

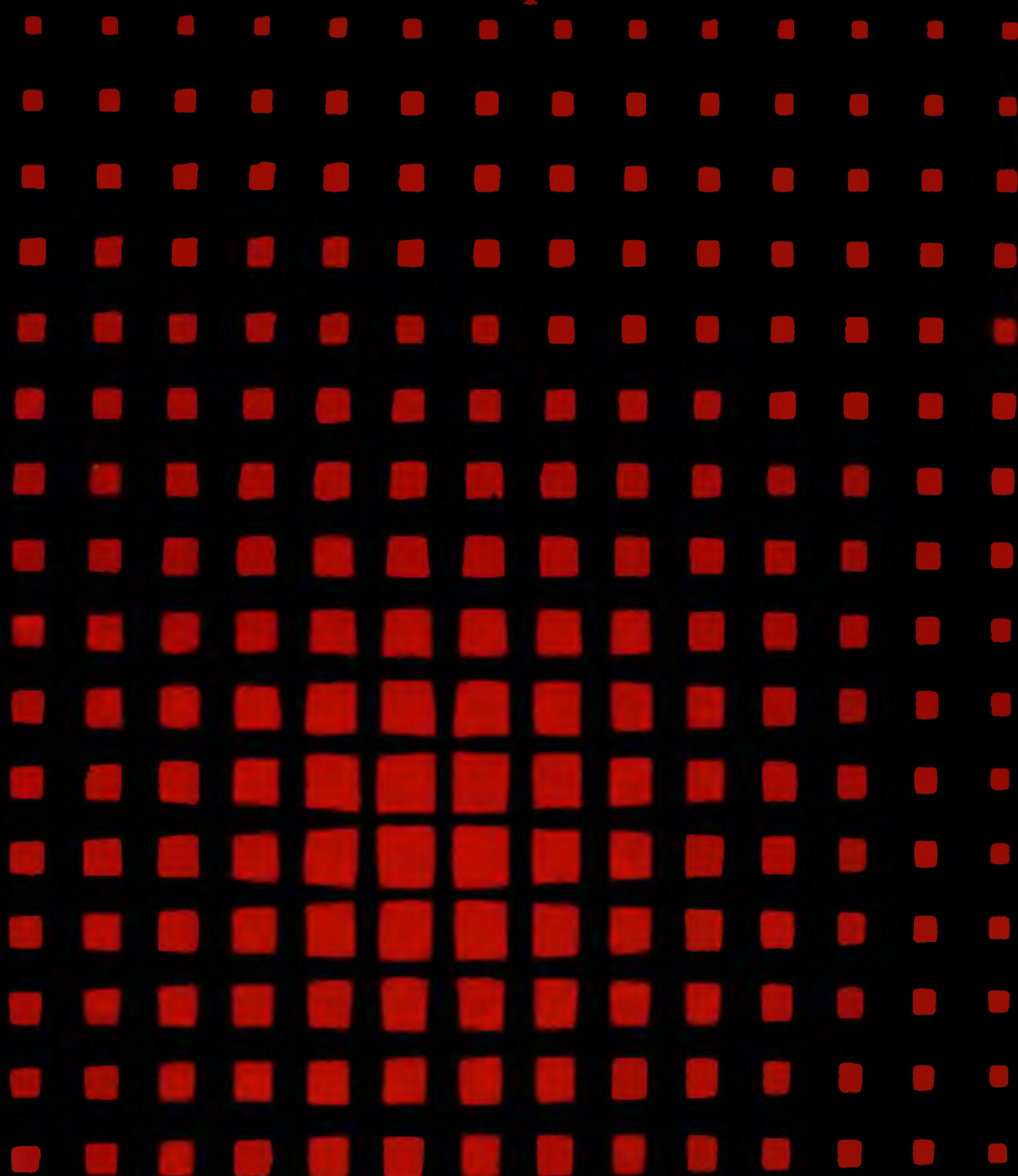
Гармонический

М. Мошинский

осциллятор

в современной физике:

от атомов до кварков



**THE HARMONIC OSCILLATOR
IN MODERN PHYSICS:
FROM ATOMS TO QUARKS**

M. MOSHINSKY

Instituto de Física, Universidad de México, and
Comisión Nacional de Energía Nuclear, México, D. F.

**GORDON AND BREACH SCIENCE PUBLISHERS
NEW YORK – LONDON – PARIS
1969**

М. Мошинский **Гармонический осциллятор
в современной физике:
от атомов до кварков**

Перевод с английского
Ю. Ф. СМЕРНОВА

В книге излагаются современные результаты по теории гармонического осциллятора и ее применениям в атомной, молекулярной, ядерной физике, а также в теории элементарных частиц — в модели кварков. При проведении расчетов широко используется преобразование осцилляторных волновых функций, которое часто называют преобразованием Тальми — Мошинского. Оно позволяет простым образом вычислять энергии двухчастичного взаимодействия в квантовой системе нескольких частиц. Это обстоятельство дает возможность рассмотреть в рамках единого подхода такие разнообразные системы, как атомы водорода, лития и бериллия, молекулы H_2^+ , H_2 , H_3^+ , ядра He^4 , O^{16} , O^{18} , F^{18} , а также систему из трех кварков — протон.

Книга написана с большим педагогическим мастерством, для ее понимания требуется знание только обычного курса квантовой механики. Она представляет интерес для широкого круга читателей: студентов, аспирантов, научных сотрудников, специализирующихся по теории ядра, квантовой химии, атомной и молекулярной спектроскопии.

Редакция литературы по физике

ПРЕДИСЛОВИЕ ПЕРЕВОДЧИКА

Предлагаемая вниманию читателя книга написана известным физиком-теоретиком, профессором М. Мошинским, одним из учеников Е. Вигнера. М. Мошинский — профессор университета Мехико, лауреат Национальной премии Мексики по физике за 1968 г. Он широко известен своими работами по теории групп и ее приложениям к задачам ядерной физики и теории элементарных частиц.

Данная книга представляет собой курс лекций, прочитанных автором в латиноамериканской школе по физике в 1968 г. В ней рассматриваются различные приложения теории гармонического осциллятора в атомной, молекулярной и ядерной физике, а также в теории элементарных частиц — в модели кварков.

Гармонический осциллятор занимает особое место в квантовой механике. Это одна из немногих точно решаемых квантовомеханических задач. Гармонический осциллятор представляет значительный теоретический интерес в силу весьма разнообразных свойств симметрии, которыми он обладает. Разработка теории осциллятора имеет также большую практическую важность, так как решение многих задач, например о малых колебаниях молекул, твердых тел, колебаниях ядерной поверхности, о квантованном свободном электромагнитном поле и т. д., сводится к решению уравнения Шредингера для многомерного гармонического осциллятора. Гамильтониан гармонического осциллятора обладает высокой сепарабельностью. Так, гамильтониан трехмерного осциллятора разделяется и имеет точное решение в различных системах координат: декартовых, сферических, цилиндрических и др. Гамильтониан системы нескольких частиц в осцилляторном потенциале разделяется в одночастичных переменных, а также в координатах Якоби этой системы, во многомерных сферических координатах и т. д. Это обстоятельство делает волновые функции гармонического осциллятора очень удобными для практических расчетов в теории ядра, в модели ядерных оболочек, в вычислениях по методу Хартри — Фока, в теории трех-четырёх тел, а в последнее время и в кварковой модели элементарных частиц. В теории молекул волновые функции

осцилляторного типа также часто используются как базисные функции, что позволяет развить весьма эффективный метод расчета многоцентровых интегралов.

При проведении расчетов широко используется преобразование осцилляторных волновых функций пары частиц от переменных, связанных с отдельными частицами, к координатам их центра масс и относительного движения; его часто называют преобразованием Тальми — Мошинского. В книге подробно описаны свойства трансформационных коэффициентов Тальми — Мошинского и метод их вычисления.

Примечательно, что автор с единой точки зрения рассматривает, казалось бы, совершенно непохожие друг на друга системы: атом водорода и молекулярный ион H_2^+ , молекулы H_2 , H_3^+ и ядра O^{18} , F^{18} ; атом лития и протон, представляемый в виде системы из трех кварков; атом Be и ядро O^{16} . Такой подход приводит к «стиранию граней» между различными областями квантовой физики, которые в настоящее время сильно обособились, и облегчает обмен идеями и методами между специалистами, работающими в разных областях.

Это обстоятельство делает книгу весьма полезной и интересной для очень широкого круга читателей: студентов, аспирантов и научных сотрудников, специализирующихся по теории ядра, атомной и молекулярной спектроскопии.

Приложение В добавлено переводчиком.

Ю. Ф. Смирнов

ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

Цель этой небольшой книги заключается в том, чтобы дать элементарное введение к многочисленным приложениям волновых функций гармонического осциллятора в проблеме многих тел. Осцилляторные функции и их приложения неоднократно и детально обсуждались в литературе с использованием методов теории групп. Однако автор счел необходимым предпослать этим более утонченным методам введение, которое базируется только на стандартном курсе квантовой механики и элементарной теории углового момента. Хотелось бы надеяться, что у тех, кто прочтет эту вступительную книгу, появится желание ознакомиться с более фундаментальной литературой по теоретико-групповым методам в теории гармонического осциллятора и применениям этой теории.

Русское издание дополнено двумя приложениями, посвященными расчетам свойств ядра трития и α -частицы, которые были выполнены уже после выхода в свет английского издания.

Автор хотел бы выразить свою признательность Ю. Ф. Смирнову, взявшему на себя труд по переводу книги на русский язык.

М. Мошинский

ВВЕДЕНИЕ

Как ясно из заглавия этого цикла лекций, их целью является исследование применений волновых функций гармонического осциллятора для произвольного числа частиц к задачам атомной, молекулярной и ядерной физики и даже физики кварков.

Автор и его сотрудники интенсивно разрабатывали эту проблему с точки зрения теории групп, и результаты их исследований были суммированы в двух недавно опубликованных книгах [30, 47].

Однако последние исследования в этой области позволяют сделать вывод о том, что обсуждение многих аспектов этой проблемы можно провести, опираясь только на концепции трансформационных коэффициентов для состояний гармонического осциллятора и связанных с ними величин [1]. Эти концепции детально развиваются в настоящих лекциях и, помимо стандартных областей их приложения, используются также для обсуждения энергий связи и формфакторов трех- и четырехчастичных систем, а также проблемы n частиц в приближении Хартри — Фока.

Для того чтобы можно было систематическим образом проанализировать концепции, введенные в этих лекциях, они излагаются параллельно с рассмотрением тех физических систем, в которых они впервые появляются и которые обсуждаются в порядке возрастания числа частиц. Таким образом, в последующих главах на общей основе рассматриваются одно-, двух-, трех- и четырехчастичная задачи. В гл. V мы сразу переходим к системе n частиц, но ограничиваемся только приближением Хартри — Фока. Для разделов в главах принята сквозная нумерация, а перед номером формулы указывается также номер соответствующего раздела.

Мы надеемся, что этот цикл лекций может служить логически замкнутым введением в проблему. Необходимым условием для их понимания является знание стандартного курса квантовой механики плюс знакомство с некоторыми книгами по элементарной теории момента количества движения таких, как книга Роуза [2]¹⁾. В разд. 17 используется концепция

¹⁾ См. также работы [50—52]. — *Прим. перев.*

проекционных операторов для построения состояний с определенной перестановочной симметрией, но читатель, не знакомый с ними, может ограничиться рассмотрением хорошо известных проекционных операторов для полностью симметричных и антисимметричных состояний. В этом разделе употребляется также понятие таблиц Юнга, но они не очень существенны для основных приведенных там рассуждений. Лишь в разд. 20, посвященном кварковой модели протона, используются понятия, связанные с неприводимыми представлениями унитарных групп. Этот раздел необязателен с точки зрения полноты изложения идей, развитых в этих лекциях, так что читатель, не знакомый с соответствующими вопросами теории унитарных групп, может без ущерба его опустить.

Данные лекции ни в какой мере не заменяют двух упомянутых выше монографий, но являются, как мы надеемся, введением к ним, а также расширяют область приложения этой наиболее простой из динамических систем — гармонического осциллятора.

1. Радиальные волновые функции гармонического осциллятора

Мы начнем с того, что напомним некоторые результаты, которые можно найти в любом элементарном учебнике по квантовой механике. Не зависящее от времени уравнение Шредингера для гармонического осциллятора в той системе единиц, в которой величины \hbar , m и частота осциллятора равны единице, записывается следующим образом:

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + \frac{1}{2} r^2\right) \psi = E\psi. \quad (1.1)$$

Предположив, что его решение имеет вид

$$\psi = \frac{1}{r} \phi(r) e^{-1/2 r^2} Y_{lm}(\theta, \varphi) \equiv \psi_{nlm}(\mathbf{x}) \equiv |nlm\rangle \equiv \langle \mathbf{x} | nlm \rangle, \quad (1.2)$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические гармоники, получаем для ϕ уравнение

$$-\phi'' + 2r\phi' + \phi + \frac{l(l+1)}{r^2} \phi = 2E\phi. \quad (1.3)$$

В (1.2) дано несколько различных обозначений для одночастичных осцилляторных состояний, которые будут использованы нами в дальнейшем. Смысл фигурирующего там индекса n поясняется ниже.

Если мы ищем решение ϕ в виде степенного ряда

$$\phi = r^p \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k, \quad (1.4)$$

то получаем следующее рекуррентное соотношение для коэффициентов a_k :

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = -\frac{(2E-1) - 2(p+k)}{(p+k+2)(p+k+1) - l(l+1)}. \quad (1.5)$$

Пусть $k = -2$, $a_{-2} = 0$, тогда $p(p-1) = l(l+1)$ и, следовательно, $p = l+1$, так как значение $p = -l$ не имеет физического смысла, поскольку в этом случае функция ϕ расходится в точке $r = 0$.

Ряд (1.4) необходимо оборвать на каком-то члене $k_{\text{макс}}$, так как этот ряд, даже умноженный на $\exp(-1/2r^2)$, расхо- дится при $r \rightarrow \infty$. Таким образом, получаем

$$E - 1 - 2(p + k_{\text{макс}}) = 0. \quad (1.6)$$

Поскольку $k_{\text{макс}}$ должно быть четным числом, положим $k_{\text{макс}} = 2n$. Тогда

$$E = 2n + l + \frac{3}{2} \quad (1.7)$$

и нормированное решение радиального уравнения имеет вид

$$R_{nl}(r) \equiv \frac{1}{r} \phi(r) e^{-1/2r^2} = r^l \sum_{k=0}^n a_{nlk} r^{2k} e^{-1/2r^2}, \quad (1.8)$$

где

$$a_{nlk} = \frac{(-1)^k}{k!} \left[\frac{2(n!)}{\Gamma(n+l+3/2)} \right]^{1/2} \frac{\Gamma(n+l+3/2)}{(n-k)! \Gamma(k+l+3/2)}, \quad (1.9)$$

как можно показать, исходя из соотношения (1.5) (см. [1]).

2. Матричные элементы оператора $f(r)Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$ по волновым функциям гармонического осциллятора. Коэффициенты $B(n'l', nl, p)$

Пусть нам нужно найти матричные элементы оператора $f(r)Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$ по волновым функциям гармонического осциллятора. Здесь $Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$ — сферическая гармоника, т. е. μ -я компонента неприводимого тензора ранга λ с точки зрения алгебры тензорных операторов Рака¹⁾. Согласно (1.2) и (1.8), матричный элемент разделяется на угловую и радиальную части:

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | f(r)Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) | nlm \rangle &= \\ &= \int \int \int R_{n'l'}(r) Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) f(r) Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \times \\ &\quad \times r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = \\ &= \int_0^\infty R_{n'l'}(r) f(r) R_{nl}(r) r^2 dr \langle l'm' | Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) | lm \rangle. \end{aligned} \quad (2.1)$$

¹⁾ Относительно алгебры тензорных операторов см. [50, 51]. — Прим. перев.

С помощью теоремы Вигнера — Экарта и формул, приведенных в книге Роуза [2]¹⁾, получаем

$$\begin{aligned} \langle l'm' | Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) | lm \rangle = \\ = (l\lambda m\mu | l'm') \sqrt{\frac{(2l+1)(2\lambda+1)}{4\pi(2l'+1)}} (l\lambda 00 | l'0), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $(l\lambda m\mu | l'm')$ — коэффициент Клебша — Гордана. Мы можем вычислить радиальный интеграл, подставляя в (2.1) функции R_{nl} в явном виде (1.8); при этом находим

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R_{n'l'}(r) f(r) R_{nl}(r) r^2 dr = \\ = \sum_{k=0}^n \sum_{k'=0}^{n'} a_{nlk} a_{n'l'k'} \int_0^\infty r^{2k+2k'+l+l'} f(r) e^{-r^2} r^2 dr. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Введем величину

$$p \equiv \frac{1}{2}(2k + 2k' + l + l'). \quad (2.4)$$

Заметим, что p изменяется от $1/2(l + l')$ до $1/2(l + l') + n + n'$. Кроме того, поскольку в последнем множителе в (2.2) число $l + l' + \lambda$ должно быть четным из соображений сохранения четности, то p принимает целые (полуцелые) значения, если λ — четное (нечетное) число. Исключая k' из (2.4), получаем $k' = p - k - 1/2(l + l')$. Теперь можно переписать (2.3) в виде

$$\begin{aligned} \sum_p \sum_k a_{nlk} a_{n'l'p-k-1/2(l+l')} \int_0^\infty r^{2p+2} f(r) e^{-r^2} dr \equiv \\ \equiv \sum_p B(n'l', nl, p) I_p, \end{aligned} \quad (2.5)$$

где коэффициенты B определяются следующим образом:

$$B(n'l', nl, p) \equiv \frac{1}{2} \Gamma\left(p + \frac{3}{2}\right) \sum_k a_{nlk} a_{n'l'p-k-1/2(l+l')}, \quad (2.6)$$

¹⁾ См. также [50—52]. — *Прим. перев.*

I_p представляют собою интегралы Тальми [3]

$$I_p \equiv \frac{2}{\Gamma(p + 3/2)} \int_0^{\infty} r^{2p+2} f(r) e^{-r^2} dr. \quad (2.7)$$

Нормировка в (2.7) выбрана так, что $I_p = 1$ при $f(r) = 1$. Коэффициенты $B(n'l', nl, p)$ были рассмотрены и протабулированы Броди и Мошинским [1, 4].

В итоге матричный элемент (2.1) сводится к следующему выражению:

$$\begin{aligned} & \langle n'l'm' | f(r) Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) | nlm \rangle = \\ & = \sum_p B(n'l', nl, p) I_p(l\lambda m\mu | l'm') \sqrt{\frac{(2l+1)(2\lambda+1)}{4\pi(2l'+1)}} (l\lambda 00 | l'0). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Для удобства в табл. 1 приведены наиболее важные интегралы Тальми

Таблица 1

$f(r)$	I_p	
r^λ	$\frac{\Gamma\left(p + \frac{1}{2}\lambda + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(p + \frac{3}{2}\right)}$	(2.9)
$\frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$	$\frac{2e^{\mu^2/4}}{\mu\Gamma\left(p + \frac{3}{2}\right)} \int_{\mu/2}^{\infty} \left(x - \frac{1}{2}\mu\right)^{2p+1} e^{-x^2} dx$	(2.10)
$e^{-\alpha^2/r^2}$	$(1 + \alpha^2)^{-p-1/2}$	(2.11)
$\frac{1}{r}$	$\frac{p!}{\Gamma\left(p + \frac{3}{2}\right)}$	(2.12)

Первый из этих интегралов появляется при рассмотрении задачи об электрических мультиполях; при этом приходится вычислять матричные элементы оператора $r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$. Два следующих интеграла встречаются в ядерных задачах, когда в качестве потенциала взаимодействия между двумя нукло-

нами используются гауссовы силы или потенциал Юкавы. Последний интеграл появляется в задаче с кулоновским взаимодействием.

3. Одноэлектронная атомная задача. Вариационный анализ основного состояния атома водорода с использованием волновых функций гармонического осциллятора

Все расчеты в ядерной физике имеют два важных недостатка.

1) Используется не полный набор базисных функций, а путем введения различных моделей обрезают базис таким образом, чтобы сделать расчеты выполнимыми. 2) Ядерный гамильтониан не известен с такой точностью, как в других областях физики.

Если результаты вычислений расходятся с экспериментом, то не ясно, какой из двух недостатков в этом повинен. Такой проблемы не существует в атомных и молекулярных задачах. Здесь расхождение между расчетами и экспериментом означает неудачный выбор базисных функций. Поэтому в данной книге мы часто будем использовать волновые функции гармонического осциллятора для описания n -электронных атомов или молекул как в связи с интересом, который представляют сами эти системы, так и с целью анализа процедуры приближенных вычислений.

Мы пренебрежем спин-орбитальным взаимодействием. Это релятивистский эффект, и в атомах и молекулах с небольшим числом электронов он мал. Гамильтониан системы из n электронов и N ядер имеет вид

$$H' = \sum_{s=1}^n \frac{(p'^s)^2}{2m} + \sum_{s < t=2}^n \frac{e^2}{|x'^s - x'^t|} - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{s=1}^n \frac{Z_{\alpha} e^2}{|x'^s - X'^{\alpha}|} + \sum_{\alpha < \beta=2}^N \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{|X'^{\alpha} - X'^{\beta}|}, \quad (3.1)$$

где x'^s — координата s -го электрона, X'^{α} — координата α -го ядра и Z_{α} — заряд ядра α . Последний член в выражении (3.1) описывает отталкивание между ядрами, и в приближении Борна — Оппенгеймера, в котором расположение ядер предполагается фиксированным, он является постоянным. Постоянные векторы X'^{α} будут входить в вычисления как вариационные параметры.

В качестве пробных волновых функций мы будем использовать волновые функции гармонического осциллятора с некоторой частотой ω , которая является вариационным параметром.

Произведем замену переменных

$$\begin{aligned} x_i^s &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_i^{\prime s}, & X_i^a &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X_i^{\prime a}, \\ p_i^s &= \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} p_i^{\prime s}, & H &= \left(\frac{me^4}{2\hbar^2}\right)^{-1} H', \end{aligned} \quad (3.2)$$

где $1/2 me^4/\hbar^2 \equiv E_B$ — энергия первой боровской орбиты.

Введем безразмерный параметр

$$\varepsilon \equiv \sqrt{\frac{\hbar\omega}{E_B}} = \sqrt{\hbar\omega / \left(\frac{me^4}{2\hbar^2}\right)}. \quad (3.3)$$

Тогда

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sum_{s=1}^n (p^s)^2 + \sqrt{2} \varepsilon \left[\sum_{s < t=2}^n \frac{1}{|x^s - x^t|} - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{s=1}^n \frac{Z_\alpha}{|x^s - X^\alpha|} + \sum_{\alpha < \beta=2}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|X^\alpha - X^\beta|} \right]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

В случае атома водорода $N = n = 1$, и мы положим $X^\alpha = 0$, т. е. поместим ядро в начало координат. Тогда

$$H = \frac{1}{2} \varepsilon^2 p^2 - \sqrt{2} \varepsilon \frac{1}{r}, \quad (3.5)$$

где $r = |\mathbf{x}|$.

Собственные функции ψ гамильтониана (3.5) характеризуются определенными квантовыми числами l , m , и мы можем разложить их по соответствующим состояниям ψ_{nlm} гармонического осциллятора, задаваемым формулой (1.2), т. е.

$$\psi = \sum_n a_n |nlm\rangle. \quad (3.6)$$

При вариационном анализе энергии мы вычисляем интеграл $\int \psi^* H \psi d\tau$ и минимизируем его при условии $\int \psi^* \psi d\tau = 1$, т. е.

$$\delta \left[\int \psi^* H \psi d\tau - \lambda \int \psi^* \psi d\tau \right] = 0. \quad (3.7)$$

Поскольку, согласно (3.6), функция ψ линейна по a , то минимизация указанного интеграла эквивалентна диагонализации матрицы $\left\| \int \Phi_{n'l'm}^* H \Psi_{nlm} d\tau \right\|$ при фиксированных l и m . Низшее собственное значение этой матрицы, минимизированное также по параметру ϵ , будет представлять собой приближенное значение энергии системы, полученное с помощью вариационной процедуры с использованием указанных выше пробных функций. Так как

$$H_{n0} = \frac{1}{2} (p^2 + r^2) \quad (3.8)$$

и, следовательно,

$$\frac{1}{2} p^2 = H_{n0} - \frac{1}{2} r^2,$$

то

$$\begin{aligned} \langle n'l'm | H | nlm \rangle &= \langle n'l'm | \left(\epsilon^2 H_{n0} - \frac{1}{2} \epsilon^2 r^2 - \sqrt{2} \epsilon \frac{1}{r} \right) | nlm \rangle = \\ &= \epsilon^2 \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) \delta_{n'n} - \frac{1}{2} \epsilon^2 \int_0^\infty R_{n'l}(r) r^4 R_{nl}(r) dr - \\ &\quad - \sqrt{2} \epsilon \int_0^\infty R_{n'l}(r) \frac{1}{r} R_{nl}(r) r^2 dr. \quad (3.9) \end{aligned}$$

Для вычисления первого интеграла мы воспользуемся рекуррентными соотношениями для присоединенных полиномов Лагерра [5]¹⁾. Второй интеграл можно выразить через интегралы Тальми. Используя (2.12), окончательно получаем

$$\begin{aligned} \langle n'l'm | H | nlm \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \epsilon^2 \left\{ \left[n(n+l+\frac{1}{2}) \right]^{1/2} \delta_{n'n-1} + \left(2n+l+\frac{3}{2} \right) \delta_{n'n} + \right. \\ &\quad \left. + \left[(n+1) \left(n+l+\frac{3}{2} \right) \right]^{1/2} \delta_{n'n+1} \right\} - \\ &\quad - \sqrt{2} \epsilon \sum_{p=l}^{l+n+n'} B(n'l, nl, p) \frac{p!}{\Gamma(p+3/2)}. \quad (3.10) \end{aligned}$$

Для основного состояния атома водорода $l = m = 0$. Таким образом, нам необходимо вычислить матрицу

¹⁾ См., например, [53—55]. — Прим. перев.

$\| \langle n'00 | H | n00 \rangle \|$. Если учитываются состояния с числом квантов вплоть до \mathfrak{N} , то приходится диагонализировать матрицу порядка $(\frac{1}{2}\mathfrak{N} + 1)(\frac{1}{2}\mathfrak{N} + 1)$; при этом n принимает значения $n = 0, 1, 2, \dots, \frac{1}{2}\mathfrak{N}$. Пусть мы ограничились состоянием с нулем квантов ($n = n' = 0$), тогда из таблиц коэффициентов B [4] находим, что

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &\equiv \langle 000 | H | 000 \rangle = \frac{3}{4} \epsilon^2 - \sqrt{2} \epsilon B(00, 00, 0) \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2})} = \\ &= \frac{3}{4} \epsilon^2 - \sqrt{2} \epsilon \frac{2}{\sqrt{\pi}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Минимизируя $\langle H \rangle$ относительно ϵ , получаем

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} \left[\frac{3}{4} \epsilon^2 - 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \epsilon \right] = \frac{3}{2} \epsilon - 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} = 0, \quad (3.12)$$

или

$$\epsilon = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} = 1,06. \quad (3.13)$$

Согласно (3.3), $\epsilon = \sqrt{\hbar\omega/E_B}$, где $E_B = 13,5$ эВ. Таким образом,

$$\hbar\omega = (1,06)^2 E_B. \quad (3.14)$$

Подставляя в (3.11) вместо ϵ значение (3.13), получаем следующее значение энергии:

$$\langle 000 | H | 000 \rangle = -\frac{4}{3} \frac{2}{\pi} = -0,849 \quad (3.15)$$

в единицах энергии первой боровской орбиты. Заметим, что эта энергия больше E_B , как и должно быть.

Если проделать аналогичные вычисления с учетом \mathfrak{N} квантов, сохраняя фиксированное значение $\epsilon = 1,06$, то получим

Таблица 2

Число квантов	Энергия связи в процентах от E_B
0	84,9
2	84,9
4	93,33
6	93,73
8	95,75
10	96,19

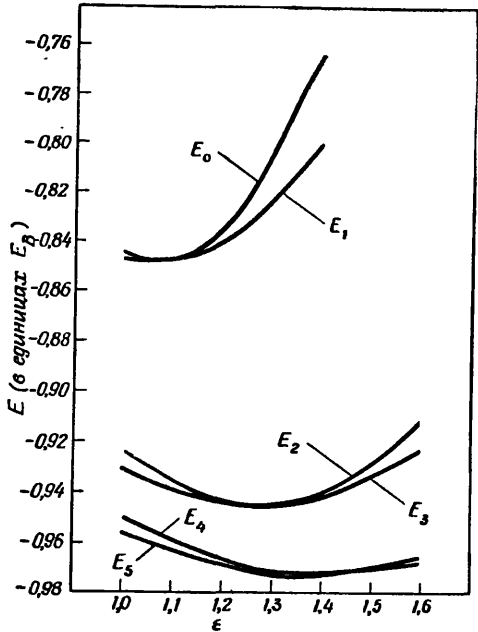
значения, приведенные в табл. 2 [6]. Если при учете 10 квантов провести варьирование параметра ϵ , то точность возрастает до 97,35%.

Зависимость величины энергии связи от параметра ϵ можно видеть из фиг. 1 [7], где представлены приближенные

Фиг. 1. Энергия основного состояния атома водорода как функция параметра ϵ .

Иллюстрация к вариационному расчету, описанному в разд. 3. Энергия $E_p(\epsilon_p)$ соответствует пробной волновой функции

$$\psi_p = \sum_{n=0}^p a_n^{(p)} |n00\rangle, \text{ где } |n00\rangle - \text{волновая функция гармонического осциллятора с частотой } \hbar\omega = (m e^4 / 2 \hbar^2) \epsilon^2.$$



значения энергии связи $E_{\mathcal{N}/2}$, соответствующие учету \mathcal{N} квантов, в единицах энергии первой боровской орбиты. С увеличением числа учитываемых квантов значение ϵ , отвечающее минимуму энергии связи, возрастает. Это означает, что частота гармонического осциллятора, при которой имеет место минимум энергии связи, увеличивается.

Отметим также, что заметное улучшение энергии связи происходит в том случае, когда число учитываемых квантов увеличивается на четыре, а не на два. Это является общим свойством, наблюдавшимся во многих расчетах [7, 8], которое мы здесь докажем строго для произвольного потенциала $V(r')$, если речь идет о вариационном анализе состояний с $l = m = 0$ с учетом 0 и 2 квантов, т. е. $n = 0$ и 1. В этом

случае гамильтониан может быть записан следующим образом:

$$H = \frac{1}{2m} p'^2 + V(r') = \frac{1}{2} \hbar \omega p^2 + V\left(\left[\frac{\hbar}{m\omega}\right]^{1/2} r\right), \quad (3.16)$$

и его матрица при учете указанных выше состояний имеет вид

$$\begin{pmatrix} \langle 000|H|000\rangle & \langle 000|H|100\rangle \\ \langle 100|H|000\rangle & \langle 100|H|100\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

где матричные элементы

$$\begin{aligned} \langle 000|H|000\rangle &= \frac{3}{4} \hbar \omega + \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} r^2 V\left(r \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right) e^{-r^2} dr = \\ &= \frac{3}{4} \hbar \omega + \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2} r'^2 V(r') \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} r'^2\right) dr', \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \langle 100|H|000\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}} \hbar \omega + \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} r^2 V\left(r \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right) e^{-r^2} dr - \\ &- \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} r^4 V\left(r \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right) e^{-r^2} dr \end{aligned} \quad (3.19)$$

и аналогичное выражение для $\langle 100|H|100\rangle$ могут быть получены с помощью таблиц коэффициентов B [4]. Вычислим теперь производную матричного элемента $\langle 000|H|000\rangle$ по параметру $\hbar\omega$; с помощью (3.18) и (3.19) сразу получим

$$\frac{d}{d(\hbar\omega)} \langle 000|H|000\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{\hbar\omega} \langle 100|H|000\rangle. \quad (3.20)$$

Поэтому ясно, что частота $\hbar\omega$, при которой $\langle 000|H|000\rangle$ имеет минимум, т. е. выражение (3.20) равняется нулю, соответствует также нулевому значению матричного элемента $\langle 100|H|000\rangle = 0$, и, следовательно, при этой частоте никакого улучшения энергии связи не происходит при переходе от учета состояний с нулем квантов к учету состояний с двумя квантами. Более общие соотношения этого типа были введены Дубовым и Флоресом [8].

4. Одноэлектронная молекулярная задача.

Анализ основного состояния иона H_2^+ с использованием волновых функций гармонического осциллятора

Из (3.4) видно, что одноэлектронная молекулярная задача имеет гамильтониан

$$H = \frac{1}{2} \varepsilon^2 p^2 - \sqrt{2} \varepsilon \left[\sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}^\alpha|} - \sum_{\alpha < \beta=2}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{X}^\alpha - \mathbf{X}^\beta|} \right]. \quad (4.1)$$

Для обсуждения матричных элементов оператора H по волновым функциям гармонического осциллятора нам необходимо только проанализировать матричный элемент оператора $|\mathbf{x} - \mathbf{X}|^{-1}$ по этим функциям при условии, что \mathbf{X} — некоторый фиксированный вектор. Обозначим через (r, θ, φ) и (R, Θ, Φ) сферические координаты векторов \mathbf{x} и \mathbf{X} соответственно и воспользуемся разложением

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}|} = \sum_{k=0}^{\infty} \left[\frac{r^k/R^{k+1}}{R^k/r^{k+1}} \right] \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{q=-k}^k Y_{kq}^*(\Theta, \Phi) Y_{kq}(\theta, \varphi), \quad (4.2)$$

в котором берется верхний или нижний член квадратных скобок при $r \leq R$ и $r > R$ соответственно. В результате матричный элемент оператора $|\mathbf{x} - \mathbf{X}|^{-1}$ сводится к линейной комбинации матричных элементов следующего вида:

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' \left| \left[\frac{r^k/R^{k+1}}{R^k/r^{k+1}} \right] Y_{kq}(\theta, \varphi) \right| nlm \rangle = \\ = \langle n'l' \left\| \left[\frac{r^k/R^{k+1}}{R^k/r^{k+1}} \right] Y_k(\theta, \varphi) \right\| nl \rangle (lkmq | l'm') = \\ = \sum_p \left\{ B(n'l', nl, p) I_p^k(R) (lkmq | l'm') \times \right. \\ \left. \times (lk00 | l'0) \left[\frac{(2l+1)(2k+1)}{4\pi(2l'+1)} \right]^{1/2} \right\}, \quad (4.3) \end{aligned}$$

где

$$I_p^k(R) \equiv \frac{2}{\Gamma(p + 3/2)} \left[\int_0^R \frac{r^{2p+k+2}}{R^{k+1}} e^{-r^2} dr + \int_R^\infty R^k r^{2p-k+1} e^{-r^2} dr \right] =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(p + 3/2)} \left\{ \left[\sum_{q=0}^{p-1/2k} R^{2q+k} \frac{(p-1/2k)!}{q!} - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \sum_{q=0}^{p+1/2k} \frac{R^{2q-k} (2p+k+1)!!}{2^{p-q+1/2k} (2q+1)!!} \right] e^{-R^2} + \frac{\sqrt{\pi} (2p+k+1)!!}{R^{k+1} 2^{p+1+1/2k}} \operatorname{erf}(R) \right\}. \quad (4.4)$$

В (4.4) $\operatorname{erf}(R)$ означает функцию ошибок

$$\operatorname{erf}(R) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^R e^{-t^2} dt. \quad (4.5)$$

Из правил отбора для коэффициента $(lk00|l'0)$ следует, что $l + l' + k$ — четное число, а из ограничений, налагаемых на значения p выражением (2.4), получаем, что $p \pm 1/2k$ в (4.4) всегда является целым числом.

Переписывая гамильтониан (4.1) для частного случая молекулярного иона H_2^+ , мы можем взять в качестве координат двух протонов векторы $\mathbf{X}^1 = \mathbf{X}$ и $\mathbf{X}^2 = -\mathbf{X}$, где вектор \mathbf{X} длиной R направлен вдоль оси z , $2R$ — межъядерное расстояние в молекуле.

Если вычислить среднее значение H в состоянии с нулем осцилляторных квантов, то получим

$$\langle H \rangle = \langle 000 | H | 000 \rangle = \frac{3}{4} \varepsilon^2 + \varepsilon f(R), \quad (4.6)$$

где

$$f(R) = \frac{1}{R\sqrt{2}} [1 - 4 \operatorname{erf}(R)]. \quad (4.7)$$

Мы возьмем для ε значение, которое минимизирует $\langle H \rangle$, если для R берется то значение R_0 , которое приводит к низшему значению $\langle H \rangle$, т. е. ε и R_0 определяются уравнениями

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \langle H \rangle = \frac{3}{2} \varepsilon + f(R) = 0; \quad \frac{\partial}{\partial R} \langle H \rangle = \varepsilon \frac{\partial f}{\partial R} = 0. \quad (4.8)$$

Значение R_0 получается путем графического построения функции $f(R)$ и отыскания ее минимума, в то время как зна-

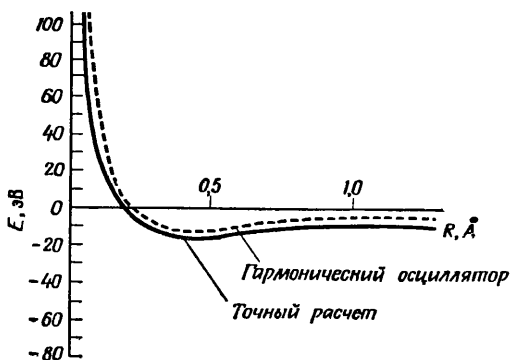
чение ϵ задается формулой $\epsilon = -^2/3f(R_0)$. Таким образом, для $\langle H \rangle$ окончательно получаем выражение

$$\langle H \rangle_{\text{мин}} \equiv E(R) = \frac{1}{3} f(R_0) [f(R_0) - 2f(R)]. \quad (4.9)$$

На фиг. 2 проводится сравнение функции $E(R)$ для H_2^+ с точным расчетом. Полная электронная энергия, которая соответствует минимуму кривой, составляет 84% от ее экспериментального значения, и теоретическое значение межъядерного расстояния равно 1,022 Å, в то время как экспериментальное значение составляет 1,06 Å.

Фиг. 2. Среднее значение $E(R)$ гамильтониана молекулярного иона H_2^+ как функция половины межъядерного расстояния R .

Одноэлектронная волновая функция аппроксимирована функцией гармонического осциллятора с нулевым числом квантов, частота которого выбрана таким образом, что энергия $E(R)$ минимальна.



Для иона H_2^+ Бендер [9] выполнил расчеты с функциями гармонического осциллятора, включая состояния с четырьмя квантами. В своем анализе он рассматривал только электронные энергии, т.е. не учитывал энергию отталкивания ядер. Взяв результаты Бендера при экспериментальном значении $R = 0,53 \text{ Å}$ с той частотой осциллятора, которая приводит к минимуму энергии для данного R , и добавив к ним $e^2/2R$, получаем следующее:

а) Вычисленная энергия для состояния $|000\rangle$ составляет 84% экспериментальной величины, что находится в соответствии с анализом, проведенным выше.

б) Для линейной комбинации состояний $|000\rangle$ и $|100\rangle$ расчетная энергия равна 88,66% от точного значения.

в) В случае линейной комбинации состояний $|000\rangle$ и $|020\rangle$ расчет дает энергию, равную 88,88% от точного значения.

г) Для линейной комбинации

$$a_1|000\rangle + a_2|100\rangle + a_3|020\rangle + a_4|200\rangle + a_5|120\rangle + a_6|040\rangle, \quad (4.10)$$

которая соответствует учету всех состояний до четырех квантов включительно, с помощью результатов Бендера получаем 93,46% от точного значения энергии и следующие значения коэффициентов:

$$\begin{aligned} a_1 &= 0,96396, & a_3 &= 0,15880, & a_5 &= 0,06226, \\ a_2 &= -0,18707, & a_4 &= 0,07847, & a_6 &= 0,02334. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Видно, что для иона H_2^+ сходимость вычислений при увеличении числа квантов такая же, как и для атома H .

5. Рассеяние электронов атомами водорода и формфактор плотности распределения электронного заряда в основном состоянии этих атомов

Мы использовали волновые функции гармонического осциллятора для вариационного анализа основного состояния атома водорода. В следующих разделах мы применим их к анализу формфактора атома водорода, что позволит создать базу для аналогичного обсуждения в дальнейшем формфактора протона, рассматриваемого как трехкварковая система, и α -частицы, представляющей собой четырехнуклонную систему.

Прежде всего покажем, как можно получить формфактор из экспериментальных данных по дифференциальному сечению упругого рассеяния электронов на атомах водорода. Для высоких (но нерелятивистских) энергий дифференциальное сечение рассеяния электронов может быть рассчитано в борновском приближении [10]¹⁾

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int U(r') \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right|^2 d\Omega, \quad (5.1)$$

где m — масса электрона, $d\Omega$ — дифференциал телесного угла и $\hbar\mathbf{q}$ — передаваемый импульс

$$\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \bar{\mathbf{p}}',$$

¹⁾ Мы всегда будем обозначать символами r' , p' и т. д. координаты и импульсы в обычных единицах, сохраняя обозначения r , p для соответствующих безразмерных величин.

или, поскольку $p' = \bar{p}'$,

$$\hbar q = 2p' \sin \frac{1}{2} \theta, \quad (5.2)$$

где θ — угол рассеяния. В (5.1) $U(r')$ можно представить в виде суммы потенциала, обусловленного протоном, и потенциала, создаваемого распределением электронного заряда, т. е.

$$U(r') = -\frac{e^2}{r'} + e^2 \int \frac{\rho(r'')}{|r' - r''|} dr'', \quad (5.3)$$

где $\rho(r')$ записывается через волновую функцию основного состояния ψ следующим образом:

$$\rho(r') = \psi^*(r') \psi(r'). \quad (5.4)$$

Используя теорему о свертке [11], согласно которой

$$\int dx e^{ikx} \int dy f(x-y) g(y) = \int dx e^{ikx} f(x) \int dy e^{iky} g(y), \quad (5.5)$$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int \left[\frac{e^2}{r'} - \int \frac{e^2 \rho(r'')}{|r' - r''|} dr'' \right] \exp(iq \cdot r') dr' \right|^2 = \\ &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \left| 1 - \int \rho(r') \exp(iq \cdot r') dr' \right|^2, \end{aligned} \quad (5.6)$$

где

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int \frac{e^2}{r'} \exp(iq \cdot r') dr' \right|^2 \quad (5.7)$$

есть резерфордовское сечение рассеяния.

Из (5.6) видно, что

$$1 - \left[\frac{d\sigma/d\Omega}{(d\sigma/d\Omega)_R} \right]^{1/2} = \int \rho(r') \exp(iq \cdot r') dr' \equiv F(q), \quad (5.8)$$

где $F(q)$ — формфактор плотности электронного заряда в основном состоянии атома водорода. Таким образом, из экспериментальных данных об отношении дифференциального сечения упругого рассеяния электронов к резерфордовскому дифференциальному сечению мы можем получить информацию о формфакторе $F(q)$ и тем самым [с учетом (5.8) и (5.4)] о волновой функции основного состояния $\psi(r')$.

Конечно, в случае атома водорода волновая функция основного состояния нам известна

$$\psi(r') = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left(-\frac{r'}{a}\right). \quad (5.9)$$

Здесь $a = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус. Поэтому точное выражение для формфактора $F_e(\mathbf{q})$ имеет вид

$$F_e(\mathbf{q}) = \frac{1}{\pi a^3} \int \exp\left(-\frac{2r'}{a}\right) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \\ = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r'}{a}\right) \frac{\sin qr'}{qr'} r'^2 dr', \quad (5.10)$$

оно является функцией только q^2 :

$$F_e(q^2) = \left[1 + \left(\frac{aq}{2}\right)^2\right]^{-2}. \quad (5.11)$$

В следующем разделе мы найдем выражение для формфактора в том случае, когда для описания основного состояния атома водорода используются функции гармонического осциллятора. Затем мы сравним результаты, полученные в приближениях, учитывающих различные числа квантов, с точным выражением.

6. Теоретический формфактор атома водорода в представлении, использующем осцилляторные функции

Представим себе, что нам неизвестна точная волновая функция основного состояния атома водорода, но мы можем аппроксимировать ее набором осцилляторных функций с числом квантов, не превышающим \mathfrak{N} , т. е.

$$\psi = \sum_n a_n |n00\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_n a_n R_{n0}(r), \quad n = 0, 1, \dots, \frac{1}{2}\mathfrak{N}. \quad (6.1)$$

В этом соотношении r — безразмерная переменная (см. разд. 1). Коэффициенты a_n можно определить из вариационного выражения (3.7), которое приводит к системе линейных уравнений для a_n

$$\sum_n \langle n'00 | \frac{1}{2} \epsilon^2 p^2 - \frac{\sqrt{2} \epsilon}{r} | n00 \rangle a_n = E(\epsilon) a_{n'}. \quad (6.2)$$

Здесь $E(\epsilon)$, низшее собственное значение матрицы гамильтониана (3.5), является функцией параметра ϵ , которая изображена на фиг. 1. Если принять для ϵ значение, которое дает минимум $E(\epsilon)$ для $\mathfrak{N} = 0, 2, 4, 6, 8$ или 10 квантов, то можно найти для этих случаев соответствующие значения

a_n . Плотность заряда, задаваемая функцией ψ в форме (6.1), имеет вид

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{nn'} a_n^* a_n R_{n'0}(r) R_{n0}(r), \quad (6.3)$$

а соответствующий формфактор, согласно (5.8), описывается выражением

$$\begin{aligned} F(q^2) &= \int \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \rho(r) dr = \\ &= 4\pi \int_0^\infty \rho(r) \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr = \sum_{nn'} a_n^* a_n M_{n'n}(k^2). \end{aligned} \quad (6.4)$$

В (6.4) k^2 и q^2 связаны соотношением

$$k^2 = \frac{\hbar}{m\omega} q^2 = 2 \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 \frac{1}{e^2} q^2, \quad (6.5)$$

поскольку в подынтегральное выражение входит безразмерная величина r . Далее

$$\begin{aligned} M_{n'n}(k^2) &\equiv \int_0^\infty R_{n'0}(r) \frac{\sin kr}{kr} R_{n0}(r) r^2 dr = \\ &= \sum_{p=0}^{n'+n} B(n'0, n0, p) I_p(k^2), \end{aligned} \quad (6.6)$$

где

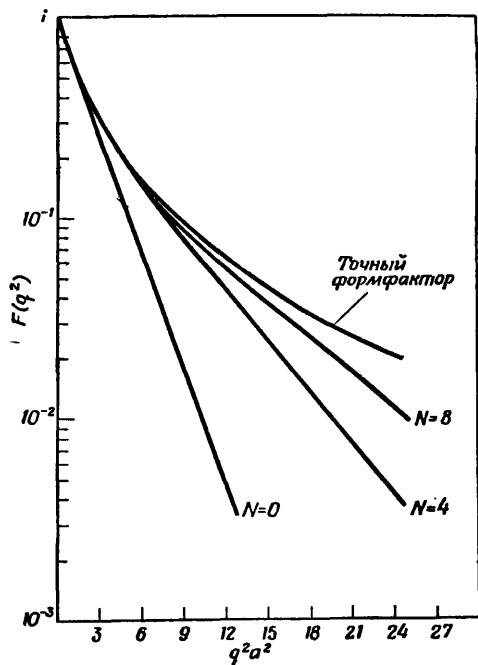
$$\begin{aligned} I_p(k^2) &= \frac{2}{\Gamma(p+3/2)} \int_0^\infty r^{2p+2} \frac{\sin kr}{kr} e^{-r^2} dr = \\ &= \frac{1}{2} e^{-k^2/4} \sum_{s=0}^p \binom{2p+1}{2s} \frac{\Gamma(s+1/2)}{\Gamma(p+3/2)} \left(-\frac{k^2}{4} \right)^{p-s}, \end{aligned} \quad (6.7)$$

в чем нетрудно убедиться путем интегрирования по частям.

Взяв для a_n значения, полученные вариационным методом при $\mathfrak{N} = 0, 4$ и 8 , и подставив в (6.5) подходящие значения ϵ для этих трех случаев, Яе¹⁾ вычислил соответствующие формфакторы; они изображены на фиг. 3, где приведен

¹⁾ W. W. Yeh, частное сообщение.

также точный формфактор $F_e(q^2)$. Заметим, что кривые на этом графике даны в полулогарифмическом масштабе, так что приближению с $N = 0$ соответствует прямая линия. Из графика ясно видно, что если увеличивать число квантов N , учитываемых в расчете, то можно получить результат, сколь



Фиг. 3. Формфактор электронного заряда основного состояния атома водорода как функция квадрата передаваемого импульса q^2 .

Верхняя кривая — точный формфактор (5.11). Остальные линии представляют формфакторы (6.4) для линейных комбинаций осцилляторных функций, полученных с помощью вариационного анализа разд. 3. Обозначения $N=0, 4, 8$ указывают максимальное число квантов, учитываемых в разложении.

угодно близкий к точному формфактору. По причинам, обсуждавшимся в конце разд. 3, на фиг. 3 мы показали формфакторы только для тех случаев, когда число квантов в выражении, аппроксимирующем функцию ψ , увеличивается сразу на четыре единицы.

В следующем разделе мы рассмотрим альтернативную процедуру, связанную с получением a_n непосредственно из экспериментальных данных или, как в случае атома водорода, из точного формфактора; таким образом, удастся обойтись без вариационных вычислений, которые требуют знания матрицы гамильтониана (6.2).

7. Прямое определение волновой функции основного состояния из формфактора с помощью метода наименьших квадратов.

Псевдохартри-фоковское (ПХФ) приближение

Предположим, что нам неизвестен вид потенциала в атоме водорода, но мы имеем в своем распоряжении экспериментальные данные относительно формфактора упругого рассеяния электронов на атоме водорода. Снова будем считать, что экспериментальные результаты совпадают с выражением (5.11), т. е. $F_e(q^2) = [1 + (aq/2)^2]^{-2}$, поскольку это есть точный формфактор.

Рассмотрим теперь производную $F_e(q^2)$ по q^2 , взятую в точке $q^2 = 0$. Она определяет тангенс угла наклона кривой $F_e(q^2)$ при $q^2 = 0$. Покажем, что эта величина пропорциональна среднеквадратичному радиусу атома, и в дальнейшем воспользуемся этим результатом для того, чтобы зафиксировать значение частоты $\hbar\omega$ в осцилляторных функциях, с которыми мы будем работать. Как видно из (6.4), нахождение производной dF/dq^2 фактически сводится к вычислению следующей величины:

$$\frac{d}{dq^2} \frac{\sin qr'}{qr'} = \frac{1}{2q} \frac{d}{dq} \frac{\sin qr'}{qr'} = \frac{1}{2q^2} \left(\cos qr' - \frac{\sin qr'}{qr'} \right). \quad (7.1)$$

Разлагая $\cos qr'$ и $\sin qr'/qr'$ по степеням аргумента qr' , мы окончательно получаем

$$\left[\frac{d}{dq^2} \frac{\sin qr'}{qr'} \right]_{q^2=0} = -\frac{1}{6} r'^2. \quad (7.2)$$

Следовательно,

$$\left(\frac{dF}{dq^2} \right)_{q^2=0} = -\frac{4\pi}{6} \int_0^\infty \rho(r') r'^4 dr'. \quad (7.3)$$

Поскольку плотность $\rho(r')$, входящая в выражение для $F_e(q^2)$, равна $(\pi a^3)^{-1} \exp(-2r'/a)$, то

$$\left(\frac{dF_e}{dq^2} \right)_{q^2=0} = -\frac{1}{2} a^2. \quad (7.4)$$

Отметим, что этот результат можно было бы получить непосредственно из (5.11), однако соотношение (7.3) справедливо

для значений $\rho(r')$, задаваемых любыми волновыми функциями, описывающими основное состояние атома водорода. Мы подставим в него разложение ψ по осцилляторным функциям (6.1) и затем сравним результат с (7.4). Таким способом мы зафиксируем значение параметра ϵ .

В приближении, учитывающем только состояние с нулем квантов, получаем

$$\rho(r) = \pi^{-3/2} e^{-r^2}, \quad (7.5)$$

где r — безразмерная переменная (разд. 1). Подставляя это значение $\rho(r)$ в (7.3), находим

$$\left(\frac{dF}{dq^2}\right)_0 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{dF}{dk^2}\right)_0 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[-\frac{4\pi}{6} \int_0^\infty r^4 \pi^{-3/2} e^{-r^2} dr \right] = -\frac{1}{4} \frac{\hbar}{m\omega}, \quad (7.6)$$

где мы учли связь (6.5) между k^2 и q^2 , что необходимо сделать при использовании безразмерной величины r . Приравнявая этот результат к «экспериментальному» значению (7.4), имеем

$$\frac{1}{4} \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{1}{2} a^2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar^4}{m^2 e^4}, \quad (7.7)$$

или

$$\frac{\hbar\omega}{me^4/2\hbar^2} = \epsilon = 1. \quad (7.8)$$

Таким образом, из анализа формфактора для параметра ϵ нами получено значение 1. Оно находится в хорошем согласии с вариационным расчетом в аналогичном приближении, учитывающем только состояние с нулем квантов, в котором мы нашли $\epsilon = 1,06$ [(3.13)].

Чтобы полностью определить вид волновой функции (6.1), нам остается только вычислить коэффициенты a_n . Мы сделаем это путем подгонки выражения (6.4) для $F(q^2)$ к точному формфактору $F_e(q^2)$ методом наименьших квадратов; при этом нужно учесть условие нормировки для функции ψ , т. е. мы должны минимизировать выражение

$$\int_0^\infty [F(q^2) - F_e(q^2)]^2 dq^2 - \lambda \sum_n a_n^* a_n, \quad n = 0, 1, \dots, \frac{1}{2} \mathfrak{N}, \quad (7.9)$$

где λ — множитель Лагранжа. После подстановки в это выражение формфактора (6.4) оно приобретает вид (суммирование по всем индексам производится от 0 до $1/2\mathcal{N}$)

$$\sum_{\substack{n'n \\ m'm}} a_n^* a_m^* a_n a_m \int_0^\infty M_{n'n}(q^2) M_{m'm}(q^2) dq^2 - 2 \sum_{n'n} a_n^* a_n \times \\ \times \int_0^\infty M_{n'n}(q^2) F_e(q^2) dq^2 + \int_0^\infty [F_e(q^2)]^2 dq^2 - \lambda \sum_{n'n} a_n^* a_n \delta_{n'n}. \quad (7.10)$$

Дифференцируя его по a_k^* , получаем следующую систему алгебраических уравнений:

$$2 \sum_n \left[\sum_{m'm} a_m^* a_m \int_0^\infty M_{kn}(q^2) M_{m'm}(q^2) dq^2 \right] a_n - \\ - 2 \sum_n \left[\int_0^\infty M_{kn}(q^2) F_e(q^2) dq^2 \right] a_n = \lambda a_k. \quad (7.11)$$

Будем решать систему (7.11) методом последовательных приближений. Взяв в качестве отправного пункта некоторые исходные значения $a_n^{(0)}$, с помощью (6.4) находим величину

$$F^{(p-1)}(q^2) \equiv \sum_{m'm} a_m^{*(p-1)} a_m^{(p-1)} M_{m'm}(q^2), \quad (7.12)$$

используя коэффициенты $a_n^{(p-1)}$ в $(p-1)$ -м приближении. Подставляя (7.12) в (7.11), получаем систему линейных уравнений

$$2 \sum_n \left\{ \int_0^\infty dq^2 [F^{(p-1)}(q^2) - F_e(q^2)] M_{kn}(q^2) \right\} a_n^{(p)} = \lambda a_k^{(p)}. \quad (7.13)$$

Мы продолжим эту процедуру до тех пор, пока не получится самосогласованное решение уравнений (7.13), т. е. пока коэффициенты $a_n^{(p)}$ и $a_n^{(p-1)}$ не окажутся совпадающими друг с другом с желаемой степенью точности.

Уравнения (7.11) и предложенный выше метод их решения очень сходны с процедурой вычислений в методе Хартри — Фока [12]. По этой причине мы назовем данный способ нахождения коэффициентов a_n псевдохартри-фоковским (ПХФ) приближением.

Уравнения (7.13) в случае $\mathfrak{N} = 2$ и $\varepsilon = 1$ решала А. М. Сетто¹⁾, которая получила следующие результаты:

$$\begin{aligned} \alpha_0^{(3)} = 1, \quad \alpha_0^{(1)} = 0,680, \quad \alpha_0^{(2)} = 0,650, \\ \alpha_1^{(0)} = 0, \quad \alpha_1^{(1)} = 0,733, \quad \alpha_1^{(2)} = 0,760. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Таким образом, самосогласованность практически достигается уже после двух итераций. В настоящее время выполняются вычисления с бóльшим числом квантов \mathfrak{N} ¹⁾.

8. Волновые функции одночастичного гармонического осциллятора, выраженные через операторы рождения квантов

Известно, что волновые функции одномерного гармонического осциллятора характеризуются целым квантовым числом n и могут быть следующим образом записаны с помощью операторов рождения квантов, действующих на функцию основного состояния:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \eta^n |0\rangle, \quad |0\rangle = \pi^{-1/4} e^{-1/2x^2}, \quad (8.1)$$

где

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{2}} (x - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right). \quad (8.2)$$

Легко показать, что $|n\rangle$ является собственной функцией оператора H

$$H|n\rangle = \frac{1}{2} (p^2 + x^2)|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle. \quad (8.3)$$

Чтобы убедиться в этом, введем оператор уничтожения кванта

$$\xi = \eta^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (x + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right), \quad (8.4)$$

для которого ввиду (8.1) имеем

$$\xi |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \pi^{-1/4} e^{-1/2x^2} = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2}} x [e^{-1/2x^2} - e^{-1/2x^2}] = 0. \quad (8.5)$$

¹⁾ А. М. Cetto, частное сообщение.

С другой стороны, мы получаем, что коммутатор $[\xi, \eta] = 1$. Поэтому

$$\begin{aligned} H|n\rangle &= \frac{1}{2}(\rho^2 + x^2)|n\rangle = \left(\eta\xi + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \eta\xi \frac{1}{\sqrt{n!}}\eta^n|0\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\eta[\xi, \eta^n]|0\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle = \frac{n}{\sqrt{n!}}\eta^n|0\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Здесь мы использовали результат $[\xi, \eta^n] = n\eta^{n-1}$. Обобщение на трехмерный случай производится непосредственным образом. Тогда собственные функции имеют вид

$$|n_1 n_2 n_3\rangle = [n_1! n_2! n_3!]^{-1/2} \eta_1^{n_1} \eta_2^{n_2} \eta_3^{n_3} |0\rangle, \quad (8.7)$$

где

$$\eta_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_j - ip_j), \quad \xi_j = \eta_j^\dagger, \quad j = 1, 2, 3. \quad (8.8)$$

Нормированная волновая функция основного состояния записывается следующим образом:

$$|0\rangle = \pi^{-3/4} \exp\left[-\frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)\right]. \quad (8.9)$$

В рассматриваемой нами декартовой системе координат квантовые числа n_1 , n_2 и n_3 связаны с интегралами движения H_1 , H_2 и H_3 . Состояния (8.7), вообще говоря, не являются собственными состояниями операторов L^2 или L_3 . Если мы хотим иметь дело с состояниями, принадлежащими к определенным собственным значениям операторов H , L^2 и L_3 , т. е. характеризуемыми квантовыми числами N , l , m , то мы должны построить из операторов η_i соответствующие однородные полиномы степени N . Чтобы найти указанные полиномы, решим сначала следующую вспомогательную задачу: какой вид имеют полиномы $P = P(x_1, x_2, x_3)$, удовлетворяющие уравнениям

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \cdot \nabla P &= NP, \\ L^2 P &= l(l+1)P, \\ L_3 P &= mP, \end{aligned} \quad (8.10)$$

с целыми значениями N , l , m , $-l \leq m \leq l$, $N \geq l$ и четным значением $N - l$? Ясно, что это будут однородные полиномы $r^N Y_{lm}(\theta, \varphi)$ степени N , где Y_{lm} — обычные сферические гармоники. Вводя пространственные сферические гармоники

$$\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{x}) \equiv r^l Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (8.11)$$

можно переписать решение следующим образом:

$$(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})^n \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{x}) \text{ с } N = 2n + l. \quad (8.12)$$

Вернемся теперь к операторам рождения и уничтожения квантов η_i, ξ_j . Из (8.8) легко видеть, что

$$[\xi_i, \eta_j] = \delta_{ij}, \quad [\xi_i, \xi_j] = [\eta_i, \eta_j] = 0 \quad (8.13)$$

и

$$\boldsymbol{\eta} \times \boldsymbol{\xi} = \frac{1}{2} i (\mathbf{x} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{x}) \equiv i \mathbf{x} \times \mathbf{p}, \quad (8.14)$$

так что

$$\mathbf{L} = -i \boldsymbol{\eta} \times \boldsymbol{\xi}. \quad (8.15)$$

Из (8.13) можно сделать вывод, что если ξ_j действует на полином, составленный из операторов рождения η_j , то его можно рассматривать как оператор дифференцирования $\partial/\partial\eta_j$, подобно тому как для оператора импульса берется выражение $p_j = -i\partial/\partial x_j$. Поэтому с учетом (8.10) и (8.12) становится ясно, что состояние

$$|nlm\rangle \equiv A_{nl} (\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta})^n \mathcal{Y}_{lm}(\boldsymbol{\eta}) |0\rangle, \quad (8.16)$$

в котором A_{nl} — нормировочная константа, удовлетворяет уравнениям

$$\begin{aligned} \left(H - \frac{3}{2}\right) |nlm\rangle &= \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\xi} |nlm\rangle = N |nlm\rangle, \\ \mathbf{L}^2 |nlm\rangle &= l(l+1) |nlm\rangle, \\ L_3 |nlm\rangle &= m |nlm\rangle. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Таким образом, функция $|nlm\rangle$, задаваемая выражением (8.16), является одновременно собственной функцией операторов H, \mathbf{L}^2, L_3 и имеет вид однородного полинома степени $N = 2n + l$ из операторов η_j , действующего на функцию основного состояния

$$|0\rangle \equiv \pi^{-3/4} e^{-1/2 r^2}. \quad (8.18)$$

Нормировочный коэффициент A_{nl} , вычисленный в следующем разделе, равен

$$A_{nl} = (-1)^n \left[\frac{4\pi}{(2n+2l+1)!! (2n)!!} \right]^{1/2}. \quad (8.19)$$

9. Нормировочные коэффициенты для волновых функций гармонического осциллятора

Нормировочный коэффициент A_{nlm} можно найти, вычислив скалярное произведение функции $|nlm\rangle$ самой на себя $1 = \langle nlm|nlm\rangle = |A_{nlm}|^2 \langle 0|\mathcal{Y}_{lm}^\dagger(\boldsymbol{\eta})(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi})^n(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\eta})^n\mathcal{Y}_{lm}(\boldsymbol{\eta})|0\rangle$. (9.1)

В качестве первого шага нужно получить рекуррентное соотношение по индексу n , позволяющее связать искомый матричный элемент с матричным элементом при $n = 0$, который уже нетрудно вычислить непосредственным путем. Из отмеченного выше соответствия $\xi_j \rightarrow \partial/\partial\eta_j$ следует, что $\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}$ действует на $(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\eta})^n\mathcal{Y}_{lm}(\boldsymbol{\eta})$ подобно действию оператора Лапласа

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2} \quad (9.2)$$

на функцию $(\mathbf{x}\cdot\mathbf{x})^n\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r})$; результат последнего легко найти

$$\begin{aligned} \nabla^2(\mathbf{x}\cdot\mathbf{x})^n\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}) &= \nabla^2 r^{2n+l} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \\ &= [(2n+l)(2n+l+1) - l(l+1)] r^{2n-2} \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}) = \\ &= 2n(2n+2l+1) r^{2n-2} \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (9.3)$$

Посредством этой аналогии скалярное произведение (9.1) приводится к виду

$$\begin{aligned} \langle 0|\mathcal{Y}_{lm}^\dagger(\boldsymbol{\eta})(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi})^n(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\eta})^n\mathcal{Y}_{lm}(\boldsymbol{\eta})|0\rangle &= \\ &= 2n(2n+2l+1) \langle 0|\mathcal{Y}_{lm}^\dagger(\boldsymbol{\eta})(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi})^{n-1}(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\eta})^{n-1}\mathcal{Y}_{lm}(\boldsymbol{\eta})|0\rangle = \\ &= \frac{(2n)!!(2n+2l+1)!!}{(2l+1)!!} \langle 0|\mathcal{Y}_{lm}^\dagger(\boldsymbol{\eta})\mathcal{Y}_{lm}(\boldsymbol{\eta})|0\rangle. \end{aligned} \quad (9.4)$$

Дальнейший анализ упрощается, если учесть, что скалярное произведение (9.4) не зависит от m . Это становится ясным из следующих соображений: вспомним, что

$$L_+|0lm\rangle = [(l-m)(l+m+1)]^{1/2}|0lm+1\rangle, \quad (9.5)$$

или

$$[(l-m)(l+m+1)]^{-1/2}L_+|0lm\rangle = |0lm+1\rangle. \quad (9.6)$$

Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} \langle 0|\mathcal{Y}_{lm+1}^\dagger\mathcal{Y}_{lm+1}|0\rangle &= \\ &= [(l-m)(l+m+1)]^{-1} \langle 0|\mathcal{Y}_{lm}^\dagger L_- L_+ \mathcal{Y}_{lm}|0\rangle. \end{aligned} \quad (9.7)$$

Используя равенство $L^2 = L_-L_+ + L_0(L_0 + 1)$, получаем соотношение

$$\begin{aligned} \langle 0 | \mathcal{Y}_{lm+1}^\dagger \mathcal{Y}_{lm+1} | 0 \rangle &= \frac{l(l+1) - m(m+1)}{(l-m)(l+m+1)} \langle 0 | \mathcal{Y}_{lm}^\dagger \mathcal{Y}_{lm} | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | \mathcal{Y}_{lm}^\dagger \mathcal{Y}_{lm} | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (9.8)$$

которое и представляет собой искомый результат. Теперь мы можем опустить у коэффициента A_{nlm} индекс m , что и было сделано уже в (8.16).

Таким образом, без ущерба для общности можно положить $m = l$, тогда $\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{x})$ сводится к выражению [13]

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{ll}(\mathbf{r}) &= (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{r^l}{l! 2^l} \sin^l \theta \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} = \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2^{4\pi}}} \frac{1}{l!} (x_+)^l, \end{aligned} \quad (9.9)$$

где

$$x_{\pm} \equiv \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 \pm ix_2). \quad (9.10)$$

По аналогии имеем

$$\mathcal{Y}_{ll}(\boldsymbol{\eta}) = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2^{4\pi}}} \frac{1}{l!} (\eta_+)^l, \quad (9.11)$$

где

$$\eta_{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta_1 \pm i\eta_2). \quad (9.12)$$

Тогда

$$\langle 0 | \mathcal{Y}_{ll}^\dagger(\boldsymbol{\eta}) \mathcal{Y}_{ll}(\boldsymbol{\eta}) | 0 \rangle = \frac{(2l+1)!}{4\pi} \frac{1}{2^l (l!)^2} \langle 0 | (\eta_+^\dagger)^l (\eta_+)^l | 0 \rangle = \frac{(2l+1)!!}{4\pi}. \quad (9.13)$$

С учетом (9.4) и (9.13) выражение (9.1) приобретает форму

$$\langle nlm | nlm \rangle = |A_{nl}|^2 \frac{(2n)!! (2n+2l+1)!!}{(2l+1)!!} \frac{(2l+1)!!}{4\pi}, \quad (9.14)$$

или

$$A_{nl} = e^{i\delta_{nl}} \left[\frac{4\pi}{(2n)!! (2n+2l+1)!!} \right]^{1/2}. \quad (9.15)$$

Мы выберем фазовый множитель $e^{i\delta_{nl}}$ таким образом, чтобы согласовать полученное выражение со стандартным

определением присоединенных полиномов Лагерра [11]¹⁾, в которых коэффициент a_{nl0} из формулы (1.8) положителен.

Из (1.8) и (9.9) видно, что

$$|nll\rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2^l 4\pi}} \frac{1}{l!} x_+^l \sum_{k=0}^n a_{nlk} r^{2k} e^{-1/2r^2}, \quad (9.16)$$

где a_{nlk} определяется соотношением (1.9), в то время как через операторы рождения квантов $|nll\rangle$ записывается так:

$$|nll\rangle = A_{nl} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2^l 4\pi}} \frac{1}{l!} (\eta \cdot \eta)^n \eta_+^l |0\rangle. \quad (9.17)$$

Чтобы сравнить эти два выражения и получить фазовый множитель, заметим вначале, что

$$\eta_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_+ - ip_+) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x_+ - \frac{\partial}{\partial x_+} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x_+ + \frac{\partial}{\partial x_-} \right), \quad (9.18)$$

затем используем (9.16), (9.17), а также тот факт, что $r^2 = -2x_+x_- + x_0^2$, вследствие чего $\partial f(r)/\partial x_- = -(x_+/r) \partial f/\partial r$.

В результате запишем

$$\begin{aligned} |nl+1l+1\rangle &= \frac{A_{nl+1}}{A_{nl}} \left[\frac{(2l+3)(2l+2)}{2} \right]^{1/2} \frac{1}{l+1} \eta_+ |nll\rangle = \\ &= \frac{A_{nl+1}}{A_{nl}} \frac{[(2l+3)(2l+2)]^{1/2}}{2(l+1)} \left(x_+ + \frac{\partial}{\partial x_-} \right) |nll\rangle = \\ &= \frac{A_{nl+1}}{A_{nl}} \left[\frac{(2l+3)!}{4\pi 2^l} \right]^{1/2} \frac{1}{(l+1)!} \sum_k (a_{nlk} - (k+1)a_{nlk+1}) r^{2k} e^{-1/2r^2}. \end{aligned} \quad (9.19)$$

Таким образом, мы получаем

$$a_{nl+10} = \frac{A_{nl+1}}{A_{nl}} \sqrt{2} (a_{nl0} - a_{nl1}), \quad (9.20)$$

где выражение в круглых скобках положительно, согласно (1.9). Это означает, что A_{nl+1} и A_{nl} имеют один и тот же знак. Поскольку эти рассуждения сохраняют силу и при рассмотрении более высоких степеней оператора η_+ , очевидно, что фазовый множитель не зависит от l .

Далее заметим, что

$$\eta \cdot \eta = r^2 - \frac{1}{2} (p^2 + r^2) - \frac{3}{2} - i\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = r^2 - H_{h0} - \frac{3}{2} - \mathbf{r} \cdot \nabla, \quad (9.21)$$

¹⁾ См. также [53—55]. — Прим. перев.

поэтому из (9.16) и (9.17) получаем

$$\begin{aligned}
 |n+1l\rangle &= \frac{A_{n+1l}}{A_{nl}} (\eta \cdot \eta) |nl\rangle = \\
 &= \frac{A_{n+1l}}{A_{nl}} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2^{l+1}4\pi}} \frac{1}{l!} \left(\frac{x_+}{r}\right)^l \sum_k [2a_{nlk-1} - \\
 &\quad - (2n+2k+l+3) a_{nlk}] r^{2k+l} e^{-1/2r^2}. \quad (9.22)
 \end{aligned}$$

В итоге находим

$$a_{n+1l0} = - \frac{A_{n+1l}}{A_{nl}} (2n+2k+l+3) a_{nl0}. \quad (9.23)$$

Это означает, что A_{n+1l} и A_{nl} имеют противоположные знаки.

Поскольку, по определению $A_{00} = 1$, из проведенного выше обсуждения видно, что фазовый множитель в (9.15) равен

$$e^{i\delta_{nl}} = (-1)^n. \quad (9.24)$$

Именно этот фазовый множитель и фигурирует в (8.19).

10. Трансформационные коэффициенты для состояний двух частиц в потенциале гармонического осциллятора

В предыдущей главе мы обсуждали одночастичную задачу на основе одночастичных осцилляторных волновых функций. Самая общая задача двух тел может быть проанализирована путем разложения волновой функции по двухчастичным осцилляторным волновым функциям с определенным полным угловым моментом Λ и его проекцией M , которые записываются в дираковских обозначениях следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2 | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M \rangle &= [\psi_{n_1 l_1}(\mathbf{x}^1) \psi_{n_2 l_2}(\mathbf{x}^2)]_{\Lambda M} \equiv \\ &\equiv \sum_{m_1 m_2} (l_1 l_2 m_1 m_2 | \Lambda M) \psi_{n_1 l_1 m_1}(\mathbf{x}^1) \psi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{x}^2). \end{aligned} \quad (10.1)$$

В (10.1) квадратные скобки с нижним индексом ΛM представляют собой сокращенную запись векторного сложения моментов l_1 и l_2 в полный момент Λ , которая расшифровывается в последней строке этого выражения. Мы будем различать координаты и импульсы отдельных частиц с помощью верхнего индекса, используя нижний индекс там, где это необходимо, для нумерации компонент этих векторов, например, x_i^α .

Состояния (10.1) удобны для вычисления матричных элементов одночастичных операторов, таких, как кинетическая энергия или общий для всех частиц потенциал, поскольку эти операторы действуют только либо на $\psi_{n_1 l_1 m_1}(\mathbf{x}^1)$, либо на $\psi_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{x}^2)$. Однако они совсем неудобны для рассмотрения таких операторов, как энергия взаимодействия $V(|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2|)$, которая является функцией относительной координаты. Поэтому представляется целесообразным разложить состояние (10.1) по состояниям, зависящим от относительных координат и координат центра масс.

Для удобства мы введем в определение этих координат и соответствующих импульсов коэффициент $\sqrt{2}$:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2), & \dot{\mathbf{p}}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{p}^1 - \mathbf{p}^2), \\ \dot{\mathbf{x}}^2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^1 + \mathbf{x}^2), & \dot{\mathbf{p}}^2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{p}^1 + \mathbf{p}^2). \end{aligned} \quad (10.2)$$

Подчеркнем еще раз, что все \mathbf{x} и \mathbf{p} даны в безразмерных единицах (разд. 1). Здесь и ниже для того, чтобы отличать друг от друга величины, относящиеся к различным системам координат, мы часто будем использовать символы с одной или двумя точками сверху. Эти обозначения не имеют никакого отношения к производным по времени.

Волновая функция двух частиц в относительных переменных и переменных центра масс записывается следующим образом:

$$\langle \dot{\mathbf{x}}^1, \dot{\mathbf{x}}^2 | \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{\Lambda} \dot{M} \rangle \equiv [\psi_{\dot{n}_1 \dot{l}_1}(\dot{\mathbf{x}}^1) \psi_{\dot{n}_2 \dot{l}_2}(\dot{\mathbf{x}}^2)]_{\dot{\Lambda} \dot{M}}. \quad (10.3)$$

Заметим, что если использовать неполные дираковские обозначения, то может возникнуть путаница с кет-векторами (10.1) и (10.3). Мы попытаемся избежать этого, используя обычные буквы $n_s l_s$ для кет-векторов, зависящих от $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2$, и буквы с точками $\dot{n}_s \dot{l}_s$ — для кет-векторов, зависящих от $\dot{\mathbf{x}}^1, \dot{\mathbf{x}}^2$.

Из (10.2) получаем

$$H = \frac{1}{2} [(\mathbf{p}^1)^2 + (\mathbf{x}^1)^2 + (\mathbf{p}^2)^2 + (\mathbf{x}^2)^2] = \\ = \frac{1}{2} [(\dot{\mathbf{p}}^1)^2 + (\dot{\mathbf{x}}^1)^2 + (\dot{\mathbf{p}}^2)^2 + (\dot{\mathbf{x}}^2)^2] = \dot{H}, \quad (10.4)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 = \mathbf{x}^1 \times \mathbf{p}^1 + \mathbf{x}^2 \times \mathbf{p}^2 = \\ = \dot{\mathbf{x}}^1 \times \dot{\mathbf{p}}^1 + \dot{\mathbf{x}}^2 \times \dot{\mathbf{p}}^2 = \dot{\mathbf{l}}_1 + \dot{\mathbf{l}}_2 = \dot{\mathbf{L}}, \quad (10.5)$$

так что в разложении состояний (10.1) по состояниям (10.3) следует положить $\Lambda = \dot{\Lambda}$, $M = \dot{M}$ и, кроме того,

$$2\dot{n}_1 + \dot{l}_1 + 2\dot{n}_2 + \dot{l}_2 = 2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2. \quad (10.6)$$

Интересующие нас трансформационные коэффициенты являются коэффициентами разложения

$$|n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle = \\ = \sum_{\dot{n}_1 \dot{l}_1 \dot{n}_2 \dot{l}_2} |\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M\rangle \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2 \Lambda \rangle, \quad (10.7)$$

где сумма конечна, поскольку неотрицательные целые числа \dot{n}_s, \dot{l}_s ограничены условием (10.6), а также правилом векторного сложения угловых моментов:

$$|\dot{l}_1 - \dot{l}_2| \leq \Lambda \leq \dot{l}_1 + \dot{l}_2. \quad (10.8)$$

Трансформационные коэффициенты не зависят от M , поскольку, как видно из (10.5), мы получаем в обеих частях равенства (10.7) состояния с проекцией углового момента $M + 1$, если подействуем на него оператором

$$[(\Lambda - M)(\Lambda + M + 1)]^{-1/2} (L_1 + iL_2). \quad (10.9)$$

Чтобы вывести явное выражение для трансформационных коэффициентов осцилляторных функций, отвечающих переходу от координат x^1, x^2 к координатам \dot{x}^1, \dot{x}^2 , мы сначала выразим двухчастичные состояния (10.1) через операторы рождения. Из формул разд. 8 видно, что

$$\begin{aligned} |n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle &= \\ &= A_{n_1 l_1} A_{n_2 l_2} (\eta^1 \cdot \eta^1)^{n_1} (\eta^2 \cdot \eta^2)^{n_2} [\mathcal{Y}_{l_1}(\eta^1) \mathcal{Y}_{l_2}(\eta^2)]_{\Lambda M} |0\rangle, \end{aligned} \quad (10.10)$$

где

$$\eta^\alpha \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x^\alpha - i p^\alpha), \quad \alpha = 1, 2, \quad (10.11)$$

и

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \pi^{-3/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} [(x^1)^2 + (x^2)^2]\right\} = \\ &= \pi^{-3/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} [(\dot{x}^1)^2 + (\dot{x}^2)^2]\right\}. \end{aligned} \quad (10.12)$$

В первую очередь мы получим трансформационные коэффициенты для случая $n_1 = n_2 = 0$, а затем выведем рекуррентное соотношение, которое даст нам возможность вычислить эти коэффициенты при произвольных значениях n_1 и n_2 . Для $n_1 = n_2 = 0$ (10.10) сводится к следующему выражению:

$$|0l_1, 0l_2, \Lambda M\rangle = A_{0l_1} A_{0l_2} [\mathcal{Y}_{l_1}(\eta^1) \mathcal{Y}_{l_2}(\eta^2)]_{\Lambda M} |0\rangle. \quad (10.13)$$

В соответствии с (10.2) операторы рождения квантов в системе координат \dot{x}^1, \dot{x}^2 определяются соотношениями

$$\dot{\eta}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta^1 - \eta^2), \quad \dot{\eta}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta^1 + \eta^2). \quad (10.14)$$

Нам нужно выразить (10.13) через операторы η^α и затем сравнить результат с (10.3). Однако сначала мы должны получить вид зависимости $\mathcal{Y}_{lm}(\eta)$ от $\dot{\eta}^1$ и $\dot{\eta}^2$ или (что более удобно) рассмотреть эквивалентную задачу для обычных

переменных так же, как в разд. 8. Пусть имеется пространственная сферическая гармоника $\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}) = r^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$, где

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}'', \quad (10.15)$$

и мы хотим представить $\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r})$ как функцию от \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' . При фиксированном \mathbf{r}'' получим $\nabla^2 \mathcal{Y}_{lm} = (\nabla')^2 \mathcal{Y}_{lm} = 0$, так как \mathbf{r} отличается от \mathbf{r}' только трансляцией. Аналогично $(\nabla'')^2 \times \times \mathcal{Y}_{lm} = 0$. Следовательно, в разложение должны входить члены вида

$$(r')^{l'} (r'')^{l''} [Y_{l'}(\theta', \varphi') Y_{l''}(\theta'', \varphi'')]_{lm} = [\mathcal{Y}_{l'}(\mathbf{r}') \mathcal{Y}_{l''}(\mathbf{r}'')]_{lm}. \quad (10.16)$$

Далее, \mathcal{Y}_{lm} — однородный полином степени l по координате r , следовательно, также и по r' и r'' . Поэтому

$$l' + l'' = l. \quad (10.17)$$

Линейная комбинация членов (10.16) должна равняться \mathcal{Y}_{lm}

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}) &= r^l Y_{lm}(\theta, \varphi) = \\ &= \sum_{l', l''=0}^l \delta_{l, l'+l''} G(l'l''l) (r')^{l'} (r'')^{l''} [Y_{l'}(\theta', \varphi') Y_{l''}(\theta'', \varphi'')]_{lm}, \end{aligned} \quad (10.18)$$

где $G(l'l''l)$ — коэффициент, подлежащий определению, а $\delta_{l, l'+l''}$ — дельта-символ Кронекера.

Чтобы вычислить G , положим $\theta' = \theta'' = 0$; это означает, что $\theta = 0$ и, следовательно, $r = r' - r''$. При учете соотношения $Y_{lm}(0, 0) = [4\pi/(2l+1)]^{-1/2} \delta_{m0}$ разложение (10.18) принимает вид

$$\begin{aligned} \left[\frac{4\pi}{2l+1} \right]^{-1/2} (r' - r'')^l &= \\ &= \sum_{l', l''=0}^l \delta_{l, l'+l''} G(l'l''l) (l'l''00 | l0) \left[\frac{(4\pi)^2}{(2l'+1)(2l''+1)} \right]^{-1/2} (r')^{l'} (r'')^{l''}. \end{aligned} \quad (10.19)$$

Разлагая в выражении (10.19) в ряд бином $(r' - r'')^l$ и используя явное выражение для коэффициентов Клебша — Гордана [14] ¹⁾, получаем

$$G(l'l''l) = (-1)^{l''} \sqrt{\frac{4\pi(2l+1)!}{(2l'+1)!(2l''+1)!}}. \quad (10.20)$$

Вернемся теперь к нашей функции $|0l_1, 0l_2, \Lambda M\rangle$.

¹⁾ См. также [50—52]. — Прим. перев.

Мы видим, что сферическую гармонику можно записать следующим образом:

$$\mathcal{Y}_{l_1 m_1}(\eta^1) = 2^{-1/2 l_1} \sum_{l_1' l_2'} (-1)^{l_2'} G(l_1' l_2' l_1) \times \\ \times \delta_{l_1, l_1' + l_2'} [\mathcal{Y}_{l_1'}(\dot{\eta}^1) \mathcal{Y}_{l_2'}(\dot{\eta}^2)]_{l_1 m_1}, \quad (10.21)$$

где множитель $2^{-1/2 l_1}$ возник за счет дополнительной величины $\sqrt{2}$, входящей в определение $\eta^1 = 2^{-1/2}(\dot{\eta}^1 + \dot{\eta}^2)$, в то время, как в (10.15) фигурировал вектор $\mathbf{r} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}''$; множитель $(-1)^{l_2'}$ обусловлен изменением знака у второго слагаемого:

$$\mathcal{Y}_{lm}(-\mathbf{r}) = r^l Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l r^l Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}).$$

Аналогично записываем

$$\mathcal{Y}_{l_2 m_2}(\eta^2) = 2^{-1/2 l_2} \sum_{l_1'' l_2''} (-1)^{l_2} G(l_1'' l_2'' l_2) \delta_{l_2, l_1'' + l_2''} [\mathcal{Y}_{l_1''}(\dot{\eta}^1) \mathcal{Y}_{l_2''}(\dot{\eta}^2)]_{l_2 m_2}. \quad (10.22)$$

Теперь можно использовать 9j-символы [15] ¹⁾, чтобы выразить произведение

$$\left[[\mathcal{Y}_{l_1'}(\dot{\eta}^1) \mathcal{Y}_{l_2'}(\dot{\eta}^2)]_{l_1} [\mathcal{Y}_{l_1''}(\dot{\eta}^1) \mathcal{Y}_{l_2''}(\dot{\eta}^2)]_{l_2} \right]_{\Lambda M} \quad (10.23)$$

через произведение

$$\left[[\mathcal{Y}_{l_1'}(\dot{\eta}^1) \mathcal{Y}_{l_1''}(\dot{\eta}^1)]_{l_1} [\mathcal{Y}_{l_2'}(\dot{\eta}^2) \mathcal{Y}_{l_2''}(\dot{\eta}^2)]_{l_2} \right]_{\Lambda M}. \quad (10.24)$$

Применяя известное соотношение для обычных сферических гармоник [2]

$$Y_{l' m'}(\theta, \varphi) Y_{l'' m''}(\theta, \varphi) = \\ = \sum_{lm} H(l' l'' l) (l' l'' m' m'' | lm) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (10.25)$$

где

$$H(l' l'' l) = \sqrt{\frac{(2l' + 1)(2l'' + 1)}{4\pi(2l + 1)}} (l' l'' 00 | l0), \quad (10.26)$$

мы можем далее выразить произведение двух пространствен-

¹⁾ См. также [50—52]. — *Прим. перев.*

ных сферических гармоник через одну сферическую гармонику и множитель $(\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta})^n$. С помощью указанных соотношений, в частности, получаем

$$\begin{aligned} & [\mathcal{Y}_{l_1'}(\dot{\boldsymbol{\eta}}^1) \mathcal{Y}_{l_1''}(\dot{\boldsymbol{\eta}}^1)]_{l_1 \dot{m}_1} = \\ & = \delta_{l_1'+l_1'', 2\dot{n}_1+1} H(l_1' l_1'' l_1) (\dot{\boldsymbol{\eta}}^1 \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}}^1)^{\dot{n}_1} \mathcal{Y}_{l_1 \dot{m}_1}(\dot{\boldsymbol{\eta}}^1). \end{aligned} \quad (10.27)$$

Комбинируя все полученные выше результаты, мы видим, что состояния (10.13) могут быть разложены по функциям относительных координат и координат центра масс следующим образом:

$$\begin{aligned} |0l_1, 0l_2, \Lambda M\rangle = \\ = \sum_{\dot{n}_1 \dot{n}_2 l_1 l_2} |\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M\rangle \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | 0l_1, 0l_2, \Lambda \rangle, \end{aligned} \quad (10.28)$$

где трансформационный коэффициент

$$\langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | 0l_1, 0l_2, \Lambda \rangle \quad (10.29)$$

определяется формулой

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | 0l_1, 0l_2, \Lambda \rangle = \\ = 2^{-1/2(l_1+l_2)} A_{0l_1} A_{0l_2} \sum_{l_1' l_2' l_1'' l_2''} [G(l_1' l_2' l_1) G(l_1'' l_2'' l_2) \delta_{l_1 l_1'+l_2' l_2} \delta_{l_2 l_1''+l_2'' l_2} \times \\ \times [(2l_1+1)(2l_2+1)(2\dot{l}_1+1)(2\dot{l}_2+1)]^{1/2} \times \\ \times \begin{pmatrix} \dot{l}_1' & \dot{l}_2' & l_1 \\ \dot{l}_1'' & \dot{l}_2'' & l_2 \\ \dot{l}_1 & \dot{l}_2 & \Lambda \end{pmatrix} \delta_{l_1'+l_1'', 2\dot{n}_1+l_1} \delta_{l_2'+l_2'', 2\dot{n}_2+l_2} H(l_1' l_1'' l_1) \times \\ \times H(l_2' l_2'' l_2) A_{\dot{n}_1 l_1}^{-1} A_{\dot{n}_2 l_2}^{-1}]. \end{aligned} \quad (10.30)$$

Поскольку в выражение входят четыре дельта-символа Кронекера и суммирование также проводится по четырем индексам, может показаться, что сумма (10.30) сводится всего лишь к одному слагаемому. Однако один из дельта-символов является лишним, так как $l_1 + l_2 = \dot{l}_1 + \dot{l}_1'' + \dot{l}_2 + \dot{l}_2'' = 2\dot{n}_1 + \dot{l}_1 + 2\dot{n}_2 + \dot{l}_2 =$ полная энергия. В результате у нас остается однократная сумма. Упрощенное выражение для коэффициента (10.30) приведено в работе [4]. Трансформационный

коэффициент общего вида можно получить из (10.30) с помощью рекуррентных соотношений, которые мы сейчас выведем. Из нашей дискуссии в разд. 8 мы знаем, что

$$|n_1 + 1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle = \frac{A_{n_1+1 l_1}}{A_{n_1 l_1}} (\boldsymbol{\eta}^1 \cdot \boldsymbol{\eta}^1) |n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle. \quad (10.31)$$

Используя (9.15) и (10.14), получаем

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 + 1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle &= \\ &= -2 \left[\left(n_1 + l_1 + \frac{3}{2} \right) (n_1 + 1) \right]^{1/2} \times \\ &\times \sum_{\dot{n}'_1 \dot{n}'_2 \dot{l}'_1 \dot{l}'_2} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | \frac{1}{2} (\dot{\boldsymbol{\eta}}^1 \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}}^1) + \frac{1}{2} (\dot{\boldsymbol{\eta}}^2 \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}}^2) + \\ &+ (\dot{\boldsymbol{\eta}}^1 \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}}^2) | \dot{n}'_1 \dot{l}'_1, \dot{n}'_2 \dot{l}'_2, \Lambda \rangle \langle \dot{n}'_1 \dot{l}'_1, \dot{n}'_2 \dot{l}'_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle = \\ &= \sum_{\dot{n}'_1 \dot{n}'_2 \dot{l}'_1 \dot{l}'_2} \frac{A_{n_1+1 l_1}}{A_{n_1 l_1}} \left\{ \frac{1}{2} \frac{A_{\dot{n}'_1 \dot{l}'_1}}{A_{\dot{n}'_1+1 \dot{l}'_1}} \delta_{\dot{n}_1, \dot{n}'_1+1} \delta_{\dot{l}'_1 l_1} \delta_{\dot{n}_2 \dot{n}'_2} \delta_{\dot{l}'_2 l_2} + \right. \\ &+ \frac{1}{2} \frac{A_{\dot{n}'_2 \dot{l}'_2}}{A_{\dot{n}'_2+1 \dot{l}'_2}} \delta_{\dot{n}'_1 \dot{n}_1} \delta_{\dot{l}'_1 l_1} \delta_{\dot{n}_2+1, \dot{n}'_2} \delta_{\dot{l}'_2 l_2} + \\ &\left. + \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | \dot{\boldsymbol{\eta}}^1 \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}}^2 | \dot{n}'_1 \dot{l}'_1 \dot{n}'_2 \dot{l}'_2, \Lambda \rangle \right\} \times \\ &\times \langle \dot{n}'_1 \dot{l}'_1, \dot{n}'_2 \dot{l}'_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle. \quad (10.32) \end{aligned}$$

Наконец, с помощью известных формул алгебры тензорных операторов Рака [14] ¹⁾ находим

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | \dot{\boldsymbol{\eta}}^1 \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}}^2 | \dot{n}'_1 \dot{l}'_1, \dot{n}'_2 \dot{l}'_2, \Lambda \rangle &= \\ &= (-1)^{l_1+l_2-\Lambda} W(\dot{l}_1 \dot{l}_2 \dot{l}'_1 \dot{l}'_2; \Lambda 1) [(2\dot{l}_1 + 1)(2\dot{l}_2 + 1)]^{1/2} \times \\ &\times \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1 \| \dot{\boldsymbol{\eta}}^1 \| \dot{n}'_1 \dot{l}'_1 \rangle \langle \dot{n}_2 \dot{l}_2 \| \dot{\boldsymbol{\eta}}^2 \| \dot{n}'_2 \dot{l}'_2 \rangle, \quad (10.33) \end{aligned}$$

где в свою очередь приведенные матричные элементы могут быть получены из соотношений

$$\begin{aligned} \eta_q |nlm\rangle &= \eta_q A_{nl} (\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta})^n \mathcal{Y}_{lm}(\boldsymbol{\eta}) |0\rangle = \\ &= A_{nl} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left\{ \frac{1}{A_{n+1}} H(l+1) (l+1) (l+1) |nl+1m+q\rangle + \right. \\ &\left. + \frac{1}{A_{n+1-1}} H(l-1) (l-1) (l-1) |n+1l-1m+q\rangle \right\}. \quad (10.34) \end{aligned}$$

¹⁾ См. также [50–52]. — Прим. перев.

Здесь нижний индекс $q = 1, 0, -1$ указывает сферическую компоненту вектора η . Следовательно,

$$\langle n'l' \| \eta \| nl \rangle = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \left\{ \sqrt{n+l+\frac{3}{2}} H(l'l+1) \delta_{nn'} \delta_{l'l+1} - \sqrt{n+l-1} H(l'l-1) \delta_{n'n+1} \delta_{l'l-1} \right\}. \quad (10.35)$$

Комбинируя все эти результаты, имеем

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 + 1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle &= \left[(n_1 + 1) \left(n_1 + l_1 + \frac{3}{2} \right) \right]^{-1/2} \times \\ &\times \sum_{\dot{n}_1' \dot{n}_2' \dot{l}_1' \dot{l}_2'} M(\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2; \dot{n}_1' \dot{l}_1', \dot{n}_2' \dot{l}_2', \Lambda) \langle \dot{n}_1' \dot{l}_1', \dot{n}_2' \dot{l}_2', \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle, \end{aligned} \quad (10.36)$$

где коэффициент $M(\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2; \dot{n}_1' \dot{l}_1', \dot{n}_2' \dot{l}_2', \Lambda)$ можно вычислить с помощью (10.32) и (10.33). Суммирование ограничено кронекеровскими дельта-символами, входящими в (10.32) и (10.35). Фактически, существует только шесть ненулевых матричных элементов, которые приведены в табл. 3. Трансформационный коэффициент

$$\langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | \dot{n}_1' \dot{l}_1', \dot{n}_2' + 1 \dot{l}_2', \Lambda \rangle \quad (10.37)$$

может быть вычислен аналогичным образом. При этом получается формула, подобная (10.36), с тем лишь отличием, что в первом множителе нужно заменить нижний индекс 1 на 2. Таблица матричных элементов M будет совпадать с табл. 3, однако в четырех последних ее строках нужно изменить общий знак на противоположный.

С помощью рекуррентного соотношения по индексу n_1 (10.36) и аналогичного соотношения по индексу n_2 мы можем выразить трансформационный коэффициент с произвольными n_1 и n_2 через соответствующие коэффициенты с квантовыми числами $n_1 - 1$, n_2 и т. д. Таким образом можно свети трансформационный коэффициент с произвольными n_1, n_2 к коэффициентам с $n_1 = n_2 = 0$, для которых мы уже имеем явное выражение (10.30)¹⁾.

Процедура вычисления трансформационных коэффициентов, развитая в этом разделе, может быть запрограммиро-

¹⁾ Вывод общей формулы для трансформационных коэффициентов дан в работах [22—24, 56—58]. — *Прим. перев.*

Таблица 3

Матричные элементы, входящие в рекуррентные соотношения для трансформационных коэффициентов с произвольными значениями n_1 и n_2

n'_1	l'_1	n'_2	l'_2	$M(n_1 l_1, n_2 l_2; n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \Lambda)$
$n_1 - 1$	l_1	n_2	l_2	$\frac{1}{2} \left[n_1 \left(n_1 + l_1 + \frac{1}{2} \right) \right]^{1/2}$
n_1	l_1	$n_2 - 1$	l_2	$\frac{1}{2} \left[n_2 \left(n_2 + l_2 + \frac{1}{2} \right) \right]^{1/2}$
$n_1 - 1$	$l_1 + 1$	$n_2 - 1$	$l_2 + 1$	$[n_1 n_2 (l_1 + 1) (l_2 + 1)]^{1/2} (-1)^{l_1 + l_2 + \Lambda} \times$ $\times W(l_1 l_1 + 1 l_2 l_2 + 1; 1 \Lambda)$
$n_1 - 1$	$l_1 + 1$	n_2	$l_2 - 1$	$\left[n_1 \left(n_2 + l_2 + \frac{1}{2} \right) (l_1 + 1) l_2 \right]^{1/2} (-1)^{l_1 + l_2 + \Lambda} \times$ $\times W(l_1 l_1 + 1 l_2 l_2 - 1; 1 \Lambda)$
n_1	$l_1 - 1$	$n_2 - 1$	$l_2 + 1$	$\left[\left(n_1 + l_1 + \frac{1}{2} \right) n_2 l_1 (l_2 + 1) \right]^{1/2} (-1)^{l_1 + l_2 + \Lambda} \times$ $\times W(l_1 l_1 - 1 l_2 l_2 + 1; 1 \Lambda)$
n_1	$l_1 - 1$	n_2	$l_2 - 1$	$\left[\left(n_1 + l_1 + \frac{1}{2} \right) \left(n_2 + l_2 + \frac{1}{2} \right) l_1 l_2 \right]^{1/2} (-1)^{l_1 + l_2 + \Lambda} \times$ $\times W(l_1 l_1 - 1 l_2 l_2 - 1; 1 \Lambda)$

вана. Были опубликованы таблицы этих величин [4]. При пользовании этими таблицами полезно иметь в виду некоторые соотношения симметрии для трансформационных коэффициентов, полученные в работе [5]:

$$\begin{aligned}
 \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle &= (-1)^{l_2 - \Lambda} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda \rangle = \\
 &= (-1)^{l_1 - \Lambda} \langle \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{n}_1 \dot{l}_1, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle = \\
 &= (-1)^{l_1 + l_1} \langle \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{n}_1 \dot{l}_1, \Lambda | n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda \rangle = \\
 &= (-1)^{l_2 + \Lambda} \langle n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda | \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda \rangle. \quad (10.38)
 \end{aligned}$$

Другие программы для вычисления трансформационных коэффициентов на ЭВМ были составлены Баранжером и Дэвисом [16] с использованием рекуррентных соотношений по l_1, l_2 при заданных n_1, n_2 . Они оказываются полезными в расчетах по методу Хартри — Фока, обсуждаемых в гл. V.

Очень важно подчеркнуть, что трансформационные коэффициенты, определяемые равенством (10.7), связывают друг с другом два кет-вектора, зависящие соответственно от координат x^1, x^2 и \dot{x}^1, \dot{x}^2 . Если вместо кет-векторов мы имеем два бра-вектора $\langle n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M |$ и $\langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M |$, то соотношение, аналогичное (10.7), принимает вид

$$\langle n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M | = \sum_{\dot{n}_1 \dot{n}_2 \dot{l}_1 \dot{l}_2} (n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda | \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda) \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M |, \quad (10.39)$$

где мы заключили трансформационные коэффициенты в круглые скобки, чтобы отличить их от коэффициентов, входящих в (10.7) и заключенных в угловые скобки.

Если провести эрмитово сопряжение обеих частей равенства (10.39) и использовать стандартные соотношения между бра- и кет-векторами, а также тот факт, что трансформационные коэффициенты, вычисленные в этом разделе, являются вещественными числами, то получим

$$(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda | \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda) = \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle. \quad (10.40)$$

Вычисляя матричные элементы операторов по волновым функциям, зависящим от координат x^1, x^2 , и преобразуя их к матричным элементам по волновым функциям координат \dot{x}^1, \dot{x}^2 , мы встречаемся как с трансформационными коэффициентами $\langle | \rangle$ для кет-векторов, так и с аналогичными величинами $(|)$ для бра-векторов. Поскольку в опубликованных таблицах [4] приведены только коэффициенты вида $\langle | \rangle$, мы всюду в дальнейшем будем использовать соотношение (10.40), чтобы выразить матричные элементы только через трансформационные коэффициенты такого типа.

11. Применение трансформационных коэффициентов в атомных задачах. Атом гелия

В качестве иллюстрации применения трансформационных коэффициентов в атомной физике мы обсудим их использование в двухэлектронной задаче, такой, как атом гелия.

В безразмерных переменных, введенных в разд. 3, гамильтониан атома He записывается следующим образом:

$$H = \frac{1}{2} \varepsilon^2 [(p^1)^2 + (p^2)^2] + \sqrt{2} \varepsilon \left[\frac{1}{|x^1 - x^2|} - \frac{2}{|x^1|} - \frac{2}{|x^2|} \right]. \quad (11.1)$$

Набор интегралов движения для этого гамильтониана, очевидно, включает в себя квадрат полного углового момента L^2 , его проекцию L_3 и четность, а также оператор перестановки частиц 1 и 2. Собственная функция гамильтониана H может быть разложена по двухчастичным осцилляторным функциям

$$|n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle_{S, A} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [|n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle \pm (-1)^{l_1 + l_2 - \Lambda} |n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda M\rangle], \quad (11.2)$$

где ставится знак $+$ или $-$ в зависимости от того, является ли рассматриваемое состояние симметричным (S) или антисимметричным (A) относительно перестановки частиц 1 и 2. Состояния положительной (отрицательной) четности разлагаются только по тем состояниям (11.2), в которых полное число квантов $2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2$ четно (нечетно). В (11.2) предполагалось, что два электрона не занимают одной и той же орбитали, т. е. $(n_1, l_1) \neq (n_2, l_2)$; если они заполняют одну и ту же орбиталь, нужно включить в (11.2) для обеспечения правильной нормировки еще один множитель $1/\sqrt{2}$, поскольку в этом случае такое состояние само по себе оказывается симметричным при четном Λ и антисимметричным при Λ нечетном.

В результате рассуждений, аналогичных проведенным в разд. 3, вариационный анализ энергии атома He приводит к диагонализации матрицы гамильтониана

$$\|_{S, A} \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \Lambda M | H | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M \rangle_{S, A} \| \quad (11.3)$$

В (11.3) значение Λ и характер симметрии осцилляторных состояний фиксированы, а величины $n_1 l_1, n_2 l_2$ принимают все возможные неотрицательные целочисленные значения, согласующиеся с указанным Λ и с четностью и удовлетворяющие условию

$$2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 \leq \mathfrak{N}, \quad (11.4)$$

где \mathfrak{N} — максимальное число квантов, рассматриваемое в данном приближении.

Из (11.1) видно, что матричные элементы в (11.3) можно представить в виде суммы членов вида

$$\begin{aligned} \langle n_1' l_1', n_2' l_2', \Lambda M \mid \frac{1}{2} \epsilon^2 (\mathbf{p}^1)^2 - \sqrt{2} \epsilon \frac{2}{|\mathbf{x}^1|} \mid n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M \rangle = \\ = \delta_{n_2' n_2} \delta_{l_2' l_2} \delta_{l_1' l_1} \langle n_1' l_1' m_1 \mid \frac{1}{2} \epsilon^2 (\mathbf{p}^1)^2 - \sqrt{2} \epsilon \frac{2}{|\mathbf{x}^1|} \mid n_1 l_1 m_1 \rangle \end{aligned} \quad (11.5)$$

(где последний матричный элемент, как было показано в разд. 3, не зависит от m_1) и матричных элементов

$$\langle n_1' l_1', n_2' l_2', \Lambda M \mid \frac{\sqrt{2} \epsilon}{|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2|} \mid n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M \rangle. \quad (11.6)$$

В последних мы перейдем к переменным (10.2) и используем трансформационные коэффициенты, введенные в разд. 10, а также матричные элементы, вычисленные в разд. 3; при этом получаем

$$\begin{aligned} \langle n_1' l_1', n_2' l_2', \Lambda M \mid \frac{\epsilon}{|\mathbf{x}^1|} \mid n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M \rangle = \\ = \epsilon \sum_{\substack{\dot{n}_1 \dot{n}_2 \\ l_1 l_2}} \sum_p \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda \mid n_1' l_1' n_2' l_2', \Lambda \rangle B(\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, p) \times \\ \times \frac{p!}{\Gamma(p + 3/2)} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda \mid n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle. \end{aligned} \quad (11.7)$$

Таким образом, имеется непосредственная возможность записать матричные элементы в (11.3) в явном виде.

Возвращаясь к проблеме атома He, мы видим, что при $\mathfrak{N} = 0$ имеется только один матричный элемент

$$E(\epsilon) \equiv \langle 00, 00, 0 \mid H \mid 00, 00, 0 \rangle = \frac{3}{2} \epsilon^2 - 8\epsilon \sqrt{\frac{2}{\pi}} + \frac{2\epsilon}{\sqrt{\pi}}. \quad (11.8)$$

Минимизируя его по параметру ϵ , получаем

$$\epsilon = \frac{1}{3} \left(8 \sqrt{\frac{2}{\pi}} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \right), \quad (11.9)$$

и соответствующее значение $E(\epsilon)$ составляет 79% экспериментальной величины.

При $\aleph = 2$ мы имеем три состояния

$$\begin{aligned} & |00, 00, 0\rangle, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} (|10, 00, 0\rangle + |00, 10, 00\rangle), \\ & |01, 01, 00\rangle. \end{aligned} \quad (11.10)$$

Диагонализация соответствующей матрицы и минимизация по параметру ϵ незначительно улучшают значение энергии, доводя его до 80% экспериментальной величины. Это неудивительно, поскольку в разд. 3 мы видели, что для атома водорода точность приближения заметно возрастает только при увеличении числа учитываемых квантов на четыре единицы, а не на две. Расчет Дубового [17] для атома He при $\aleph = 4$ дает для энергии основного состояния теоретическое значение, которое составляет 92% экспериментальной величины.

12. Применение трансформационных коэффициентов в молекулярных задачах. Молекулы H_2 и H_3^+

Гамильтониан двухэлектронной молекулярной задачи имеет вид

$$\begin{aligned} H = \frac{1}{2} \epsilon^2 [(p^1)^2 + (p^2)^2] + \sqrt{2} \epsilon \left[\frac{1}{|x^1 - x^2|} - \right. \\ \left. - \sum_a \frac{Z_a}{|x^1 - X^a|} - \sum_a \frac{Z_a}{|x^2 - X^a|} + \sum_{a < \beta} \frac{Z_a Z_\beta}{|X^a - X^\beta|} \right], \end{aligned} \quad (12.1)$$

где Z_a, X_a — соответственно заряды и координаты различных ядер молекулы.

Вариационный расчет сводится к диагонализации матрицы оператора H , вычисленной на базе состояний (11.2). Единственный матричный элемент, который еще не обсуждался нами в разд. 11, это матричный элемент оператора $|x^1 - X^a|^{-1}$. Разлагая $|x^1 - X^a|^{-1}$ по формуле (4.2), приводим

такие матричные элементы к виду линейной комбинации следующих членов (см. например [14]):

$$\begin{aligned} \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \Lambda' M' | \left[\begin{array}{c} r_1^k / R_a^{k+1} \\ R_a^k / r_1^{k+1} \end{array} \right] Y_{kq}(\theta_1, \varphi_1) | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M \rangle = \\ = \delta_{n_2 n'_2} \delta_{l_2 l'_2} (-1)^{l_2 + k - l_1 - \Lambda'} [(2l'_1 + 1)(2\Lambda + 1)]^{1/2} W(l_1 \Lambda l'_1 \Lambda'; l_2 k) \times \\ \times (\Lambda k M q | \Lambda' M') \langle n'_1 l'_1 | \left[\begin{array}{c} r_1^k / R_a^{k+1} \\ R_a^k / r_1^{k+1} \end{array} \right] Y_{kq}(\theta_1, \varphi_1) | n_1 l_1 \rangle, \quad (12.2) \end{aligned}$$

где W — коэффициент Рака, а последний множитель представляет собой приведенный матричный элемент, фигурирующий в (4.3).

Заметим, что в молекулярной задаче операторы перестановки координат все еще являются интегралами движения, но полный угловой момент электронов не сохраняется и Λ не является хорошим квантовым числом. По тем же причинам M представляет собой хорошее квантовое число только для линейных молекул с ядрами, ориентированными вдоль оси z , аналогично четность является интегралом движения только для молекул, у которых конфигурация ядер инвариантна относительно инверсии.

Рассмотрим теперь молекулу H_2 , у которой $X^1 = X$, $X^2 = -X$, а вектор X длиной R направлен вдоль оси z . Для случая $\mathcal{N} = 0$ с помощью формул из разд. 4 и 11 находим

$$\langle 00, 00, 0 | H | 00, 00, 0 \rangle = \frac{3}{2} \epsilon^2 + \epsilon f(R), \quad (12.3)$$

где

$$f(R) = \frac{2}{V\pi} + \frac{1}{RV^2} [1 - 8 \operatorname{erf}(R)]. \quad (12.4)$$

Минимизируя это выражение по параметрам ϵ и R (как и в разд. 4), получаем

$$\langle H \rangle_{\min} \equiv E(R) = \frac{1}{6} f(R_0) [f(R_0) - 2f(R)], \quad (12.5)$$

где R_0 — значение R , при котором функция $f(R)$ вида (12.4) минимальна.

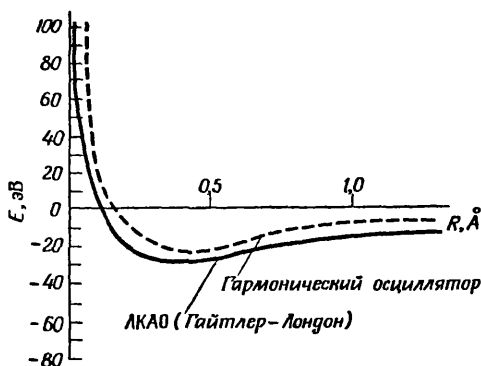
График зависимости величины E от R приведен на фиг. 4. Для сравнения приведена также аналогичная кривая, рассчитанная по методу ЛКАО (линейная комбинация атомных

орбит) Гайтлера — Лондона [18], в котором варьируются три параметра, а не один параметр ϵ , как в данном подходе. Значение энергии связи при таком R , которое соответствует минимуму функции $E(R)$, составляет 79% экспериментальной величины. Теоретическое межъядерное расстояние $2R$ оказывается равным $0,82 \text{ \AA}$ по сравнению с экспериментальной величиной $0,74 \text{ \AA}$.

При обобщении этих расчетов на случай $N = 2$ следует иметь в виду, что, поскольку мы имеем дело с линейной молекулой, у которой центр заряда совпадает с началом координат, состояния (11.2) все еще должны характеризоваться

Фиг. 4. Среднее значение $E(R)$ гамильтониана молекулы H_2 как функция половины межъядерного расстояния R .

Двухэлектронная волновая функция аппроксимирована функцией гармонического осциллятора с нулевым числом квантов, частота которого выбрана таким образом, чтобы минимизировать энергию $E(R)$. Здесь R в ангстремах, в то время как в тексте использовалась безразмерная величина.



квантовым числом $M = 0$, иметь положительную четность и быть симметричными относительно перестановки электронов 1 и 2. Это означает, что, кроме трех состояний (11.10), мы должны рассмотреть еще функции

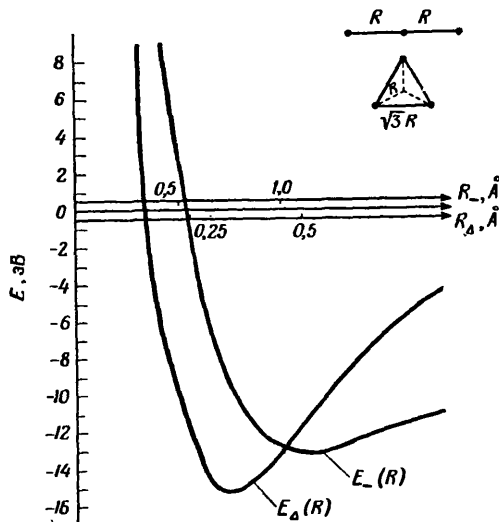
$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|02, 00, 20\rangle + |00, 02, 20\rangle), \quad (12.6)$$

$$|01, 01, 20\rangle.$$

Взяв для R значение $R = 0,41 \text{ \AA}$ из нулевого приближения и минимизируя по параметру ϵ численным методом низшее собственное значение матрицы порядка 5×5 , получим энергию связи, которая составляет 84% от экспериментального значения.

В качестве заключительного примера мы обсудим молекулу H_3^+ , состоящую из двух электронов и трех протонов. Из соображений симметрии естественно предположить, что три протона либо образуют линейную цепочку, состоящую из

двух звеньев одинаковой длины и ориентированную вдоль оси z используемой нами системы координат, либо расположены в вершинах равностороннего треугольника. В обоих случаях за начало системы координат выберем центр заряда ядер, как показано на фиг. 5.



Фиг. 5. Среднее значение гамильтониана молекулы H_3^+ , вычисленное с двухэлектронной волновой функцией, которая аппроксимирована осцилляторной функцией с нулевым числом квантов. Рассмотрены две конфигурации расположения протонов: линейная цепочка и равносторонний треугольник. Соответствующие энергии обозначены символами $E_-(R)$ и $E_\Delta(R)$, где смысл параметра R в каждом случае ясен из фигуры. Как и в других задачах, частота выбрана так, чтобы энергия была минимальна.

Начнем наш анализ со случая $\mathfrak{N} = 0$, для которого вычисления, аналогичные описанному выше расчету молекулы H_2 , приводят к следующим результатам: треугольная конфигурация

$$\langle H \rangle = \frac{3}{2} \epsilon^2 + \epsilon f_\Delta(R); \quad (12.7)$$

линейная молекула

$$\langle H \rangle = \frac{3}{2} \epsilon^2 + \epsilon f_-(R), \quad (12.8)$$

где f_Δ и f_- определяются формулами

$$f_\Delta(R) = -\frac{1}{R} 6 \sqrt{2} \operatorname{erf}(R) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} + \frac{\sqrt{6}}{R}, \quad (12.9)$$

$$f_-(R) = -\frac{1}{R} 4 \sqrt{2} \operatorname{erf}(R) - 4 \sqrt{\frac{2}{\pi}} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} + \frac{5}{R\sqrt{2}}. \quad (12.10)$$

Минимизируя $\langle H \rangle$ по параметрам ϵ и R , мы снова приходим к выражению (12.5) для $E(R)$, только вместо $f(R)$ в него входят $f_{\Delta}(R)$ или $f_{-}(R)$ в зависимости от треугольной или линейной формы молекулы. Графики энергий $E_{\Delta}(R)$, $E_{-}(R)$ приведены на фиг. 5, из которой видно, что в приближении с $\mathfrak{N} = 0$ треугольная конфигурация оказывается более стабильной: соответствующий минимум более глубокий. Полная энергия в минимуме $E_{\Delta}(R_0) = -30,5$ эВ, а межъядерное расстояние (фиг. 5) равно $\sqrt{3}R = 0,845$ Å. В данном приближении молекула H_3^+ стабильна относительно диссоциации на $H_2 + H^+$.

Эти расчеты были обобщены на случай $\mathfrak{N} = 2$, при этом энергия связи увеличилась до $-31,86$ эВ¹⁾.

13. Матричные элементы в jj -связи

В предыдущих разделах этой главы мы вычисляли матричные элементы по двухчастичным волновым функциям гармонического осциллятора для операторов, зависящих только от координат и импульсов частиц. Этого было достаточно для рассмотрения атомных и молекулярных задач, в которых мы не учитывали эффекты сил, зависящих от спина. В ядерных задачах, как правило, и одночастичные, и двухчастичные операторы зависят от спина, поэтому часто оказывается удобным исходить из одночастичных состояний, в которых орбитальный и спиновый моменты количества движения сложены в полный момент j . Нам нужно будет рассчитать матричные элементы одночастичных и двухчастичных операторов по двухчастичным волновым функциям такого типа. Мы обсудим вопрос о вычислении этих матричных элементов в настоящем разделе и, в частности, получим удобные алгебраические формулы, затабулированные Мавроматисом и др. [19], которые значительно упрощают вычисления.

Волновая функция отдельного нуклона в jj -связи записывается в виде

$$\phi_{nljm} \equiv R_{nl}(r) [Y_l(\theta, \varphi) \chi_{1/2}]_{jm}, \quad (13.1)$$

где $\chi_{1/2 m_s}$, $m_s = \pm 1/2$ — спиновая волновая функция. Антисимметричная волновая функция двух нуклонов имеет следующую

¹⁾ Относительно приложений функций осцилляторного типа в молекулярных расчетах см. также работы [59, 60]. — *Прим. перев.*

форму:

$$|n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2, JT\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [|n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2, JT\rangle + (-1)^{T+I_1+I_2-J} |n_2 l_2 j_2 n_1 l_1 j_1, JT\rangle], \quad (13.2)$$

где

$$|n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2, JT\rangle = [\phi_{n_1 l_1 j_1}(1) \phi_{n_2 l_2 j_2}(2)]_{JM} [\tau_{1/2}(1) \tau_{1/2}(2)]_{TM_T}. \quad (13.3)$$

Здесь $\tau_{1/2 m_T}(i)$, $i = 1, 2$ — изоспиновая функция двух частиц, аналогичная спиновой функции $\chi_{1/2 m_s}(i)$, $i = 1, 2$, TM_T — полный изоспин и его проекция. В (13.2) мы явно предполагали, что нуклоны заполняют неодинаковые орбитали. Чтобы выражение (13.2) было корректным во всех случаях, нужно дополнительно умножить его на $[1 + \delta_{n_1 n_2} \delta_{l_1 l_2}]^{-1/2}$. В дальнейшем мы будем опускать этот множитель.

Чтобы найти матричный элемент, сначала преобразуем состояния (13.2) к схеме LS -связи

$$|n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2, JT\rangle = \sum_{\Lambda S} |n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda; S; JT\rangle \begin{pmatrix} l_1 & \frac{1}{2} & j_1 \\ l_2 & \frac{1}{2} & j_2 \\ \Lambda & S & T \end{pmatrix}, \quad (13.4)$$

где последний член связан с $9j$ -символом следующим равенством:

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = [(2c+1)(2f+1)(2g+1)(2h+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}. \quad (13.5)$$

Затем выразим кет-векторы, входящие в разложение (13.4), через относительные координаты и координаты центра масс

$$\begin{aligned} |n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda; S; JT\rangle &= \\ &= \sum_{n l N L} |n l, N L, \Lambda; S; JT\rangle \langle n l, N L, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle. \end{aligned} \quad (13.6)$$

Трансформационные коэффициенты в (13.6) совпадают с рассмотренными в разд. 10, однако здесь они даны в более употребительных в литературе [4, 19] обозначениях, в которых $\dot{n}_1 \dot{l}_1$, $\dot{n}_2 \dot{l}_2$ заменены символами $n l N L$.

Далее кет-вектор в правой части (13.6) преобразуется таким образом, чтобы векторно складывались относительный угловой момент и полный спин:

$$|nl, NL, \Lambda; S; JT\rangle = \sum_j |nlS(j), NL, JT\rangle \langle lS(j) LJ | lL(\Lambda) SJ\rangle = \\ = \sum_j |nlS(j), NL, JT\rangle [(2\Lambda + 1)(2j + 1)]^{1/2} W(jLS\Lambda; JI). \quad (13.7)$$

Здесь, как и прежде, W — коэффициент Рака [14]¹⁾ и

$$|nlS(j), NL, JT\rangle = [|nlS(j), T\rangle |NL\rangle]_J^- \quad (13.8)$$

(квадратные скобки означают векторное сложение соответствующих моментов). В свою очередь кет-векторы в (13.8) имеют вид

$$|NLM\rangle = \langle \dot{\mathbf{x}}^2 | NLM\rangle, \quad (13.9a)$$

$$|nlS(j), T\rangle = [\langle \dot{\mathbf{x}}^1 | nl\rangle [\chi_{1/2}(1) \chi_{1/2}(2)]_S]_T [\tau_{1/2}(1) \tau_{1/2}(2)]_T, \quad (13.9b)$$

где $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{S}$.

Комбинируя (13.4), (13.6) и (13.7), получаем [19]

$${}_A \langle n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2, JT | V | n_3 l_3 j_3, n_4 l_4 j_4, JT \rangle_A = \\ = \sum_{\Lambda \Lambda' S} \begin{pmatrix} l_1 & \frac{1}{2} & j_1 \\ l_2 & \frac{1}{2} & j_2 \\ \Lambda & S & J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \frac{1}{2} & j_3 \\ l_4 & \frac{1}{2} & j_4 \\ \Lambda' & S & J \end{pmatrix} \sum_{nl n' l' NL} \langle nl, NL, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle \times \\ \times \langle n' l', NL, \Lambda' | n_3 l_3, n_4 l_4, \Lambda' \rangle (-1)^{\Lambda + \Lambda'} [1 - (-1)^{l+S+T}] \times \\ \times \sum_j U(LIJS; \Lambda j) U(L'l'JS; \Lambda' j) \langle nlS(j) T | V | n' l' S(j) T \rangle, \quad (13.10)$$

где

$$U(abcd; ef) = [(2e + 1)(2f + 1)]^{1/2} W(abcd; ef), \quad (13.11)$$

и последний матричный элемент представляет собой матричный элемент потенциала взаимодействия по волновым функциям (13.9б). Коэффициенты при этих матричных элементах в сумме (13.10) были затабулированы Мавроматисом, Сандерсоном и Сингхом [19].

Заметим, что (13.9б) зависит только от относительной координаты $\dot{\mathbf{x}}^1$, так что последний матричный элемент может

¹⁾ См. также [50—52]. — Прим. перев.

быть вычислен путем простого обобщения методов, описанных в разд. 2. При перестановке номеров частиц 1 и 2 часть кет-вектора (13.8), зависящая от относительных координат, умножается на $(-1)^l$, спиновая и изоспиновая части умножаются на $(-1)^{1-s}$ и $(-1)^{1-t}$ соответственно. Таким образом, общий результат действия оператора перестановки (1, 2) заключается в появлении множителя $(-1)^{l+s+t}$, и, следовательно, член $\frac{1}{2} [1 - (-1)^{l+s+t}]$ в правой части равенства (13.10) обеспечивает антисимметричность состояний в матричном элементе в левой части (13.10), указанную индексами A, A .

14. Применение к задаче двух частиц в ядерной оболочке $2s - 1d$. Ядра O^{18} и F^{18}

Из (13.10) видно, что матричный элемент двухчастичного взаимодействия по двухчастичным состояниям (13.2) сводится к сумме произведений некоторых геометрических факторов на матричные элементы

$$\langle nlS(j)T | V | n'l'S(j)T \rangle. \quad (14.1)$$

Прежде чем применить соотношение (13.10) к задачам ядерной физики, рассмотрим вычисление матричных элементов (14.1) для конкретных видов сил.

В случае центральных сил $V(r)$ матричный элемент сводится к выражению

$$\langle n'l' | V(r) | nl \rangle = \delta_{ll'} \int_0^{\infty} R_{n'l'}(r) V(r) R_{nl}(r) r^2 dr, \quad (14.2)$$

где интеграл вычисляется подобно (2.3) и (2.5).

Для сил Майорана $V(r)P^M$, где P^M — майорановский проекционный оператор, мы получаем тот же самый результат (14.2), но умноженный на $(-1)^l$.

Для сил Бартлета $V(r)P^B$, где P^B — проекционный оператор Бартлета, который действует так же, как оператор $S^2 - 1$ (S — полный спин двух частиц), находим

$$\delta_{ll'} [S(S+1) - 1] \langle n'l' | V(r) | nl \rangle. \quad (14.3)$$

Для сил Гейзенберга, когда проекционный оператор действует подобно оператору $-(T^2 - 1)$ (T — изоспин двух частиц), мы получим матричный элемент типа (14.3) с заменой S на T и противоположным знаком.

Матричный элемент спин-орбитального взаимодействия $V(r)\mathbf{l} \cdot \mathbf{S}$ легко найти, записав $\mathbf{l} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}[\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{S}^2]$, в результате чего получаем

$$\frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - S(S+1)] \langle n'l | V | nl \rangle \delta_{ll'}. \quad (14.4)$$

Тензорные силы могут быть представлены в виде [4]¹⁾

$$V_T = \sqrt{\frac{32\pi}{5}} V(r) \mathbf{Y}_2(\theta, \varphi) \cdot \mathbf{X}_2. \quad (14.5)$$

Здесь \mathbf{Y}_2 — тензорный оператор Рака с компонентами $Y_{2m}(\theta, \varphi)$, r, θ, φ — относительные координаты, \mathbf{X}_2 — тензор второго ранга Рака, нулевая компонента которого задается выражением

$$X_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} (3S_0^2 - S^2). \quad (14.6)$$

Матричные элементы тензорных сил теперь легко вычислить, используя стандартную алгебру Рака [4]²⁾.

Таким способом мы рассчитали матричные элементы для любого типа взаимодействия. Простую иллюстрацию можно найти в расчете энергетических уровней ядер в оболочке $2s - 1d$ [20]. Возьмем, например, ядро O^{18} или F^{18} . Напомним, что в осцилляторной модели оболочек мы помещаем четыре нуклона (2 нейтрона и 2 протона) в $1s$ -оболочку, 12 частиц (6 нейтронов и 6 протонов) в $1p$ -оболочку. Таким образом, ядро O^{16} соответствует заполненным оболочкам и будет рассматриваться нами как инертный остов (неизвестны какие-либо возбужденные состояния в O^{16} с энергией ниже 6 МэВ).

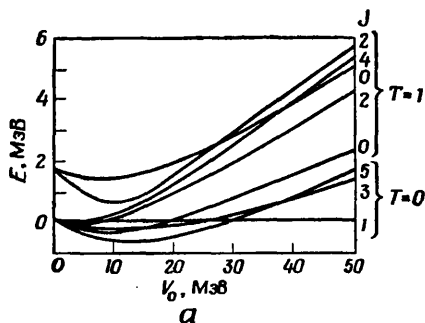
Итак, проблема ядер O^{18} и F^{18} сводится к задаче двух частиц в оболочке $2s - 1d$, находящихся в потенциальной яме, создаваемой остовом. Для этих двух ядер гамильтониан можно записать в следующей форме:

$$H = H_{h0} - \frac{\xi}{\hbar^2} \sum_{l=1}^2 \mathbf{l}^l \cdot \mathbf{s}^l - U_0 \sum_{l=1}^2 (l^l)^2 + \frac{1}{3} V_0 \boldsymbol{\tau}^1 \cdot \boldsymbol{\tau}^2 [0,3 + 0,7\boldsymbol{\sigma}^1 \cdot \boldsymbol{\sigma}^2] \frac{e^{-r_{12}/a}}{r_{12}/a}. \quad (14.7)$$

¹⁾ См. также [61]. — Прим. перев.

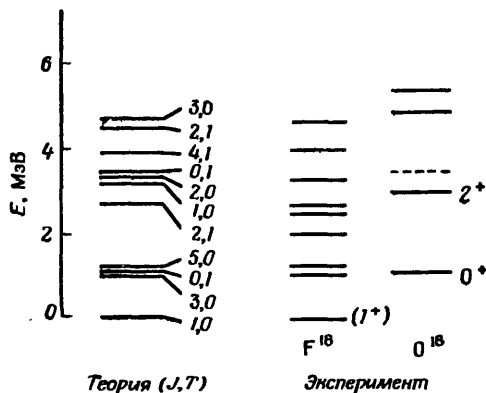
²⁾ См. также [50—52]. — Прим. перев.

Сделаем несколько замечаний по поводу этого гамильтониана. Член H_{ho} характеризует общий потенциал гармонического осциллятора. Чтобы учесть расщепление энергетических уровней в ядре O^{17} , введена спин-орбитальная связь, а также



Фиг. 6. а) Расчетный спектр ядер с $A = 18$ в зависимости от амплитуды центральных сил V_0 при фиксированных одночастичных членах, таких, как спин-орбитальное взаимодействие;

б) сравнение экспериментальных спектров ядер с $A = 18$ с теорией при $V_0 = 42$ МэВ. Графики заимствованы из работы [20].



б

член $\Sigma(I^i)^2$. Параметр ξ , который фигурирует в спин-орбитальном взаимодействии, определяется из расстояния между уровнями $d_{3/2}$ и $d_{5/2}$ в ядре O^{17} . Находим, что по порядку величины $\xi = 2$ МэВ. Подобным же образом из расстояния между уровнями $s_{1/2}$ и $d_{5/2}$ в O^{17} определяется параметр U_0 . Последнее слагаемое в гамильтониане представляет собой остаточное нуклон-нуклонное взаимодействие между парой частиц в оболочке $2s - 1d$. В расчете была использована розенфельдовская смесь обменных сил. В этом взаимодействии для a

принято значение $a = 1,37$ Ферми [20], σ^i , τ^i — удвоенные спиновые и изоспиновые операторы частицы i .

Описанный выше математический аппарат позволяет нам рассчитать матричные элементы гамильтониана (14.7). При вычислении последнего слагаемого следует помнить, что

$$\sigma^1 \cdot \sigma^2 = \frac{1}{2} [4S^2 - (\sigma^1)^2 - (\sigma^2)^2] = 2S(S + 1) - 3 \quad (14.8)$$

и аналогично

$$\tau^1 \cdot \tau^2 = 2T(T + 1) - 3. \quad (14.9)$$

Результаты расчета, проведенного Эллиотом и Флауерсом [20], показаны на фиг. 6. Эти авторы использовали для частоты значение, определяемое равенством $(\hbar/m\omega)^{1/2} = 1,64$ Ферми. Кривые, пронумерованные соответствующими значениями J и T , получены в результате вычислений с различными значениями амплитуды остаточного взаимодействия V_0 . Кстати заметим, что для расчета необходимых матричных элементов нужны интегралы Тальми для потенциала Юкавы, которые были вычислены в (2.10). Энергетические уровни, которые представлены на нижнем графике и сравниваются с экспериментом, были получены при $V_0 = 42$ МэВ.

Следует отметить, что развитая выше техника вычислений не использовалась Эллиотом и Флауерсом. Они проводили довольно громоздкие вычисления радиальных матричных элементов с полиномами Лагерра, используя стандартную алгебру Рака для расчета угловых частей.

15. Представление трансформационных коэффициентов для кинематического поворота на произвольные углы через стандартные трансформационные коэффициенты

В разд. 10 мы обсуждали трансформационные коэффициенты для перехода от двухчастичных состояний, зависящих от координат x^1 , x^2 , к соответствующим функциям переменных \dot{x}^1 и \dot{x}^2 , связанных с первоначальными координатами соотношением

$$\begin{pmatrix} \dot{x}^1 \\ \dot{x}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \end{pmatrix}. \quad (15.1)$$

Это соотношение показывает, что мы фактически производим поворот на угол $\pi/4$ в двумерном пространстве номеров частиц.

В этом разделе мы выведем трансформационные коэффициенты для случая, когда соотношение между координатами задается общей ортогональной матрицей

$$\begin{pmatrix} \dot{x}^1 \\ \dot{x}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & -\sin \frac{1}{2} \beta \\ \sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \end{pmatrix}; \quad (15.2)$$

при этом угол поворота равен $\beta/2$ ¹⁾.

Ниже мы следуем анализу, проведенному недавно Галом [21], в котором трансформационные коэффициенты, связанные с преобразованием (15.2), были выражены через трансформационные коэффициенты для преобразования (15.1); последние мы будем в этом разделе называть стандартными трансформационными коэффициентами (СТК).

Напомним, что, согласно разд. 10, двухчастичные состояния можно представить в форме

$$|n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle = P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) |0\rangle, \quad (15.3)$$

где P — полином вида

$$\begin{aligned} P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) = \\ = A_{n_1 l_1} A_{n_2 l_2} (\eta^1 \cdot \eta^1)^{n_1} (\eta^2 \cdot \eta^2)^{n_2} [\mathcal{Y}_{l_1}(\eta^1) \mathcal{Y}_{l_2}(\eta^2)]_{\Lambda M}. \end{aligned} \quad (15.4)$$

Из определения (8.8), связывающего оператор η с x и p , ясно, что преобразование координат (15.2) индуцирует аналогичное преобразование операторов рождения, а именно

$$\begin{pmatrix} \dot{\eta}_1 \\ \dot{\eta}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & -\sin \frac{1}{2} \beta \\ \sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}. \quad (15.5)$$

Трансформационный коэффициент для поворота на угол $\beta/2$ обозначим символом

$$\langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle_{\beta}; \quad (15.6)$$

¹⁾ Такое преобразование в литературе называют кинематическим поворотом. — *Прим. перев.*

очевидно, что он связывает друг с другом следующие полиномы:

$$P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) = \sum_{\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2} \dot{P}(\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M) \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle_{\beta}, \quad (15.7)$$

где \dot{P} определяется выражением (15.4), в котором η^s заменяется на $\dot{\eta}^s$, $s = 1, 2$, и мы разлагаем η^s по операторам $\dot{\eta}^s$, а не наоборот.

Чтобы найти коэффициенты (15.6), представим матрицу, обратную (15.5), в виде следующего произведения:

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \beta & \sin \frac{1}{2} \beta \\ -\sin \frac{1}{2} \beta & \cos \frac{1}{2} \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} e^{-1/2 i \beta} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i \beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \mathbf{ABCDEFG}, \quad (15.8)$$

где заглавными буквами в (15.8) обозначены отдельные матрицы в порядке их следования. Сразу видно, что матрицы **C** и **F** приводят к СТК. Действие матриц **A** и **G** сводится только к умножению полинома P на $(\mp i)^{2n_2+l_2}$ соответственно, поскольку степень полинома относительно η^2 равна $2n_2 + l_2$. По аналогичной причине преобразование **E** означает умножение полинома на фазовый множитель

$$(e^{1/2 i \beta})^{2n_2+l_2-2n_1-l_1}. \quad (15.9)$$

Наконец, действие матриц **D** = **B** заключается в замене η^1 на η^2 , и наоборот. Соотношение (15.4) показывает, что

$$DP(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) = (-1)^{l_1+l_2-\Lambda} P(n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda M). \quad (15.10)$$

Комбинируя все эти результаты и используя следующие соотношения симметрии СТК [вытекающие из (10.38)]:

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{n}_1 \dot{l}_1, \Lambda | n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda \rangle &= (-1)^{l_2+l_2} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle, \\ \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle &= -1^{l_2+l_2} \langle n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda | \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda \rangle, \\ \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle &= (-1)^{l_1-\Lambda} \langle \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{n}_1 \dot{l}_1, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle, \end{aligned} \quad (15.11)$$

окончательно получаем

$$\begin{aligned} & \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle_\beta = \\ & = i^{2\dot{n}_2 + \dot{l}_2 - 2n_2 - l_2} \sum_{n'_1 l'_1 n'_2 l'_2} \exp \left[\frac{1}{2} i \beta (2n'_2 + l'_2 - 2n'_1 - l'_1) \right] (-1)^{l_2 + l_1} \times \\ & \times \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \Lambda | \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda \rangle \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle. \end{aligned} \quad (15.12)$$

Последнее соотношение из (15.11) можно использовать для того, чтобы показать, что этот трансформационный коэффициент принимает только вещественное значение. Если член с квантовыми числами $n'_1 l'_1 n'_2 l'_2$ входит в сумму (15.12), то в ней содержится также член с характеристиками $n'_2 l'_2 n'_1 l'_1$; применяя двукратно последнее из соотношений (15.11), убеждаемся, что эти два сорта членов будут одного и того же знака, если $l_1 + l_1 -$ четно, так что от экспоненты остается только косинусоидальный член, в то время как при нечетном $l_1 + l_1$ сохраняется синусоидальная часть экспоненты с множителем i . Однако закон сохранения энергии требует, чтобы

$$2\dot{n}_1 + \dot{l}_1 + 2\dot{n}_2 + \dot{l}_2 = 2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 = 2n'_1 + l'_1 + 2n'_2 + l'_2 \quad (15.13)$$

и, следовательно,

$$(-1)^{l_1 + l'_1} = (-1)^{l_2 + l'_2}. \quad (15.14)$$

Таким образом, степень мнимой единицы i перед знаком суммы в (15.12) оказывается вещественной при косинусоидальном члене и чисто мнимой при синусоидальном члене, и результирующий трансформационный коэффициент всегда является вещественным.

Эти трансформационные коэффициенты имеют много приложений [21—24]¹⁾; мы подчеркнем новую сферу их применения, когда будем обсуждать задачу трех и четырех тел.

Отметим, что выше мы использовали обозначения угла поворота $\beta/2$, чтобы сохранить соответствие с обозначениями Галя [21].

¹⁾ См. также [62]. — *Прим. перев.*

В этой главе мы построим полный набор волновых функций гармонического осциллятора для системы трех частиц в конфигурационном пространстве, которые характеризуются определенным полным угловым моментом и образуют базисы неприводимых представлений группы перестановок трех объектов $S(3)$. Затем мы используем эти волновые функции для рассмотрения ряда проблем, представляющих интерес с точки зрения физики.

В качестве первого шага рассмотрим трансляционно-инвариантные задачи, в которых исключим координату центра масс, получив таким образом систему с числом координат на единицу меньшим. Во многих случаях дискуссия, составляющая содержание последующих разделов, проводится сразу для системы n частиц и в дальнейшем конкретизируется в данной и следующей главах применительно к задачам трех и четырех частиц.

16. Матричные элементы гамильтониана относительно трансляционно-инвариантных состояний

В этом разделе мы опишем общую процедуру вычисления матричных элементов внутреннего гамильтониана системы n частиц по трансляционно-инвариантным осцилляторным волновым функциям. С этой целью рассмотрим сначала гамильтониан \mathcal{H} для вспомогательной задачи n частиц с массой m , взаимодействующих друг с другом посредством сил, описываемых потенциалом гармонического осциллятора с частотой ω/\sqrt{n} ,

$$\mathcal{H} = \sum_{s=1}^n \frac{1}{2m} (\mathbf{p}'^s)^2 + \frac{m\omega^2}{2n} \sum_{s < t}^n (\mathbf{x}'^s - \mathbf{x}'^t)^2, \quad (16.1)$$

где \mathbf{x}' , \mathbf{p}' даны в обычных единицах, в то время как \mathbf{x} , \mathbf{p} являются безразмерными величинами, как в разд. 3. Введем

координаты Якоби [25]

$$\dot{\mathbf{x}}^s \equiv [s(s+1)]^{-1/2} \left[\sum_{t=1}^s \mathbf{x}^t - s\mathbf{x}^{s+1} \right], \quad 1 \leq s \leq n-1, \quad (16.2)$$

$$\dot{\mathbf{x}}^n \equiv \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{t=1}^n \mathbf{x}^t$$

и аналогичные определения для импульсов Якоби \mathbf{p}^s ; при этом гамильтониан \mathcal{H} приобретает вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{s=1}^{n-1} [(\dot{\mathbf{p}}^s)^2 + (\dot{\mathbf{x}}^s)^2] + \frac{1}{2} \hbar \omega (\dot{\mathbf{p}}^n)^2. \quad (16.3)$$

Последний член в (16.3) представляет собой кинетическую энергию движения центра масс

$$\frac{1}{2} \hbar \omega (\dot{\mathbf{p}}^n)^2 = \frac{1}{2nm} \left[\sum_{s=1}^n \mathbf{p}^s \right]^2. \quad (16.4)$$

Если речь идет только о внутренних собственных состояниях гамильтониана \mathcal{H} , т. е. о состояниях трансляционно-инвариантных, то они будут выражаться через произведения волновых функций от отдельных координат Якоби

$$\prod_{s=1}^{n-1} \langle \dot{\mathbf{x}}^s | \dot{n}_s \dot{l}_s \dot{m}_s \rangle. \quad (16.5)$$

Линейные комбинации произведений функций (16.5) на соответствующие спиновые и изоспиновые части образуют полный набор трансляционно-инвариантных состояний. Ниже мы будем характеризовать такие состояния полным числом квантов

$$\mathfrak{N} = \sum_{s=1}^{n-1} (2\dot{n}_s + \dot{l}_s), \quad (16.6)$$

полным угловым моментом J и его проекцией M и потребуем, чтобы они были антисимметричными относительно перестановки пространственных координат, спиновых и изоспиновых переменных любой пары частиц для того, чтобы удовлетворить принципу Паули. Мы будем использовать один общий символ \mathcal{N} , заменяющий сразу все квантовые числа

в этих трансляционно-инвариантных состояниях n частиц, в результате чего последние будут обозначаться кет-вектором вида

$$|\mathcal{N}^n\rangle = |\mathcal{RJM} \dots\rangle, \quad (16.7)$$

где многоточие заменяет остальные квантовые числа, которые характеризуют данное состояние. Ниже будет показано, как можно в явном виде построить состояния типа (16.7) для трех- и четырехчастичных систем.

Обратимся теперь к реалистическому n -частичному трансляционно-инвариантному гамильтониану

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{s=1}^n (\mathbf{p}^{s'})^2 + \sum_{s < t=2}^n V(s, t), \quad (16.8)$$

где $V(s, t)$, как уже обсуждалось, например, в разд. 14, может зависеть от относительных координат и импульсов $\mathbf{x}^{s'} - \mathbf{x}^{t'}$, $\mathbf{p}^{s'} - \mathbf{p}^{t'}$ частиц s и t , а также от их спинов и изоспинов.

Обычно мы интересуемся только внутренней частью H_I гамильтониана H , которая получается из H вычитанием кинетической энергии центра масс (16.4). Кроме того, для упрощения последующего анализа добавим к H_I и вычтем из него потенциальный член гамильтониана (16.1); в результате с помощью (16.3) получаем

$$H_I \equiv H - \frac{1}{2nm} \left(\sum_{s=1}^n \mathbf{p}^{s'} \right)^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega \sum_{s=1}^{n-1} [(\dot{\mathbf{p}}^s)^2 + (\dot{\mathbf{x}}^s)^2] + \sum_{s < t=2}^n U(s, t), \quad (16.9)$$

где

$$U(s, t) \equiv V(s, t) - \frac{m\omega^2}{2n} (\mathbf{x}^{s'} - \mathbf{x}^{t'})^2. \quad (16.10)$$

Теперь перейдем к вычислению матричных элементов H_I по состояниям $|\mathcal{N}^n\rangle$; вспомнив, что эти состояния полностью антисимметричны относительно перестановок пространственных, спиновых и изоспиновых переменных, получаем

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N}^{n'} | H_I | \mathcal{N}^n \rangle &= \\ &= \hbar\omega \left[\mathcal{N} + \frac{3}{2}(n-1) \right] \delta_{\mathcal{N}^{n'} \mathcal{N}^n} + \frac{1}{2} n(n-1) \langle \mathcal{N}^{n'} | U(1, 2) | \mathcal{N}^n \rangle. \end{aligned} \quad (16.11)$$

Здесь символ $\delta_{j'j''}$ означает произведение кронекеровских дельта-символов для всех квантовых чисел, входящих в (16.7); $1/2n(n-1)$ — число пар частиц,

$$U(1, 2) = V(\dot{\mathbf{x}}^1, \dot{\mathbf{p}}^1, \mathbf{s}^1 + \mathbf{s}^2, \mathbf{t}^1 + \mathbf{t}^2) - \frac{1}{n} \hbar \omega (\dot{\mathbf{x}}^1)^2. \quad (16.12)$$

В (16.12) $\mathbf{s}^1, \mathbf{s}^2$ и $\mathbf{t}^1, \mathbf{t}^2$ — спины и изоспины двух частиц соответственно, и, согласно (16.2),

$$\dot{\mathbf{x}}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2), \quad \dot{\mathbf{p}}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{p}^1 - \mathbf{p}^2). \quad (16.13)$$

Поэтому ясно, что матричный элемент оператора $U(1, 2)$ в (16.11) можно свести к матричным элементам одночастичного типа, рассмотренным в разд. 14.

Выражение (16.11) было использовано для вычисления энергий уровней четырехчастичной системы в работах [26, 27]. Другие его приложения, относящиеся к расчету энергии связи α -частицы и возможному определению волновой функции ее основного состояния, будут упомянуты в конце гл. IV¹⁾.

17. Трансляционно-инвариантные состояния трех частиц с определенной перестановочной симметрией

Применим анализ, проведенный в предыдущем разделе, к случаю трех частиц. Пространственная часть трансляционно-инвариантных состояний может быть разложена по состояниям

$$\langle \dot{\mathbf{x}}^1 | \dot{n}_1 \dot{l}_1 \dot{m}_1 \rangle \langle \dot{\mathbf{x}}^2 | \dot{n}_2 \dot{l}_2 \dot{m}_2 \rangle \quad (17.1)$$

или несколько иначе по состояниям, характеризуемым полным орбитальным моментом Λ и его проекцией M , т. е.

$$| \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M \rangle \equiv [\langle \dot{\mathbf{x}}^1 | \dot{n}_1 \dot{l}_1 \rangle \langle \dot{\mathbf{x}}^2 | \dot{n}_2 \dot{l}_2 \rangle]_{\Lambda M}, \quad (17.2)$$

где в соответствии с (16.2)

$$\dot{\mathbf{x}}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2), \quad \dot{\mathbf{x}}^2 = \frac{1}{\sqrt{6}} (\mathbf{x}^1 + \mathbf{x}^2 - 2\mathbf{x}^3). \quad (17.3)$$

Кет-вектор (17.2) можно также представить, как было показано в разд. 10 или 15, в виде полинома \hat{P} по операторам

¹⁾ Теория трансляционно-инвариантных осцилляторных состояний n частиц развивалась и применялась к исследованию свойств ядер также в работах [62—64]. — *Прим. перев.*

рождения квантов

$$\dot{\eta}^s = \frac{1}{\sqrt{2}} (\dot{\mathbf{x}}^s - i\dot{\mathbf{p}}^s), \quad s = 1, 2, \quad (17.4)$$

действующего на волновую функцию основного состояния $|0\rangle$

$$|\dot{n}_1\dot{l}_1, \dot{n}_2\dot{l}_2, \Lambda M\rangle = \dot{P}(\dot{n}_1\dot{l}_1, \dot{n}_2\dot{l}_2, \Lambda M)|0\rangle, \quad (17.5)$$

где, как и в (15.4), \dot{P} дается выражением

$$\begin{aligned} \dot{P}(\dot{n}_1\dot{l}_1, \dot{n}_2\dot{l}_2, \Lambda M) = \\ = A_{\dot{n}_1\dot{l}_1} A_{\dot{n}_2\dot{l}_2} (\dot{\eta}^1 \cdot \dot{\eta}^1)^{\dot{n}_1} (\dot{\eta}^2 \cdot \dot{\eta}^2)^{\dot{n}_2} [\mathcal{Y}_{\dot{l}_1}(\dot{\eta}^1) \mathcal{Y}_{\dot{l}_2}(\dot{\eta}^2)]_{\Lambda M}, \end{aligned} \quad (17.6)$$

и

$$\begin{aligned} |0\rangle = \pi^{-3/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}[(\dot{\mathbf{x}}^1)^2 + (\dot{\mathbf{x}}^2)^2]\right\} = \\ = \pi^{-3/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}[(\mathbf{x}^1)^2 + (\mathbf{x}^2)^2 + (\mathbf{x}^3)^2 - \frac{1}{3}(\mathbf{x}^1 + \mathbf{x}^2 + \mathbf{x}^3)^2]\right\}. \end{aligned} \quad (17.7)$$

Очевидно, что основное состояние инвариантно относительно перестановок координат $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3$, так что рассмотрение свойств симметрии линейных комбинаций кет-векторов (17.2) сводится к анализу свойств симметрии соответствующих линейных комбинаций полиномов \dot{P} . Например, если мы хотим симметризовать полином $\dot{P}(\dot{n}_1\dot{l}_1, \dot{n}_2\dot{l}_2, \Lambda M)$, необходимо подействовать на него операторами всех шести перестановок группы $S(3)$ и затем сложить результирующие полиномы. Соответствующее симметричное состояние получается действием полученного таким образом окончательного полинома на функцию $|0\rangle$.

Все элементы группы $S(3)$ могут быть построены из транспозиции (1, 2) и циклической перестановки (1, 2, 3). Из (17.3) и (17.4) видно, что последние действуют на операторы рождения следующим образом:

$$\begin{aligned} (1, 2) \begin{pmatrix} \dot{\eta}^1 \\ \dot{\eta}^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\eta}^1 \\ \dot{\eta}^2 \end{pmatrix}, \\ (1, 2, 3) \begin{pmatrix} \dot{\eta}^1 \\ \dot{\eta}^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\eta}^1 \\ \dot{\eta}^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17.8)$$

Результат действия любой перестановки из группы $S(3)$ на полином P легко получить, если известно, как действуют на этот полином перестановки $(1, 2)$ и $(1, 2, 3)$. Из формул (17.8) и рассмотрения, проведенного в разд. 15, ясно, что действие на полином \dot{P} перестановки $(1, 2)$ эквивалентно умножению его на величину $(-1)^{2n_1+l_1}$, в то время как перестановка $(1, 2, 3)$, действуя на \dot{P} , превращает его в линейную комбинацию полиномов \dot{P} , коэффициентами которой являются трансформационные коэффициенты, соответствующие такому углу β , для которого

$$\cos \frac{1}{2} \beta = -\frac{1}{2}, \quad \sin \frac{1}{2} \beta = \frac{1}{2} \sqrt{3} \quad \text{или} \quad \frac{1}{2} \beta = \frac{2}{3} \pi. \quad (17.9)$$

Используя эти результаты, мы смогли бы непосредственным, но весьма громоздким способом построить состояния с необходимыми свойствами симметрии, о которых шла речь в предыдущем разделе.

Вместо этого мы покажем сейчас, что может быть сформулирована значительно более простая процедура конструирования симметризованных состояний или конкретно трехчастичных трансляционно-инвариантных состояний гармонического осциллятора с произвольной симметрией, если ввести вспомогательные операторы

$$\begin{aligned} \eta^1 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (-i\dot{\eta}^1 + \dot{\eta}^2), \\ \eta^2 &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (i\dot{\eta}^1 + \dot{\eta}^2). \end{aligned} \quad (17.10)$$

В этом разделе символами η^1 и η^2 обозначены операторы, которые определены равенствами (17.10), и их не следует путать с операторами рождения квантов, отвечающими координатам x^1, x^2 . Из (17.8) видно, что под действием перестановок, генерирующих группу $S(3)$, операторы η^1 и η^2 преобразуются следующим образом:

$$(1, 2) \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix}; \quad (1, 2, 3) \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2/3\pi i} & 0 \\ 0 & e^{2/3\pi i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix}. \quad (17.11)$$

Теперь рассмотрим полиномы $P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M)$, которые определены точно так же, как (17.6), но с заменой $\dot{\eta}^s, \dot{n}_s, \dot{l}_s,$

на η^s , n_s , l_s , $s = 1, 2$. Действие перестановок $(1, 2)$, $(1, 2, 3)$ на P означает обратное преобразование аргументов η^1 , η^2 в этом полиноме [28], поэтому, согласно (17.11) и дискуссии разд. 15, имеем

$$(1, 2)P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) = (-1)^{l_1 + l_2 - \Lambda} P(n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda M), \quad (17.12)$$

$$(1, 2, 3)P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) = e^{i\pi l_1} P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M), \quad (17.13)$$

где

$$2g \equiv 2n_1 + l_1 - 2n_2 - l_2. \quad (17.14)$$

Чтобы получить полиномы с определенной перестановочной симметрией, нам потребуются проекционные операторы. Мы отсылаем читателя к книге Хамермеша [29], где приведено явное выражение для проекционного оператора \mathcal{P}^f , отвечающего определенному неприводимому представлению f некоторой конечной группы G . Оно имеет вид

$$\mathcal{P}^f \equiv \frac{d_f}{[G]} \sum_p \chi^f(p) p. \quad (17.15)$$

Здесь p — элемент группы, $\chi^f(p)$ — характер этого элемента в неприводимом представлении, f , $[G]$ — порядок группы, d_f — размерность неприводимого представления f .

Группа перестановок $S(3)$ имеет три неприводимых представления, характеризующихся схемами Юнга $f = \{3\}$, $\{21\}$ и $\{111\}$. Их размерности равны соответственно 1, 2 и 1. Первое и третье — это обычные полностью симметричное и полностью антисимметричное представления. С помощью таблицы характеров группы $S(3)$, приведенной, например, в книге Хамермеша [29], мы получаем для проекционных операторов группы $S(3)$ следующие выражения:

$$\mathcal{P}^{\{3\}} = \frac{1}{6} [e + (1, 2) + (1, 3) + (2, 3) + (1, 2, 3) + (1, 3, 2)], \quad (17.16)$$

$$\mathcal{P}^{\{21\}} = \frac{1}{3} [2e - (1, 2, 3) - (1, 3, 2)] = \frac{1}{3} [2e - (1, 2, 3) - (1, 2, 3)^{-1}], \quad (17.17)$$

$$\mathcal{P}^{\{111\}} = \frac{1}{6} [e - (1, 2) - (1, 3) - (2, 3) + (1, 2, 3) + (1, 3, 2)], \quad (17.18)$$

где e — единичный элемент.

Сначала действуем оператором $\mathcal{P}^{\{21\}}$ на полином $P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M)$. С помощью (17.13) получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{\{21\}} P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) &= \\ &= \frac{1}{3} (2 - e^{i/3 \pi g} - e^{-i/3 \pi g}) P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) = \\ &= \frac{4}{3} \sin^2 \left(\frac{2}{3} \pi g \right) P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) = \\ &= (1 - \delta_{v0}) P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M), \end{aligned} \quad (17.19)$$

где v определяется соотношением конгруэнтности

$$2g \equiv v \pmod{3}. \quad (17.20)$$

Из (17.19) видно, что величина v должна равняться 1 или 2, так как при $v = 0$ проектированное состояние со схемой Юнга $\{21\}$ обращается в нуль.

Поскольку размерность неприводимого представления $f = \{21\}$ группы $S(3)$ равна $d_f = 2$, ему соответствуют два состояния, которые характеризуются таблицами Юнга [29]

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \leftrightarrow (211), \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} \leftrightarrow (121). \quad (17.21)$$

Их можно также охарактеризовать с помощью символа Яманути $(r_3 r_2 r_1)$, указывающего номера строк таблицы Юнга, в которых находятся цифры 3, 2, 1 соответственно; эти символы также приведены в (17.21).

Из таблицы Юнга следует, что состояния, характеризующиеся символами Яманути (211) и (121) , являются соответственно симметричными и антисимметричными относительно перестановки частиц 1 и 2. Таким образом, чтобы получить состояния типа (211) и (121) , необходимо действовать на полиномы $P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M)$ с $v = 1, 2$ проекционными операторами, которые дают симметричные или антисимметричные по первым двум частицам состояния:

$$\mathcal{P}^{\{2\}} = \frac{1}{2} [e + (1, 2)], \quad \mathcal{P}^{\{11\}} = \frac{1}{2} [e - (1, 2)]. \quad (17.22)$$

Из (17.12) при $\nu \neq 0$ немедленно получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(2)}P(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M) &= \\ &= \frac{1}{2} [P(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M) + (-1)^{l_1+l_2-\Lambda} P(n_2l_2, n_1l_1, \Lambda M)] \equiv \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \phi(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M; \{21\}(211)), \end{aligned} \quad (17.23)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(11)}P(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M) &= \\ &= \frac{1}{2} [P(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M) - (-1)^{l_1+l_2-\Lambda} P(n_2l_2, n_1l_1, \Lambda M)] \equiv \\ &\equiv \frac{i}{\sqrt{2}} (-1)^\nu \phi(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M; \{21\}(121)). \end{aligned} \quad (17.24)$$

В формулах (17.23), (17.24) ϕ — нормированные полиномы, характеризуемые схемой Юнга $\{21\}$ и соответствующим символом Яманюти, а также квантовыми числами $n_1l_1n_2l_2\Lambda M$; здесь уместно напомнить, что $P(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M)$ никогда не совпадает с $P(n_2l_2, n_1l_1, \Lambda M)$, поскольку $\nu \equiv 2n_1 + l_1 - 2n_2 - l_2 \neq 0$. Фазовый множитель в (17.24) выбран в соответствии с лестничной процедурой, описанной в работе [25].

Для получения симметричных и антисимметричных состояний можно использовать операторы $\mathcal{P}^{(3)}$ и $\mathcal{P}^{(111)}$ соответственно, имея в виду, что все перестановки можно выразить через (1, 2) и (1, 2, 3). Однако появляется более элегантный путь, если заметить, что из анализа, проведенного для $f = \{21\}$, можно заключить, что только линейные комбинации полиномов $P(n_1l_1, n_2l_2, \Lambda M)$ с $2n_1 + l_1 - 2n_2 - l_2 \equiv 0 \pmod{3}$ будут или симметричными, или антисимметричными. Симметричные состояния характеризуются таблицей Юнга

$$\boxed{\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array}} \leftrightarrow (111), \quad (17.25)$$

и поэтому совершенно очевидно являются симметричными также относительно перестановки частиц 1 и 2. Антисимметричные комбинации характеризуются таблицей Юнга

$$\boxed{\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array}} \leftrightarrow (321), \quad (17.26)$$

и являются, естественно, антисимметричными относительно перестановки частиц 1 и 2. Поэтому мы можем получить нормированные состояния типа $\{3\}$ (111) и $\{111\}$ (321), действуя соответственно операторами $\mathcal{P}^{(2)}$ и $\mathcal{P}^{(1)}$ на полином $P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M)$, а именно:

$$\begin{aligned} \left[\mathcal{P}^{(2)} \right] P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) &= \frac{1}{2} [P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) \pm \\ &\pm (-1)^{l_1 + l_2 - \Lambda} P(n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda M)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M; \{3\}(111)) \right. \\ &\left. \pm \phi(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M; \{111\}(321)) \right]. \end{aligned} \quad (17.27)$$

Выражение (17.27) применимо в том случае, когда $2n_1 + l_1 - 2n_2 - l_2 \equiv 0 \pmod{3}$, но пара чисел $(n_1 l_1)$ отлична от $(n_2 l_2)$. Если же

$$n_1 = n_2 = n, \quad l_1 = l_2 = l, \quad (17.28)$$

то из (17.27) находим, что

$$P(nl, nl, \Lambda M) = \begin{cases} \phi(nl, nl, \Lambda M; \{3\}(111)) & \text{при четном } \Lambda, \\ \phi(nl, nl, \Lambda M; \{111\}(321)) & \text{при нечетном } \Lambda. \end{cases} \quad (17.29)$$

Итак, мы получим полиномы для трансляционно-инвариантной задачи трех тел, обладающие определенной перестановочной симметрией и выраженные через операторы рождения квантов η^1, η^2 (17.10). Для вычисления матричных элементов гамильтониана (16.11), а также ядерных формфакторов, которые мы будем рассматривать в разд. 19, значительно удобнее иметь полиномы, выраженные через операторы рождения $\dot{\eta}^1, \dot{\eta}^2$, иначе говоря, выраженные через $\dot{P}(\dot{n}_1 l_1, \dot{n}_2 l_2, \Lambda M)$. Этого легко достичь, если учесть, что матрицу преобразования (17.10), связывающую η^1, η^2 с $\dot{\eta}^1, \dot{\eta}^2$, можно представить в следующей форме:

$$\begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{A}\mathbf{B}. \quad (17.30)$$

Эта задача значительно проще той, которая обсуждалась в разд. 15. Преобразование \mathbf{A} превращает P в линейную ком-

бинацию таких же полиномов P , причем коэффициентами этой линейной комбинации служат стандартные трансформационные коэффициенты (СТК); преобразование \mathbf{B} означает просто умножение полинома на $(-i)^{2\dot{n}_1+l_1}$. Комбинируя эти две операции, приходим к результату

$$\begin{aligned} P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) &= \\ &= \sum_{\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2} P(\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M) (-1)^{\dot{n}_1+l_1} i^{l_1} \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2 \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle, \end{aligned} \quad (17.31)$$

в котором мы использовали соотношения симметрии СТК (15.11).

Из (17.13) и предыдущей дискуссии видно, что

$$\begin{aligned} |n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M; fr\rangle &\equiv \phi(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M; fr)|0\rangle = \\ &= A(v, f, r) [P(n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M) \pm (-1)^{l_1+l_2-\Lambda} P(n_2 l_2, n_1 l_1, \Lambda M)] |0\rangle = \\ &= \sum_{\dot{n}_1 \dot{n}_2 \dot{l}_1 \dot{l}_2} |\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M\rangle \{A(v, f, r) (-1)^{\dot{n}_1+l_1} i^{l_1} [1 \pm (-1)^{l_1}] \times \\ &\quad \times \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle\} = \\ &= \sum_{\dot{n}_1 \dot{n}_2 \dot{l}_1 \dot{l}_2} |\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M\rangle \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda, f, r \rangle, \end{aligned} \quad (17.32)$$

где f и r представляют собой сокращенное обозначение схемы Юнга $\{f_1 f_2 f_3\}$ и символа Яманути $(r_3 r_2 r_1)$; при выводе (17.32) мы использовали свойства симметрии трансформационных коэффициентов [4]. Коэффициенты $A(v, f, r)$ и знаки $+$ или $-$ в (17.32) выбираются в соответствии с формулами (17.23), (17.24), (17.27). Совершенно очевидно, что трансформационный коэффициент в последней строке выражения (17.32) является либо вещественным, либо чисто мнимым, поскольку множитель $[1 \pm (-1)^{l_1}]$ ограничивает \dot{l}_1 только четными или нечетными значениями. Поэтому можно тривиальным образом переопределить кет-вектор в (17.32) так, чтобы указанный трансформационный коэффициент всегда был вещественным.

Обозначим символом

$$|SM_S T M_T; fr\rangle \quad (17.33)$$

спин-изоспиновую функцию трех частиц [30], в которой $SM_S(TM_T)$ — полный спин (изоспин) и его проекция; f, r

имеют тот же смысл, что и в (17.32). Состояние, полностью антисимметричное относительно одновременной перестановки пространственных, спиновых и изоспиновых переменных, задается формулой [30]

$$|\mathcal{N}^r\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{d_f}} \sum_r (-1)^r [|n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda; f r\rangle |STM_T; \tilde{f}\tilde{r}\rangle]_{JM}. \quad (17.34)$$

В (17.34) через \tilde{f} , \tilde{r} обозначены схема Юнга и символ Яманоути, сопряженные по отношению к f и r ; например, для $f, r = \{3\}$, (111) имеем $\tilde{f}, \tilde{r} = \{111\}$, (321). Фаза $(-1)^r$ определена так, что $(-1)^r = +1, +1, +1, -1$ для $r = (111), (321), (211), (121)$ соответственно. Символ \mathcal{N}^r заменяет весь набор квантовых чисел

$$\mathcal{N}^r \equiv n_1 l_1 n_2 l_2 \Lambda f, STM_T, JM. \quad (17.35)$$

Таким образом, мы построили в явном виде трансляционно-инвариантные трехчастичные состояния общего типа, обсуждавшиеся в разд. 16.

18. Общая задача трех тел. Применение к атому лития

Когда речь идет о ядре, мы имеем дело с трансляционно-инвариантной задачей, поскольку, кроме кинетической энергии, в гамильтониан входит только взаимодействие между нуклонами. Для этого типа задач мы можем использовать трансляционно-инвариантные состояния, рассмотренные в разд. 16 и 17.

В атомных и молекулярных задачах мы имеем фиксированную систему отсчета — систему координат, связанную с ядрами атома или молекулы. Если теперь использовать координаты Якоби (16.2) для описания n -электронных состояний, то следует включить в их число также координату центра масс \mathbf{x}^n . Эта координата инвариантна относительно перестановки первоначальных координат \mathbf{x}^s , $s = 1, 2, \dots, n$. Поэтому простейший способ построения волновых функций с определенной симметрией в координатном пространстве и с определенным орбитальным моментом заключается в следующем: берется соответствующее трансляционно-инвариантное состояние, зависящее от $n - 1$ координат \mathbf{x}^s , $s = 1, 2, \dots, n - 1$, и его угловой момент связывается посредством процедуры векторного сложения с орбитальным моментом l состояния, зависящего от одной координаты \mathbf{x}^n .

Для трехчастичной задачи трансляционно-инвариантные состояния задаются формулой (17.32), и указанная выше процедура приводит нас к волновой функции

$$|n_1 l_1, n_2 l_2(\Lambda); n_3 l_3; \lambda \mu; fr\rangle = [\langle \mathbf{x}^1 \mathbf{x}^2 | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda; fr \rangle \langle \mathbf{x}^3 | n_3 l_3 \rangle]_{\lambda \mu}, \quad (18.1)$$

где квадратные скобки означают векторное сложение моментов Λ и l_3 в полный орбитальный момент λ с проекцией μ .

Состояния (17.32) вида $\phi|0\rangle$ можно разложить по состояниям (17.2)

$$|\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda M\rangle,$$

используя коэффициенты

$$\langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda; fr \rangle, \quad (18.2)$$

введенные в (17.32).

Из определения общего трехчастичного состояния (18.1) видно, что те же самые коэффициенты (18.2) можно использовать для разложения кет-векторов (18.1) по состояниям

$$\begin{aligned} |\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2(\Lambda); n_3 l_3; \lambda \mu\rangle &= [[\langle \mathbf{x}^1 | \dot{n}_1 \dot{l}_1 \rangle \langle \mathbf{x}^2 | \dot{n}_2 \dot{l}_2 \rangle]_{\Lambda} \langle \mathbf{x}^3 | n_3 l_3 \rangle]_{\lambda \mu} = \\ &= \sum_{\bar{\Lambda}} [\langle \mathbf{x}^1 | \dot{n}_1 \dot{l}_1 \rangle [\langle \mathbf{x}^2 | n_2 l_2 \rangle \langle \mathbf{x}^3 | \dot{n}_3 \dot{l}_3 \rangle]_{\bar{\Lambda}}]_{\lambda \mu} \langle \dot{l}_1, \dot{l}_2 l_3(\bar{\Lambda}), \lambda | \dot{l}_1 \dot{l}_2(\Lambda), l_3, \lambda \rangle = \\ &= \sum_{\bar{\Lambda}} | \dot{n}_1 \dot{l}_1; \dot{n}_2 \dot{l}_2, n_3 l_3(\bar{\Lambda}); \lambda \mu [(2\Lambda + 1)(2\bar{\Lambda} + 1)]^{1/2} W(\dot{l}_1 \dot{l}_2 l_3; \Lambda \bar{\Lambda}), \end{aligned} \quad (18.3)$$

где в последних двух строчках стандартным образом [31] с помощью коэффициентов Рака W была произведена пересвязка угловых моментов состояний, зависящих от отдельных координат Якоби.

Теперь мы можем рассмотреть матричные элементы трехэлектронного гамильтониана атома или молекулы по состояниям (18.1). Для определенности рассмотрим гамильтониан атома лития, для которого (в единицах разд. 3) имеем

$$H = \sum_{s=1}^3 \left[\frac{1}{2} \varepsilon^2 (\mathbf{p}^s)^2 - \frac{V\sqrt{2}\varepsilon}{|\mathbf{x}^s|} \right] + \sum_{s < t=2}^3 \frac{V\sqrt{2}\varepsilon}{|\mathbf{x}^s - \mathbf{x}^t|}. \quad (18.4)$$

Этот гамильтониан инвариантен относительно вращений и перестановок координат частиц, следовательно, λ, μ, f в (18.1)

будут хорошими квантовыми числами в случае гамильтониана H . Полная волновая функция нашей трехэлектронной задачи получается путем умножения кет-вектора (18.1), зависящего от пространственных переменных, на спиновую функцию типа (17.33) и последующей антисимметризации по формуле (17.34).

Поскольку волновые функции антисимметричны относительно перестановки пространственных и спиновых переменных частиц, при вычислении матричного элемента оператора H можно заменить первую сумму в (18.4) утроенным матричным элементом только одного из ее слагаемых, отвечающего $s = 3$; аналогично матричный элемент двухчастичного взаимодействия электронов можно заменить утроенным (по числу пар электронов) матричным элементом взаимодействия между частицами 1 и 2. Кроме того, поскольку H не зависит от спина, матричные элементы H сводятся к матричным элементам по функциям (18.1), но просуммированным по символу Яманути r . В результате получаем

$$\begin{aligned} & \sum_r \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2(\Lambda'); n'_3 l'_3; \lambda\mu; fr | H | n_1 l_1, n_2 l_2(\Lambda); n_3 l_3; \lambda\mu; fr \rangle = \\ & = 3 \sum_r \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2(\Lambda'); n'_3 l'_3; \lambda\mu; fr | \left[\frac{1}{2} \varepsilon^2 (\mathbf{p}^3)^2 - \frac{V\sqrt{2}}{|\mathbf{x}^3|} \varepsilon \right] \times \\ & \times | n_1 l_1, n_2 l_2(\Lambda); n_3 l_3; \lambda\mu; fr \rangle + 3 \sum_r \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2(\Lambda'); n'_3 l'_3; \lambda\mu; fr \times \\ & \times \left| \frac{V\sqrt{2}}{|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2|} \varepsilon \right| | n_1 l_1, n_2 l_2(\Lambda); n_3 l_3; \lambda\mu; fr \rangle. \quad (18.5) \end{aligned}$$

Воспользовавшись разложением состояний (18.1) по состояниям (18.3), рассмотренным выше, можно видеть, что вычисление последнего члена в (18.5) сводится к нахождению матричного элемента вида

$$\begin{aligned} & \langle \dot{n}'_1 \dot{l}'_1, \dot{n}'_2 \dot{l}'_2(\Lambda'); \dot{n}'_3 \dot{l}'_3; \lambda\mu \left| \frac{\varepsilon}{|\mathbf{x}^1|} \right| \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2(\Lambda); \dot{n}_3 \dot{l}_3; \lambda\mu \rangle = \\ & = \varepsilon \sum_p B(\dot{n}'_1 \dot{l}'_1, \dot{n}_1 \dot{l}_1, p) \frac{p!}{\Gamma(p + 3/2)} \delta_{l'_1 l_1} \delta_{\dot{n}'_2 \dot{n}_2} \delta_{l'_2 l_2} \delta_{n'_3 n_3} \delta_{l'_3 l_3} \delta_{\Lambda' \Lambda}. \quad (18.6) \end{aligned}$$

Для расчета первого члена в правой части (18.5) удобны состояния с измененной схемой связи моментов, фигурирующие

в последней строке соотношения (18.3); при этом приходится вычислять матричные элементы

$$\begin{aligned} & \langle \dot{n}'_1 j'_1; \dot{n}'_2 j'_2, n'_3 l'_3 (\bar{\Lambda}'); \lambda \mu \left| \frac{1}{2} \varepsilon^2 (\mathbf{p}^3)^2 - \frac{\sqrt{2} \varepsilon}{|\mathbf{x}^3|} \right| \dot{n}_1 j_1; \dot{n}_2 j_2, n_3 l_3 (\bar{\Lambda}); \lambda \mu \rangle = \\ & = \langle \dot{n}'_2 j'_2, n'_3 l'_3, \bar{\Lambda} \bar{M} \left| \frac{1}{2} \varepsilon^2 (\mathbf{p}^3)^2 - \frac{\sqrt{2} \varepsilon}{|\mathbf{x}^3|} \right| \dot{n}_2 j_2, n_3 l_3, \bar{\Lambda} \bar{M} \rangle \times \\ & \quad \times \delta_{\dot{n}'_1 \dot{n}_1} \delta_{l'_1 l_1} \delta_{\bar{\Lambda}' \bar{\Lambda}}. \end{aligned} \quad (18.7)$$

Здесь появление $\delta_{\bar{\Lambda}' \bar{\Lambda}}$ обусловлено тем фактом, что оператор в матричном элементе является скаляром.

Чтобы вычислить последний матричный элемент в (18.7), заметим, что можно ввести координаты

$$\mathbf{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^1 + \mathbf{x}^2), \quad \mathbf{x}^3, \quad (18.8)$$

связанные с $\dot{\mathbf{x}}^2, \dot{\mathbf{x}}^3$ соотношением

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{x}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{x}}^2 \\ \dot{\mathbf{x}}^3 \end{pmatrix}. \quad (18.9)$$

Разложим состояния

$$\langle \dot{\mathbf{x}}^2 \dot{\mathbf{x}}^3 | \dot{n}_2 j_2, n_3 l_3, \Lambda M \rangle \quad (18.10)$$

по состояниям

$$\langle \mathbf{X} \mathbf{x}^3 | NL, n l, \Lambda M \rangle, \quad (18.11)$$

где NL — квантовые числа, отвечающие координате \mathbf{X} , а $n l$ — координате \mathbf{x}^3 . Это разложение может быть выполнено с помощью трансформационных коэффициентов, обсужденных в разд. 15

$$\langle NL, n l, \Lambda | \dot{n}_2 j_2, n_3 l_3, \Lambda \rangle_{\beta}, \quad (18.12)$$

где угол β определяется равенствами

$$\cos \frac{1}{2} \beta = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \sin \frac{1}{2} \beta = \sqrt{\frac{2}{3}}. \quad (18.13)$$

Таким путем матричный элемент, входящий в (18.7), можно свести к матричному элементу типа

$$\langle n'lm \left| \frac{1}{2} \epsilon^2 p^2 - \frac{\sqrt{2} \epsilon}{r} \right| nlm \rangle, \quad (18.14)$$

вычисленному в разд. 3.

Мы наметили общую процедуру вычисления матричных элементов (18.5) и теперь применим ее к расчету энергии основного состояния атома лития. Это состояние имеет положительную четность, полный орбитальный момент $\lambda = 0$ и полный спин $S = 1/2$. Последнее означает [32], что оно должно соответствовать схеме Юнга {21}. Так как четность осцилляторных состояний связана с числом квантов \mathfrak{N} , а именно для состояний положительной (отрицательной) четности \mathfrak{N} должно быть четным (нечетным), мы ограничимся при рассмотрении основного состояния атома Li четными значениями \mathfrak{N} . Состояние с $\mathfrak{N} = 0$ пропорционально

$$\exp \left[-\frac{1}{2} ((x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2) \right] \quad (18.15)$$

и поэтому симметрично относительно перестановок координат частиц; следовательно, оно принадлежит к неприводимому представлению со схемой Юнга {3}. Поэтому оно исключается из числа компонент основного состояния атома Li. Следующее возможное значение \mathfrak{N} равно 2, так что на состояния (18.1) налагается ограничение

$$2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 + 2n_3 + l_3 = 2; \quad (18.66)$$

кроме того, в связи с (17.19) и (17.20) должно быть

$$2n_1 + l_1 - 2n_2 - l_2 \not\equiv 0 \pmod{3}. \quad (18.17)$$

Эти условия и симметричная форма выражений (17.23), (17.24) для состояний, принадлежащих к неприводимому представлению {21}, оставляют возможными только следующие состояния типа (18.1):

$$\begin{aligned} & |10, 00(0); 00; 00; \{21\}r\rangle, \\ & |01, 00(1); 01; 00; \{21\}r\rangle, \end{aligned} \quad (18.18)$$

где r принимает значения (211) и (121).

Таким образом, ограничиваясь числом квантов $\mathfrak{N} = 2$, мы получаем с помощью описанной выше процедуры матрицу порядка 2×2 , которая является функцией ϵ . Мы можем диа-

гонализировать ее для отдельных значений ϵ и минимизировать результат относительно данного параметра; при этом мы получим для энергии основного состояния атома Li [6] значение, составляющее 60% экспериментальной величины. Точность расчета может быть увеличена путем перехода к большим значениям \mathfrak{N} .

Приложения этого метода к другим трехэлектронным атомным и молекулярным задачам описаны в работе [6].

19. Формфакторы ядер

В разд. 5 мы обсуждали рассеяние электронов на атомах водорода и видели, что из отношения дифференциального сечения рассеяния к резерфордскому сечению можно определить формфактор распределения электронного заряда. Аналогичным образом [33] можно показать, что квадратный корень из отношения дифференциального сечения рассеяния высокоэнергетических электронов на ядре к соответствующему моттовскому сечению рассеяния на точечном заряде дает с точностью до знака зарядовый формфактор ядра, определяемый соотношением

$$F_{\text{зар}}(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{Z} \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (19.1)$$

Здесь Z — число протонов в ядре, $\rho(\mathbf{x})$ — плотность заряда в системе центра масс ядра и $\hbar\mathbf{q}$ — передаваемый импульс (в единицах $[\hbar m\omega]^{1/2}$, поскольку \mathbf{x} — безразмерный параметр).

В данном разделе мы покажем, как можно получить теоретическое выражение для этого формфактора, если представлять волновую функцию основного состояния в виде суперпозиции трансляционно-инвариантных осцилляторных состояний подобных тем, которые обсуждались в разд. 16 и 17.

Выполнение этой программы начнем с рассмотрения операторов, средние значения которых по основному состоянию ядра определяют плотность вероятности нахождения протона или нейтрона в определенной точке пространства $\tilde{\mathbf{x}}$. Очевидно, что этими операторами являются

$$\hat{\Pi}_\nu(\tilde{\mathbf{x}}) = \sum_{s=1}^n \delta(\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^s) \left[\frac{1}{2} + (-1)^\nu t_0^s \right], \quad (19.2)$$

где \mathbf{x}^s , t_0^s — координата и проекция изоспина частицы s . Индекс ν в (19.2) принимает значения 0 и 1, характеризующие соответственно нейтронный и протонный операторы. Другими

словами, ν — это зарядовый индекс. Число нуклонов обозначим буквой n .

В операторе (19.2) координата $\tilde{\mathbf{x}}$ отсчитывается от произвольного начала координат, в то время как в реальной физической задаче мы интересуемся плотностью заряда в системе координат с началом в центре масс ядра

$$\mathbf{X} \equiv \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n \mathbf{x}^s. \quad (19.3)$$

Поэтому мы вычтем \mathbf{X} одновременно из $\tilde{\mathbf{x}}$ и \mathbf{x}^s в δ -функции, входящей в (19.2). Вводя координату относительно центра масс ядра

$$\mathbf{x} \equiv \tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{X}, \quad (19.4)$$

перепишем оператор (19.2) в виде

$$\hat{\Pi}_\nu(\mathbf{x}) = \sum_{s=1}^n \delta[\mathbf{x} - (\mathbf{x}^s - \mathbf{X})] \left[\frac{1}{2} + (-1)^\nu t_0^s \right]. \quad (19.5)$$

Нашим следующим шагом будет анализ среднего значения оператора $\hat{\Pi}_\nu(\mathbf{x})$ по основному состоянию ядра. Поэтому необходимо кратко рассмотреть свойства этого состояния. В число хороших квантовых чисел, характеризующих основное состояние, входят полный угловой момент J и его проекция M , четность π , проекция полного изоспина

$$M_T = \frac{1}{2} (n - 2Z) \quad (19.6)$$

и, если мы пренебрегли кулоновскими силами, сам полный изоспин. Волновую функцию с этими квантовыми числами можно разложить по произведениям пространственных и спин-изоспиновых функций. Ясно, что если ограничиться только функциями относительных координат таких, как координаты Якоби (16.2) \mathbf{x}^s , $s = 1, 2, \dots, n - 1$, то не появляется никаких ложных состояний.

Мы характеризуем пространственные волновые функции схемой Юнга f и символом Яманюти r в соответствии с их симметрией относительно перестановок координат частиц, а также полным орбитальным моментом L . Для спин-изоспиновых функций также задаются перестановочная симметрия, полный спин S и изоспин T . Согласно рассуждениям, приведшим нас к формуле (17.34), основное состояние будет

удовлетворять принципу Паули, если представить его в виде следующего разложения:

$$|\pi J M T M_T\rangle = \sum_{\alpha L f \gamma S} a(\alpha L f \gamma S) \sum_r \frac{1}{\sqrt{d_f}} (-1)^r [|\alpha \pi L f r\rangle |\gamma S T M_T \tilde{f} \tilde{r}\rangle]_{JM}, \quad (19.7)$$

где α и γ заменяют соответственно все остальные квантовые числа в пространственных и спин-изоспиновых волновых функциях, a — коэффициенты разложения, на которые наложено обычное ограничение, вытекающее из условия нормированности состояния (19.7). Мы опустили в обозначении коэффициентов a все фиксированные квантовые числа, такие, как J , M и т. п. Все остальные символы уже обсуждались в конце разд. 17 применительно к случаю $n = 3$. Что касается общего случая, то мы заметим только, что $(-1)^r$ равняется 1 или -1 в зависимости от того, четное или нечетное количество транспозиций надо последовательно произвести, чтобы преобразовать таблицу Юнга, характеризующую символом Яманоути r , к стандартному виду, в котором последовательно числами 1, 2, 3, ... нумеруются слева направо клетки первой строки, затем клетки второй строки и т. д. [30]¹⁾. Как обычно, квадратные скобки в (19.7) означают сложение моментов \mathbf{L} и \mathbf{S} в \mathbf{J} .

Мы интересуемся вероятностью $\Pi_\nu(\mathbf{x})$ наблюдения протона или нейтрона в некоторой точке ядра безотносительно к ориентации ядра в пространстве. Это означает, что мы должны взять среднее значение оператора $\hat{\Pi}_\nu(\mathbf{x})$ по состоянию (19.7) и затем провести усреднение по проекциям M ; при этом мы находим, что

$$\begin{aligned} \Pi_\nu(\mathbf{x}) &\equiv \frac{1}{2J+1} \sum_M \langle \pi J M T M_T | \hat{\Pi}_\nu(\mathbf{x}) | \pi J M T M_T \rangle = \\ &= \frac{n}{2L+1} \sum_{\substack{ff' \\ LS}} \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \gamma\gamma'}} \sum_{rr'} \sum_{M_L} \frac{(-1)^r (-1)^{r'}}{[d_f d_{f'}]^{1/2}} \times \\ &\times \langle \alpha' \pi L M_L f' r' | \delta \left(\mathbf{x} + \left[\frac{n-1}{n} \right]^{1/2} \hat{x}^{n-1} \right) | \alpha \pi L M_L f r \rangle \times \\ &\times \langle \gamma' S T M_T \tilde{f}' \tilde{r}' | \left(\frac{1}{2} + (-1)^\nu t_0^n \right) | \gamma S T M_T \tilde{f} \tilde{r} \rangle \times \\ &\times a^* (\alpha' L f' \gamma' S) a (\alpha L f \gamma S). \quad (19.8) \end{aligned}$$

¹⁾ См. также [65]. — Прим. перев.

Окончательная форма $\Pi_\nu(\mathbf{x})$ в (19.8) получается из следующих соображений: поскольку состояние (19.7) антисимметрично относительно перестановки пространственных, спиновых и изоспиновых переменных частиц, мы заменяем оператор (19.5) умноженным на n одним его членом, отвечающим значению $s = n$, в результате чего с учетом (16.2) приходим к оператору

$$n\delta\left(\mathbf{x} + \left[\frac{n-1}{n}\right]^{1/2} \hat{\mathbf{x}}^{n-1}\right) \left[\frac{1}{2} + (-1)^\nu t_0^n\right], \quad (19.9)$$

фигурирующему в (19.8). Далее, так как (19.9) не зависит от спина, спин-изоспиновый матричный элемент в (19.8) диагонален по S и не зависит от M_S . Поэтому за счет имеющего место в (19.7) векторного сложения моментов \mathbf{L} и \mathbf{S} в полный момент \mathbf{J} в (19.8) мы получаем множитель

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2J+1} \sum_{MM_S} (LSM_L M_S | JM) (L' S M'_L M'_S | JM) = \\ & = \sum_{MM_S} (SJM_S M | L M_L) (SJM_S M | L' M'_L) [(2L+1)(2L'+1)]^{-1/2} = \\ & = \delta_{LL'} \delta_{M_L M'_L} (2L+1)^{-1}. \quad (19.10) \end{aligned}$$

Истинная плотность заряда $\rho(\mathbf{x})$ в ядре получится из $\Pi_\nu(\mathbf{x})$, если учесть также тот факт, что протоны и нейтроны не являются точечными частицами, а имеют собственную плотность заряда [34], которую мы обозначим через $\rho_\nu(\mathbf{x})$ с $\nu = 1$ или 0 . В результате получим

$$\rho(\mathbf{x}) = \int [\rho_1(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Pi_1(\mathbf{y}) + \rho_0(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Pi_0(\mathbf{y})] d\mathbf{y}. \quad (19.11)$$

Используя теорему о свертке [11], можно записать зарядовый формфактор следующим образом:

$$F_{\text{зар}}(\mathbf{q}) = f_1(\mathbf{q}) F_1(\mathbf{q}) + f_0(\mathbf{q}) F_0(\mathbf{q}), \quad (19.12)$$

где

$$f_\nu(\mathbf{q}) = \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) \rho_\nu(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (19.13)$$

$$F_\nu(\mathbf{q}) = \frac{1}{Z} \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) \Pi_\nu(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (19.14)$$

Поскольку $f_1(q)$ и $f_0(q)$, которые, между прочим, являются только функциями q^2 , были получены экспериментально, нам необходимо только рассчитать теоретически выражение (19.14) для $F_\nu(q)$, $\nu = 0, 1$, чтобы сравнить предсказания теории с экспериментальным формфактором. Подставляя (19.8) в (19.14) и изменяя порядок интегрирования, видим, что формфактор $F_\nu(q)$ (который точно так же является функцией только q^2) можно переписать в виде

$$F_\nu(q^2) = \frac{n}{Z} \sum_{\substack{ff' \\ rr'}}^n \sum_{\substack{\alpha\alpha' \\ \gamma\gamma'}} \sum_{iLS} (-1)^r (-1)^{r'} \frac{1}{[d_f d_{f'}]^{1/2}} \times \\ \times \langle \alpha' \pi L f' r' \left| \frac{\sin k |\dot{\mathbf{x}}^{n-1}|}{k |\dot{\mathbf{x}}^{n-1}|} \right| \alpha \pi L f r \rangle \times \\ \times \langle \gamma' S T M_T \tilde{f} \tilde{r}' \left| \frac{1}{2} + (-1)^\nu t_0^n \right| \gamma S T M_T \tilde{f} \tilde{r} \rangle \times \\ \times a^* (\alpha' L f' \gamma' S) a (\alpha L f \gamma S). \quad (19.15)$$

В (19.15)

$$k = q \sqrt{\frac{n-1}{n}} = q \left[\frac{\hbar(n-1)}{m\omega n} \right]^{1/2}, \quad (19.16)$$

где q — передаваемый импульс в единицах Ферми⁻¹. На первый взгляд кажется, что вместо оператора, входящего в пространственную часть матричного элемента (19.15), мы должны были бы иметь оператор

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \dot{\mathbf{x}}^{n-1}) = \sum_{l=0}^{\infty} j_l(kr) \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\alpha, \beta) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (19.17)$$

где (r, θ, φ) и (k, α, β) — сферические координаты векторов $\dot{\mathbf{x}}^{n-1}$ и \mathbf{k} соответственно; $j_l(kr)$ — сферическая функция Бесселя порядка l .

Вычислим отдельно пространственный матричный элемент для каждого члена суммы (19.17); при этом из теоремы Вигнера — Экарта [2]¹⁾ получаем множитель $(LIM_L m | LM_L)$, который означает, что только члены с $m = 0$ дают отличный от нуля вклад в матричный элемент. Далее, из (19.8)

¹⁾ См. также [50]. — Прим. перев.

видно, что нужно провести усреднение по M_L , в результате чего имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{2L+1} \sum_{M_L} (LLM_L 0 | LM_L) &= \frac{1}{[2I+1]^{1/2}} \sum_{M_L} (LLM_L - M_L | I 0) \frac{(-1)^{L+M_L}}{[2L+1]^{1/2}} = \\ &= \frac{1}{[2I+1]^{1/2}} \sum_{M_L} (LLM_L - M_L | I 0) (LLM_L - M_L | 0 0) = \delta_{I0}. \end{aligned} \quad (19.18)$$

Таким образом, сохраняется только сферически симметричный член $j_0(kr)$; следовательно, пространственный матричный элемент в (19.15) не зависит от M_L .

Для трехнуклонной системы можно вычислить $F_\nu(q^2)$ непосредственным образом, используя явный вид состояний (17.34). Пространственный матричный элемент при этом сводится к матричному элементу

$$\langle n' l m | \frac{\sin kr}{kr} | n l m \rangle, \quad (19.19)$$

вычисленному в (6.6), (6.7), а спин-изоспиновая часть может быть рассчитана с помощью соответствующих генеалогических коэффициентов для системы трех частиц [35]¹⁾.

Прежде чем обсуждать приложения общего выражения (19.15) для $F_\nu(q^2)$, конкретизируем его применительно к случаю, когда не только $\pi J M T M_T$, но и L, S, f являются хорошими квантовыми числами в рассматриваемом состоянии и, кроме того, его пространственная часть либо симметрична, либо антисимметрична, т. е. $f = \{n\}$ или $\{1^n\}$. Тогда $d_f = 1$, и мы опускаем сумму по символам Яманути. Поскольку функция $|\psi S T M_T f\rangle$ также будет симметричной или антисимметричной, мы получим

$$\begin{aligned} n \langle \psi' S T M_T \tilde{f} | \frac{1}{2} + (-1)^\nu t_0^n | \psi S T M_T \tilde{f} \rangle &= \\ &= \langle \psi' S T M_T \tilde{f} | \sum_s \left(\frac{1}{2} + (-1)^\nu t_0^n \right) | \psi S T M_T \tilde{f} \rangle = \\ &= \left[\frac{1}{2} n + (-1)^\nu M_T \right] \delta_{\nu\nu'} = \left\{ \frac{1}{2} [1 + (1)^\nu] n - (-1)^\nu Z \right\} \delta_{\nu\nu'}. \end{aligned} \quad (19.20)$$

¹⁾ См. также [62]. — Прим. перев.

Таким образом, в этом частном случае имеем

$$F_{\nu}(q^2) = \sum_{\alpha\alpha'\gamma} \left[\begin{matrix} (n-Z)/Z \\ 1 \end{matrix} \right] \langle \alpha' \pi L f \left| \frac{\sin k |x^{n-1}|}{k |x^{n-1}|} \right| \alpha \pi L f \rangle a^*(\alpha'\gamma) a(\alpha\gamma), \quad (19.21)$$

где мы опустили в обозначении коэффициента a фиксированные квантовые числа L, S, f . Для $\nu = 0$ ($\nu = 1$), т. е. в формфакторе распределения нейтронов (протонов), нужно взять верхнее (нижнее) число в квадратных скобках.

Из (19.12) видно, что если протон и нейтрон являются точечными частицами с зарядами 1 и 0, то мы для состояний с фиксированным L, S и $f = \{n\}$ или $\{1^n\}$ получаем

$$F_{\text{зар}}(q^2) = F_1(q^2), \quad (19.22)$$

где последний формфактор определяется выражением (19.21). Легко видеть, что этот результат остается справедливым для любой системы точечных частиц с определенными зарядами (например, для такой, как система трех кварков, образующих протон), если пространственная часть волновой функции системы точечных частиц симметрична или антисимметрична, так что мы можем выполнить выкладки, аналогичные (19.20), для волновых функций внутренних переменных точечных частиц. Мы воспользуемся этим результатом в следующем разделе при обсуждении формфактора протона в модели кварков.

В следующей главе также будет использовано соотношение (19.21) для анализа формфактора α -частицы, относительно которой мы будем предполагать, что в ее основном состоянии $f = \{4\}$, $L = S = J = T = 0$.

20. Формфактор протона как системы трех кварков ¹⁾

Часто оказывается полезным рассматривать барионы и мезоны как системы, состоящие из кварков и антикварков [36]²⁾. В частности, можно представить себе протон как систему трех кварков. В предположении о том, что кварки

¹⁾ В этом разделе используются некоторые концепции теории групп, более сложные, чем те, которые встречались в предыдущих разделах. Читатель, не знакомый с ними, может без ущерба для понимания дальнейшего опустить этот раздел.

²⁾ См. также [66]. — Прим. перев.

являются частицами со спином $1/2$, подчиняющимися статистике Ферми, можно разложить волновую функцию, описывающую протон, по трехчастичным состояниям типа тех, которые были обсуждены в связи с (17.34). В этом разделе мы покажем, что экспериментальные данные свидетельствуют о том, что пространственная часть волновой функции трех кварков антисимметрична и обладает нулевым полным угловым моментом. Если бы мы смогли определить коэффициенты разложения пространственной части волновой функции по состояниям (17.32) и если рассматривать кварки как точечные частицы, то формфактор протона определялся бы выражением $F_1(q^2)$ в (19.21). Таким образом, кварковая модель позволяет сделать теоретическое предсказание относительно этого формфактора, о котором имеется также экспериментальная информация [34] ¹⁾.

Конечно, мы сделали очень сильные предположения и, кроме того, к ним необходимо добавить фундаментальное предположение относительно существования самих кварков, не говоря уже о том, что мы используем для системы кварков нерелятивистское описание. Ввиду большой предполагаемой массы кварков высокая энергия связи, необходимая для того, чтобы скомпенсировать разность между их массой и массой протона, вероятно, делает эту систему в высшей степени релятивистской. Все же, несмотря на эти критические замечания, представляется очень интересным проанализировать следствия, вытекающие из кварковой гипотезы, относительно формфакторов протона.

Прежде всего нам необходимо получить волновую функцию, зависящую от внутренних переменных для кварков. Для этой цели мы используем аналогию с волновой функцией $|\sigma\tau\rangle$, зависящей от внутренних переменных нуклона; в случае нуклона

$$|\sigma\tau\rangle = |\sigma\rangle|\tau\rangle, \quad (20.1)$$

и $|\sigma\rangle$, $|\tau\rangle$ — спиновая и изоспиновая волновые функции с $\sigma = \pm 1/2$, $\tau = \pm 1/2$. Таким образом, нуклон имеет четыре различных спин-изоспиновых состояния, которые образуют базис неприводимого представления (НП) группы унитарных унимодулярных преобразований в четырехмерном пространстве $SU(4)$, характеризуемого схемой Юнга $\{1\}$ [30, 32]. В то

¹⁾ См. также [67]. — *Прим. перев.*

же время две компоненты спинового и изоспинового состояния $|\sigma\rangle$ и $|\tau\rangle$ независимо друг от друга образуют базисы НП со схемой Юнга $\{1\}$ для двух групп унитарных унимодулярных преобразований в двумерном пространстве $SU(2)^{(\sigma)}$ и $SU(2)^{(\tau)}$. В результате состояние (20.1) полностью определяется с помощью НП следующей цепочки групп:

$$SU(4) \supset SU(2)^{(\sigma)} \otimes SU(2)^{(\tau)}, \quad (20.2)$$

где знак \otimes символизирует прямое произведение соответствующих групп.

Нуклон может находиться в двух изоспиновых состояниях, отвечающих нейтрону или протону. Кварк может находиться в трех состояниях, обозначаемых буквами p, n, λ ; они характеризуются кет-векторами

$$|\rho\rangle, \quad (20.3)$$

где квантовое число ρ принимает соответственно значения $\rho = 1, 2, 3$ для состояний p, n, λ . Поскольку кварк имеет спин, он также описывается вектором $|\sigma\rangle$ с $\sigma = \pm 1/2$, идентичным вектору, входящему в (20.1). Таким образом, внутреннее состояние кварка описывается кет-вектором

$$|\rho\sigma\rangle = |\rho\rangle|\sigma\rangle, \quad \rho = 1, 2, 3, \quad \sigma = \pm \frac{1}{2}. \quad (20.4)$$

Очевидно, что это состояние полностью определяется неприводимыми представлениями цепочки групп

$$SU(6) \supset SU(2)^{(\sigma)} \times SU(3)^{(\rho)} \quad (20.5)$$

В системе с заданным числом кварков схема Юнга $f = \{f_1 f_2 f_3 f_4 f_5 f_6\}$ с числом строк, не превышающим шести [37]¹⁾, определяет не только НП группы $U(6)$ для этой системы, но также характеризует симметрию состояния относительно перестановок внутренних переменных [32]²⁾. Поскольку кварки подчиняются статистике Ферми, это означает, что пространственная часть волновой функции обладает симметрией, характеризующей сопряженной схемой Юнга \bar{f} .

НП групп $SU(2)^{(\sigma)}$ и $SU(3)^{(\rho)}$ также характеризуются схемами Юнга f' и f'' соответственно с числом клеток в каждой равным числу кварков, причем схема f' (f'') содержит не

1) См. также [65]. — Прим. перев.

2) См. также [68]. — Прим. перев.

более двух (трех) строк, т. е. $f' = f \{f'_1 f'_2\}$, $f'' = \{f''_1 f''_2 f''_3\}$ [37]. Задача отыскания НП $f' \times f''$ группы $SU(2)^{(a)} \times SU(3)^{(a)}$, содержащихся в данном НП f группы $SU(6)$, аналогична по смыслу задаче нахождения НП m группы вращений $R(2)$, входящих в данное НП l группы $R(3)$. Решение последней задачи описывается неравенством $-l \leq m \leq l$. Что касается первой задачи, то здесь необходимо использовать процедуру плетизма [38]; при этом для системы трех кварков получаем соотношения ¹⁾

$$56 \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \supset \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^{\frac{1}{2}} \times \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^8 + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}^{\frac{5}{2}} \times \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}^{10} \quad (20.6a)$$

$$70 \quad \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \supset \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^{\frac{1}{2}} \times \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^8 + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}^{\frac{3}{2}} \times \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^8 + \\ + \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^{\frac{1}{2}} \times \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}^{10} + \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^{\frac{1}{2}} \times \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \end{array}^1 \quad (20.6b)$$

$$20 \quad \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \end{array} \supset \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^{\frac{1}{2}} \times \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array}^8 + \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}^{\frac{3}{2}} \times \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \end{array}^1 \quad (20.6b)$$

В соотношениях (20.6) слева от знака \supset указаны схемы Юнга $f = \{3\}$, $\{21\}$, $\{1^3\}$, которые характеризуют НП группы $SU(6)$ для трехкварковой системы. Справа от знака \supset приведены произведения схем Юнга $f' \times f''$, которые описывают НП группы $SU(2)^{(a)} \times SU(3)^{(a)}$. Над схемами f , f'' для групп $SU(6)$, $SU(3)^{(a)}$ проставлены размерности этих НП в то время, как над схемой f' для группы $SU(2)^{(a)}$ указан полный спин S . Размерность последнего НП, очевидно, равна $2S+1$.

¹⁾ По поводу разложения неприводимых представлений группы $SU(mn)$ на неприводимые представления группы $SU(m) \times SU(n)$ см., например, [69]. — Прим. перев.

С точки зрения эксперимента для нас представляет интерес НП $f = \{3\}$ группы $SU(6)$, имеющее размерность 56, поскольку это как раз тот мультиплет, который содержит октет частиц со спином $1/2 (N, \Lambda, \Sigma, \Xi)$ и декуплет частиц со спином $3/2 (N^*, \Sigma^*, \Xi^*, \Omega^-)$ и который, как мы ожидаем, соответствует низшим состояниям спектра барионов. Протон — это один из членов октета со спином $1/2$; таким образом, видно, что в этой модели его состояние симметрично относительно перестановок внутренних переменных трехкварковой системы. Это означает в свою очередь, что пространственная часть волновой функции протона должна быть антисимметрична относительно перестановок координат кварков; иначе говоря, она должна характеризоваться схемой Юнга $\{1^3\}$. Далее, экспериментально известно, что полный угловой момент барионов октета равен $J = 1/2$, в то же время, согласно (20.6а), частицы октета имеют полный спин $S = 1/2$. Если мы хотим иметь в качестве низших состояний точно один октет с $J = 1/2$, нам необходимо предположить, что полный орбитальный момент системы трех кварков Λ равен нулю, так что сложение $S + \Lambda$ при $S = 1/2$ приводит к единственному значению $J = 1/2$.

Таким образом, мы интересуемся трансляционно-инвариантной волновой функцией пространственных координат трех частиц, которая является антисимметричной, т. е. $f = \{1^3\}$, и имеет $\Lambda = 0$.

Из (17.27) мы видим, что эти состояния могут быть разложены по осцилляторным функциям типа

$$\begin{aligned} |n_1 l, n_2 l, 00; \{111\} (321)\rangle &\equiv \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [P(n_1 l, n_2 l, 00) - P(n_2 l, n_1 l, 00)] |0\rangle, \end{aligned} \quad (20.7)$$

где

$$2(n_1 - n_2) \equiv 0 \pmod{3}, \quad \mathfrak{N} = 2(n_1 + n_2 + l) \quad (20.8)$$

и \mathfrak{N} — полное число квантов. Согласно (20.7), такие функции обращаются в нуль при $n_1 = n_2$. Без ущерба для общности можно положить $n_1 < n_2$, и, поскольку 2 не делится на 3, заключаем из (20.8), что разность $n_1 - n_2$ кратна трем. В результате можно записать

$$n_1 \equiv n, \quad n_2 = n + 3\mu, \quad \mathfrak{N} = 2(2n + 3\mu + l), \quad (20.9)$$

где n и l могут быть нулем или положительными целыми числами, в то время как μ принимает только целые положительные значения. Используя разложение (17.32), можно переписать (20.7) в форме

$$\begin{aligned} |nl, n + 3\mu l, 00; \{1^3\} (321)\rangle = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\dot{n}_1 \dot{n}_2 l} |\dot{n}_1 \dot{l}, \dot{n}_2 \dot{l}, 00\rangle (-1)^{\dot{n}_1 + l} i^l [1 - (-1)^l] \times \\ \times \langle \dot{n}_1 \dot{l}, \dot{n}_2 \dot{l}, 0 | nl, n + 3\mu l 0 \rangle = i \sqrt{2} \sum_{\dot{n}_1 \dot{n}_2 l} |\dot{n}_1 2\dot{l} + 1, \dot{n}_2 2\dot{l} + 1, 00\rangle \times \\ \times (-1)^{\dot{n}_1} \langle \dot{n}_1 2\dot{l} + 1, \dot{n}_2 2\dot{l} + 1, 0 | nl, n + 3\mu l, 0 \rangle, \quad (20.10) \end{aligned}$$

где при желании можно отбросить множитель i и иметь дело с вещественной функцией. В формуле (20.10) фигурируют стандартные трансформационные коэффициенты $\langle | \rangle$, табулированные в работе [4].

Вследствие условий (20.9) состояние с наименьшим допустимым числом квантов соответствует $n = l = 0$, $\mu = 1$, т. е. $\mathfrak{N} = 6$; оно имеет вид

$$|00, 30, 00; \{1^3\} (321)\rangle. \quad (20.11)$$

Для вычисления формфактора $F_1(q^2)$, определяемого выражением (19.21), можно в первом приближении воспользоваться такой функцией. С помощью (20.10) это вычисление производится непосредственным образом, и мы получаем [39]

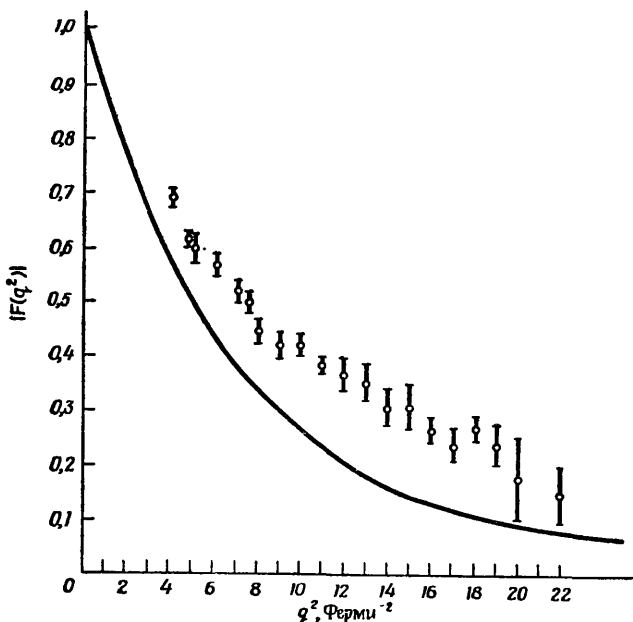
$$\begin{aligned} F_1(k^2) = \exp\left(-\frac{k^2}{4}\right) \left[1 - \frac{1}{2} k^2 + \frac{17}{160} k^4 - \right. \\ \left. - \frac{31}{3360} k^6 + \frac{27}{7168} k^8 - \frac{1}{14336} k^{10} \right], \quad (20.12) \end{aligned}$$

где

$$k^2 = \frac{2\hbar}{3m\omega} q^2. \quad (20.13)$$

Значение $\hbar\omega$ мы зафиксируем, потребовав, чтобы тангенс угла наклона кривой $F_1(q^2)$ в точке $q^2 = 0$ равнялся тангенсу угла наклона экспериментальной кривой; подобная процедура была проведена нами, например, в разд. 7 при обсуждении формфактора атома водорода. Кривая $F_1(q^2)$ с указанным значением $\hbar\omega$, а также экспериментальные данные представлены на фиг. 7.

Теоретическая кривая проходит значительно ниже экспериментальных точек, и, кроме того, хотя это не показано на



Фиг. 7. Формфактор протона как функция квадрата передаваемого импульса, рассчитанный в предположении о том, что эта частица представляет собой систему трех кварков.

В качестве волновой функции этой системы взята осцилляторная волновая функция с шестью квантами, частота которой подобрана таким образом, чтобы воспроизводился наклон экспериментальной кривой в точке $q^2=0$. Как обсуждалось в данном разделе, такое число квантов является минимальным, при котором существует антисимметричное относительно перестановок пространственных координат состояние трех кварков с нулевым орбитальным моментом.

Точками обозначены экспериментальные результаты, полученные Янсенсом и др. [34].

графике, при больших q она уходит в отрицательную область так, что

$$4\pi \int_0^{\infty} F(q^2) q^2 dq = \left[\int F(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{q} \right]_{\mathbf{r}=0} = \rho(0) = 0. \quad (20.14)$$

Можно показать, что $\rho(0) = 0$ при любой комбинации состояний (20.10); для этого нужно только заметить, что,

согласно (19.8), плотность заряда $\rho(\mathbf{x})$ является линейной комбинацией матричных элементов

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}'_1 2l' + 1, \dot{n}'_2 2l' + 1, 00 | \delta \left(\mathbf{x} + \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\mathbf{x}}^2 \right) | \dot{n}_1 2l + 1, \dot{n}_2 2l + 1, 00 \rangle = \\ = \delta_{\dot{n}'_1 \dot{n}_1} \delta_{l'l} \frac{1}{4\pi} R'_{\dot{n}'_2 2l' + 1} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} r \right) R_{\dot{n}_2 2l + 1} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} r \right), \quad (20.15) \end{aligned}$$

где $r = |\mathbf{x}|$. Из формулы (1.8) для R_{nl} видно, что выражение (20.15) представляет собой гауссоиду от аргумента r , умноженную на полином, низшим членом которого является r^{4l+2} . Поэтому ясно, что даже при $l = 0$ полином в (20.15) начинается членом r^2 , и этот матричный элемент обращается в нуль при $r = 0$.

Имевшиеся до настоящего времени экспериментальные данные [34] относительно формфактора протона не дают никаких указаний на то, что функция $F_1(q^2)$ может иметь отрицательные значения, и таким образом не согласуются с версией о том, что плотность заряда протона обращается в нуль в центре масс этой частицы¹⁾. Отсюда ясно, что модель кварков, основанная на сделанных в начале этого раздела предположениях, не дает правильного описания формфактора протона. В принципе некоторые из этих предположений можно смягчить, однако, поскольку данная работа посвящена исследованию гармонического осциллятора, а не модели кварков, мы больше не будем обсуждать этот вопрос.

¹⁾ Современные данные по электромагнитным формфакторам протона приведены в сборнике [67]. — *Прим. перев.*

Глава IV. ЗАДАЧА ЧЕТЫРЕХ ТЕЛ

В этой главе мы хотим повторить применительно к задаче четырех тел то общее рассмотрение, которое было проведено в предыдущей главе для задачи трех тел, и далее проанализировать его приложение к конкретным системам типа α -частицы.

В гл. III были рассмотрены матричные элементы гамильтониана по трансляционно-инвариантным состояниям и ядерные формфакторы для произвольного числа частиц. Поэтому единственным новым вопросом, подлежащим изучению, является построение четырехчастичных осцилляторных состояний как общего типа, так и трансляционно-инвариантных. Иначе говоря, речь идет об обобщении результатов, полученных в разд. 17 и 18, на случай четырех частиц ¹⁾. Хотя подобное рассмотрение может быть проведено совершенно так же, как и в случае трех тел, оно оказывается довольно громоздким, и, кроме того, основные принципы в обоих случаях остаются очень сходными. Поэтому в данной главе мы сконцентрируем свое внимание на одном частном вопросе: построении трансляционно-инвариантных четырехчастичных осцилляторных состояний, симметричных относительно перестановок пространственных координат частиц и обладающих нулевым орбитальным моментом. Эти состояния будут использованы в дальнейшем для анализа формфактора основного состояния α -частицы.

Эта частная задача дает возможность проиллюстрировать все новые концепции, необходимые для того, чтобы распространить на случай четырех частиц выводы, полученные для трех частиц в разд. 17 и 18.

В качестве первого шага на пути к построению симметричных состояний с нулевым орбитальным моментом мы введем удобный симметричный набор относительных координат для системы четырех частиц, к определению и использованию которого мы перейдем в следующем разделе.

¹⁾ Примечание при корректуре. Это было проделано Агилера — Нарваро, Крамером и Мошинским в работе [70].

21. Состояния гармонического осциллятора в симметричной системе относительных координат

Согласно (16.2), относительные координаты Якоби для системы четырех частиц имеют вид

$$\begin{aligned}\dot{x}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x^1 - x^2), \\ \dot{x}^2 &= \frac{1}{\sqrt{6}}(x^1 + x^2 - 2x^3), \\ \dot{x}^3 &= \frac{1}{\sqrt{12}}(x^1 + x^2 + x^3 - 3x^4).\end{aligned}\quad (21.1)$$

Соответствующие состояния, зависящие от отдельных координат, обозначим символом $\langle \dot{x}^s | n_s l_s m_s \rangle$, $s = 1, 2, 3$. Волновая функция состояния с нулевым полным орбитальным моментом, зависящая от этих трех координат, представляет собой кет-вектор

$$\begin{aligned}|n_1 l_1, n_2 l_2; n_3 l_3\rangle &\equiv |n_1 l_1, n_2 l_2 (L' = l_3); n_3 l_3, L = 0\rangle = \\ &= [[\langle \dot{x}^1 | n_1 l_1 \rangle \langle \dot{x}^2 | n_2 l_2 \rangle]_{L' = l_3} \langle \dot{x}^3 | n_3 l_3 \rangle]_{L = 0},\end{aligned}\quad (21.2)$$

где, как и прежде, квадратные скобки означают векторное сложение моментов.

Аналогичным образом мы определим состояния типа

$$|n_1 l_1; n_2 l_2, n_3 l_3\rangle, \quad (21.3)$$

где моменты двух последних частиц складываются в момент $L' = l_1$, который далее складывается с моментом первой частицы в полный орбитальный момент $L = 0$. Состояния (21.2) можно разложить по состояниям (21.3) и наоборот с помощью коэффициентов Рака [31]¹⁾. Однако легко видеть, что, поскольку $L = 0$, в этом разложении содержится только один член с коэффициентом единица, так что состояния (21.2) и (21.3) идентичны; там, где это удобно, мы будем использовать для них общее обозначение

$$|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle, \quad (21.4)$$

в котором отсутствие точки с запятой означает, что порядок сложения моментов несуществен. Важно только заметить,

¹⁾ См. также [50—52]. — Прим. перев.

что в (21.4) первая пара квантовых чисел относится к переменной $\dot{\mathbf{x}}^1$, вторая — к $\dot{\mathbf{x}}^2$, третья — к $\dot{\mathbf{x}}^3$. Следовательно, в (21.4) числа $n_2 l_2$ относятся к переменной $\dot{\mathbf{x}}^2$, $n_3 l_3$ — к $\dot{\mathbf{x}}^3$, в то время как в состоянии $|n_1 l_1, n_3 l_3, n_2 l_2\rangle$ имеет место обратное соответствие.

Таким образом, конструкция трансляционно-инвариантных осцилляторных состояний четырех частиц с $L = 0$, зависящих от координат Якоби \mathbf{x}^s , $s = 1, 2, 3$, тривиальна. Менее тривиальным является построение из них линейных комбинаций, которые обладали бы определенной перестановочной симметрией, в частности таких, которые полностью симметричны относительно перестановок координат четырех частиц.

В свою очередь построение таких симметричных состояний может быть произведено значительно проще, если вместо координат Якоби (21.1) ввести симметричные относительные координаты

$$\begin{aligned}\ddot{\mathbf{x}}^1 &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}^1 + \mathbf{x}^4 - \mathbf{x}^2 - \mathbf{x}^3), \\ \ddot{\mathbf{x}}^2 &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}^4 - \mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^3), \\ \ddot{\mathbf{x}}^3 &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}^3 + \mathbf{x}^4 - \mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2),\end{aligned}\tag{21.5}$$

связанные с координатами Якоби ортогональным преобразованием

$$\begin{pmatrix} \ddot{\mathbf{x}}^1 \\ \ddot{\mathbf{x}}^2 \\ \ddot{\mathbf{x}}^3 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{x}}^1 \\ \dot{\mathbf{x}}^2 \\ \dot{\mathbf{x}}^3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M} = \|\mathbf{M}^{st}\| = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} & -\sqrt{\frac{1}{3}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} & -\sqrt{\frac{1}{3}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & -\sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix}.\tag{21.6}$$

Теперь можно определить состояния, зависящие от отдельных координат $\ddot{\mathbf{x}}^s$, $s = 1, 2, 3$, а затем из них точно так же, как в (21.2), сконструировать кет-векторы

$$|n_1 l_1, n_2 l_2; n_3 l_3\rangle = [[\langle \ddot{\mathbf{x}}^1 | n_1 l_1 \rangle \langle \ddot{\mathbf{x}}^2 | n_2 l_2 \rangle]_s \langle \ddot{\mathbf{x}}^3 | n_3 l_3 \rangle]_0,\tag{21.7}$$

которые в отличие от кет-векторов, зависящих от координат Якоби, мы будем заключать круглой скобкой, а не угловой.

Покажем, что перестановка координат x^s , $s = 1, 2, 3, 4$, преобразует состояние (21.7) очень простым образом, вследствие чего построение симметричного состояния, или по существу состояния с произвольной перестановочной симметрией, легко осуществляется.

Рассмотрим сначала, как действует произвольный элемент симметрической группы $S(4)$ перестановок координат x^s на переменные (21.5). Для симметричных координат \ddot{x}^s , $s = 1, 2, 3$, очевидно, достаточно рассмотреть только перестановки, генерирующие группу $S(4)$, в качестве которых можно взять транспозиции (1, 2), (2, 3), (3, 4). Тогда получаем

$$(1, 2) \begin{pmatrix} \ddot{x}^1 \\ \ddot{x}^2 \\ \ddot{x}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{x}^1 \\ \ddot{x}^2 \\ \ddot{x}^3 \end{pmatrix}, \quad (2, 3) \begin{pmatrix} \ddot{x}^1 \\ \ddot{x}^2 \\ \ddot{x}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{x}^1 \\ \ddot{x}^2 \\ \ddot{x}^3 \end{pmatrix}, \quad (21.8)$$

$$(3, 4) \begin{pmatrix} \ddot{x}^1 \\ \ddot{x}^2 \\ \ddot{x}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{x}^1 \\ \ddot{x}^2 \\ \ddot{x}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{x}^1 \\ \ddot{x}^2 \\ \ddot{x}^3 \end{pmatrix}.$$

Отсюда, сразу видно, что действие операций подгруппы $S(3)$ группы $S(4)$, которая осуществляет перестановки координат x^s , $s = 1, 2, 3$, на переменные \ddot{x}^s , $s = 1, 2, 3$, также сводится к простой перестановке этих переменных. С другой стороны, ввиду (21.8) инвариантная подгруппа $D(2)$ группы $S(4)$, состоящая из перестановок

$$D(2) : e, d_1 = (2, 3)(1, 4), d_2 = (1, 3)(2, 4), d_3 = (1, 2)(3, 4), \quad (21.9)$$

имеет следующее представление в базисе \ddot{x}^s , $s = 1, 2, 3$:

$$D(2) : e = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad d_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$d_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad d_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21.10)$$

Группу $S(4)$ можно рассматривать как полупрямое произведение [30] двух указанных выше подгрупп

$$S(4) = D(0) \wedge S(3); \quad (21.11)$$

это означает, что любой элемент ρ группы $S(4)$ можно единственным образом записать в виде произведения

$$\rho = d\rho, \quad (21.12)$$

где d — элемент группы $D(2)$, а ρ — элемент группы $S(3)$. Поэтому проекционный оператор \mathcal{P} для симметричного состояния четырех частиц принимает следующую форму:

$$\mathcal{P} = \sum_{\rho} \rho = \sum_{\rho} (e + d_1 + d_2 + d_3) \rho. \quad (21.13)$$

Теперь довольно просто найти результат действия оператора \mathcal{P} на состояния $|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle$: нужно последовательно подействовать на координаты \vec{x}^s в этом кет-векторе операциями, обратными каждому элементу ρ . Поскольку, согласно (21.12) и (21.10), $\rho^{-1} = p^{-1}d^{-1} = p^{-1}d$, мы сначала подействуем на кет-вектор (21.7) суммой четырех элементов, заключенных в скобки в (21.13); при этом получаем

$$(e + d_1 + d_2 + d_3) |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle = \\ = [1 + (-1)^{l_1+l_2} + (-1)^{l_1+l_3} + (-1)^{l_2+l_3}] |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle. \quad (21.14)$$

Действие транспозиции (1, 2) на кет-вектор (21.7) дает результат

$$(1, 2) |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle = (-1)^{l_1+l_2-l_3} |n_2 l_2, n_1 l_1, n_3 l_3\rangle; \quad (21.15)$$

аналогичным образом перестановка (2, 3) преобразует кет-вектор $|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle$ к виду

$$(2, 3) |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle = (-1)^{l_2+l_3-l_1} |n_1 l_1, n_3 l_3, n_2 l_2\rangle. \quad (21.16)$$

Теперь точку с запятой можно опустить, поскольку порядок сложения моментов несуществен. Кроме того, числа l_s , $s = 1, 2, 3$ — целые, таким образом, влияние перестановок группы $S(3)$ на $|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle$ сводится к соответствующей перестановке индексов $n_s l_s$ и умножению на величину $(-1)^{l_1+l_2+l_3}$, если перестановка нечетна; при четной перестановке этот множитель отсутствует.

В итоге действие проекционного оператора \mathcal{P} на кет-вектор (21.7) приводит к следующей волновой функции:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle = & \\ = [1 + (-1)^{l_2+l_3} + (-1)^{l_1+l_3} + (-1)^{l_1+l_2}] \{ & \\ & |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle + \\ & + |n_2 l_2, n_3 l_3, n_1 l_1\rangle + |n_3 l_3, n_1 l_1, n_2 l_2\rangle \} + (-1)^{l_1+l_2+l_3} [& \\ & |n_2 l_2, n_1 l_1, n_3 l_3\rangle + \\ & + |n_3 l_3, n_2 l_2, n_1 l_1\rangle + |n_1 l_1, n_3 l_3, n_2 l_2\rangle \}. \end{aligned} \quad (21.17)$$

В частном случае основного состояния α -частицы четность положительна. Так как состояние (21.7) имеет четность $(-1)^{l_1+l_2+l_3}$, то мы интересуемся только состояниями, в которых $l_1 + l_2 + l_3$ четно. Это означает, что либо все три величины l_s четны, либо две из них нечетны. Однако вторая возможность не представляет для нас интереса, поскольку в этом случае выражение в первых квадратных скобках в (21.17) обращается в нуль. Поэтому мы ограничимся только рассмотрением нормированных состояний, спроектированных из векторов $|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle$ с четными значениями квантовых чисел l_1, l_2, l_3 , т. е. состояний вида

$$\begin{aligned} |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle_S \equiv & A [|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle + |n_1 l_1, n_3 l_3, n_2 l_2\rangle + \\ & + |n_2 l_2, n_3 l_3, n_1 l_1\rangle + |n_2 l_2, n_1 l_1, n_3 l_3\rangle + \\ & + |n_3 l_3, n_1 l_1, n_2 l_2\rangle + |n_3 l_3, n_2 l_2, n_1 l_1\rangle]. \end{aligned} \quad (21.18)$$

Нормировочная константа A равняется $1/\sqrt{6}$, если все три пары чисел $n_s l_s$ отличны друг от друга; она равна $1/\sqrt{12}$, если какие-то две из этих пар совпадают друг с другом, и она принимает значение $1/6$, если все три пары одинаковы.

Итак, мы сконструировали в явном виде неложное, т. е. трансляционно-инвариантное, осцилляторное, состояние для системы четырех частиц, которое симметрично относительно перестановок координат частиц и обладает нулевым полным орбитальным моментом. Эти состояния являются функциями симметричных координат \ddot{x}^s , $s = 1, 2, 3$. Для вычисления формфактора (19.21), а также матричных элементов внутреннего гамильтониана (16.11) нам нужно выразить эти состояния через координаты Якоби \dot{x}^s , $s = 1, 2, 3$. Это преобразование будет выполнено в следующем разделе.

22. Трансформационные коэффициенты, связывающие состояния, которые зависят от симметричных координат и координат Якоби

Используя обозначения $|\dot{\cdot}\rangle$ и $|\ddot{\cdot}\rangle$ для состояний, зависящих соответственно от координат $\dot{\mathbf{x}}^s$ и $\ddot{\mathbf{x}}^s$, $s = 1, 2, 3$, можно записать разложение

$$|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle = \sum_{\dot{n}_s l_s} |\dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{n}_3 \dot{l}_3\rangle \langle \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{n}_3 \dot{l}_3 | n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle, \quad (22.1)$$

трансформационные коэффициенты которого $\langle \dot{\cdot} | \ddot{\cdot} \rangle$ мы и хотим определить. Заметим, что полный орбитальный момент L в обоих состояниях $|\dot{\cdot}\rangle$ и $|\ddot{\cdot}\rangle$ равен нулю; действительно, имеем

$$\begin{aligned} L_1 &\equiv \sum_{s=1}^3 \sum_{j, k=1}^3 \epsilon_{ijk} \ddot{x}_j^s \dot{p}_k^s \equiv \sum_{r, s, t=1}^3 \sum_{j, k=1}^3 \epsilon_{ijk} M^{st} \dot{x}_j^t M^{sr} \dot{p}_k^r = \\ &= \sum_{t=1}^3 \sum_{j, k=1}^3 \epsilon_{ijk} \dot{x}_j^t \dot{p}_k^t \equiv \dot{L}_1, \end{aligned} \quad (22.2)$$

поскольку матрица $\|M^{st}\|$ преобразования (21.6) ортогональна. Кроме того, сумма (22.1) содержит конечное число слагаемых, поскольку аналогично (22.2) можно записать

$$H \equiv \frac{1}{2} \sum_{s=1}^3 [(\ddot{\mathbf{p}}^s)^2 + (\ddot{\mathbf{x}}^s)^2] = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^3 [(\dot{\mathbf{p}}^s)^2 + (\dot{\mathbf{x}}^s)^2] \equiv \dot{H}, \quad (22.3)$$

и, следовательно,

$$2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 + 2n_3 + l_3 = 2\dot{n}_1 + \dot{l}_1 + 2\dot{n}_2 + \dot{l}_2 + 2\dot{n}_3 + \dot{l}_3, \quad (22.4)$$

где все квантовые числа принимают целые неотрицательные значения.

Чтобы получить явное выражение для трансформационных коэффициентов, заметим, что матрицу M преобразования (21.6) можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{2}{2}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \\ &\equiv \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_3, \end{aligned} \quad (22.5)$$

где символами M_α , $\alpha = 1, 2, 3$, мы будем обозначать три матрицы, входящие в (22.5), в соответствии с порядком их расположения.

Теперь очевидно, что преобразование M_3 приводит просто к умножению состояния $|n_1l_1, n_2l_2, n_3l_3\rangle$ на фазовый множитель $(-1)^{l_3}$, поскольку его матрица диагональна.

Чтобы выяснить действие преобразования M_1 , представим интересующее нас состояние в виде

$$|n_1l_1, n_2l_2, n_3l_3\rangle = |n_1l_1, n_2l_2(L' = l_3); n_3l_3; L = 0\rangle. \quad (22.6)$$

Отсюда ясно, что действие преобразования M_1 на состояние (22.6) соответствует повороту на угол $1/2\beta = 1/4\pi$ в пространстве первых двух новых координат; другими словами, оно эквивалентно преобразованию

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}^1 \\ \mathbf{x}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{X} \end{pmatrix}, \quad (22.7)$$

действующему на двухчастичное состояние

$$|n_1l_1, n_2l_2, l_3m_3\rangle \quad (22.8)$$

с полным угловым моментом l_3 . Как было показано в разд. 10, преобразование (22.7) выполняется с помощью стандартных трансформационных коэффициентов

$$\langle nl, NL, l_3 | n_1l_1, n_2l_2, l_3 \rangle, \quad (22.9)$$

затабулированных Броди и Мошинским [4], которые мы и используем для нахождения результата действия M_1 на состояния (22.6).

Если переписать наше состояние в виде

$$|n_1l_1, n_2l_2, n_3l_3\rangle = |n_1l_1; n_2l_2, n_3l_3(L' = l_1); L = 0\rangle, \quad (22.10)$$

то становится ясным, что преобразование M_2 соответствует повороту на угол $1/2\beta$, удовлетворяющий условию $\cos 1/2\beta = 1/\sqrt{3}$ (т. е. $\beta \approx 109,47^\circ$) в пространстве координат 2 и 3; это эквивалентно преобразованию

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}^2 \\ \mathbf{x}^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{X} \end{pmatrix}, \quad (22.11)$$

действующему на двухчастичное состояние

$$|n_2 l_2, n_3 l_3, l_1 m_1\rangle \quad (22.12)$$

с полным угловым моментом l_1 . Оно выполняется с помощью трансформационных коэффициентов типа (22.9), но для угла поворота $1/2\beta$ вместо $\pi/4$; мы обозначим их символом

$$\langle nl, NL, l_1 | n_2 l_2, n_3 l_3, l_1 \rangle_{\beta}. \quad (22.13)$$

В разд. 15 обсуждались формулы Гала [21], с помощью которых можно записать эти трансформационные коэффициенты в виде суммы произведений двух стандартных трансформационных коэффициентов типа (22.9) с фазовыми множителями, зависящими от β . Отсюда ясно, что трансформационные коэффициенты $\langle | \rangle$ в (22.1) можно в конечном счете выразить через табулированные в [4] коэффициенты (22.9).

В следующем разделе мы применим намеченную здесь процедуру к вычислению трансформационных коэффициентов $\langle | \rangle$ для четных состояний с числом квантов, не превышающим четырех.

23. Формфактор для линейной комбинации состояний гармонического осциллятора.

Применение к α -частице

Перейдем к рассмотрению симметризованных состояний $|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle_S$, описываемых формулой (21.18), с четными l_1, l_2, l_3 и полным числом квантов

$$\mathfrak{N} = 2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 + 2n_3 + l_3, \quad (23.1)$$

принимаящим все четные значения, включая $\mathfrak{N} = 4$.

При $\mathfrak{N} = 0$ все квантовые числа имеют нулевые значения, и наше первое состояние, которое мы обозначим символом $|1\rangle$, описывается кет-вектором

$$|1\rangle \equiv |00, 00, 00\rangle_S = |00, 00, 00\rangle. \quad (23.2)$$

При $\mathfrak{N} = 2$ мы имеем с точностью до перестановок квантовых чисел две возможности: 1) $n_1 = 1$ и нулевые значения для всех остальных квантовых чисел или 2) $l_1 = l_2 = 1$ и нулевые значения для остальных квантовых чисел. Однако второй вариант следует отбросить, поскольку, как мы видели, l_1 и l_2 не могут быть нечетными. В результате остается только

одно состояние, которое мы запишем следующим образом:

$$|2\rangle = |10, 00, 00\rangle_S. \quad (23.3)$$

При $\mathfrak{N} = 4$ и четных l_1, l_2, l_3 мы имеем с точностью до перестановок только три допустимые комбинации угловых моментов: (000) , (200) и (220) . Вторую возможность следует исключить, поскольку соответствующее состояние имело бы полный угловой момент $L = 2$, а не нулевой, который нам требуется. В случае (000) мы имеем либо $n_1 = 2, n_2 = n_3 = 0$, либо $n_1 = n_2 = 1, n_3 = 0$ и, конечно, плюс перестановки этих чисел. В случае (220) и $\mathfrak{N} = 4$ следует положить $n_1 = n_2 = n_3 = 0$. Таким образом, мы имеем только три возможных состояния с четырьмя квантами:

$$\begin{aligned} |3\rangle &\equiv |20, 00, 00\rangle_S, \\ |4'\rangle &\equiv |10, 10, 00\rangle_S, \\ |5'\rangle &\equiv |02, 02, 00\rangle_S. \end{aligned} \quad (23.4)$$

Для удобства в последующих численных расчетах мы будем использовать вместо $|4'\rangle$ и $|5'\rangle$ два новых состояния, полученных посредством ортогонального преобразования

$$\begin{aligned} |4\rangle &= \frac{\sqrt{15}}{3\sqrt{3}}|4'\rangle + \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{3}}|5'\rangle, \\ |5\rangle &= \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{3}}|4'\rangle - \frac{\sqrt{15}}{3\sqrt{3}}|5'\rangle. \end{aligned} \quad (23.5)$$

Теперь мы используем результаты разд. 22, чтобы выразить эти состояния через координаты Якоби; непосредственным вычислением получаем

$$|1\rangle = |00, 00, 00\rangle, \quad (23.6a)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|10, 00, 00\rangle + |00, 10, 00\rangle + |00, 00, 10\rangle]. \quad (23.6b)$$

$$\begin{aligned} |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{12}} \left[|20, 00, 00\rangle + |00, 20, 00\rangle + \frac{2}{3}|00, 00, 20\rangle \right] - \\ &- \frac{\sqrt{10}}{9}|10, 01, 01\rangle + \frac{\sqrt{10}}{18} [|10, 10, 00\rangle + \\ &+ 2|00, 10, 10\rangle + 2|10, 00, 10\rangle] - \frac{2\sqrt{2}}{9}|02, 01, 01\rangle + \\ &+ \frac{\sqrt{2}}{9} [|02, 02, 00\rangle + 2|00, 02, 02\rangle + 2|02, 00, 02\rangle] + \\ &+ \frac{\sqrt{6}}{9}|00, 11, 01\rangle, \end{aligned} \quad (23.6b)$$

$$\begin{aligned}
|4\rangle = & \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[|20, 00, 00\rangle + |00, 20, 00\rangle + \frac{4}{3} |00, 00, 20\rangle \right] + \\
& + \frac{1}{6} \sqrt{\frac{5}{3}} |10, 10, 00\rangle + \frac{1}{3\sqrt{3}} |02, 02, 00\rangle + \\
& + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{5}{3}} |10, 01, 01\rangle + \frac{2}{3\sqrt{3}} |02, 01, 01\rangle - \frac{1}{3} |00, 11, 01\rangle,
\end{aligned} \tag{23.6r}$$

$$\begin{aligned}
|5\rangle = & \frac{2}{3\sqrt{3}} \left[|10, 10, 00\rangle + |10, 00, 10\rangle + |00, 10, 10\rangle \right] - \\
& - \frac{1}{3} \sqrt{\frac{5}{3}} |02, 02, 00\rangle + |02, 00, 02\rangle + |00, 02, 02\rangle.
\end{aligned} \tag{23.6д}$$

Обозначим состояния (23.6) общим символом $|m\rangle$, $m = 1, 2, 3, 4, 5$. Если ограничиться значениями $\mathfrak{N} \leq 4$, то самое общее симметричное трансляционно-инвариантное состояние четырех частиц с нулевым орбитальным моментом и положительной четностью можно представить в виде

$$\sum_{m=1}^5 a_m |m\rangle, \tag{23.7}$$

где a_m — пока еще неизвестные коэффициенты разложения.

Если волновая функция (23.7) описывает основное состояние α -частицы, у которой $n = 4$ и $Z = 2$, то соответствующие формфакторы (19.21) распределения протонов и нейтронов одинаковы; мы обозначим оба одним символом $F(q^2)$ и перепишем (19.21) в виде

$$F(q^2) = \sum_{m'm} \langle m' \left| \frac{\sin k |\dot{\mathbf{x}}^3|}{k |\dot{\mathbf{x}}^3|} \right| m \rangle a_m^* a_m, \tag{23.8}$$

где q^2, k^2 связаны соотношением (19.16).

С помощью (23.6) матричные элементы в (23.8) сводятся к линейной комбинации матричных элементов типа

$$\begin{aligned}
\langle \dot{n}_1 \dot{l}'_1, \dot{n}_2 \dot{l}'_2, \dot{n}_3 \dot{l}'_3 \left| \frac{\sin k |\dot{\mathbf{x}}^3|}{k |\dot{\mathbf{x}}^3|} \right| \dot{n}_1 \dot{l}_1, \dot{n}_2 \dot{l}_2, \dot{n}_3 \dot{l}_3 \rangle = \\
= \delta_{\dot{n}'_1 \dot{n}_1} \delta_{\dot{l}'_1 \dot{l}_1} \delta_{\dot{n}'_2 \dot{n}_2} \delta_{\dot{l}'_2 \dot{l}_2} \delta_{\dot{l}'_3 \dot{l}_3} \langle \dot{n}'_3 \dot{l}'_3 \left\| \frac{\sin k |\dot{\mathbf{x}}^3|}{k |\dot{\mathbf{x}}^3|} \right\| \dot{n}_3 \dot{l}_3 \rangle,
\end{aligned} \tag{23.9}$$

где последний одночастичный матричный элемент был вычислен явно в (6.6) и (6.7).

Предполагая коэффициенты a_m вещественными, можно записать $F(k^2)$ следующим образом [40]:

$$\begin{aligned}
 F(k^2) = e^{-1/4k^2} \left\{ 1 - \left[\frac{\sqrt{2}}{6} a_1 a_2 + \frac{1}{9} a_2^2 + \frac{\sqrt{5}}{9} a_2 a_3 + \right. \right. \\
 \left. \left. + \frac{2}{9} \sqrt{\frac{5}{6}} a_2 a_4 + \frac{2}{9} \sqrt{\frac{2}{3}} a_2 a_5 + \frac{2}{9} (a_3^2 + a_4^2 + a_5^2) \right] k^2 + \right. \\
 \left. + \left[\frac{\sqrt{10}}{360} a_1 a_3 + \frac{\sqrt{15}}{180} a_1 a_4 + \frac{1}{72} a_2^2 + \frac{\sqrt{5}}{135} a_2 a_3 + \frac{2}{45} \sqrt{\frac{5}{6}} a_2 a_4 + \right. \right. \\
 \left. \left. + \frac{11}{540} a_3^2 + \frac{11}{270} \sqrt{\frac{2}{3}} a_3 a_4 + \frac{1}{135} \sqrt{\frac{10}{3}} a_3 a_5 + \frac{11}{270} a_4^2 + \frac{1}{54} a_5^2 \right] k^4 - \right. \\
 \left. - \left[\frac{\sqrt{5}}{2160} a_2 a_3 + \frac{1}{360} \sqrt{\frac{5}{6}} a_2 a_4 + \frac{1}{1620} a_3^2 + \frac{1}{270} \sqrt{\frac{2}{3}} a_3 a_4 + \right. \right. \\
 \left. \left. + \frac{1}{270} a_4^2 \right] k^6 + \left[\frac{1}{144} \sqrt{\frac{2}{5}} a_3 + \frac{1}{120} \sqrt{\frac{5}{3}} a_4 \right]^2 k^8 \right\}. \quad (23.10)
 \end{aligned}$$

Ввиду условия нормировки для волновой функции

$$\sum_{m=1}^5 a_m^2 = 1 \quad (23.11)$$

мы имеем только четыре независимых параметра, но все же их еще слишком много, чтобы можно было графически представить поведение F как функции k^2 . Следует также помнить, что частота осциллятора является еще одним дополнительным параметром, как видно из (19.16).

В качестве иллюстрации поведения $|F(k^2)|$ при изменении k^2 [40] мы рассмотрим частную линейную комбинацию состояний

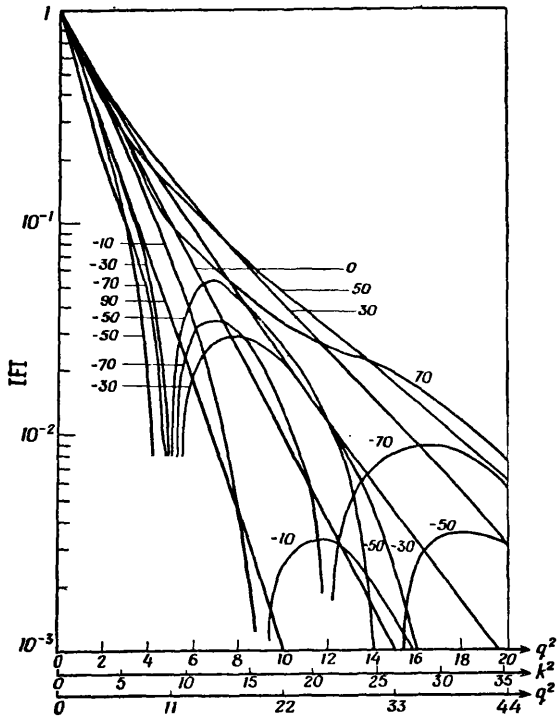
$$\cos \delta |1\rangle + \sin \delta |4\rangle, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \delta \leq \frac{\pi}{2}. \quad (23.12)$$

График этой зависимости для различных значений δ приведен на фиг. 8, где использован логарифмический масштаб по оси $|F|$. На оси абсцисс показаны значения q^2 в единицах Ферми, полученные по формуле (19.16) для двух значений $\hbar\omega = 16,8$ и 37 МэВ. При значениях $\delta = -30^\circ$, -50° или -70° наблюдаются дифракционные эффекты, которые радикально отличаются от поведения формфактора для состояния $|1\rangle$: выражение (23.10) с $a_1 = 1$ и нулевыми остальными ко-

эффицентами показывает, что соответствующий формфактор является гауссоидой от аргумента k и в логарифмическом масштабе должен изображаться прямой линией.

Фиг. 8. Формфактор α -частицы как функция квадрата передаваемого импульса, рассчитанный для трансляционно-инвариантного состояния (23.12).

Кривые характеризуются значениями угла δ ($-1/2\pi \leq \delta \leq 1/2\pi$), которые соответствуют различным смесям состояний с нулем и четырьмя квантами. На графике приведены три шкалы. Средняя соответствует безразмерному параметру $k^2 = (2\hbar/3m\omega) q^2$, в то время как на верхней и нижней приведены значения q^2 (в единицах Ферми-2) при $\hbar\omega = 16,8$ и 37 МэВ соответственно.

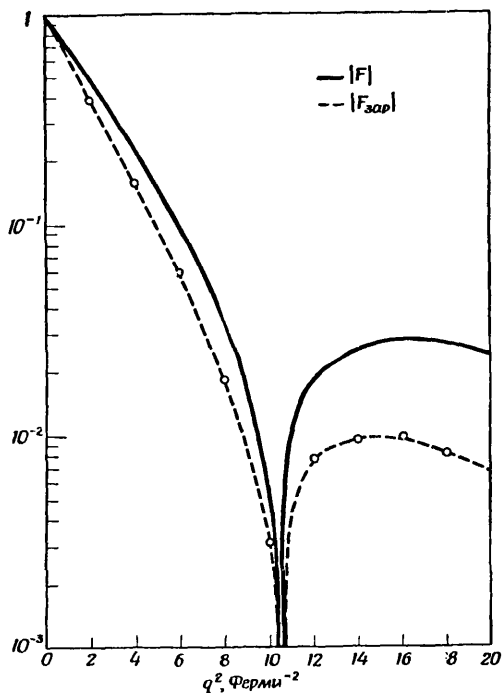


Прежде чем сравнивать $F(q^2)$ при некоторых значениях a_m , $m = 1, \dots, 5$, с экспериментальными результатами, отметим, что из рассеяния высокоэнергетичных электронов на α -частицах получается величина $|F_{\text{зар}}(q^2)|$, а не $|F(q^2)|$. Однако, согласно (19.12), эти величины связаны между собой соотношением

$$F_{\text{зар}}(q^2) = [f_1(q^2) + f_0(q^2)] F(q^2). \quad (23.13)$$

Поскольку множитель $f_1(q^2) + f_0(q^2)$, т. е. сумма формфакторов протона и нейтрона, известен из эксперимента [34], мы можем с помощью соотношения (23.13) извлечь из экспериментального формфактора $|F_{\text{зар}}(q^2)|$, полученного Фрошем

и др. [41], интересующую нас величину $|F(q^2)|$. Она приведена на фиг. 9; пунктирная кривая изображает $F_{зар}(q^2)$, а сплошная кривая соответствует $|F(q^2)|$.



Фиг. 9. Зарядовый формфактор α -частицы (пунктирная кривая), полученный из экспериментальных данных [41] по рассеянию электронов, и соответствующий формфактор (сплошная кривая), определяемый соотношением (23.13).

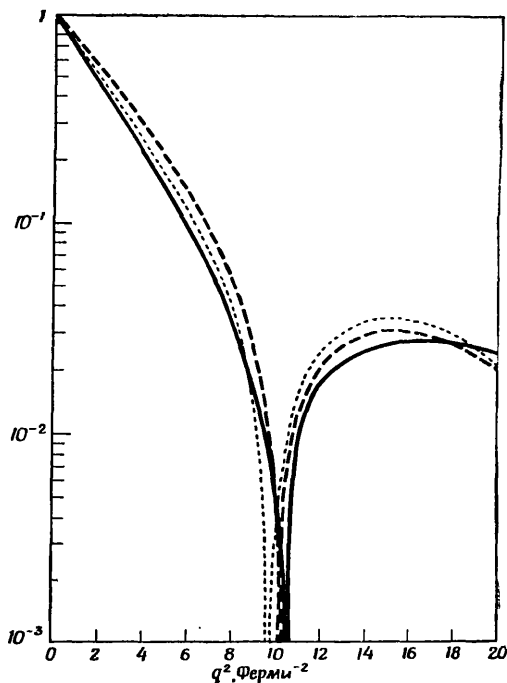
Возвращаясь теперь к фиг. 8, мы видим, что при двух значениях $\delta = -30$ и -70° теоретическая кривая выглядит подобно экспериментальной. В этом сходстве можно убедиться, поместив все три кривые вместе на фиг. 10. Заметим, что величины $\hbar\omega$, которые обеспечивают наилучшую подгонку, для двух значений δ различны.

Мы рассчитали формфактор основного состояния α -частицы при несколько произвольном выборе коэффициентов a_m , $m = 1, \dots, 5$.

Можно разработать более систематический подход к определению этих коэффициентов, если воспользоваться процедурой, совершенно аналогичной той, которая обсуждалась в разд. 5 и 6 в связи с электронным формфактором атома водорода,

Если задать определенный внутренний гамильтониан α -частицы, то с помощью вариационного метода, используя состояния (23.7) и некоторые формулы из разд. 16 и 3,

Ф и г. 10. Сравнение экспериментального формфактора (сплошная кривая) и теоретического формфактора, полученного из соотношения (23.10) с использованием волновой функции (23.12). Кривая с короткими пунктирами соответствует $\delta = -70^\circ$ и $\hbar\omega = 37$ МэВ, кривая с длинными пунктирами отвечает $\delta = -30^\circ$ и $\hbar\omega = 33,6$ МэВ.



можно найти как значения a_m , так и энергию связи α -частицы. Однако мы должны исключить из рассмотрения нуклон-нуклонные потенциалы с твердым кором, так как для них матричные элементы, описанные в разд. 16, расходятся. Потенциалы с мягким кором, или потенциалы, зависящие от скорости, не составляют проблемы.

Для аппроксимации экспериментального формфактора $F(q^2)$ можно также использовать метод наименьших квадратов. Как показано в разд. 7, это приводит к системам алгебраических уравнений для коэффициентов a_m , которые мы можем решать методом последовательных приближений, пока не достигнем самосогласования.

В настоящее время исследуются оба эти подхода.

Глава V. ПРОБЛЕМА n ТЕЛ В ПРИБЛИЖЕНИИ ХАРТРИ — ФОКА

Техника вычислений, развитая в гл. III и IV для задач трех и четырех тел, может быть обобщена на случай большего числа частиц, но возрастающая сложность аналитических выражений быстро делает точные вычисления матричных элементов практически невыполнимыми. Это вынуждает нас использовать в задаче многих тел приближенные методы, среди которых одним из наиболее широко используемых является метод Хартри — Фока (МХФ). В этой главе будут использоваться волновые функции гармонического осциллятора в систематических приложениях метода Хартри — Фока. Прежде чем приступить к выполнению этой программы, нам хотелось бы получить некоторое представление о том, насколько хорош метод Хартри — Фока. В следующем разделе для критического обсуждения МХФ будет использована очень простая модель, снова включающая в себя гармонические осцилляторы. В остальных разделах этой главы, в частности, будет рассмотрен МХФ для заполненных оболочек и обсуждаются его применения к некоторым атомным и ядерным задачам.

24. Насколько хорош метод Хартри — Фока? Простая модель [42]

Рассмотрим две частицы одинаковой массы, движущиеся в потенциале гармонического осциллятора и взаимодействующие друг с другом посредством гармонических сил с амплитудой k . Гамильтониан такой системы (в единицах, в которых $\hbar = m = \omega = 1$, где ω — частота общего осцилляторного потенциала) имеет вид

$$H = \frac{1}{2} [(p^1)^2 + (x^1)^2 + (p^2)^2 + (x^2)^2] + k \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (x^1 - x^2) \right]^2. \quad (24.1)$$

Как и в разд. 10, введем относительные координаты и координаты центра масс

$$r = \frac{1}{\sqrt{2}} (x^1 - x^2), \quad R = \frac{1}{\sqrt{2}} (x^1 + x^2); \quad (24.2)$$

аналогичным образом введем соответствующие импульсы, тогда H приобретает форму

$$H = \frac{1}{2} (P^2 + R^2) + \frac{1}{2} [p^2 + (2k + 1) r^2] \quad (24.3)$$

и имеет решение, которое определяется стандартным методом,

$$\psi = \pi^{-3/2} (2k + 1)^{3/8} \exp\left(-\frac{1}{2} R^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} [2k + 1]^{1/2} r^2\right). \quad (24.4)$$

Энергия основного состояния (нуль квантов) в наших единицах равна

$$E = \frac{3}{2} (1 + [2k + 1]^{1/2}). \quad (24.5)$$

До сих пор мы не вводили никаких приближений; формулы (24.4) и (24.5) представляют собой точные результаты. Теперь решим ту же самую задачу, используя метод Хартри — Фока, и затем сравним результаты с (24.4) и (24.5). Предполагая, что частицы имеют спины $1/2$ и одинаковые орбитальные волновые функции $\phi(\mathbf{x})$, запишем пробную волновую функцию для нашей системы в форме

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{ХФ}} \equiv \Psi' &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi(\mathbf{x}^1) \chi_{1/2}(1) & \phi(\mathbf{x}^2) \chi_{1/2}(2) \\ \phi(\mathbf{x}^1) \chi_{-1/2}(1) & \phi(\mathbf{x}^2) \chi_{-1/2}(2) \end{vmatrix} = \\ &= \phi(\mathbf{x}^1) \phi(\mathbf{x}^2) \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{1/2}(1) \chi_{-1/2}(2) - \chi_{-1/2}(1) \chi_{1/2}(2)], \end{aligned} \quad (24.6)$$

где, как и раньше, χ_{m_S} — спиновая волновая функция с проекцией спина на ось z $m_S = \pm 1/2$. Уравнение Хартри — Фока для гамильтониана (24.1) имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [(p^1)^2 + (x^1)^2] \phi(\mathbf{x}^1) + \left[\int \phi^*(\mathbf{x}^2) \frac{k}{2} (\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2)^2 \phi(\mathbf{x}^2) d\mathbf{x}^2 \right] \phi(\mathbf{x}^1) = \\ = \epsilon \phi(\mathbf{x}^1), \end{aligned} \quad (24.7)$$

где ϵ подлежит определению. Мы получили интегро-дифференциальное уравнение, хотя решается оно тривиальным образом. Распишем бином $(\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2)^2$ в подынтегральном выражении; в виду соображений четности член $\int \phi^*(\mathbf{x}^2) \mathbf{x}^1 \cdot \mathbf{x}^2 \phi(\mathbf{x}^2) d\mathbf{x}^2$

обращается в нуль. Кроме того,

$$\frac{k}{2} \int \phi^*(\mathbf{r}) r^2 \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \equiv A \quad (24.8)$$

— это некоторая константа, которую можно включить в ϵ . В результате уравнение (24.7) приобретает форму

$$\frac{1}{2} [(\mathbf{p}^1)^2 + (k+1)(\mathbf{x}^1)^2] \phi(\mathbf{x}^1) = \epsilon' \phi(\mathbf{x}^1) = (\epsilon - A) \phi(\mathbf{x}^1), \quad (24.9)$$

где мы предполагаем, что функция ϕ нормирована на единицу. Уравнение (24.9) легко решается, и мы находим

$$\phi(r_1) = \pi^{-3/4} (k+1)^{3/8} \exp\left(-\frac{1}{2} [1+k]^{1/2} r_1^2\right), \quad r_1 \equiv |\mathbf{x}^1|. \quad (24.10)$$

Подставляем это выражение в (24.8) и используя (24.9), получаем

$$\epsilon = \frac{3}{2} \left(\frac{3k+2}{2k+2}\right) [k+1]^{1/2} \quad (24.11)$$

и

$$\begin{aligned} \psi' = \phi(r_1) \phi(r_2) &= \pi^{-3/2} (1+k)^{3/4} \exp\left[-\frac{1}{2} [1+k]^{1/2} (r_1^2 + r_2^2)\right] = \\ &= \pi^{-3/2} (1+k)^{3/4} \exp\left[-\frac{1}{2} [1+k]^{1/2} (r^2 + R^2)\right]. \end{aligned} \quad (24.12)$$

Это следует сопоставить с точным результатом (24.4).

Хартри-фоковская энергия представляет собой среднее значение H по функции ψ' . Так как H можно записать в виде

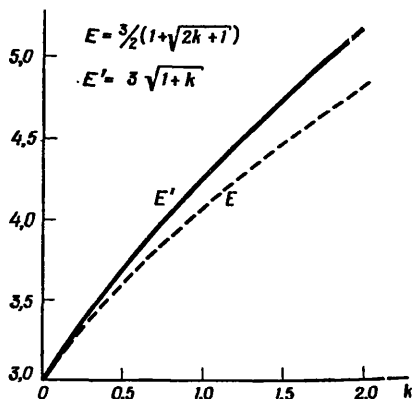
$$H = \frac{1}{2} [(\mathbf{p}^1)^2 + (k+1)(\mathbf{x}^1)^2] + \frac{1}{2} [(\mathbf{p}^2)^2 + (k+1)(\mathbf{x}^2)^2] - k\mathbf{x}^1 \cdot \mathbf{x}^2, \quad (24.13)$$

мы сразу получаем, что хартри-фоковская энергия равна

$$E_{\text{ХФ}} \equiv E' = 3[1+k]^{1/2}. \quad (24.14)$$

Теперь можно сравнить результаты метода Хартри — Фока с точным расчетом. При $k=0$, как и следовало ожидать, имеет место полное согласие. В физических приложениях потенциал взаимодействия между частицами обычно того же порядка величины, что и общий потенциал, поэтому интересно рассмотреть для нашей модели степень согласия при $k=1$. На фиг. 11 изображены хартри-фоковское и точное значения энергии как функции k .

Заметим, что $E < E'$, как и должно быть. При $k = 1$ величина E составляет 96,5% хартри-фоковской энергии. Из

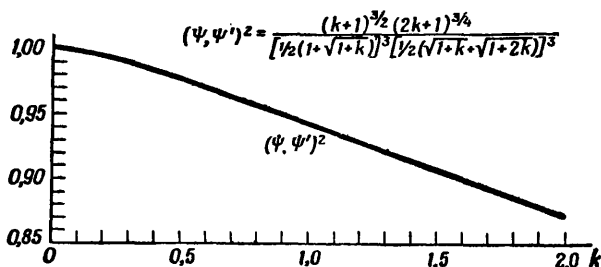


Фиг. 11. Точная и хартри-фоковская энергии для модельной двухчастичной задачи как функции параметра связи k .

(24.4) и (24.12) видно, что квадрат интеграла перекрывания $(\psi, \psi')^2$ дается выражением

$$(\psi, \psi')^2 = \frac{64 (k+1)^{3/2} (2k+1)^{3/4}}{[1 + \sqrt{1+k}]^3 [\sqrt{1+k} + \sqrt{1+2k}]^3}, \quad (24.15)$$

которое изображено графически на фиг. 12. При $k = 1$ перекрывание составляет 95%.



Фиг. 12. Перекрывание точной и хартри-фоковской волновых функций для модельной двухчастичной задачи в зависимости от параметра связи k

Отсюда ясно, что метод Хартри — Фока является вполне хорошим для этой простой модели в отношении как энергии, так и волновых функций.

25. Система алгебраических уравнений и ее самосогласованное решение

Обычный ядерный или атомный гамильтониан может быть записан в форме

$$H = \sum_{s=1}^n H_0(s) + \sum_{s < t=2}^n V(s, t), \quad (25.1)$$

где $H_0(s)$ — одночастичный гамильтониан для частицы s , а $V(s, t)$ — потенциал двухчастичного взаимодействия.

Если мы интересуемся только средним значением H по полностью антисимметричным волновым функциям, то можно заменить H оператором

$$H' = nH_0(1) + \frac{1}{2} n(n-1)V(1, 2). \quad (25.2)$$

Антисимметричную волновую функцию можно записать в виде детерминанта Слэтера

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det |\psi_i(s)| = \frac{1}{\sqrt{n!}} \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} \psi_{i_1}(1) \psi_{i_2}(2) \dots \psi_{i_n}(n), \quad (25.3)$$

где предполагается суммирование по повторяющимся индексам.

В (25.3) $\varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n}$ — полностью антисимметричный тензор, определяемый условиями

$$\varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} = \begin{cases} +1, & \text{если } i_1 i_2 \dots i_n \text{ — четная перестановка} \\ & \text{чисел } 1, 2, \dots, n, \\ -1, & \text{если } i_1 i_2 \dots i_n \text{ — нечетная перестановка} \\ & \text{чисел } 1, 2, \dots, n, \\ 0 & \text{в остальных случаях, т. е. если какие-либо} \\ & \text{два числа из } i_1 i_2 \dots i_n \text{ равны друг} \\ & \text{другу.} \end{cases} \quad (25.4)$$

Одночастичные состояния $\psi_i(s)$ предполагаются ортонормированными. Индекс i включает в себя орбитальные, спиновые и изоспиновые квантовые числа.

Среднее значение H по состоянию (25.3) имеет вид

$$\begin{aligned}
 (\Psi, H\Psi) = & \frac{n}{n!} \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} \varepsilon_{j_1 j_2 \dots j_n} \int \psi_i^*(1) H_0(1) \psi_j(1) d\tau_1 + \\
 & + \frac{1}{2} \frac{n(n-1)}{n!} \varepsilon_{i_1 j_1 i_2 j_2 \dots i_n j_n} \varepsilon_{k_1 l_1 k_2 l_2 \dots k_n l_n} \times \\
 & \times \int \psi_i^*(1) \psi_j^*(2) V(1, 2) \psi_k(1) \psi_l(2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (25.5)
 \end{aligned}$$

где символ интегрирования подразумевает также суммирование по спиновым и изоспиновым переменным; кроме того, имеет место суммирование по повторяющимся индексам в пределах от 1 до n .

В первом члене выражения (25.5) $i = j$, иначе в одном из символов ε два индекса окажутся одинаковыми; по той же причине во втором члене $i = k$, $j = l$ или, наоборот, $i = l$, $j = k$. Суммирование по всем остальным индексам i в первом члене дает $(n-1)!$, во втором члене $(n-2)!$, таким образом, получаем

$$(\Psi, H\Psi) = \sum_i \langle i | H_0(1) | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | V(1, 2) | ij \rangle_A, \quad (25.6)$$

где

$$\langle ij | V(1, 2) | ij \rangle_A = \langle ij | V(1, 2) | ij \rangle - \langle ij | V(1, 2) | ji \rangle, \quad (25.7)$$

и

$$\langle ij | V(1, 2) | kl \rangle = \int \psi_i^*(1) \psi_j^*(2) V(1, 2) \psi_k(1) \psi_l(2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (25.8a)$$

$$\langle i | H_0(1) | j \rangle = \int \psi_i^*(1) H_0(1) \psi_j(1) d\tau_1. \quad (25.8b)$$

Функции ψ_i можно разложить по любому полному набору одночастичных состояний $|\alpha\rangle$:

$$\psi_i = \sum_{\alpha} c_i^{\alpha} |\alpha\rangle. \quad (25.9)$$

Хотя разложение (25.9), вообще говоря, содержит бесконечное число членов, в приближенных расчетах мы всегда обрезаем его, поэтому будем считать, что выражение (25.9) является конечной суммой.

Подставляя (25.9) в (25.6), можно записать

$$\begin{aligned}
 (\Psi, H\Psi) - \sum_{i=1}^n \varepsilon_i \sum_{\alpha} c_i^{\alpha*} c_i^{\alpha} &= \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha\gamma} [c_i^{\alpha*} \langle \alpha | H_0 | \gamma \rangle c_i^{\gamma}] + \\
 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \{ &c_i^{\alpha*} c_j^{\beta*} [\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\beta | V | \delta\gamma \rangle] c_i^{\gamma} c_j^{\delta} \} - \sum_{i=1}^n \varepsilon_i \sum_{\alpha} c_i^{\alpha*} c_i^{\alpha},
 \end{aligned} \quad (25.10)$$

где ε_i — множители Лагранжа, введенные для обеспечения нормировки функций. Вариационный подход означает минимизацию выражения (25.10) относительно коэффициентов c_i^{α} . Приравняв к нулю производную от правой части (25.10) по $c_i^{\alpha*}$ и учитывая, что c_i^{α} и $c_i^{\alpha*}$ являются независимыми величинами, мы получаем уравнения Хартри — Фока [12]

$$\sum_{\gamma} \langle \alpha | H_0 | \gamma \rangle c_i^{\gamma} + \sum_{\gamma} \sum_{\beta\delta} [c_j^{\beta*} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle_A c_j^{\delta}] c_i^{\gamma} = \varepsilon_i c_i^{\alpha}. \quad (25.11)$$

Уравнения (25.11) — это система кубических уравнений относительно коэффициентов c_i^{α} , $c_i^{\alpha*}$, которая может быть решена методом итераций. Запишем величину

$$\sum_{\beta\delta} [c_j^{\beta*} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle_A c_j^{\delta}] \equiv \langle \alpha | U | \gamma \rangle \quad (25.12)$$

и вычислим ее при некоторых начальных значениях коэффициентов c_i^{α} , скажем δ_i^{α} . Подставив этот результат в (25.11), мы получим систему линейных уравнений для c_i^{α} , которую теперь можно решить стандартным методом. Если мы исходили из набора K состояний $|\alpha\rangle$, то коэффициенты c_i^{α} — это компоненты K -мерных ортонормированных векторов, удовлетворяющие условию

$$\sum_{\alpha} c_i^{\alpha*} c_i^{\alpha} = \delta_{ii}. \quad (25.13)$$

Таким образом, имеется K независимых векторных решений линеаризованных уравнений (25.11)

$$\sum_{\gamma} [\langle \alpha | H_0 | \gamma \rangle + \langle \alpha | U | \gamma \rangle] c_i^{\gamma} = \varepsilon_i c_i^{\alpha}. \quad (25.14)$$

Из этих решений мы отберем n решений, отвечающих наименьшим собственным значениям ε_i , и подставим их снова

в (25.12); мы получим исходное выражение для следующей итерации. Подобная процедура продолжается до тех пор, пока не будет достигнуто самосогласование, или, другими словами, пока коэффициенты c_i^a , использованные в (25.12), и решения уравнений (25.14), полученных с их помощью, не совпадут друг с другом в заданном приближении.

В следующем разделе мы рассмотрим эту процедуру решения уравнений (25.11) для того случая, когда в качестве пространственной части состояний $|\alpha\rangle$ используются одночастичные волновые функции гармонического осциллятора. В частности мы обсудим случай заполненных оболочек.

26. Метод Хартри — Фока с волновыми функциями гармонического осциллятора. Случай заполненных оболочек

Для определенности будем считать, что гамильтониан (25.1) соответствует ядерной задаче [43], в которой $H_0(s)$ представляет собой кинетическую энергию s -го нуклона

$$H_0(s) \equiv T(s), \quad (26.1)$$

в то время как $V(s, t)$ — потенциал центрального взаимодействия между нуклонами, включающий в себя также обменные члены,

$$\begin{aligned} V(s, t) = & V_W(r_{st}) + V_M(r_{st})P_{st}^M + V_B(r_{st})P_{st}^B + V_H(r_{st})P_{st}^H = \\ = & V_W(r_{st}) - V_M(r_{st})(S^2 - 1)(T^2 - 1) + V_B(r_{st})(S^2 - 1) - \\ & - V_H(r_{st})(T^2 - 1). \end{aligned} \quad (26.2)$$

Здесь буквами W, M, B, H указаны взаимодействия типа Вигнера, Майораны, Бартлета и Гейзенберга, S, T — полный спин и изоспин двух частиц.

Возьмем одночастичные состояния нуклонов $|\alpha\rangle$ в виде

$$|\alpha\rangle = |n_\alpha l_\alpha m_\alpha\rangle |\sigma_\alpha\rangle |\tau_\alpha\rangle, \quad (26.3)$$

где $|n_\alpha l_\alpha m_\alpha\rangle$ — состояния гармонического осциллятора (разд. 1), $|\sigma_\alpha\rangle, |\tau_\alpha\rangle$ — обычные спиновые и изоспиновые волновые функции.

Уравнения Хартри — Фока (25.11) теперь можно записать следующим образом:

$$\sum_{\gamma} \Gamma_{\alpha\gamma} c_{\gamma}^{\alpha} + \sum_{\gamma} \sum_{j=1}^n \sum_{\beta\delta} [c_j^{\beta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_j^{\delta}] c_{\gamma}^{\alpha} = \epsilon_i c_i^{\alpha}. \quad (26.4)$$

Они содержат одночастичные матричные элементы $T_{\alpha\gamma}$ и двухчастичные матричные элементы $V_{\alpha\beta\gamma\delta}$; нам уже известно, как выразить последние через трансформационные коэффициенты и матричные элементы одночастичного типа (гл. II). Используя свойства ортонормированности коэффициентов Клебша — Гордана и соотношения симметрии (10.38) для СТК, получаем [43]

$$T_{\alpha\gamma} \equiv \langle n_\alpha l_\alpha m_\alpha \sigma_\alpha \tau_\alpha | T(1) | n_\gamma l_\gamma m_\gamma \sigma_\gamma \tau_\gamma \rangle = \\ = \langle n_\alpha l_\alpha || T(1) || n_\gamma l_\gamma \rangle \delta_{l_\alpha l_\gamma} \delta_{m_\alpha m_\gamma} \delta_{\sigma_\alpha \sigma_\gamma} \delta_{\tau_\alpha \tau_\gamma}, \quad (26.5)$$

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_{\lambda\mu} \sum_{\substack{SM_S \\ TM_T}} \sum_{\substack{NLn' \\ nl}} \{ (l_\alpha l_\beta m_\alpha m_\beta | \lambda\mu) (l_\gamma l_\delta m_\gamma m_\delta | \lambda\mu) \times \\ \times \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_\alpha \sigma_\beta | SM_S \right) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \sigma_\gamma \sigma_\delta | SM_S \right) \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \tau_\alpha \tau_\beta | TM_T \right) \times \\ \times \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \tau_\gamma \tau_\delta | TM_T \right) \langle n'l, NL, \lambda | n_\alpha l_\alpha, n_\beta l_\beta, \lambda \rangle [1 - (-1)^{l'+s+T}] \times \\ \times \langle n'l || V_{ST}(1, 2) || nl \rangle \langle nl, NL, \lambda | n_\gamma l_\gamma, n_\delta l_\delta, \lambda \rangle \}. \quad (26.6)$$

С помощью (26.2) можно записать в явном виде двухчастичный потенциал, входящий в выражение (26.6):

$$V_{ST}(1, 2) = V_W(r_{12}) - V_M(r_{12}) [S(S+1) - 1] [T(T+1) - 1] + \\ + V_B(r_{12}) [S(S+1) - 1] - V_H(r_{12}) [T(T+1) - 1]. \quad (26.7)$$

В (26.7) множитель $V_W(r_{12})$ и другие характеризуют радиальные зависимости отдельных компонент потенциала (26.2). Методы, описанные в разд. 2, дают возможность вычислить приведенные матричные элементы операторов $T(1)$ и $V_{ST}(1, 2)$.

Наконец, укажем явно, от каких квантовых чисел зависят коэффициенты:

$$c_i^\alpha \equiv c_i^{\alpha l_\alpha m_\alpha \sigma_\alpha \tau_\alpha}. \quad (26.8)$$

Таким образом, все члены в уравнении (26.4) полностью определены и мы можем приступить к систематическому решению этих уравнений в соответствии с тем, как было отмечено в предыдущем разделе.

Особый интерес представляет задача n частиц, заполняющих орбиты в центральном потенциале, параметры которого следует определить по методу Хартри — Фока. Это означает, что индекс i состояния, в котором находится частица, расшифровывается следующим образом:

$$i = \nu_i l_i m_i \sigma_i \tau_i, \quad (26.9)$$

где l_i , m_i , σ_i , τ_i — соответственно орбитальный момент и его проекция, проекции спина и изоспина, которые характеризуют данное состояние. Индекс ν_i характеризует радиальную волновую функцию в этом пока еще не определенном центральном потенциале. Ясно, что коэффициенты c_i^a можно теперь записать в виде

$$c_i^a = c_{\nu_i}^{n_a} (l_a m_a \sigma_a \tau_a) \delta_{l_i}^{l_a} \delta_{m_i}^{m_a} \delta_{\sigma_i}^{\sigma_a} \delta_{\tau_i}^{\tau_a}. \quad (26.10)$$

Далее предположим, что частицы заполняют *все* орбиты в этом центральном потенциале вплоть до некоторого заданного уровня; тогда на каждой заполненной орбите $\nu_i l_i$ имеются нуклоны в состояниях, соответствующих всем допустимым значениям $m_i = l_i, l_i - 1, \dots, -l_i$, $\sigma_i = +1/2, -1/2$, $\tau_i = +1/2, -1/2$. Мы покажем теперь, что в этом случае коэффициенты $c_{\nu_i}^{n_a}$ зависят только от l_a , т. е. можно записать

$$c_i^a = c_{\nu_i}^{n_a} (l_a) \delta_{l_i}^{l_a} \delta_{m_i}^{m_a} \delta_{\sigma_i}^{\sigma_a} \delta_{\tau_i}^{\tau_a}. \quad (26.11)$$

Для наших целей достаточно доказать, что если подставить (26.11) в (26.4), то результирующие уравнения не будут зависеть от индексов m , σ и τ .

Прежде всего, уясним себе, что из (26.11) следует равенство

$$\sum_j c_j^{\beta*} c_j^\delta = \sum_{\nu_j} c_{\nu_j}^{n_{\beta*}} (l_\beta) c_{\nu_j}^{n_\delta} (l_\beta) \delta_{l_\beta l_\delta} \delta_{m_\beta m_\delta} \delta_{\sigma_\beta \sigma_\delta} \delta_{\tau_\beta \tau_\delta}. \quad (26.12)$$

Применяя его к выражению в квадратных скобках в (26.4) и вспоминая, что суммирование в них производится по всем значениям

$$m_\beta = l_\beta, l_\beta - 1, \dots, -l_\beta, \quad \sigma_\beta = \pm \frac{1}{2}, \quad \tau_\beta = \pm \frac{1}{2},$$

находим

$$\begin{aligned} \sum_l \sum_{\beta\delta} [c_l^{\beta\alpha} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_l^\delta] = \\ = \sum_{\nu_j} \sum_{n_\beta n_\delta} \sum_{l_\beta} \left[c_{\nu_j}^{n_\beta\alpha} (l_\beta) \sum_{\lambda ST} \sum_{\substack{n'l \\ NL}} \left\{ \frac{(2\lambda+1)(2S+1)(2T+1)}{4(2l_\alpha+1)} \times \right. \right. \\ \times \langle n'l, NL, \lambda | n_\alpha l_\alpha, n_\beta l_\beta, \lambda \rangle [1 - (-1)^{l+S+T}] \langle n'l \| V_{ST}(1, 2) \| nl \rangle \times \\ \left. \left. \times \langle nl, NL, \lambda | n_\nu l_\nu, n_\delta l_\delta, \lambda \rangle \right\} c_{\nu_j}^{n_\delta} (l_\beta) \right] \delta_{l_\alpha l_\nu} \delta_{m_\alpha m_\nu} \delta_{\sigma_\alpha \sigma_\nu} \delta_{\tau_\alpha \tau_\nu}; \quad (26.13) \end{aligned}$$

при этом мы использовали соотношение

$$\begin{aligned} \sum_{m_\beta m_\delta \mu} (l_\alpha l_\beta m_\alpha m_\beta | \lambda \mu) (l_\nu l_\delta m_\nu m_\delta | \lambda \mu) \delta_{m_\beta m_\delta} \delta_{l_\beta l_\delta} = \\ = \frac{2\lambda+1}{[(2l_\alpha+1)(2l_\nu+1)]^{1/2}} \sum_{m_\beta \mu} (l_\beta \lambda m_\beta \mu | l_\alpha m_\alpha) (l_\beta \lambda m_\beta \mu | l_\nu m_\nu) = \\ = \frac{2\lambda+1}{2l_\alpha+1} \delta_{l_\alpha l_\nu} \delta_{m_\alpha m_\nu}, \quad (26.14) \end{aligned}$$

а также аналогичные формулы для спиновых и изоспиновых коэффициентов Клебша — Гордана.

Подставляя (26.13) в (26.4) и сокращая общий множитель $\delta_{l_i^\alpha}^{\delta_{m_i^\alpha}} \delta_{\sigma_i^\alpha}^{\delta_{\tau_i^\alpha}}$, получаем систему уравнений для коэффициентов $c_{\nu_i}^{n_i^\alpha} (l_\alpha)$:

$$\begin{aligned} \sum_{n_\nu} \langle n_\alpha l_\alpha \| T \| n_\nu l_\alpha \rangle c_{\nu_i}^{n_\nu} (l_\alpha) + \\ + \sum_{n_\nu} \sum_{\nu_j} \sum_{n_\beta n_\delta} \sum_{l_\beta} \left[c_{\nu_j}^{n_\beta\alpha} (l_\beta) \sum_{\lambda ST} \sum_{\substack{n'l \\ NL}} \left\{ \frac{(2\lambda+1)(2S+1)(2T+1)}{4(2l_\alpha+1)} \times \right. \right. \\ \times \langle n'l, NL, \lambda | n_\alpha l_\alpha, n_\beta l_\beta, \lambda \rangle [1 - (-1)^{l+S+T}] \times \\ \left. \left. \times \langle nl, NL, \lambda | n_\nu l_\nu, n_\delta l_\delta, \lambda \rangle \langle n'l \| V_{ST}(1, 2) \| nl \rangle \right\} \times \right. \\ \left. \times c_{\nu_j}^{n_\delta} (l_\beta) \right] c_{\nu_i}^{n_\nu} (l_\alpha) = \varepsilon_i c_{\nu_i}^{n_i^\alpha} (l_\alpha). \quad (26.15) \end{aligned}$$

Таким образом, мы показали, что в случае заполненных оболочек можно принять для коэффициентов c_i^a в уравнениях (26.4) форму (26.11); при этом указанные уравнения преобразуются к виду (26.15). Это означает существенное упрощение уравнений и сокращение объема работы по их решению, поскольку в (26.15) зависимость от индексов m , σ , τ полностью исчезла.

Мы получили уравнения Хартри — Фока в ядерном случае для одного из видов сил. Когда мы имеем дело с атомами, появляется несколько отличий, которые следует отметить. Во-первых, вместо члена кинетической энергии мы имеем теперь одночастичный гамильтониан (в единицах разд. 3)

$$H_0 = \frac{1}{2} \epsilon^2 p^2 - \frac{Ze\sqrt{2}}{r}. \quad (26.16)$$

Во-вторых, в характеристиках состояний отсутствует квантовое число изоспина τ ; поэтому следует опустить индекс T в потенциале $V_{ST}(1, 2)$, а также множитель $(-1)^{T-1}$, содержащийся в выражении $[1 - (-1)^{l+s+T}]$, и $1/2(2T + 1)$ в уравнениях (26.15) и в предшествующих формулах. Наконец, кулоновские силы являются силами вигнеровского типа, и поэтому $V_S(1, 2)$ не зависит от S . Следовательно, мы можем просуммировать по S соответствующие члены в (26.15) и получаем

$$\sum_S \frac{1}{2} (2S + 1) [1 + (-1)^{l+s}] = 2 - (-1)^l. \quad (26.17)$$

Таким образом, из (26.15) можно непосредственно вывести систему уравнений Хартри — Фока для атомного случая.

Если мы хотим использовать одночастичные состояния $|\alpha\rangle$, в которых произведено сложение орбитального и спинового моментов в полный угловой момент j , т. е.

$$|\alpha\rangle \equiv |n_a l_a j_a m_a\rangle |\tau_a\rangle, \quad (26.18)$$

то все рассмотрение может быть проведено аналогичным образом с тем различием, что теперь для приведения двухчастичных матричных элементов взаимодействия к интегралам одночастичного типа следует воспользоваться процедурой вычислений в jj -связи, развитой в разд. 13. В случае заполненных оболочек, когда заняты состояния со всеми значениями

$\tau_i = \pm 1/2$, $m_i = j_i$, $j_i = 1, \dots, -j_i$, мы снова убеждаемся, что уравнения Хартри — Фока не зависят от m , τ .

В следующем разделе мы применим полученные выше результаты для случая заполненных оболочек к некоторым атомным и ядерным задачам.

27. Применение к атому бериллия и ядру O^{16}

Атом бериллия представляет собой систему из четырех электронов с заполненными оболочками, которая в обычных спектроскопических обозначениях характеризуется конфигурацией [13] $(1s)^2(2s)^2^1S_0$. Это означает, что все одночастичные состояния в методе Хартри — Фока имеют нулевые орбитальные моменты и их проекции. При этом все же остаются две возможности $\sigma = \pm 1/2$ для проекции спина электронов; но так как необходимо разместить четыре электрона, мы должны отнести два из них к одному радиальному состоянию, обозначим его индексом $\nu = 1$, а два других — ко второму радиальному состоянию с $\nu = 2$. Следовательно, мы видим, что уравнения Хартри — Фока (26.15), переписанные применительно к атомному случаю, приобретают для атома бериллия, имеющего конфигурацию $l_\alpha = l_\beta = 0$, следующую форму:

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1} \langle n'_1 0 | \frac{1}{2} \epsilon^2 (\mathbf{p}^1)^2 - \frac{V\sqrt{2}}{|\mathbf{x}^1|} \epsilon | n_1 0 \rangle c_\nu^{n_1} + \\ & + \sum_{n_1} \sum_{\nu'} \sum_{n'_2 n_2} \left[c_{\nu'}^{n'_2} \sum_{\substack{n'_1 n'_1 N \\ \lambda l}} \left\{ (2\lambda + 1) \langle n'l, NL, 0 | n'_1 0, n'_2 0, 0 \rangle \times \right. \right. \\ & \times \left. \left. [2 - (-1)^l] \langle n'l | \frac{\epsilon}{|\mathbf{x}^1|} | nl \rangle \langle nl, NL, 0 | n_1 0, n_2 0, 0 \rangle \right\} c_{\nu'}^{n'_2} \right] c_\nu^{n_1} = \epsilon_\nu c_\nu^{n_1}. \end{aligned} \quad (27.1)$$

Здесь через \mathbf{p}^1 , \mathbf{x}^1 , $\dot{\mathbf{x}}^1 = 1/\sqrt{2}(\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2)$ мы обозначили безразмерные координаты и импульсы, определяемые соотношением (3.2). В (27.1) произведено следующее изменение обозначений по сравнению с (26.15):

$$n_\alpha = n'_1, \quad n_\beta = n'_2, \quad n_\gamma = n_1, \quad n_\delta = n_2, \quad \nu_j = \nu', \quad \nu_i = \nu, \quad (27.2)$$

где ν и ν' принимают только значения 1 и 2, и мы записываем $c_\nu^n (l=0) \equiv c_\nu^n$.

Число уравнений в системе (27.1) равно числу осциллирующих состояний, которые мы учитываем в разложении

$$\psi_v = \sum_n c_v^n |n00\rangle, \quad n = 0, 1, \dots, \frac{1}{2} \mathfrak{N}, \quad (27.3)$$

т. е. равно $1 + \mathfrak{N}/2$, где \mathfrak{N} — максимальное число квантов в этом разложении; из соображений четности для состояний с $l = 0$ величина \mathfrak{N} ограничена четными значениями.

Уравнения (27.1) можно решить методом последовательных приближений, как обсуждалось в разд. 25; это дает нам значения коэффициентов c_v^n в (27.3), которые в свою очередь позволяют вычислить средние значения энергии (25.6) для антисимметричных четырехэлектронных состояний.

Эта программа была осуществлена для атома Be Каллесом и Дубовым, которые взяли в качестве исходных следующие одночастичные состояния:

$$\psi_1 = |000\rangle, \quad \psi_2 = |100\rangle; \quad (27.4)$$

для этих состояний среднее значение энергии (25.6) имеет вид

$$\langle \Psi, H\Psi \rangle = 5\epsilon^2 - 18,2149\epsilon, \quad (27.5)$$

где, согласно (3.3), $\epsilon = [\hbar\omega / (me^4/2\hbar^2)]^{1/2}$. Минимизируя эту энергию по параметру ϵ , получаем

$$\epsilon = 1,82, \quad (27.6a)$$

$$\langle H \rangle = -16,59. \quad (27.6b)$$

Заметим, что энергии во всех атомных задачах, обсуждаемых здесь, даны в единицах

$$\frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,55 \text{ эВ}. \quad (27.7)$$

На следующем этапе Каллес и Дубовой рассматривают разложение

$$\psi_v = c_v^0 |000\rangle + c_v^1 |100\rangle + c_v^2 |200\rangle + c_v^3 |300\rangle \quad (27.8)$$

и показывают, что самосогласованное решение уравнений (27.1), в которых для ϵ взято значение (27.6a), достигается после четырех итераций. Они получили следующие значения

коэффициентов c_n^n и соответствующих энергий ϵ :

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= -6,42, & c_1^0 &= 0,886, & c_1^1 &= 0,359, & c_1^2 &= 0,219, \\ c_1^3 &= 0,194, & \epsilon_2 &= 0,10, & c_2^0 &= -0,316, & c_2^1 &= 0,833, \\ c_2^2 &= -0,345, & c_2^3 &= 0,295. \end{aligned} \quad (27.9)$$

С помощью этих значений c_n^n мы теперь получаем среднее значение энергии

$$\langle H \rangle = -21,37. \quad (27.10)$$

Экспериментальная энергия основного состояния атома Ве в единицах (27.7) равна $-28,74$. Таким образом, в приближении (27.8) мы получаем 74% энергии связи. Поскольку нетрудно составить программу для решения уравнений (27.1) при больших \mathcal{N} , а также существуют программы для вычисления трансформационных коэффициентов и величин $V(n'l', nl, \rho)$, планируется проведение более детальных расчетов для атома Ве.

Теперь обратимся к применению метода Хартри — Фока с осцилляторными функциями в области ядерной физики. Важный вклад в этом направлении сделан Девисом, Кригером и Баранжером (ДКБ) [43]; они провели обширные вычисления для многих ядер периодической системы. Мы обсудим здесь только их результаты для ядра с заполненными оболочками O^{16} .

Первое, что необходимо для решения уравнения (26.15) в ядерном случае, — это знание двухчастичного взаимодействия $V_{ST}(1, 2)$. Ясно, что невозможно рассмотреть взаимодействия с твердым кором, так как интеграл в матричном элементе $\langle n'l \| V_{ST}(1, 2) \| nl \rangle$ будет расходиться. Вместо этого в работе [43] предложено взаимодействие, зависящее от скорости, которое действует только в состояниях с нулевым орбитальным моментом относительного движения $l = 0$, а именно:

$$\langle n'l \| V_{ST}(1, 2) \| nl \rangle = \delta_{l0} \langle n'0 \| V_{ST}(1, 2) \| n0 \rangle. \quad (27.11)$$

Можно видеть, что из-за множителя $[1 - (-1)^{l+S+T}]$, входящего в (25.16), при $l = 0$ допустимы либо $S = 0, T = 1$, либо $S = 1, T = 0$. Потенциал взаимодействия, зависящий от скорости, который предложен Девисом, Кригером и Баранжером, имеет вид

$$V_{ST} = \frac{\hbar^2}{m} [U_S(r') + p'^2 W_S(r') + W_S(r') p'^2], \quad (27.12a)$$

где

$$U_S(r') = -A_S \exp(-\alpha_S^2 r'^2), \quad (27.126)$$

$$W_S(r') = B_S \exp(-\alpha_S^2 r'^2), \quad (27.12в)$$

$$T = \frac{1}{2} [1 + (-1)^S] \quad (27.12г)$$

и (как в разд. 5) r' и p' — координаты и импульсы в обычных единицах.

В готовящейся к печати работе Каллеса и Дубового приняты следующие значения параметров A_S , B_S , α_S :

s	A_S (Ферми ⁻²)	B_S	α_S (Ферми ⁻¹)
0	0,835	0.60	0,50
1	2,56	0.50	0,70

(27.12д)

Потенциал (27.12), действующий только в состояниях с $l = 0$, был выбран главным образом потому, что он хорошо описывает энергию связи бесконечной ядерной материи. С данными по нуклон-нуклонному рассеянию он согласуется довольно плохо.

С учетом (27.11) в обозначениях (27.2) уравнения Хартри — Фока (26.15) для случая заполненных оболочек приобретают форму [43]:

$$\sum_{n_1} \langle n_1' l_1' | \frac{1}{2m} p'^2 | n_1 l_1 \rangle c_v^{n_1}(l_1) +$$

$$+ \sum_{n_1} \sum_{v'} \sum_{n_2' n_2} \sum_{l_2} \left\{ c_v^{n_2'}(l_2) \sum_{\substack{n_1' n_1 \\ l_1' l_1}} \sum_{\lambda} \left(\frac{3(2\lambda + 1)}{2(2l_1 + 1)} \right) \times \right.$$

$$\times \langle n_1' 0, N\lambda, \lambda | n_1' l_1', n_2' l_2', \lambda \rangle [\langle n_1' 0 | V_{01} | n_1 0 \rangle + \langle n_1' 0 | V_{10} | n_1 0 \rangle] \times$$

$$\times \langle n_1 0, N\lambda, \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda \rangle \left. \right\} c_v^{n_1}(l_1) = \epsilon_v(l_1) c_v^{n_1}(l_1); \quad (27.13)$$

$$\langle n_1' l_1' | \frac{1}{2m} p'^2 | n_1 l_1 \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \left[\left(n_1 \left(n_1 + l_1 + \frac{1}{2} \right) \right)^{1/2} \delta_{n_1' n_1 + 1} + \right.$$

$$\left. + \left(2n_1 + l_1 + \frac{3}{2} \right) \delta_{n_1' n_1} + \left((n_1 + 1) \left(n_1 + l_1 + \frac{3}{2} \right) \right)^{1/2} \delta_{n_1' n_1 - 1} \right], \quad (27.14)$$

Матричный элемент V_{ST} содержит, кроме члена $\langle n'0 \| U \| n0 \rangle$, также члены типа

$$\langle n'0 \| p'^2 W(r') \| n0 \rangle = \sum_{n''} \langle n'0 \| p'^2 \| n''0 \rangle \langle n''0 \| W(r') \| n0 \rangle, \quad (27.15)$$

где первый множитель, стоящий под знаком суммы, определяется соотношением (27.14), в то время как второй множитель вычисляется обычным методом, обсуждавшимся в разд. 2.

Вычисления Девиса, Кригера и Баранжера для ядра O^{16} были выполнены при значении параметра

$$\frac{\hbar}{m\omega} = 2,1 \text{ Ферми}^2. \quad (27.16)$$

В этом ядре мы имеем четыре нуклона в состоянии с $l_1 = 0$, и двенадцать нуклонов в состояниях с $l_1 = 1$. Таким образом, имеются две отдельные системы (27.13) для $l_1 = 0$ и $l_1 = 1$, хотя индекс суммирования l_2 в квадратных скобках должен пробегать оба эти значения. Порядок системы линейных уравнений d совпадает с количеством учитываемых нами значений квантового числа n . Так, если мы берем $n = 0, 1, 2$, то $d = 3$, при $n = 0, 1, 2, 3$ $d = 4$ и т. д. Приближение улучшается с увеличением d . Собственные значения $\epsilon_\nu(l)$ определяют уровни энергии в эквивалентном одночастичном потенциале. В частности, нас интересуют уровни с $\nu = 1$ и $l = 0, 1$, т. е. энергии состояний $1s$ и $1p$. Решив самосогласованным образом уравнения (27.13), мы далее находим коэффициенты $c_1^n(l)$, отвечающие собственным значениям $\epsilon_1(l)$. С помощью этих коэффициентов можно вычислить среднее значение энергии $\langle H \rangle$, определяемое выражением (25.6).

В табл. 4 приведены результаты Девиса, Кригера и Баранжера для $\epsilon_1(l)$, $c_1^n(l)$ и $\langle H \rangle$, полученные решением систем уравнений 3, 4, 5, 6, 7 и 8-го порядков.

Рассмотренные здесь примеры иллюстрируют применение осцилляторных функций в расчетах по методу Хартри — Фока для атомных и ядерных задач. Для более детального ознакомления с этими приложениями мы отсылаем читателя к оригинальным работам [43, 44].

Таблица 4

(Средние значения полной энергии $\langle H \rangle$ и одночастичные энергии $\epsilon_1(t)$ (в МэВ)

Приведены также коэффициенты разложения $c_1^d(t)$ одночастичных состояний по функциям гармонического осциллятора. Все эти величины являются функциями порядка d той системы уравнений, из которой они определяются.

d	$\langle H \rangle$	$\epsilon_1(0)$	$\epsilon_1(1)$	Состояние $1s$									
				$c_1^0(0)$	$c_1^1(0)$	$c_1^2(0)$	$c_1^3(0)$	$c_1^4(0)$	$c_1^5(0)$	$c_1^6(0)$	$c_1^7(0)$		
3	-78,289	-40,592	-16,173	0,98425	0,17255	0,03836							
4	-78,298	-40,610	-16,173	0,98414	0,17329	0,03752	0,00552						
5	-78,301	-40,611	-16,171	0,98413	0,17335	0,03763	0,00535	0,00083					
6	-78,303	-40,610	-16,170	0,98413	0,17334	0,03762	0,00537	0,00072	0,00035				
7	-78,303	-40,609	-16,170	0,98413	0,17333	0,03762	0,00536	0,00077	0,00018	0,00051			
8	-78,303	-40,609	-16,170	0,98413	0,17333	0,03762	0,00536	0,00075	0,00023	0,00033	0,00048		

Состояние $1p$							
$c_1^0(1)$	$c_1^1(1)$	$c_1^2(1)$	$c_1^3(1)$	$c_1^4(1)$	$c_1^5(1)$	$c_1^6(1)$	$c_1^7(1)$
0,99363	0,09967	0,05257					
0,99361	0,09963	0,05303	-0,00094				
0,99360	0,09950	0,05342	-0,00177	0,00195			
0,99359	0,09944	0,05355	-0,00209	0,00265	-0,00145		
0,99359	0,09943	0,05357	-0,00214	0,00277	-0,00169	0,00047	
0,99359	0,09943	0,05357	-0,00214	0,00277	-0,00169	0,00046	0,00002

Заключение

В предыдущих главах мы пытались показать богатство теоретического аппарата многочастичных состояний гармонического осциллятора и широкий диапазон их применения в атомной, молекулярной, ядерной физике и даже в физике кварков. Как отмечалось во введении, настоящая книга не содержит исчерпывающего изложения ни теоретических концепций, ни физических приложений.

Более сложные представления о состояниях гармонического осциллятора базируются на понимании того факта, что группой симметрии одночастичного потенциала гармонического осциллятора [30] является унитарная группа $\mathcal{U}(3)$, а не группа трехмерных вращений $R(3)$, являющаяся общей группой симметрии для всех задач с центральным потенциалом. Если перейти к состояниям n частиц, то группой симметрии становится $\mathbf{U}(3n)$ — группа унитарных преобразований в пространстве размерности $3n$, а цепочка представляющих физический интерес подгрупп группы $\mathbf{U}(3n)$ включает в себя прямое произведение групп $\mathcal{U}(3) \otimes U(n)$, где $U(n)$ — группа унитарных преобразований в n -мерном пространстве, связанном с номерами частиц.

Многие проблемы осцилляторных состояний n частиц можно рассмотреть, опираясь на подходящую цепочку подгрупп группы $U(n)$. Одной из таких цепочек является $U(n) \supset \supset K(n) \supset S(n)$, где $S(n)$ — группа перестановок n частиц, а $K(n)$ — полупрямое произведение группы диагональных унитарных матриц $A(n)$ и группы $S(n)$ [30]. Эта цепочка групп характеризует оболочечную структуру системы n частиц в потенциале гармонического осциллятора и дает новый способ факторизации некоторых генеалогических коэффициентов [45], который оказывается полезным во многих расчетах структуры ядра.

Эти цепочки групп полезны также для рассмотрения ассоциативных эффектов в системе n частиц, взаимодействующих посредством осцилляторного потенциала [30]. Можно дать общее определение ассоциирования, оценить на основе перестановочной симметрии верхний предел степени ассоциирования, а также рассмотреть взаимодействие двух ассоциаций, влияние эффектов ассоциирования на энергии связи легких ядер и т. д. [30].

Состояния гармонического осциллятора используются также при описании многонуклонных систем в рамках второго квантования. Это описание можно сформулировать как теоретико-групповую задачу, в которой фигурирует цепочка групп $U(4N) \supset \mathcal{U}(4) \otimes U(N)$. Здесь N и 4 означают соответственно число одночастичных пространственных и число спин-изоспиновых состояний, так что $4N$ — это полное число одночастичных состояний. Если набор пространственных состояний включает в себя целиком состояния одной или нескольких осцилляторных оболочек, мы имеем далее цепочку групп $U(N) \supset \mathcal{U}(3)$. В состояниях, принадлежащих к неприводимым представлениям групп из этих цепочек, квадруполь-квадрупольные силы, ответственные за дальнедействующие корреляции между нуклонами, диагональны. Можно рассмотреть влияние этих сил наряду с другими взаимодействиями, такими, как силы спаривания, спин-орбитальная связь, которым соответствуют другие цепочки групп. Эти вопросы для частиц в осцилляторной оболочке $2s - 1d$ обстоятельно обсуждались в работах [46, 47], частично-дырочные конфигурации, включающие в себя состояния соседних оболочек, рассмотрены в работе [48].

Другой областью применения состояний гармонического осциллятора и, в частности, трансформационных коэффициентов, описанных в разд. 10 и 15, является решение уравнений Больцмана [22—24].

Здесь совершенно не упоминались многочисленные современные приложения теории классического гармонического осциллятора, хотя литература по этому вопросу весьма обширна.

В заключение мы можем позаимствовать мысль, которая содержится в заглавии книги Клейна «Элементарная математика с неэлементарной точки зрения» [49], и сказать, что изучение элементарных физических задач, таких, как гармонический осциллятор, с неэлементарной точки зрения представляет интересный и плодотворный предмет исследования.

ЛИТЕРАТУРА¹⁾

1. Brody T. A., Jacob G., Moshinsky M., Nucl. Phys., **17**, 16 (1960), p. 62.
2. Rose M. E., Elementary Theory of Angular Momentum, New York, 1957.
3. Talmi I., Helv. Phys. Acta, **25**, 185 (1952).
4. Brody T. A., Moshinsky M., Tables of Transformation Brackets, New York, 1967.
5. Moshinsky M., Brody T. A., Rev. Mex. Fis., **9**, 181 (1960).
6. Moshinsky M., Novaro O., Journ. Chem. Phys., **48**, 4162 (1968).
7. Veh W. W., Rev. Mex. Fis., **18**, 11 (1969).
8. Dubovoy M., Flores J., Rev. Mex. Fis., **17**, 289 (1968).
9. Bender C. F., Floating Potential Curves, M. Sc. Thesis University of the Pacific, Stockton, Calif., 1964.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
11. Morse P. M., Feshbach H., Methods of Theoretical Physics, New York, 1953 (см. перевод: Ф. М. Морс, Г. Фешбах, Методы теоретической физики, ИЛ, 1960).
12. Ripka G., «The Hartree-Fock Theory of Deformed Light Nuclei» in Advances in Nuclear Physics, vol. I, ed. by M. Baranger and E. Vogt, New York, 1968.
13. Condon E. U., Shortley G. H., The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, 1953 (см. перевод 1-го изд.: Е. Кондон, Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 1949).
14. Racah G., Phys. Rev., **62**, 438 (1942).
15. Jahn H. A., Hope J., Phys. Rev., **93**, 318 (1954).
16. Baranger M., Davies K. T. R., Nucl. Phys., **79**, 403 (1966).
17. Dubovoy M., Tesis Profesional, Universidad de México, 1968, p. 63.
18. Pauling L., Wilson E. B., Introduction to Quantum Mechanics, New York, 1935.
19. Mavromatis H. A., Sanderson E. A., Singh B., Tables of Coefficients for the Expansion of Two-Particle jj -Coupled Matrix Elements of the Nucleon-Nucleon Potential (V) in Terms of the Relative Matrix Elements of V , preprint of the School of Mathematical and Physical Sciences, University of Sussex, Falmer, Brighton, Great Britain.
20. Elliott J. P., Flowers B. H., Proc. Roy. Soc. London, **A229**, 536 (1955).
21. Gal A., Ann. Phys. (N. Y.), **49**, 341 (1968).
22. Kumar K., Aust. Journ. Phys., **20**, 205 (1967).
23. Kumar K., Ann. Phys., **37**, 113 (1966).
24. Kumar K., Journ. Math. Phys., **7**, 671 (1966).
25. Kramer P., Moshinsky M., Nucl. Phys., **82**, 241 (1966).
26. Kramer P., Moshinsky M., Nucl. Phys., **107A**, 481 (1968).
27. Kramer P., Moshinsky M., Phys. Letters, **23**, 574 (1966).
28. E. P. Wigner, Group Theory, New York, 1959 (см. перевод: Е. Вигнер, Теория групп, ИЛ, 1961).
29. Hamermesh M., Group Theory, Reading, Mass., 1962 (см. перевод: М. Хамермеш, Теория групп и ее применение к физическим проблемам, изд-во «Мир», 1966).

¹⁾ Литература, отмеченная звездочкой, добавлена переводчиком.

30. *Kramer P., Moshinsky M.*, «Group Theory of Harmonic Oscillators and Nuclear Structure» in «Group Theory and Applications», ed. by E. M. LoebI, New York, 1968.
31. *Racah G.*, Phys. Rev., **63**, 367 (1943).
32. *Moshinsky M.*, Journ. Math. Phys., **7**, 691 (1966).
33. *de Forest T., Jr., Walecka J. D.*, Advances in Physics (Philosophical Magazine Supplement), **15**, 1 (1966).
34. *Janssens T., Hofstadter R., Hughes E. B., Yearian M. R.*, Phys. Rev., **142**, 922 (1966).
35. *Jahn H. A.*, Proc. Roy. Soc., **A205**, 192 (1951).
36. *Dalitz R. H.*, in Proceedings of the Oxford International Conference in Elementary Particles, 1965 (Rutherford High Energy Laboratory, Harwell, England, 1966).
37. *Brody T. A., Moshinsky M., Renero I.*, Journ. Math. Phys., **6**, 1540 (1965).
38. *Jahn H. A.*, Proc. Roy. Soc. London, **A201**, 516 (1950).
39. *Aguilera Navarro V. C., Moshinsky M., Yeh W. W.*, Rev. Mex. Fis., **17**, 241 (1968).
40. *Aguilera Navarro V. C., Moshinsky M., Yeh W. W.*, Ann. Phys. (N. Y.), **51**, 312 (1969).
41. *Frosh R. F., McCarthy J. S., Rand R. E., Yerian M. R.*, Phys. Rev., **160**, 874 (1967).
42. *Moshinsky M.*, Am. Journ. Phys., **36**, 52 (1968).
43. *Davies K. T. R., Krieger S. J., Baranger M.*, Nucl. Phys., **84**, 545 (1966).
44. *Baranger M.*, «Recent Progress in the Understanding of Finite Nuclei from the Two-Nucleon Interaction», Varenna Lectures, 1967.
45. *Kramer P., Moshinsky M.*, Nucl. Phys. (в печати).
46. *Elliott J. P.*, Proc. Roy. Soc. London, **A245**, 128 (1958).
47. *Moshinsky M.*, Group Theory and the Many-Body Problem, New York, 1968.
48. *Flores J., Moshinsky M.*, Nucl. Phys., **A93**, 81 (1967).
49. *Klein F.*, Elementary Mathematics from an Advanced Standpoint, New York, 1945.
- 50*. *А. Эдмондс*, Угловые моменты в квантовой механике, в сб. «Деформация атомных ядер», ИЛ, 1958.
- 51*. *А. П. Юцис, И. Б. Левинсон, В. В. Ванагас*, Математический аппарат теории момента количества движения, Вильнюс, 1960.
- 52*. *А. П. Юцис, А. А. Бандзайтис*, Теория момента количества движения в квантовой механике, Вильнюс, 1965.
- 53*. *И. С. Градштейн, И. М. Рыжик*, Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Физматгиз, 1962.
- 54*. *Кампе де Ферье Ж., Кемпбелл Р., Петьо Г., Фогель Т.*, Функции математической физики, Физматгиз, 1963.
- 55*. *Бейтман Г., Эрдейи А.*, Высшие трансцендентные функции, том I, изд-во «Наука», 1966.
- 56*. *Смирнов Ю. Ф.*, в сб. «Ядерные реакции при малых и средних энергиях», Изд-во АН СССР, 1962, стр. 627 [см. также Nucl. Phys., **27**, 177 (1961)].
- 57*. *Vakri M. M.*, Nucl. Phys., **A96**, 115 (1967).
- 58*. *Talman J. D.*, Nucl. Phys., **A141**, 273 (1970).
- 59*. *Harris R. E.*, Rev. Mod. Phys., **35**, 558 (1963).
- 60*. *Boys S. F.*, Proc. Roy. Soc., **A200**, 542 (1950), **A258**, 402 (1960).

- 61*. «Строение атомного ядра», ИЛ, 1959, стр. 439—463.
- 62*. *Неудачин В. Г., Смирнов Ю. Ф.*, Нуклонные ассоциации в легких ядрах, изд-во «Наука», 1969.
- 63*. *Kretzschmar M.*, Zs. f. Phys., 157, 558 (1959); 248 (1960).
- 64*. *Ванагас В. В.*, Алгебраические методы в теории ядра, Вильнюс, 1971.
- 65*. *Бейман Б. Ф.*, Лекции по применению теории групп в ядерной спектроскопии, Физматгиз, 1961.
- 66*. *Румер И. Б., Фет А. И.*, Теория унитарной симметрии, изд-во «Наука», 1970.
- 67*. «Электромагнитные взаимодействия и структура элементарных частиц». Сборник переводов под ред. А. М. Балдина, изд-во «Мир», 1969.
- 68*. *Каплан И. Г.*, Симметрия многоэлектронных систем, изд-во «Наука», 1969.
- 69*. *Желобенко Д. П.*, Компактные группы Ли и их представления, изд-во «Наука», 1970.
- 70*. *Aguilera Navarro V. C., Kramer P., Moshinsky M.*, Ann. Phys. (N. Y.) (в печати).

Приложение А. РАСЧЕТЫ СВОЙСТВ ТРИТОНА С РЕАЛИСТИЧЕСКИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ОСЦИЛЛЯТОРНОГО БАЗИСА

В разд. 17 были рассмотрены трансляционно-инвариантные осцилляторные волновые функции трех частиц, с помощью которых можно вычислить матричные элементы любого гамильтониана, как обсуждалось в разд. 16.

В данном приложении мы хотим обсудить применение этих волновых функций и матричных элементов к расчету энергии связи основного состояния тритона с реалистическим нуклон-нуклонным взаимодействием. Эти расчеты были выполнены Джексоном, Ланде и Зауером [1], и последующее представляет собой только слегка переработанное изложение материала, предоставленного нам профессором Джексоном. Автор выражает ему свою искреннюю благодарность за возможность ознакомиться с этими результатами частично до их опубликования.

В качестве нуклон-нуклонного взаимодействия Джексон и сотр. [2] использовали потенциал Рейда [3] с мягким кором. Этот потенциал выбирается отдельно для каждой парциальной волны в виде суммы потенциалов Юкавы. Поведение этого потенциала на больших расстояниях в канале, соответствующем каждой парциальной волне, совпадает с асимптотикой однопионного обменного потенциала, в то время как компоненты с более короткими радиусами действия подобраны таким образом, чтобы получить количественное согласие с экспериментально наблюдаемыми сдвигами фаз. Например, в канале 1S_0 потенциал имеет форму

$$V_{1S_0} = -10,463 \frac{e^{-\mu_\pi r}}{\mu_\pi r} - 1650,6 \frac{e^{-4\mu_\pi r}}{\mu_\pi r} + 6484,2 \frac{e^{-7\mu_\pi r}}{\mu_\pi r}, \quad (\text{A.1})$$

где $\mu_\pi = 0,7$ Ферми $^{-1}$. Ввиду большой амплитуды короткодействующих сил отталкивания ясно, что любой расчет свойств тритона с использованием осцилляторного базиса, претендующий на точный учет короткодействующих двухчастичных корреляций, требует включения состояний с большим числом осцилляторных квантов.

До расчета тритона Джексон и др. [1] выполнили вычисления свойств дейтрона с потенциалом Рейда, использующие

осцилляторные состояния с числом квантов до 88 включительно и

$$b = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} = 0,79 \text{ Ферми}, \quad (\text{A.2})$$

где m — масса протона, ω — частота осциллятора. «Радиус» осциллятора b рассматривался как вариационный параметр, и указанное выше значение соответствует минимуму энергии дейтрона.

Матричные элементы кинетической энергии в этом случае задаются аналитически формулой (3.10), а для расчета потенциальной энергии с силами Рейда можно использовать общий метод, описанный в разд. 2. Однако в случае больших квантовых чисел удобно и целесообразно с точки зрения вычислений использовать соотношение между радиальными волновыми функциями гармонического осциллятора и функциями Бесселя [4]. В этом случае матричные элементы для потенциала Рейда сводятся к функциям Лежандра второго рода.

Сравнение результатов таких вычислений для дейтрона с расчетом Рейда проведено в табл. А. 1; согласие является обнадеживающим и стимулирует выполнение аналогичных расчетов для тритона.

Таблица А.1

Сравнение свойств дейтрона,
полученных в осцилляторном базисе,
с результатами Рейда

	Расчет в осцилляторном базисе	Расчет Рейда
B , МэВ	2,207	2,225
Q , Ферми ²	0,269	0,280
Вес D -состояния	6,6%	6,5%

Ввиду огромного количества трехчастичных состояний с числом квантов до 88 проведение полностью аналогичного расчета для тритона становится чрезвычайно трудным. Поэтому был сделан ряд упрощений [1]. В расчет были включены только состояния типа $\{3\}S$, $\{21\}D$ и $\{21\}S$. (Вариационные вычисления подтверждают, что состояния с другими свойствами симметрии, которыми пренебрегали в расчете,

слабо влияют на энергию связи тритона.) Потенциал Рейда не определен для парциальных волн с угловым моментом, большим, чем $l = 3$, поэтому всеми высшими парциальными волнами в двухчастичном взаимодействии пренебрегали.

Матричные элементы, которые нам необходимо вычислить, имеют вид (16.11), где состояние $|N\rangle$ определяется формулой (17.34). Как указывалось в разд. 16, нахождение матричных элементов кинетической энергии фактически сводится к вычислению элементов вида

$$\langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \Lambda M | \hat{r}_1^2 | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M \rangle, \quad (\text{A.3})$$

где бра- и кет-векторы представляют собой полиномы типа (17.31), действующие на функцию основного состояния. Из определения (8.8) операторов рождения и уничтожения квантов и соотношения (17.10) видно, что

$$\hat{r}_1^2 = \frac{1}{2} (\eta^1 + \xi^1)^2 = \frac{1}{4} [-(\eta^1)^2 - (\eta^2)^2 + 2\eta^1 \cdot \eta^2 + 2\eta^1 \cdot \xi^1 - 2\eta^1 \cdot \xi^2 - 2\eta^2 \cdot \xi^1 + 2\eta^2 \cdot \xi^2 + 3 - (\xi^1)^2 - (\xi^2)^2 + 2\xi^1 \cdot \xi^2]. \quad (\text{A.4})$$

Поэтому матричный элемент (A.3) можно вычислить с помощью процедуры, подобной той, которая была изложена при обсуждении соотношения (10.32). Таким образом, кинетическая энергия может быть получена в явном аналитическом виде, который не содержит трансформационных коэффициентов.

Для вычисления потенциальной энергии мы должны разложить бра- и кет-векторы в (A.3) по состояниям $|\hat{n}_1 \hat{l}_1, \hat{n}_2 \hat{l}_2, \Lambda M\rangle$, зависящим от двух координат Якоби

$$\hat{x}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (x^1 - x^2), \quad \hat{x}^2 = \frac{1}{\sqrt{6}} (x^1 + x^2 - 2x^3). \quad (\text{A.5})$$

Это приводит только к появлению трансформационных коэффициентов с фазовым множителем, как показано в (17.31). Таким образом, мы можем свести матричный элемент потенциальной энергии к элементам одночастичного типа, рассмотренным в разд. 2.

С помощью этой процедуры вычисления матричных элементов гамильтониана тритона были выполнены вариационные расчеты [1] с потенциалом Рейда, включающие в себя состояния типа $\{3\}S$ с числом квантов до 34 (всего 237 состояний), состояния типа $\{21\}D$ с числом квантов не более 20

(всего 220 состояний) и состояния $\{21\}S$ с числом квантов, не превышающим 12 (т. е. 27 состояний). Этот вариант представляет собой наилучшее распределение состояний с точки зрения условий, накладываемых объемом памяти вычислительной машины СДС-6600 Брукхейвенской национальной лаборатории.

«Радиус» осциллятора снова рассматривался как вариационный параметр и было использовано оптимальное значение $b = 0,85$ Ферми. Результаты этого расчета представлены в таблице А.2. Заметим, что вычисленная энергия связи

Таблица А.2

Результаты расчета свойств
тритона

B_T , МэВ	6,30
Состояние $\{21\} D$	8,9%
Состояние $\{21\} S$	0,52%
$\langle V \rangle$, МэВ	-56,11
$V\langle r^2 \rangle$, Ферми	2,02

6,30 МэВ сравнима с результатами Хамберстона и Хеннела [5] ($B_T = 5,8 \pm 0,5$ МэВ) и Делвеса и др. [6] ($B_T = 6,5 \pm \pm 1,0$ МэВ) для потенциала Хамада — Джонстона, полученными с помощью обычного метода, базирующегося на вариационном принципе Релея — Ритца. Результат Джексона и др. [1, 2] согласуется также с результатом, полученным Тионом ¹⁾ ($B_T = 6,5 \pm 0,25$ МэВ) для потенциала Рейда путем решения уравнений Фадеева.

Для упрощения численных расчетов многие вычисления ограничивались учетом двухчастичного взаимодействия только в состояниях 1S_0 и $^3S_1 - ^3D_1$. Введение аналогичных ограничений в данном расчете [1, 2] подтверждает вывод о том, что вклад всех остальных парциальных волн в энергию связи тритона составляет примерно 0,25 МэВ. Результаты Джексона и др. [1, 2] дают верхнюю границу энергии основного состояния тритона. Нижняя граница, в особенности для таких сильных потенциалов, как потенциал Рейда,

¹⁾ Malfliet R. A., Tjon J. A., Ann. Phys. (N. Y.), 61, 425 (1970); Tjon J. A., Gibson B. F., O'Connell J. S., Phys. Rev. Letters, 25, 570 (1970).

оказывается значительно менее информативной [6]. Джексоном и др. [1, 2] были исследованы разнообразные процедуры эмпирической экстраполяции и получено, что в пределе бесконечно большого числа учитываемых квантов их расчет привел бы к $V_T = 6,50 \pm 0,08$ МэВ. Этот вывод согласуется с экстраполяцией результатов работ [5] и [6].

Разница между расчетным значением и действительной энергией связи тритона 8,48 МэВ может быть обусловлена собственно трехчастичными силами и возможной неадекватностью двухчастичной T -матрицы, полученной из потенциала Рейда, вне энергетической поверхности. Как указано Джексоном и Тионом [7], нельзя ожидать, что учет релятивистских эффектов изменит это расхождение более чем на 0,25 МэВ.

Трехчастичные расчеты, выполненные на осцилляторном базисе, могут быть столь же точными, как и лучшие вариационные расчеты, даже в случае реалистических потенциалов с отталкиванием. Они обладают значительным преимуществом идейной простоты и, являясь по своей природе полностью систематическими, не требуют специальных забот о выборе пробной волновой функции.

Важно отметить, что расчеты Джексона и др. [1, 2] дают нам волновую функцию основного состояния тритона, и их программа после небольших модификаций позволяет получить также функцию основного состояния ядра He^3 . Поэтому мы можем использовать процедуру, описанную в разд. 19 и 20, чтобы вычислить формфактор ядра He^3 и сравнить его с экспериментальными данными, недавно полученными Стенфордской группой [8].

Приложение Б. РАСЧЕТЫ СВОЙСТВ α -ЧАСТИЦЫ
С РЕАЛИСТИЧЕСКИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ
ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ОСЦИЛЛЯТОРНОГО БАЗИСА

В гл. IV мы рассмотрели трансляционно-инвариантные осцилляторные волновые функции четырех частиц, с помощью которых можно вычислить матричные элементы любого гамильтониана, как обсуждалось в разд. 16. В частности, соотношение (21.18) позволяет выразить состояния, симметричные в конфигурационном пространстве, т. е. характеризуемые схемой Юнга {4}, с положительной четностью и нулевым орбитальным моментом, через осцилляторные волновые функции, зависящие от симметричных относительных координат (21.5). Вероятно, именно эти состояния (в сочетании со спин-изоспиновой частью, которая в этом случае антисимметрична) являются наиболее важными в вариационных расчетах энергии связи α -частицы и волновой функции ее основного состояния.

В недавней работе Агилера-Наварро и Мошинского [9] эти состояния с числом квантов, не превышающим 10 (40 состояний положительной четности, с $L = 0$ и схемой Юнга {4}),

Таблица Б.1

Параметры потенциала Танга

$$V(r_{12}) = \frac{1}{2} [V_t(r_{12}) + V_s(r_{12})] =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{s=1}^6 A_s \exp \left[- \left(\frac{r_{12}}{\beta_s} \right)^2 \right],$$

A_s в МэВ, β_s в Ферми

$$r_{12} = |x_1' - x_2'| = \left(\frac{2\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \tilde{r}_1$$

Синглет			Триплет		
A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6
β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6
880	-67,1	-21	1000	-143,4	-43
0,4385	1,27	1,6222	0,4303	1,1043	1,291

были использованы для расчета свойств α -частицы с разумным реалистическим нуклон-нуклонным взаимодействием. Этим взаимодействием служил предложенный Тангом [10] центральный потенциал гауссовского типа с мягким кором, параметры которого приведены в табл. Б.1.

Из (16.11), (16.12) и (21.18) видно, что вариационные расчеты требуют вычисления матричных элементов вида

$$(n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, n'_3 l'_3 | U(\dot{r}_1) | n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3), \quad (\text{Б.1})$$

где бра- и кет-векторы выражаются посредством соотношения (21.7) через осцилляторные функции от симметричных координат. Из (16.12) и того факта, что эти состояния характеризуются схемой {4}, можно сделать вывод, что

$$U(\dot{r}_1) = \frac{1}{2} [V_t(\dot{r}_1) + V_s(\dot{r}_1)] - \frac{1}{4} \hbar \omega \dot{r}_1^2, \quad (\text{Б.2})$$

где \dot{r}_1 — относительное расстояние между двумя частицами

$$\dot{r}_1 = |\dot{\mathbf{x}}^1|, \quad \dot{\mathbf{x}}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2), \quad (\text{Б.3})$$

V_t, V_s — триплетный и синглетный потенциалы Танга.

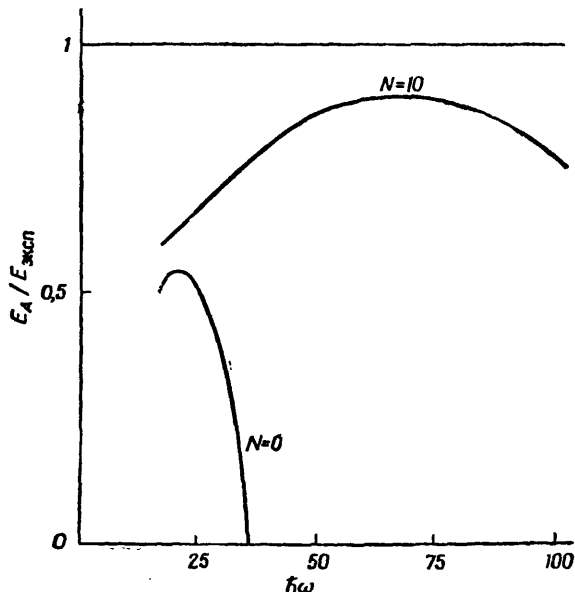
Для вычисления матричного элемента (Б.1) необходимо преобразовать бра- и кет-векторы таким образом, чтобы координата \mathbf{x}^1 стала явно фигурировать в них. Это можно легко сделать, если ввести вспомогательные переменные

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{x}}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\ddot{\mathbf{x}}^1 - \ddot{\mathbf{x}}^2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2) = \dot{\mathbf{x}}^1, \\ \bar{\mathbf{x}}^2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\ddot{\mathbf{x}}^1 + \ddot{\mathbf{x}}^2) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{x}^3 - \mathbf{x}^4), \\ \bar{\mathbf{x}}^3 &= \ddot{\mathbf{x}}^3 = \frac{1}{2} (\mathbf{x}^3 + \mathbf{x}^4 - \mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2). \end{aligned} \quad (\text{Б.4})$$

Очевидно, что переход в бра- и кет-векторах от симметричных координат \mathbf{x}^s , $s = 1, 2, 3$, к вспомогательным координатам $\bar{\mathbf{x}}^s$ выполняется с помощью только стандартных трансформационных коэффициентов. Таким образом, вопрос о вычислении матричных элементов (Б.1) можно считать решенным.

После того как матрица гамильтониана по нашим состояниям с числом квантов, не превышающим 10, найдена, ее

диагонализация дает нам энергию связи. Частота осциллятора $\hbar\omega$ рассматривается в этом расчете как параметр. На фиг. Б.1 приведено отношение вычисленной энергии связи α -частицы к ее экспериментальному значению как функция



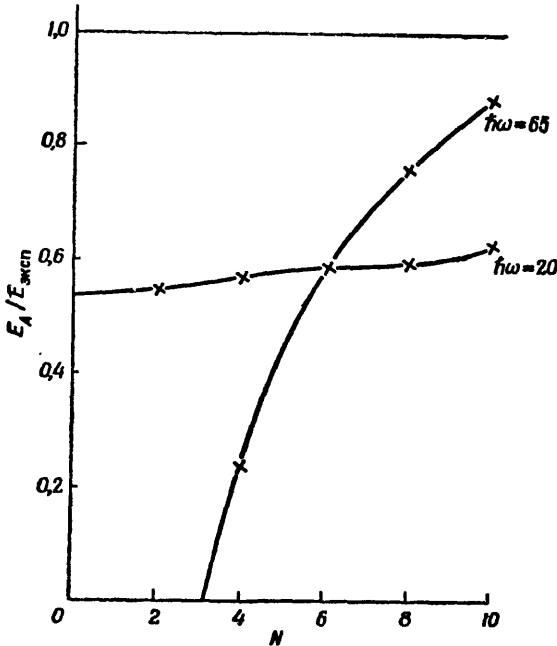
Фиг. Б.1. Отношение расчетной энергии связи α -частицы (E_A) к экспериментальной ($E_{\text{эксп}}$) как функция параметра $\hbar\omega$. Представлены кривые для $N=0$ и $N=10$.

параметра $\hbar\omega$. Кривая с индексом $N=0$ показывает результат расчета для одной гауссовской волновой функции. Кривая с индексом $N=10$ соответствует низшему собственному значению матрицы десятиквантового приближения порядка 40×40 .

Для потенциала Танга наилучшее значение при $N=0$ получается с $\hbar\omega \approx 20$ МэВ. С другой стороны, при $N=10$ лучший результат соответствует $\hbar\omega \sim 65$ МэВ. На фиг. Б.2 показано, как происходит улучшение расчетной энергии связи при увеличении числа учитываемых квантов при оптимальных значениях $\hbar\omega$ для $N=0$ и 10. Как и ожидалось, значение энергии связи при $\hbar\omega = 20$ МэВ улучшается очень медленно, в то время как при $\hbar\omega = 65$ МэВ (в этом случае при $N=0$

система оказывается вообще не связанной) оно достигает 90% экспериментальной величины для $N = 10$.

Одновременно с энергией связи мы, естественно, получили волновую функцию основного состояния в виде линейной



Фиг. Б.2. Отношение расчетной энергии связи α -частицы (E_A) к экспериментальной ($E_{\text{эксп}}$) как функция максимального числа квантов N , учитываемых в пробной волновой функции.

Значения $\hbar\omega = 20$ и 65 МэВ дают оптимальные значения энергии связи при числе учитываемых квантов $N = 0$ и 10 соответственно. Только точки на кривых, помеченные крестиком, имеют реальный смысл.

комбинации указанных выше осцилляторных функций. Теперь, используя эту волновую функцию, мы обсудим корреляционные эффекты в α -частице.

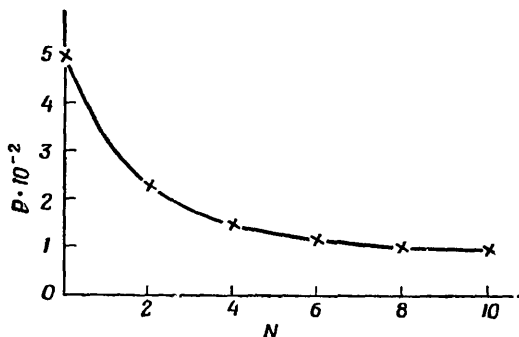
Для этой цели рассмотрим среднее значение оператора

$$P = \frac{2}{A(A-1)} \sum_{s < t}^A \exp \left[-\frac{(x^s - x^t)^2}{\beta^2} \right], \quad A = 4, \quad (\text{Б.5})$$

в найденном нами основном состоянии.

Ясно, что этот оператор характеризует вероятность того, что все пары нуклонов находятся на расстояниях друг от друга меньших, чем β , так как в противном случае экспонента быстро спадает к нулю. Оператор (Б.5) имеет предельное значение 1, когда $\beta \rightarrow \infty$.

Возьмем в качестве β средний радиус (0,4344 Ферми) гауссоид отталкивания, которые описывают мягкий синглетный и триплетный кор в потенциале Танга. Среднее значение



Фиг. Б.3. Зависимость среднего значения оператора P от числа квантов N , учитываемых в пробной волновой функции при $\hbar\omega = 65$ МэВ. Только точки на кривой, помеченные крестиком, имеют реальный смысл.

оператора (Б.5) в этом случае является мерой вероятности того, что пары частиц находятся друг от друга на расстоянии меньшем, чем радиус кора. Результаты расчета представлены на фиг. Б.3 для волновых функций, основного состояния в приближениях, учитывающих $N = 0, 2, 4 \dots 10$ квантов, при $\hbar\omega = 65$ МэВ. Мы видим, как все более отчетливой становится корреляция между нуклонами при возрастании числа учитываемых квантов, приводя к уменьшению вероятности того, что частицы находятся друг от друга на расстояниях, меньших радиуса кора. Эта вероятность становится меньше 1% при $N = 10$.

Вариационная волновая функция основного состояния, образованная из осцилляторных функций (21.18), может быть также использована для обсуждения других свойств α -частицы. Примером может служить электронный формфактор, который можно было бы обсудить в плане рассмотрения, проведенного в разд. 23.

Приложение В. ТРАНСФОРМАЦИОННЫЕ
КОЭФФИЦИЕНТЫ $\langle n_1 l_1, n_2 l_2; \Lambda | n l, N L; \Lambda \rangle^1$

Таблица В.1

$$\mathfrak{N} = 0 \quad \langle 00, 00; 0 | 00, 00; 0 \rangle = 1$$

$$\mathfrak{N} = 1 \quad \langle 00, 01; 1 | 01, 00; 1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\langle 00, 01; 1 | 00, 01; 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$\mathfrak{N} = 2$

$\mathfrak{N} = 3$

n_1	l_1	n_2	l_2	Λ	nNL		
					1000	0200	0101
1	0	0	0	0	$\frac{1}{2}$.	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
0	0	0	2	2	.	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$
0	1	0	1	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$.	.
				1	.	.	1
				2	.	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$.

n_1	l_1	n_2	l_2	Λ	nNL			
					0300	1100	0201	1001
0	0	0	3	3	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$.	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$.
1	1	0	0	1	.	$\frac{-1}{2\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{6}}$
0	1	0	2	1	.	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{3\sqrt{2}}$	$-\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{2}}$
				2	.	.	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$.
				3	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$.	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$.
0	1	1	0	1	.	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{6}}$	$-\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{2}}$	$\frac{1}{6\sqrt{2}}$

¹⁾ В таблицах данного приложения для $\mathfrak{N} = 2, 3, 4$ приводится только часть трансформационных коэффициентов. Все недостающие коэффициенты можно найти с помощью свойств симметрии (10.38). Для $\mathfrak{N} = 5, 6$ даны наиболее важные для расчетов по модели оболочек коэффициенты с $2n_1 + l_1 = 2$ и 3 соответственно. Таблицы составлены на основе работ [11, 12]. Знаки коэффициентов выбраны в соответствии с работой [11].

$\mathfrak{R} = 4$

$n_1 l_1 n_2 l_2$	Λ	$nINL$							
		0400	1200	2000	0301	1101	0202	1002	1010
0 0 0 4	4	$\frac{1}{4}$.	.	$-\frac{1}{2}$.	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$.	.
0 0 1 2	2	.	$\frac{1}{4}$.	$-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{10}}$	$-\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{10}}$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{3}}$.
0 0 2 0	0	.	.	$\frac{1}{4}$.	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$.	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{6}}$
0 1 0 3	2	.	$-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{10}}$.	$-\frac{1}{5}$	$\frac{\sqrt{21}}{10}$	0	$-\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{10}}$.
	3	.	.	.	$\frac{1}{2}$.	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$.	.
	4	$-\frac{1}{2}$.	.	$\frac{1}{2}$.	0	.	.
0 1 1 1	0	.	.	$-\frac{1}{2}$.	$\frac{1}{2}$	0	.	0
	1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$.	.
	2	.	$-\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{10}}$.	$\frac{\sqrt{21}}{10}$	$\frac{1}{5}$	0	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{10}}$.
0 2 0 2	0	.	.	$\frac{1}{\sqrt{6}}$.	0	$\frac{1}{3}$.	$-\frac{\sqrt{5}}{3}$
	1	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	.	.
	2	.	$\frac{1}{2\sqrt{3}}$.	0	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{\sqrt{7}}{6}$.
	3	.	.	.	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$.	0	.	.
0 2 1 0	4	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$.	.	0	.	$-\frac{1}{2}$.	.
	0	.	.	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{6}}$.	0	$-\frac{\sqrt{5}}{3}$.	$\frac{1}{6}$
0 2 1 0	2	.	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{3}}$.	$-\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{10}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{10}}$	$-\frac{\sqrt{7}}{6}$	$-\frac{1}{12}$.

3R = 5

n_1, l_1, n_2, l_2	Δ	$nINL$									
		0500	1300	2100	0401	1201	2001	0302	0310	1102	1110
0 2 0 3	1	·	·	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	·	$-\frac{1}{\sqrt{30}}$	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{15}}$	$-\frac{1}{5\sqrt{2}}$	·	$-\frac{\sqrt{7}}{5\sqrt{6}}$	$\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{30}}$
2	2	·	·	·	·	$\frac{1}{\sqrt{5}}$	·	$\frac{1}{5\sqrt{2}}$	·	$\frac{\sqrt{7}}{5}$	·
3	3	·	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	·	$-\frac{1}{2\sqrt{70}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{35}}$	·	$-\frac{7}{10\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}}$	$\frac{\sqrt{3}}{10}$	·
4	4	·	·	·	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$	·	·	$-\frac{1}{2\sqrt{2}}$	·	·	·
5	5	$-\frac{\sqrt{5}}{4}$	·	·	$\frac{1}{4}$	·	·	$\frac{1}{2\sqrt{2}}$	·	·	·
1 0 0 3	3	·	$-\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}$	·	$-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{7}}$	$\frac{5}{4\sqrt{14}}$	·	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}}$	$\frac{1}{4\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{4\sqrt{10}}$	·
0 2 1 1	1	·	·	$-\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{15}}$	·	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{10}}$	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	$\frac{\sqrt{7}}{5\sqrt{6}}$	·	$\frac{11}{30\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}$
2	2	·	·	·	·	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{10}}$	·	$\frac{\sqrt{7}}{5}$	·	$\frac{3}{10\sqrt{2}}$	·
3	3	·	$-\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{10}}$	·	$\frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{35}}$	$-\frac{1}{4\sqrt{70}}$	·	$\frac{\sqrt{3}}{10}$	$-\frac{1}{4\sqrt{10}}$	$\frac{9}{20\sqrt{2}}$	·
1 0 1 1	1	·	·	$-\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{3}}$	·	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{30}}$	·	$\frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{5}}$	$-\frac{1}{6\sqrt{2}}$

$\mathfrak{N} = 6$

n_1, l_1, n_2, l_2	Λ	$n \setminus N \setminus L$															
		0600	1400	2200	3000	0501	1301	2101	0402	0410	1202	1210	2002	2010	0303	1103	1111
0 3 0 3	0	.	.	.	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	$-\frac{1}{\sqrt{10}}$.	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{5}}$	0	.	0	$-\frac{\sqrt{14}}{5}$
1	1	0	.	.	$\frac{1}{5}$.	0	.
2	2	.	.	$-\frac{1}{5\sqrt{2}}$.	.	$-\frac{\sqrt{3}}{5\sqrt{70}}$	0	$-\frac{\sqrt{3}}{5\sqrt{70}}$.	$-\frac{4\sqrt{3}}{5\sqrt{7}}$.	.	0	.	0	.
3	3	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}}$.	0	.	0	.	.	$\frac{2}{5}$.	0	.
4	4	0	.	$-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{7}}$	$\frac{\sqrt{11}}{4\sqrt{5}}$	$\frac{\sqrt{11}}{2\sqrt{70}}$.	.	0	.	0	.
5	5	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$.	0	$-\frac{1}{2}$.	.	.
6	6	$\frac{\sqrt{5}}{4}$	0	.	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	0	.	.	.
1 1 0 3	2	.	.	$-\frac{3\sqrt{3}}{20}$.	.	.	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{10}}$	$-\frac{6}{5\sqrt{35}}$.	$\frac{9}{10\sqrt{14}}$.	.	0	.	$-\frac{1}{4}$.
3	3	$\frac{3\sqrt{2}}{4\sqrt{7}}$.	$-\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{7}}$.	.	$-\frac{3\sqrt{3}}{10}$.	$-\frac{1}{20}$.
4	4	$\frac{\sqrt{11}}{2\sqrt{42}}$	$\frac{1}{4\sqrt{15}}$	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{70}}$.	.	0	.	$-\frac{1}{4}$.
1 1 1 1	0	.	.	.	$-\frac{\sqrt{21}}{4\sqrt{5}}$.	.	0	.	.	$\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{30}}$.	.	0	.	0	.
1	1	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{10}}$.	.	0	.	.	$\frac{1}{4\sqrt{15}}$.	.	.
2	2	.	.	$-\frac{3\sqrt{7}}{20}$.	.	.	0	$\frac{3\sqrt{3}}{5\sqrt{5}}$.	$\frac{\sqrt{2}}{5\sqrt{3}}$.	.	$\frac{23}{20\sqrt{15}}$.	0	.

Литература

1. Jackson A. D., Lande A., Sauer P. U., Nucl. Phys., **A156**, 1 (1970).
2. Jackson A. D., Lande A., Sauer P. U., Phys. Lett., **35B**, 487 (1971).
3. Reid R. V., Ann. Phys., **50**, 411 (1968).
4. Kallio A., Phys. Lett., **18**, 51 (1965).
5. Humberston I. W., Hennell M. A., Phys. Lett., **31B**, 423 (1970).
6. Delves M. L., Blatt J. M., Pask C., Davies B., Phys. Lett., **28B**, 472 (1969).
7. Jackson A. D., Tjon J. A., Phys. Lett., **32B**, 9 (1970).
8. McCarthy J. S., Sick I., Withney R. R., Yearian M. R., Phys. Rev. Lett., **25**, 884 (1970).
9. Aguilera-Navarro V. C., Moshinsky M., Phys. Lett., **32B**, 336 (1970).
10. Afnan I. R., Tang Y. C., Phys. Rev., **175**, 1337 (1968).
11. Brody T. A., Moshinsky M., Tables of Transformation Brackets, Universidad Nacional Autonoma de México, 1960.
12. Балашов В. В., Эльтеков В. А., Nucl. Phys. **16**, 423 (1960).

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ ПЕРЕВОДЧИКА	5
ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ	7
ВВЕДЕНИЕ	9
Глава I. ОДНОЧАСТИЧНАЯ ЗАДАЧА	11
1. Радиальные волновые функции гармонического осциллятора . .	11
2. Матричные элементы оператора $f(r)Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$ по волновым функциям гармонического осциллятора. Коэффициенты $B(n'l', nl, p)$	12
3. Одноэлектронная атомная задача. Вариационный анализ основного состояния атома водорода с использованием волновых функций гармонического осциллятора	15
4. Одноэлектронная молекулярная задача. Анализ основного состояния иона H_2^+ с использованием волновых функций гармонического осциллятора	21
5. Рассеяние электронов атомами водорода и формфактор плотности распределения электронного заряда в основном состоянии этих атомов	24
6. Теоретический формфактор атома водорода в представлении, использующем осцилляторные функции	26
7. Прямое определение волновой функции основного состояния из формфактора с помощью метода наименьших квадратов. Псевдохартри-фоковское (ПХФ) приближение	29
8. Волновые функции одночастичного гармонического осциллятора, выраженные через операторы рождения квантов	32
9. Нормировочные коэффициенты для волновых функций гармонического осциллятора	35
Глава II. ДВУХЧАСТИЧНАЯ ЗАДАЧА	39
10. Трансформационные коэффициенты для состояний двух частиц в потенциале гармонического осциллятора	39
11. Применение трансформационных коэффициентов в атомных задачах. Атом гелия	48
12. Применение трансформационных коэффициентов в молекулярных задачах. Молекулы H_2 и H_3^+	51
13. Матричные элементы в jj -связи	55
14. Применение к задаче двух частиц в ядерной оболочке $2s - 1d$. Ядра O^{18} и F^{18}	58
15. Представление трансформационных коэффициентов для кинематического поворота на произвольные углы через стандартные трансформационные коэффициенты	61

Глава III. ЗАДАЧА ТРЕХ ТЕЛ	65
16. Матричные элементы гамильтониана относительно трансляционно-инвариантных состояний	65
17. Трансляционно-инвариантные состояния трех частиц с определенной перестановочной симметрией	68
18. Общая задача трех тел. Применение к атому лития	76
19. Формфакторы ядер	81
20. Формфактор протона как системы трех кварков	87
Глава IV. ЗАДАЧА ЧЕТЫРЕХ ТЕЛ	95
21. Состояния гармонического осциллятора в симметричной системе относительных координат	96
22. Трансформационные коэффициенты, связывающие состояния, которые зависят от симметричных координат и координат Якоби	101
23. Формфактор для линейной комбинации состояний гармонического осциллятора. Применение к α -частице	103
Глава V. ПРОБЛЕМА n ТЕЛ В ПРИБЛИЖЕНИИ ХАРТРИ —	
ФОКА	110
24. Насколько хорош метод Хартри — Фока? Простая модель [42]	110
25. Система алгебраических уравнений и ее самосогласованное решение	114
26. Метод Хартри — Фока с волновыми функциями гармонического осциллятора. Случай заполненных оболочек	117
27. Применение к атому бериллия и ядру O^{16}	122
Заключение	128
Литература	130
Приложение А. РАСЧЕТЫ СВОЙСТВ ТРИТОНА С РЕАЛИСТИЧЕСКИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ОСЦИЛЛЯТОРНОГО БАЗИСА	133
Приложение Б. РАСЧЕТЫ СВОЙСТВ α -ЧАСТИЦЫ С РЕАЛИСТИЧЕСКИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ОСЦИЛЛЯТОРНОГО БАЗИСА	138
Приложение В. ТРАНСФОРМАЦИОННЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ $(n_1 l_1, n_2 l_2; \Lambda n l, N L; \Lambda)$	143
Литература	147

УВАЖАЕМЫЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Ваши замечания о содержании книги, ее оформлении, качестве перевода и другие просим присылать по адресу: Москва, И-278, 1-й Рижский пер., д. 2, издательство «Мир».

М. Мошинский

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР
В СОВРЕМЕННОЙ ФИЗИКЕ
ОТ АТОМОВ ДО КВАРКОВ

Редактор *В. И. Самсонова*

Художник *Е. И. Волков*

Художественный редактор *П. Ф. Некундэ*

Технический редактор *Е. Н. Лебедева*

Корректор *Л. В. Байкова*

Сдано в набор 21/VI 1971 г.

Подписано к печати 24/XI 1971 г.

Бумага № 3 60×84¹/₁₆ = 4,75 бум. л. 8,84 усл. печ. л.

Уч.-изд. л. 7,83. Изд. № 2/6138

Цена 54 к. Заказ 1153

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»

Москва, 1-й Рижский пер., 2

Орден Трудового Красного Знамени
Ленинградская типография № 2 имени Евгении Соколовой
Главполиграфпрома Комитета по печати при Совете Министров
СССР. Измайловский проспект, 29

ВНИМАНИЮ ЧИТАТЕЛЕЙ!

На базах «Союзкниги» имеются книги издательства «Мир»

- С. Адлер.* Алгебры токов и их применение в физике частиц. (Перевод с английского, 1970 г., цена 2 р. 05 к.)
- Дж. Бернштейн.* Элементарные частицы и их токи. (Перевод с английского, 1970 г., цена 2 р. 23 к.)
- Г. Бете.* Квантовая механика. (Перевод с английского, 1965 г., цена 1 р. 17 к.)
- Р. Вильсон.* Нуклон-нуклонные взаимодействия. (Перевод с английского, 1965 г., цена 1 р. 20 к.)
- В. де Альфаро и Т. Редже.* Потенциальное рассеяние. (Перевод с английского, 1966 г., цена 86 коп.)
- Н. Марч.* Проблема многих тел в квантовой механике. (Перевод с английского, 1970 г., цена 2 р. 06 к.)
- Теория групп и элементарные частицы. Сборник статей. (Перевод с английского, 1967 г., цена 1 р. 72 к.)
- Э. Ферми.* Квантовая механика. Изд. 2. (Перевод с английского, 1968 г., цена 1 р. 58 к.)

Требуйте эти книги в магазинах, торгующих научно-технической литературой. В случае отказа обращайтесь в издательство «Мир» по адресу: 129820, Москва, И-110, ГСП, 1-й Рижский пер., д. 2, Отдел распространения.