 2$) на базисах без апріорно заданої симетрії.

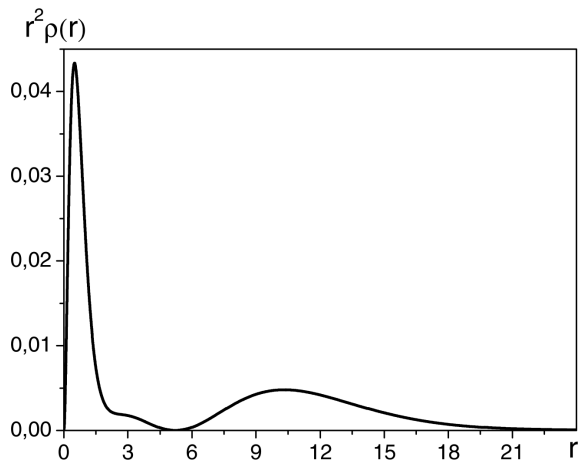


Рис. 1. Розподіл густини електронів у 3-му збудженому стані атома He

Результати розрахунків спектра та інтеграла перекриття $\Lambda_i^{(21)}$ на базисі із залученням 300 гаусоїд наведено в табл. 1. Відзначимо, по-перше, що всі розраховані рівні (друга колонка) без попереднього задання симетрії мають достатню точність – практично для всіх рівнів з табл. 1 похибка становить одиниці в 5-му–6-му знаках порівняно з прецизійними розрахунками з [8] (четверта колонка). Особливо висока точність досягається для основного стану, який має максимальну симетрію і відділений від наступного рівня (антисиметричного) значним інтервалом (щільною). Це є характерним для атомного режиму. По-друге, третя колонка показує, що для перших 10-ти–12-ти рівнів відповідна перестановна симетрія по 1-му та 2-му електрону встановлюється також надійно. Природно, якщо збільшити кількість базисних функцій, то точність розрахунку енергій та характеристик відповідної симетрії зростає. По-третє, перестановна симетрія різних станів відновлюється не завжди монотонно, а з певним тимчасовим порушенням симетрії залежно від поступового нарощування несиметризованого базису, але в середньому достатньо близько 50-ти базисних функцій (2), щоб з достовірністю була відновлена перестановна симетрія. Доречно відзначити, що відстань від певного антисиметричного рівня до попереднього симетричного рівня більша за відстань між симетричним та попереднім антисиметричним рівнями. Зауважимо, що ступінь відновлення перестановної симетрії може демонструвати також збігання розподілів густини обох електронів (визначення див. в роботі [10]). На рис. 1 наведено приклад розрахунку розподілу густини електронів для третього збудженого рівня (першого збудженого ан-

тисиметричного стану). Для нижчих рівнів розподіли густини та парні кореляційні функції повністю збігаються з точними результатами з [6] на 300 базисних функціях, і ці розподіли збігаються між собою. З рис. 1 випливає, що атом гелію у першому антисиметричному збудженому стані має досить значні розміри з електронною середньоквадратичною відстанню (с.к.в.) до центра мас атома гелію $\langle r^2 \rangle_e^{1/2} = 8,289(a.u.)$ та специфічною трирежимною поведінкою розподілу густини електронів. До речі, с.к.в. α -частинки, маса якої є значною, відносно центра мас дуже мала $\langle r^2 \rangle_\alpha^{1/2} = 0,0016$, с.к.в. між електронами така: $\langle (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2 \rangle_{ee}^{1/2} = 11,727$, а с.к.в. між електроном і α -частинкою $\langle (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)^2 \rangle_{e\alpha}^{1/2} = 8,290$ близька до електронної с.к.в. Зауважимо, що електронний розподіл густини 3-го збудженого рівня (1-го антисиметричного збудженого рівня) атома гелію практично зануляється при $r = r_0 = 5,218$ і далі має протяжне гало, а кореляційна функція $g_{e\alpha}(r)$ в значній мірі близька до $\rho_e(r)$ через значну масу ядра. В той же час, як отримано в [10], внаслідок значних кореляційних ефектів електронні розподіли густини основного та перших двох збуджених рівнів (обох симетрій) не зануляються в скінченній області відстаней.

Крім того, ці розподіли мають два режими: внутрішня частина електронного розподілу повторюється у всіх станах, а гало-структура першого збудженого симетричного стану має інші характерні розміри. Для більш високих збуджених рівнів розподіли густини електронів близькі до кореляційних функцій електрон-ядро і мають осцилюючий характер в залежності від r – розподіли густини для збудженого k -го симетричного стану та збудженого $(k - 1)$ -го ан-

Т а б л и ц я 1. Енергетичний спектр та інтеграли перекриття $\Lambda_i^{(21)}$ для атома гелію

i	$-E_i$	$\Lambda_i^{(21)}$	$-E_i$ із [8]
0	2,9033031	0,999952	2,9033044
1	2,1749285	-0,999950	2,17493011
2	2,1456621	0,999929	2,14567849
3	2,0684045	-0,998911	2,06840517
4	2,0609761	0,998858	2,060989
5	2,0362326	-0,994342	2,03623268
6	2,033274	0,994178	2,03330771
7	2,022301	-0,966029	2,022344
8	2,020816	0,964221	2,0208997
9	2,014856	-0,955985	2,01510
10	2,013798	0,953298	2,0142867
11	2,008703	-0,903414	2,01852
12	2,008066	0,907575	2,0103483

тисиметричного стану мають $(k - 1)$ нулів і доволі протяжне гало. В цілому, для більш високих станів точність розрахунків енергії, а тим більше розподілів густини та інших структурних функцій, в схемі без заданої симетрії погіршується, і більш ефективним є повернення до схеми розрахунків з заданою перестановною симетрією відносно двох електронів.

3.2. Симетрійні властивості станів системи трьох гравітуючих частинок

Наступною задачею розглянемо симетрійні властивості різних станів на базисі (2) без заданої симетрії з нульовим кутовим моментом для трьох самогравітуючих частинок з гамільтоніаном

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 + \mathbf{p}_3^2}{2} - \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \right). \quad (5)$$

Гамільтоніан (5) має безмежні енергетичні спектри для заданого кутового моменту і для кожної перестановної симетрії нижче відповідного двочастинкового порога розвалу (див. [6]) – для одновимірного повносиметричного представлення [3] та двовимірного представлення [21] групи перестановок Π_3 нижче порогової енергії $-1/4$, а для повністю антисиметричного представлення [1³] нижче порога $-1/16$. При цьому рівні зі схемою Юнга [21] є двократно виродженими в точній постановці. Як все це відтворюється у стохастичних варіаційних розрахунках на несиметризованих базисах?

У табл. 2 наведено розрахований на несиметризованому базисі енергетичний спектр (друга колонка) з

Т а б л и ц я 2. Енергетичний спектр та домінуючі ймовірності схем Юнга на несиметризованих базисах для трьох гравітуючих частинок

i	$-E_i$	симетрія – $\Gamma_\alpha^{[k]}$	$-E_i, [6]$
0	1,071778933	[3]: 0,99999999	1,07177937297
1	0,5744912	[3]: 0,99999993	0,57449221540
2	0,4528858	[21]: 0,999999909	0,4528869754
3	0,4528850	[21]: 0,99999992	-/-
4	0,393785	[3]: 0,99999951	0,39381649823
5	0,359535	[21]: 0,999999734	0,3595387446
6	0,35952287	[21]: 0,99999763	-/-
7	0,330819	[3]: 0,999979	0,33082419747
8	0,31678	[21]: 0,99999533	0,3167897461
9	0,316771	[21]: 0,99996357	-/-
10	0,3019888	[3]: 0,999831	0,301992565558
11	0,2947328	[21]: 0,999981	0,2947441034
12	0,2947176	[21]: 0,999605	-/-
13	0,2862493	[3]: 0,99773	0,28625287633

750 базисними функціями (2), в четвертій колонці наведені прецизійні розрахунки енергій з [6] у стандартній схемі з заданими схемами Юнга. Відзначимо спочатку принциповий факт, що вище енергії найнижчого двочастинкового порога розвалу $E_0(2) = -0,25$ маємо в підході без заданої перестановної симетрії область суцільного спектра, де прямий варіаційний розрахунок зв'язаних станів всякої симетрії втрачає сенс. Тоді в підході без заданої симетрії відсутня можливість відновлення навіть найнижчого повністю антисиметричного стану трьох частинок (протилежний результат для певної шестичастинкової ядерної задачі міститься в роботі [9]). У підході з заданою симетрією [6] відоме прецизійне значення енергії найнижчого повністю антисиметричного стану $E_0^a(3) = -0,127445$ лежить вище найнижчого двочастинкового порога $-0,25$. Цей факт є принциповим і для інших систем тотожних частинок з використанням несиметризованої схеми варіаційних розрахунків і не дозволяє просунутися вище найнижчого двочастинкового енергетичного порога.

Зупинимось більш детально на розрахункових проблемах у схемі без заданої симетрії для гамільтоніана (5). По-перше, для збуджених станів реалізується чергування однократно та наближено двократно вироджених (квазивироджених) енергетичних рівнів – зі збільшенням базису і збільшенням точності розрахунку виродження стає все більш достовірним.

Уже цей факт підтверджує, що двократно квазівироджені рівні відносяться до серії зі схемою Юнга [21]. Зауважимо, що для трьох самогравітуючих частинок абсолютно найнижчий повносиметричний основний стан має когерентний характер і відділений досить помітним інтервалом (щільною) від першого збудженого стану, який також є повносиметричним. По-друге, для надійного відновлення перестановної симетрії наближено розрахованих станів ми використали ще декілька прийомів. Так, були використані амплітуди монопольних переходів

$$\left\langle \Psi_\alpha \left| \sum_{i < j} r_{ij}^2 \right| \Psi_\beta \right\rangle \quad (6)$$

між різними станами α і β . Оскільки хвильова функція основного стану є повносиметричною відносно перестановок координат, то підсилені переходи (6) між основним та збудженими станами можуть бути лише між станами однакової перестановної симетрії і сильно подавлені – для станів різної перестановної симетрії. Цей прийом виявився достатньо надійним для перших 6-ти–10-ти рівнів і підтвердив, що перші два

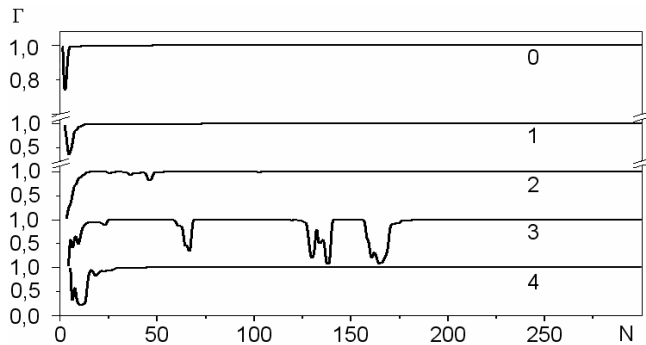


Рис. 2. Ймовірності реалізації домінуючих схем Юнга в залежності від кількості базисних функцій для системи трьох гравітуючих частинок

рівні з табл. 2 мають однакову симетрію, а наступні два квазівироджені рівні мають іншу симетрію, потім знову йде симетричний рівень, а потім два рівні іншої симетрії. Для більш високих збуджених рівнів цей прийом поступово втрачає надійність, крім переходів між сусідніми рівнями. Звичайно, переходи (6) між далекими станами сильно подавлені і вимагають дуже точних розрахунків з великими базисами.

Ми систематично розглянули також встановлення перестановної симетрії отриманих функцій уже після проведення варіаційних розрахунків, для чого із отриманих функцій $\Psi_\alpha(123)$ для кожного стану було побудовано всі незвідні представлення – симетрична відносно перестановок функція ([3]):

$$\Psi^s(123) = \Psi(123) + \Psi(132) + \Psi(213) + \Psi(231) + \Psi(312) + \Psi(321), \quad (7)$$

антисиметрична функція ([1³]):

$$\Psi^a(123) = \Psi(123) - \Psi(132) - \Psi(213) + \Psi(231) + \Psi(312) - \Psi(321) \quad (8)$$

та незвідне представлення [21]:

$$\Psi'(123) = \frac{\sqrt{3}}{2} \{ \Psi(231) + \Psi(213) - \Psi(312) - \Psi(321) \},$$

$$\Psi''(123) = -\frac{1}{2} \{ \Psi(213) + \Psi(231) + \Psi(312) + \Psi(321) \} + \Psi(123) + \Psi(132) \quad (9)$$

(до речі, представлення [21] має дві еквівалентні реалізації). Тоді нормовані на одиницю несиметризовані

функції $\Psi_\alpha(123)$ можуть бути розкладені за функціями (7)–(9) (також попередньо нормованими на одиниці) незвідних представлень групи перестановок

$$\Psi_\alpha = \sum_{[k]} N_\alpha^{[k]} \Psi_\alpha^{[k]}. \quad (10)$$

Квадрати коефіцієнтів розкладу $N_\alpha^{[k]}$ (інтегралів перекриття між хвильовою функцією Ψ_α (х.ф.) без априорі заданої симетрії та х.ф. з відновленими перестановними симетріями $\Psi_\alpha^{[k]}$) $\Gamma_\alpha^{[k]} = (N_\alpha^{[k]})^2$ визначають ймовірність в α -стані наявності відповідних схем Юнга (з нормуванням $\sum_{[k]} \Gamma_\alpha^{[k]} = 1$, де підсумовування ведеться за всіма схемами Юнга).

У табл. 2 в третій колонці наведено домінуючі ймовірності відповідної перестановочної симетрії $\Gamma_\alpha^{[k]}$ в базисі 750-ти базисних функцій, що демонструє однозначно практичну чистоту станів відносно перестановок. Підкреслимо, що для розглянутих станів повністю антисиметричне представлення не реалізується, оскільки цей стан знаходиться вище дво-частинкового енергетичного порога $E_0(2) = -0,25$. Досить цікавими виявилися немонотонні залежності ймовірності заданих схем Юнга $\Gamma_\alpha^{[k]}$ від кількості врахованих базисних функцій, коли проявилась відсутність однозначної кореляції між уточненням енергії і уточненням симетрії (ефект “порушення симетрії”). Розглянемо найпростішу і достатньо економну схему нарощування базису в (1), коли додається по одній базисній функції і для нелінійних параметрів лише в добавленій функції здійснюється велика стохастична виборка (приблизно $2 \cdot 10^5$). Більше того, стохастична мінімізація за нелінійними параметрами проводилась окремо для кожного стану. На рис. 2 для основного стану (крива 0) представлена залежність домінуючої ймовірності відновленої схеми Юнга [3] $\Gamma_\alpha^{[k]}$ від кількості базисних функцій. Як видно, врахування одної, двох і трьох базисних функцій (2) у варіаційному методі зі стохастичною вибіркою нелінійних варіаційних параметрів поступово покращує енергію, а х.ф. залишається повносиметричною і залежною лише від квадрата гіперрадіуса:

$$\rho^2 = r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2. \quad (11)$$

Урахування ж четвертої базисної функції (2) дещо покращує енергію, але порушує симетрію (на рівні 0,2%) х.ф. основного стану. Цей ефект порушення

симетрії х.ф. при уточненні енергії є достатньо загальним для різних потенціалів взаємодії і з базами різної розмірності. У подальшому немонотонність (порушення симетрії) $\Gamma_0^{[3]}$ залежно від кількості базисних функцій також має місце (особливо для не дуже великої кількості базисних функцій), але в середньому вже достатньо 50-и базисних функцій для надійного встановлення повносиметричного характеру х.ф. основного стану, коли величина $\Gamma_0^{[3]}$ виходить на асимптотичне значення одиницю. Для першого збудженого стану величина $\Gamma_1^{[3]}$ характеризує також домінуючий повносиметричний характер х.ф. і знову проявляються певні осциляції (порушення симетрії), хоча достатньо базисних функцій порядку 50-ти (крива 1 на рис. 2) для встановлення схеми Юнга [3]. Кривими 2 та 3 на рис. 2 наведено залежності від кількості базисних функцій ймовірності реалізації схеми Юнга [21] для другого та третього збуджених станів відповідно. Крива 4 відповідає ймовірності повносиметричної схеми для четвертого збудженого стану. Як видно, для всіх цих випадків відповідні схеми Юнга достовірно встановлені (хоча і немонотонно з незначним порушенням симетрії для невеликої кількості базисних функцій) з базами дещо більшими 50-ти функцій, коли досягається асимптотика. Аналогічні розрахунки було виконано і для майже 10-ти збуджених станів. В цілому для більш високих рівнів необхідно більше базисних функцій як для отримання певної точності для енергії, так і для встановлення належних асимптотик для коефіцієнтів симетрії.

Що стосується поведінки структурних функцій трьох гравітуючих частинок, таких як одночастинкові розподіли густини частинок та парні кореляційні функції, в схемі використання базисів без симетризації, то ситуація досить близька до розглянутого раніше атома гелію. Вже близько 100 базисних функцій (2) достатньо, щоб для основного та першого збудженого рівнів ці структурні функції не залежали від но-

Т а б л и ц я 3. Інтеграли перекриття для найнижчих рівнів і всіх перестановок у системі трьох гравітуючих частинок

j	ε_j	Λ_{jj}^P					
		123	132	321	213	231	312
0	1,0717570	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
1	0,5742926	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
2	0,4528858	1,00	0,50	-0,50	-1,00	-0,50	-0,50
3	0,4517665	1,00	-0,50	-0,49	1,00	-0,50	-0,50
4	0,3903133	1,00	0,93	0,94	1,00	0,93	0,93

мера частинок і кількісно збігалися з прецизійними результатами з роботи [6].

Ця одна схема часткової симетризації може бути використана в цій та інших задачах. Наприклад, якщо апіорі хвильову функцію симетризувати лише відносно якихось двох частинок, то приблизно кількість рівнів зменшиться вдвоє при заданій розмірності базису, що використовується і точність відповідних розраховуваних рівнів збільшиться, як і ймовірність відновленої симетрії.

3.3. Аналіз повного набору перестановок

Тут розглянемо більш детально інтеграли перекриття $\Lambda_\alpha^{(P)} = \langle \Psi_\alpha | P \Psi_\alpha \rangle$, але в меншому базисі, і врахуємо роль всіх перестановок в системі трьох тотожних гравітуючих частинок. Результати розрахунків на базисі 220 гаусоїд наведено в табл. 3, де енергії зв'язку $\varepsilon_j \equiv -E_j$. Мінімізація виконувалась за 2-м збудженим рівнем. Тут і далі комбінаціями цифр 123, 132 і т. д. позначено перестановку координат частинок $P = \begin{pmatrix} 123 \\ 123 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 123 \\ 132 \end{pmatrix}$ і т. д. З табл. 3 видно, що основний і перший збуджений стани є повносиметричними і реалізують одновимірні представлення, а для 2-го і 3-го збуджених станів спостерігається квазівиродження, рівні розщеплені внаслідок наближеності розрахунків, і реалізується двовимірне представлення, що відповідає змішаній симетрії. Далі бачимо, що 4-й збуджений стан знову є наближено повносиметричним.

Розглянемо детально реалізацію двовимірного представлення групи перестановок P_3 , якому відповідають 2-й і 3-й збуджені стани. Утворимо двовимірні вектори $f = \begin{pmatrix} \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \end{pmatrix}$ і $f^P = \begin{pmatrix} P\Psi^{(2)} \\ P\Psi^{(3)} \end{pmatrix}$, де $\Psi^{(2)}$ і $\Psi^{(3)}$ хвильові функції, відповідно, 2-го і 3-го збуджених станів, а P – деяка перестановка координат тотожних частинок. Тоді, як відомо, $f^P = A^P f$, де $A^P = \{a_{ij}^P\}$ – матриці незвідного двовимірного представлення групи P_3 . Тобто маємо систему рівнянь

$$P\Psi^{(2)} = a_{11}\Psi^{(2)} + a_{12}\Psi^{(3)},$$

$$P\Psi^{(3)} = a_{21}\Psi^{(2)} + a_{22}\Psi^{(3)}. \quad (12)$$

Звідки, завдяки ортогональності хвильових функцій, впливає така формула:

$$a_{ij}^P = \Lambda_{(i+1)(j+1)}^P, \quad i, j = \overline{1, 2}. \quad (13)$$

В табл. 4 наведені розрахунки величин Λ і a_{ij}^P для всіх перестановок.

Дані табл. 4 дозволяють побудувати матриці A^P , які мають такий вигляд:

$$A^P = \begin{matrix} & \begin{matrix} 123 & 132 & 321 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 123 \\ 213 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1,0 & 0 \\ 0 & 1,0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0,50 & -0,86 \\ -0,86 & -0,50 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0,50 & 0,87 \\ 0,87 & -0,49 \end{pmatrix}, \\ & \begin{pmatrix} -1,0 & 0 \\ 0 & 1,0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -0,50 & -0,86 \\ 0,86 & -0,50 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -0,50 & 0,86 \\ -0,86 & -0,50 \end{pmatrix}. \end{matrix} \quad (14)$$

Оскільки $\sqrt{3}/2 \approx 0,866025$, то бачимо відтворення в даному розрахунку представлення еквівалентного незвідному двовимірному представленню групи пере-

становок Π_3 , причому циклічні перестановки 231 і 312 відтворюються повністю, а транспозиції 132, 321, 213 вимагають деякого подібного перетворення:

$$M^{-1}A^PM = \begin{matrix} & \begin{matrix} 123 & 132 & 321 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 123 \\ 213 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1,0 & 0 \\ 0 & 1,0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -0,50 & 0,86 \\ 0,86 & +0,50 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -0,49 & -0,87 \\ -0,87 & 0,50 \end{pmatrix}, \\ & \begin{pmatrix} 1,0 & 0 \\ 0 & -1,0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -0,50 & -0,86 \\ 0,86 & -0,50 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} -0,50 & 0,86 \\ -0,86 & -0,50 \end{pmatrix}, \end{matrix} \quad (15)$$

де

$$M = \begin{pmatrix} \cos(\pi/2) & -\sin(\pi/2) \\ \sin(\pi/2) & \cos(\pi/2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Т а б л и ц я 4. Матриця двовимірного представлення a_{ij}^P і інтеграли перекриття для 2-го та 3-го збуджених рівнів трьох гравітуючих частинок

		123	132	321	213	231	321
a_{11}^P	Λ_{22}^P	1,00	0,50	0,50	-1,00	-0,50	-0,50
a_{12}^P	Λ_{23}^P	0,00	-0,86	0,87	0,00	0,86	-0,86
a_{22}^P	Λ_{33}^P	1,00	-0,50	-0,49	1,00	-0,50	-0,50
a_{21}^P	Λ_{32}^P	0,00	-0,86	0,87	0,00	-0,86	0,86

Під час розрахунків з мінімізацією по 3-му збудженому рівню розщеплення рівнів суттєво зменшується,

також відтворюється представлення еквівалентне незвідному, але кут подібного перетворення, що зводить одне до другого може бути довільний. Результати таких розрахунків з базисом 204 гаусоїди наведено в табл. 5.

З цієї таблиці бачимо, що структура станів системи не змінилась, а точність за рахунок достатньої близькості квазівироджених станів суттєво поліпшилась навіть при дещо меншому базисі. Представлення еквівалентне незвідному має вигляд

Т а б л и ц я 5. Розрахунок симетричних властивостей найнижчих станів з урахуванням унітарних перетворень (15) і мінімізацією за 3-им збудженим рівнем

j	ε_j	Λ_{jj}^P					
		123	132	321	213	231	312
0	-1,071751	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1	-0,5744743	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
2	-0,4528811	1,00000	-0,17706	-0,76381	0,94087	-0,50000	-0,50000
	$\Lambda_{23}^P \rightarrow$	1,00000	-0,98420	0,64543	0,33876	-0,86602	0,86602
3	-0,4528810	1,00000	0,17706	0,76381	-0,94087	-0,50000	-0,50000
	$\Lambda_{32}^P \rightarrow$	1,00000	-0,98420	0,64543	0,33876	0,86602	-0,86602
4	-0,3935422	1,00000	0,99966	0,99968	0,99979	0,99958	0,99958

$$A^P = \begin{pmatrix} 123 & & & & & & & \\ & 132 & & & & & & \\ & & 321 & & & & & \\ & & & 213 & & & & \\ & & & & 231 & & & \\ & & & & & 312 & & \end{pmatrix}, \quad (17)$$

Кут θ подібного перетворення можна знайти, наприклад, зі співвідношення $\sin 2\theta = 0,33876$, тоді $\theta = 0,1727993296$, подібне перетворення матиме вигляд

$$M = \begin{pmatrix} 0,9851073087 & -0,1719406592 \\ 0,1719406592 & 0,9851073087 \end{pmatrix},$$

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0,9851073087 & 0,1719406592 \\ -0,1719406592 & 0,9851073087 \end{pmatrix}.$$

Застосувавши це перетворення до матриць A^P , отримуємо

$$M^{-1}A^PM = \begin{pmatrix} 123 & & & & & & & \\ & 132 & & & & & & \\ & & 321 & & & & & \\ & & & 213 & & & & \\ & & & & 231 & & & \\ & & & & & 312 & & \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Як бачимо в даному розрахунку, детальна симетрія відновлюється з достатньо високою точністю.

Відомо, що характер представлення $D(P) = \sum_i A_{ii}^P$ відіграє важливу роль, оскільки не змінюється при подібних перетвореннях. Для двовимірних незвідних представлень групи Π_3 $D(P)$ набуває значень: 2 для тотожної перестановки, в наших позначеннях 123; 0 для транспозицій 132, 321, 213; та -1 для циклічних перестановок 231, 312. У наших розрахунках цей

факт підтверджується з високою точністю. Отже, достатньо було б не будувати матриці представлення та шукати подібне перетворення, а обчислити характери представлення. Точність цих обчислень і буде точністю відтворення симетрії.

Результати таких розрахунків в гаусоїдальному базисі розмірністю 542 функції представлено в табл. 6, де $\hat{D}(P)$ – точне значення характеристик двовимірного представлення. Мінімізація виконувалась за всіма

Т а б л и ц я 6. Розрахункові дані характеристик незвідних представлень групи перестановок для трьох гравітуючих частинок

$\hat{D}(P)$		2,0	0,0	0,0	0,0	-1,0	-1,0
j	ε_j	Λ_{jj}^P					
		123	132	321	213	231	312
0	-1,071776	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
1	-0,574488	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
2	-0,452883	1,00000	-0,994174	0,590427	0,403747	-0,500000	-0,500000
3	-0,452882	1,00000	0,994174	-0,590427	-0,403748	-0,500000	-0,500000
	$ D(P) - \hat{D}(P) $	$0,32 \cdot 10^{-13}$	$0,53 \cdot 10^{-6}$	$0,23 \cdot 10^{-6}$	$0,50 \cdot 10^{-7}$	$-0,68 \cdot 10^{-6}$	$-0,68 \cdot 10^{-6}$
4	-0,393803	1,00000	0,999998	0,999998	0,999998	0,999998	0,999998
5	-0,359517	1,00000	0,891803	-0,837704	-0,054097	-0,499998	-0,499998
6	-0,359506	1,00000	-0,891800	0,837707	0,054095	-0,499998	-0,499998
	$ D(P) - \hat{D}(P) $	$0,25 \cdot 10^{-13}$	$0,33 \cdot 10^{-5}$	$0,35 \cdot 10^{-5}$	$0,26 \cdot 10^{-5}$	$-0,39 \cdot 10^{-5}$	$-0,39 \cdot 10^{-5}$
7	-0,330728	1,00000	0,999897	0,999904	0,999978	0,999900	0,999900
8	-0,316719	1,00000	0,488361	0,511544	-0,999900	-0,499995	-0,499995
9	-0,316561	1,00000	-0,488158	-0,511320	0,999795	-0,499780	-0,499780
	$ D(P) - \hat{D}(P) $	$0,75 \cdot 10^{-13}$	$0,20 \cdot 10^{-3}$	$0,22 \cdot 10^{-3}$	$0,11 \cdot 10^{-3}$	$-0,22 \cdot 10^{-3}$	$-0,22 \cdot 10^{-3}$
10	-0,301797	1,00000	0,999137	0,999024	0,999871	0,999097	0,999097
11	-0,294636	1,00000	0,515815	0,483996	-0,999791	-0,499981	-0,499981
12	-0,294355	1,00000	-0,514688	-0,482861	0,999491	-0,498904	-0,498904
	$ D(P) - \hat{D}(P) $	$0,31 \cdot 10^{-13}$	$0,11 \cdot 10^{-2}$	$0,11 \cdot 10^{-2}$	$0,30 \cdot 10^{-3}$	$-0,11 \cdot 10^{-2}$	$-0,11 \cdot 10^{-2}$
13	-0,285861	1,00000	0,997556	0,996175	0,998018	0,996009	0,996009
14	-0,281520	1,00000	0,965797	-0,269215	-0,682057	-0,492610	-0,492610
15	-0,281053	1,00000	-0,954190	0,274642	0,694196	-0,492370	-0,492370
	$ D(P) - \hat{D}(P) $	$0,51 \cdot 10^{-11}$	$0,12 \cdot 10^{-1}$	$0,54 \cdot 10^{-2}$	$0,12 \cdot 10^{-1}$	$-0,15 \cdot 10^{-1}$	$-0,15 \cdot 10^{-1}$
16	-0,274792	1,00000	0,930606	0,992712	0,900378	0,913221	0,913221
17	-0,270548	1,00000	0,653855	-0,963852	0,331035	-0,488725	-0,488725
18	-0,268570	1,00000	-0,554538	0,966735	-0,199195	-0,390550	-0,390550
	$ D(P) - \hat{D}(P) $	$0,18 \cdot 10^{-10}$	$0,99 \cdot 10^{-1}$	$0,29 \cdot 10^{-2}$	0,13	-0,12	-0,12
19	-0,262261	1,00000	0,272561	0,977084	0,364904	0,314611	0,314611

рівнями послідовно з нарощуванням базисних функцій і стохастичною вибіркою нелінійних коефіцієнтів тільки для доданих функцій.

З таблиці видно, що в даному розрахунку симетрія відтворюється з достатньою точністю до 12-го рівня включно. Подальше підвищення точності можливе за рахунок збільшення базису, що, в свою чергу, вимагає збільшення розрядної сітки комп'ютера.

3.4. Приклади інших три- та чотиричастинкових систем

Аналогічно п. 3.2 було виконано розрахунки для трьох частинок у схемі без перестановної симетрії основного та найнижчих станів для низки інших пар-

них потенціалів, таких як лінійно залежний потенціал $V(r_{ij}) = \gamma r_{ij}$, суперпозиція лінійно залежного та осциляторного потенціалів, суперпозиція кулонівського та осциляторного потенціалів і т. д. Більш детально зупинимося на системі трьох тотожних частинок ($\hbar = M = 1$) з парними потенціалами у вигляді суперпозиції кулонівського та лінійного потенціалу:

$$V(r_{ij}) = \frac{\alpha}{r_{ij}} + \gamma r_{ij}, \tag{19}$$

який часто використовується як модельний міжкварковий потенціал взаємодії з конфайментом. Виберемо випадок $\alpha = -1$ і $\gamma = 0, 1$, коли спектр (безмежний) трьох самогравітуючих частинок (табл. 2) зсувається

вгору внаслідок наявності відштовхувального потенціалу в (19).

В табл. 7 (друга колонка) наведено значення розрахованих енергій та вказано схеми Юнга даних станів, визначені із аналізу монопольних переходів (6) та частково з використанням представлення (10). Очевидно, що дана задача трьох частинок для фіксованих кутових моментів і для всіх можливих перестановних симетрій має безмежні серії енергетичних рівнів, які необмежені зверху. У випадку, що розглядається, достатньо надійно встановлюється положення нижніх рівнів енергетичного спектра та їх перестановна симетрія з використанням лише критерію сили монопольних переходів (6). Як загальне зауваження відзначимо, що нижня частина спектра для потенціалу (19) групується так, що це нагадує спектр за наявності осциляторного потенціалу – основний стан відповідає “нульовій оболонці”, три наступні рівні відповідають “другій головній оболонці”, а шість наступних рівнів відповідають “четвертій головній оболонці”. Основний стан з “нульової оболонки” відділений щільною, як це відбувається і для інших притягувальних потенціалів, від наступного першого збудженого стану з “другої оболонки”, і обидва нижні рівні є повносиметричними. Найнижчі два рівні є повно-

симетричними внаслідок притягувального характеру вибраного нами потенціалу на малих відстанях. Наступні два квазівироджені рівні мають схему Юнга [21] і розташовані вже значно ближче до енергії попереднього рівня (також з “другої оболонки”), а потім з’являється повносиметричний рівень, відділений значним інтервалом вже з наступної “четвертої оболонки”. Наступні ж дві пари квазівироджених рівнів належать представленню зі змішаною симетрією [21]. Надалі з’являється повносиметричний рівень, який завершує четверту “оболонку”. З наступних рівнів відзначимо появу повністю антисиметричного стану (сумарно з урахуванням кратності виродження 17-й збуджений рівень), який, як відомо [11], належить шостій оболонці. Для його ідентифікації було розраховано монопольні переходи з сусідніми рівнями і остаточно встановлена його перестановна симетрія на основі (10). В середньому відстані між наступними високо збудженими рівнями стають все меншими (нагадаємо, що ми розглядаємо лінійно зростаючий потенціал, для якого інтервали між рівнями повинні зменшуватися для вищих збуджень).

Цікавими виявилися також результати у випадку чисто лінійного потенціалу ($\alpha = 0$ у (19)), коли було викинуто притягувальний потенціал. Енергетичні рівні та відновлену їх перестановочну симетрію наведено у третій колонці табл. 7. До речі, в цьому прикладі для всіх рівнів досягається найвища точність. Зауважимо також, що чергування різних симетрій децю змінюється в бік зсуву рівнів вищої симетрії вгору (з урахуванням також іншого масштабу за рахунок того, що ми вибрали $\gamma = 1$). Так, найнижчий антисиметричний рівень тепер став 16-м у загальному списку збуджень і належить до 6-ї “оболонки”. Для цього потенціалу досить чітко проявляються згрупування рівнів в оболонки навіть до 8-ї включно. Нагадаємо, що у випадку трьох частинок з осциляторним (квадратично залежним від r) потенціалом у всіх оболонках рівні є строго виродженими і вперше антисиметричний стан міститься в 6-й оболонці [11] (0-ва оболонка невироджена, 2-га оболонка трикратно вироджена, 4-та оболонка шестикратно вироджена, 6-та оболонка десятикратно вироджена і т. д.). Крім того, якщо до слабкого осциляторного потенціалу додати притягувальний кулон, то розташування рівнів буде аналогічне потенціалу (19), і у випадку “осцилятор плюс відштовхувальний кулон” знову повністю антисиметричний рівень буде десятим у списку всіх рівнів. Цікаві закономірності проявляються у випадку потенціалу (19) з відштовхувальним кулоном. Результати розрахунку для $\alpha = 1$ і $\gamma = 0, 1$ наведено

Т а б л и ц я 7. Енергетичні спектри і схеми Юнга для 3-х частинок з потенціалами (19) на несиметризованих базисах

i	$E_i(\alpha = -1, \gamma = 0, 1)$	$E_i(\alpha = 0, \gamma = 1)$	$E_i(\alpha = 1, \gamma = 0, 1)$
0	-0,5374711 [3]	6,1322623296 [3]	2,35863665 [3]
1	0,4351935 [3]	8,4460183583 [3]	2,6836025 [21]
2	0,6814962 [21]	8,6248514892 [21]	2,6836026 [21]
3	0,6814974 [21]	8,6248514892 [21]	2,7361357 [3]
4	1,088206 [3]	10,468906007 [3]	3,015767 [3]
5	1,225461 [21]	10,572169109 [21]	3,032422 [21]
6	1,225466 [21]	10,572169109 [21]	3,032424 [21]
7	1,466758 [21]	10,799850983 [21]	3,0402091 [21]
8	1,466760 [21]	10,799850983 [21]	3,0402106 [21]
9	1,5075641 [3]	10,970678650 [3]	3,0935262 [3]
10	1,615565 [3]	12,289856674 [3]	3,351440 [1 ³]
11	1,6860224 [21]	12,34459748 [21]	3,355503 [3]
12	1,6860522 [21]	12,34459750 [21]	3,360576 [21]
13	1,9215544 [3]	12,577399637 [21]	3,360587 [21]
14	1,9328835 [21]	12,577399664 [21]	3,366835 [21]
15	1,932899 [21]	12,70399441 [3]	3,366839 [21]
16	2,02983147 [3]	12,75225890 [1 ³]	3,38232 [21]
17	2,0486622 [1 ³]	12,82852283 [3]	3,38232 [21]
18	2,0753597 [3]	12,97594242 [21]	3,39606 [3]
19	2,089238 [21]	12,97594242 [21]	3,43508 [3]

в четвертій колонці табл. 7. Тут ще в більшій мірі рівні з вищою симетрією внаслідок відштовхування на малих відстанях зсунулися більш суттєво вгору. Відповідно повністю антисиметричні стани розташувалися відносно внизу. Так, найнижчий антисиметричний стан став 10-м збудженим рівнем у загальному списку (та найнижчим в 6-й оболонці), а наступний збуджений повністю антисиметричний стан став 20-м (і також найнижчим в 8-й оболонці). Перестановна симетрія всіх цих станів встановлена з використанням амплітуд монопольних переходів (6) та на основі представлення (10), але для високозбуджених станів вимагалось використовувати базис близько 300 функцій.

Розглянемо тепер коротко ще приклад встановлення перестановної симетрії в системах чотирьох частинок, зокрема для молекули водню. Нехай гамільтоніан (в *a.u.*)

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_3^2 + \mathbf{p}_4^2}{2} + \frac{Z^2}{r_{12}} + \frac{1}{r_{34}} - Z \left(\frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{14}} + \frac{1}{r_{23}} + \frac{1}{r_{24}} \right), \quad (20)$$

де відносна маса протона $M = 1836,152701$ і відносний заряд $Z = 1$. Результати розрахунку (табл. 8) спектра наведено в другій колонці (з несиметризованим базисом в 1200 компонент), а ймовірність домінуючої перестановочної симетрії згідно з представленням типу (10) наведено у третій колонці. Четверта колонка містить значення енергетичного спектра (з базисом на 1200 компонент) у стандартному методі з заданими симетричними за протонами та симетричними за електронами перестановками (*ss*). П'ята колонка містить найкращі літературні дані з роботи [12]. Зауважимо, по-перше, що рівнів інших симетрій крім *ss* для нульового кутового моменту немає, а по-друге, рівнів симетрії *ss* насправді 15 згідно зі спеціальними прецизійними розрахунками [12] та експериментальними даними нижче порога розвалу на два атома водню $4 \rightarrow 2 + 2$ з пороговою енергією $E_{\text{thres}} = -0,999455679432$. Наш розрахунок з гаусоїдним базисом в 1200 базисних функцій навіть з симетризованим базисом дозволяє отримати лише 8 рівнів і з точністю в 3-4 знаки. По-третє, несиметризований базис з 1200 гаусоїдами спроможний відтворити лише 5 енергетичних рівнів (з точністю в 2-3 знаки), але симетрія *ss* їх встановлюється напевно. Цей приклад молекули водню показує, що розрахунки в складних системах з несиметризованими базиса-

ми можуть сприйматися лише як якісні оцінки, а прецизійні розрахунки вимагають розробки спеціальних оптимізаційних варіаційних схем (див. [12]).

Нарешті, відносно системи чотирьох самогравітуючих частинок лише зауважимо, що в розрахунках з несиметризованим базисом наближено встановлюється порядок чергування різних рівнів з відновленнями перестановними симетріями. Так, основному стану відповідає повносиметрична схема Юнга [4] (див. посилання [6]), наступним рівнем, відділеним значним інтервалом (щільною), є також повносиметричний стан, наступні три квазівироджені рівні відповідають схемі Юнга [31], далі розташовані два квазівироджені рівні схеми Юнга [22]. Сьомим збудженим рівнем є також повносиметричний, який вже знаходиться в 4-й "головній оболонці" і відділений від нижніх рівнів певною щільною. Розрахунок наступних рівнів у схемі несиметризованого базису вже має відчутні похибки, і доцільно повернутися до стандартної схеми з заданими перестановними симетріями.

4. Висновки

У підсумку відзначимо головні результати.

1. Розрахунки у СВМ з несиметризованим базисом відносно перестановок тотожних частинок для систем трьох та чотирьох частинок дозволяють знайти з задовільною точністю всі низько розташовані енергетичні стани і одночасно задовільно встановлюється перестановна симетрія даних станів.

2. Несиметризований базис можливо використовувати лише нижче абсолютно найнижчого порога розвалу в області істинно зв'язаних станів, розрахунки ж сильно антисиметризованих станів у підході без заданої симетрії вище навіть забороненого з даною симетрією порога не можуть бути достовірними і для

Т а б л и ц я 8. Порівняння розрахованих енергетичних рівнів на несиметризованому базисі з розрахованими на симетризованому базисі (з 1200 компонентами) і найбільш точними літературними даними з [12]

<i>i</i>	$-E_i$	симетр. (<i>ss</i>)	$-E_i$ (симетр.)	$-E_i$ [12]
0	1,161329	0,99966	1,163501	1,1640250300
1	1,132503	0,99876	1,141878	1,1450653676
2	1,093697	0,99696	1,119645	1,1271779152
3	1,053905	0,99238	1,091461	1,1103404429
4	1,017269	0,97868	1,064515	1,0945391187
5	0,999428	0,4991	1,03230	1,0797693217
6	0,994166	0,5689	1,005119	1,0660370737
7	0,989407	0,5711	0,999522	1,0533604890
8	0,9777	0,1943	0,9983	1,0417726950

їх дослідження необхідно з самого початку задавати перестановну симетрію для тотожних частинок.

3. У всіх розглянутих випадках трьох та чотирьох частинок спостерігається природна перевага використання априорі симетризованих базисів для розрахунків зв'язаних станів, коли для досягнення заданої точності розрахунків необхідно використовувати кількість симетризованих базисних функцій в декілька разів менше.

4. Варіаційні розрахунки показали, що з покращенням розрахункової точності енергетичних рівнів при розширенні несиметризованих варіаційних базисів спостерігається тимчасове порушення симетрії хвильових функцій, особливо для не дуже великих базисів, хоча у середньому для значних базисів точна симетрія відновлюється все надійніше.

5. Зі збільшенням кількості частинок і ускладненням квантових систем частинок можливості отримання заданої високої точності для енергії та інших характеристик стають все більш проблематичними як, насамперед, для несиметризованих, так і априорі правильно симетризованих базисів.

Автори вдячні О.М. Гаврилику та П.І. Голоду за корисні зауваження щодо розглянутих тут проблем. Дану роботу виконано за підтримки цільової програми фундаментальних досліджень ВФА НАН України.

1. В.И. Кукулин, Изв. Акад. наук СССР, сер. физ. **39**, 535 (1975).
2. V.I. Kukulin and V.M. Krasnopol'sky, J. Phys. G **3**, 795 (1977).
3. Н.Н. Колесников, В.И. Тарасов, Яд. физ. **35**, 609 (1982).
4. K. Varga and Y. Suzuki, Phys. Rev. C **52**, 2885 (1995).
5. Y. Suzuki and K. Varga, *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems* (Springer, Berlin, 1998).
6. С.М. Бубін, І.В. Симоног, ЖФД **4**, №2, 124 (2000).
7. І.В. Симоног, Ю.М. Бідасюк, Б.Є. Гринюк, М.В. Кузьменко, УФЖ **52**, №1, 79 (2007).
8. І.В. Симоног, Ю.М. Бідасюк, М.В. Кузьменко, В.М. Хряпа, УФЖ **54**, № 8-9, 881 (2009).
9. П.І. Голубничий, С.Д. Кривоносов, Т.М. Слєпичко, УФЖ **50**, №5, 425 (2005).
10. М.В. Кузьменко, І.В. Симоног, ЖФД **14**, №4, (2010).
11. В.И. Овчаренко, И.В. Симоног, Г.Ф. Филиппов, *Препринт ИТФ АН УССР, ИТФ-70-100Р* (1970).

12. S. Bubin and L. Adamowicz, J. Chem. Phys. **118**, 3079 (2003).

Одержано 24.08.10

РАСЧЕТЫ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В СТОХАСТИЧЕСКОМ ВАРИАЦИОННОМ МЕТОДЕ С НЕСИММЕТРИЗОВАННЫМИ БАЗИСАМИ

И.В. Симоног, Н.В. Кузьменко, В.М. Хряпа

Резюме

Изучены возможности установления свойств симметрии энергетических состояний в системах трех и четырех частиц с нулевым угловым моментом в стохастических вариационных расчетах без предварительной симметризации состояний по координатам тождественных частиц. Установлено, что в стохастических вариационных расчетах энергетические спектры включают уровни всех возможных симметрий для заданной системы, если это разрешено суперпозицией используемых базисов. Предложены локальные и интегральные схемы установления перестановочной симметрии в результате расчетов связанных состояний. Показано, что для энергетических состояний квантовых систем нескольких частиц ниже самого нижнего порога распада на подсистемы перестановочные симметрии (схемы Юнга) могут быть установлены с высокой точностью. Состояния выше самого нижнего порога распада, даже если он запрещен, можно рассматривать лишь на базисах с заданной симметрией.

BOUND-STATE CALCULATIONS IN THE FRAMEWORK OF STOCHASTIC VARIATIONAL APPROACH WITH NON-SYMMETRIZED BASES

I. V. Simenog, M. V. Kuzmenko, V. M. Khryapa

Bogolyubov Institute for Theoretical Physics,
Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
(14-b Metrolohichna Str., Kyiv 03143, Ukraine)

Summary

In the framework of stochastic variational calculations and making no preliminary symmetrization of the wave functions with respect to identical particle coordinate permutations, the possibility of determining the symmetry properties of three- and four-particle energy states with zero angular momentum has been studied. The stochastic variational calculations revealed that the energy spectra obtained for the systems under consideration include the levels with all possible symmetries, provided that it is allowed by the superposition of applied bases. Local and integral schemes for the determination of permutation symmetry using the results of bound-state calculations have been proposed. It was found that the permutation symmetries (the Young tableaux) of energy states below the lowest breakup threshold can be determined with a high precision for a few-particle system. At the same time, the states above that threshold, even if the latter is prohibited, can be studied only using properly symmetrized bases.