

УДК 539.12

## ВЕРХНИЕ И НИЖНИЕ ОЦЕНКИ ЭНЕРГИИ ДЛЯ ЯДЕРНЫХ И КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМ НЕСКОЛЬКИХ ЧАСТИЦ

А. Г. Дончев, С. А. Калачев, Н. Н. Колесников, В. И. Тарасов

(кафедра теоретической физики)

**В рамках вариационного метода с пробными функциями экспоненциального и гауссовского типа найдены верхние и нижние оценки энергии для систем ядерного типа и для кулоновских систем трех, четырех и пяти частиц. Двухсторонние оценки энергии позволяют не только установить пределы, в которых заключено точное значение энергии, но и дают дополнительную возможность для экстраполяции к точному значению энергии. Это позволяет при достижении той же точности уменьшить объем вычислений за счет использования меньшего числа пробных функций.**

В настоящее время для расчета связанных систем небольшого числа нерелятивистских частиц предложен ряд весьма эффективных квантовомеханических методов, которые могут претендовать на высокую точность оценки энергии  $E$  (иногда до двух десятков и более значащих цифр). Обычно в расчетах используется вариационный подход: находятся верхние оценки энергии  $E_U$ , которые, как ожидается, в пределе бесконечно большого числа пробных функций  $n$  приведут к точному значению энергии системы  $E_0$ . При естественном ограничении расчетов конечным числом пробных функций энергия  $E_0$  находится путем экстраполяции зависимости  $E_U$  от  $n$ , а на основе анализа характера сходимости оценок энергии делается заключение о точности расчетов.

Однако такая процедура не является безупречной, и для того, чтобы исключить все возможные сомнения относительно точного значения энергии, влияние выбора базиса, а также истинных пределов точности расчетов необходима нижняя оценка энергии  $E_L$ . Знание нижней оценки энергии наряду с верхней не только устанавливает границы, в пределах которых заключено точное значение энергии, но и дает дополнительную возможность для экстраполяции к точному значению энергии, что позволяет при достижении той же точности уменьшить объем вычислений за счет использования меньшего числа пробных функций. Это в особенности относится к системам ядерного типа с короткодействующими потенциалами взаимодействия, на чем мы предполагаем специально остановиться.

В настоящей работе вычисления проводятся в рамках вариационного метода с пробными функциями экспоненциального или гауссовского типа [1, 2], которые в случае нулевого орбитального момента будем записывать в виде

$$\psi = \sum_{\alpha=1}^n C_n \exp \left( - \sum_{p>q=1}^A \alpha_{pq}^\alpha R_{pq}^k \right), \quad (1)$$

где  $A$  — число частиц,  $k = 1$  в случае использова-

ния экспоненциальных функций и  $k = 2$  в случае гауссовских функций;  $R_{pq}$  — расстояние между частицами  $p$  и  $q$ ,  $\alpha_{pq}^\alpha$  и  $C_n$  — соответственно нелинейный (размерный) и линейный параметры. Преимуществом выбора такого базиса является наличие большого числа размерных параметров, что обеспечивает большую гибкость по сравнению, например, с полиномиальными функциями хиллераасовского типа [3–5].

В соответствии с вариационным принципом при заданном гамильтониане  $H$  верхняя оценка энергии  $E_U$  находится путем минимизации функционала  $\mathcal{E}_U[\psi] = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$  с пробной функцией  $\psi$ . Нижняя же оценка, согласно Темплу [6], соответствует максимуму функционала  $\mathcal{E}_L[\psi]$ :

$$E_L^T = \max_{\psi, \mathcal{E}_U[\psi] < E_1} \mathcal{E}_L[\psi] = \max_{\psi, \mathcal{E}_U[\psi] < E_1} \frac{E_1 \mathcal{E}_U[\psi] - \mathcal{E}_Q^2[\psi]}{E_1 - \mathcal{E}_U[\psi]}, \quad (2)$$

где  $E_1$  — энергия первого возбужденного уровня (или его нижняя оценка) с такой же симметрией и орбитальным моментом, как для основного состояния, а

$$\mathcal{E}_Q[\psi] \equiv -\sqrt{\langle \psi | H^2 | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3)$$

Для введенных функционалов справедливы неравенства

$$\mathcal{E}_L[\psi] < E_0 < \mathcal{E}_U[\psi], \quad (4)$$

$$\mathcal{E}_L[\psi] < \mathcal{E}_Q[\psi] < \mathcal{E}_U[\psi] < E_1, \quad (5)$$

из которых второе справедливо в подпространстве  $\{\psi : \mathcal{E}[\psi] < E_1\}$ , являющемся областью определения  $\mathcal{E}_L[\psi]$ . При устремлении числа членов в (1) к  $n \rightarrow \infty$  неравенства (4) и (5) превращаются в равенства. Учитывая то, что для  $E_L^Q = \min \mathcal{E}_Q$  нормальным является возрастание при увеличении  $n$ , можно также, следуя [7], рассматривать  $E_L^Q$  как нижнюю оценку энергии (см. также [8]). Отметим, что в работе [9] предлагалось еще в качестве нижней оценки использовать  $E_L^W = E_U - \sqrt{E_L^Q - E_U^2}$ .

Для нахождения нижних оценок ( $E_L^T$ ,  $E_L^Q$ ,  $E_L^W$ ) необходимо знать матричные элементы не только

гамильтониана, но и его квадрата. Для случая гауссовского базиса матричные элементы операторов  $H$  и  $H^2$  выражаются, как было показано в работах [1, 10], через алгебраические функции, и это справедливо для произвольного числа частиц для всех обычно используемых потенциалов. В случае экспоненциальных функций матричные элементы  $H$  и  $H^2$  удается представить в замкнутой форме (через рациональные, логарифмические и дилогарифмические функции) лишь для трехчастичных систем [2, 11], а для четырехчастичных систем это возможно только для  $H$ , но не для его квадрата.

В качестве систем ядерного типа были рассмотрены (а) модельные системы  $2\alpha$ ,  $3\alpha$ ,  $4\alpha$ , связанные потенциалом Али-Бодмера, вариант  $d_0$  [12], (б) ядра  ${}^2\text{H}$ ,  ${}^3\text{H}$ ,  ${}^3\text{H}$  и  ${}^4\text{He}$ , (в) гиперядра  ${}^3_\Lambda\text{H}$ ,  ${}^4_\Lambda\text{H}$ ,  ${}^4_\Lambda\text{He}$ ,  ${}^5_\Lambda\text{He}$ , а также  ${}^9_\Lambda\text{Be}$ , рассматривавшийся как кластерная система  $\alpha + \alpha + \Lambda$ . При расчете ядер и гиперядер использовались полуреалистический центральный парный  $NN$ -потенциал работ [1, 13], а также  $\Lambda N$ -потенциал [14, 15], согласованный с основными гиперядерными данными. Кроме ядерных систем верхние и нижние оценки энергии находились для ряда трех- и четырехчастичных кулоновских систем: для атома гелия, отрицательного иона водорода, электронно-позитронной системы  $e^+e^+e^-$ , для мюонных систем  $\mu ee$ ,  $pr\mu$ ,  $\mu\mu e$ , для двухцентровой системы  $pr e$ , а также четырехчастичных систем: молекулы водорода  $\text{H}_2$  и ионизированного гидрида гелия  $\text{HeH}^+$ . Расчеты трехчастичных кулоновских систем производились с использованием экспоненциальных функций (которые обеспечивают для них более высокую точность), а для всех систем ядерного типа и четырехчастичных кулоновских систем — с гауссовскими функциями.

Используемая в настоящей работе процедура вычислений состоит в оптимизации по нелинейным параметрам, которая включает комбинацию покоординатного спуска и стохастического поиска с использованием функций распределения [2] (см. также [16]).

В случае систем ядерного типа характер сходимости верхних и нижних оценок энергии оказывается весьма похожим, в связи с чем зависимости  $E_L^T$  от  $E_U$  и  $E_L^Q$  от  $E_U$  близки к линейной\*), на что было обращено внимание в работе [17] и что использовалось для экстраполяции к точному значению энергии  $E_0$  [2, 15]. Линейный характер зависимости  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  от  $E_U$  иллюстрируется на примере четырехчастичных систем  $4\alpha$  и  ${}^4\text{He}$ , а также пятичастичной системы  ${}^5_\Lambda\text{He}$  на рис. 1, 2 и 3 соответственно. По горизонтальной оси на рис. 1, 2 и 3 откладывались (в МэВ) значения  $E_L^T$  и  $E_L^Q$ , а по вертикальной — значения  $E_U$ . Цифры у нанесенных точек указывают число пробных функций  $n$ . На рис. 2 и 3

\*) В то же время, как показали проводившиеся нами расчеты, зависимость  $E_L^W$  от  $E_U$  значительно отличается от линейной и поэтому ее экстраполяция к  $n \rightarrow \infty$  ненадежна.

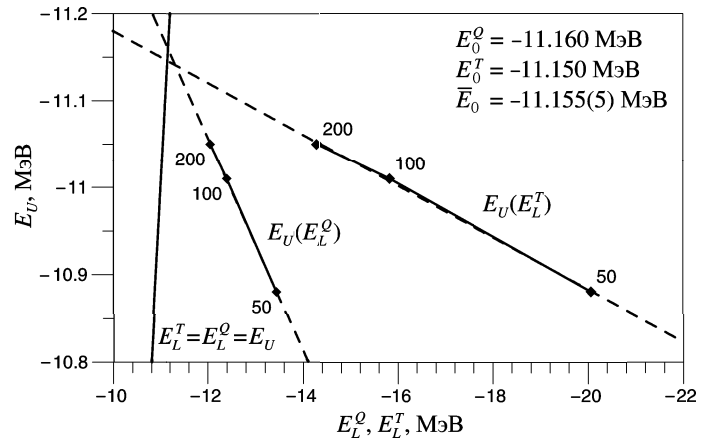


Рис. 1. График сходимости для системы  $4\alpha$

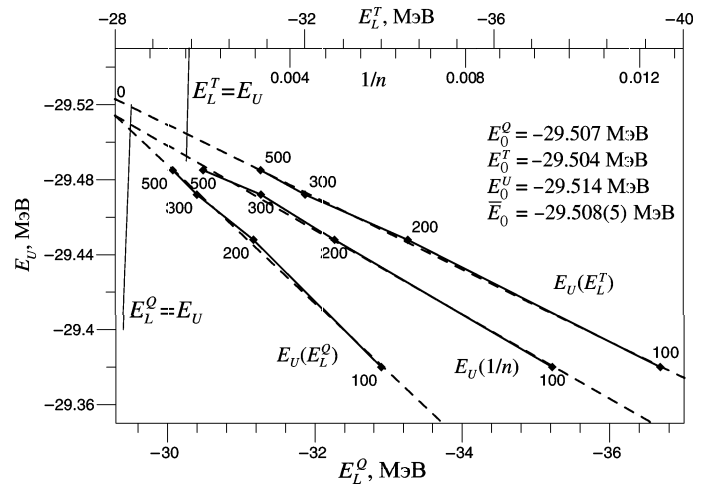


Рис. 2. График сходимости для системы  ${}^4\text{He}$

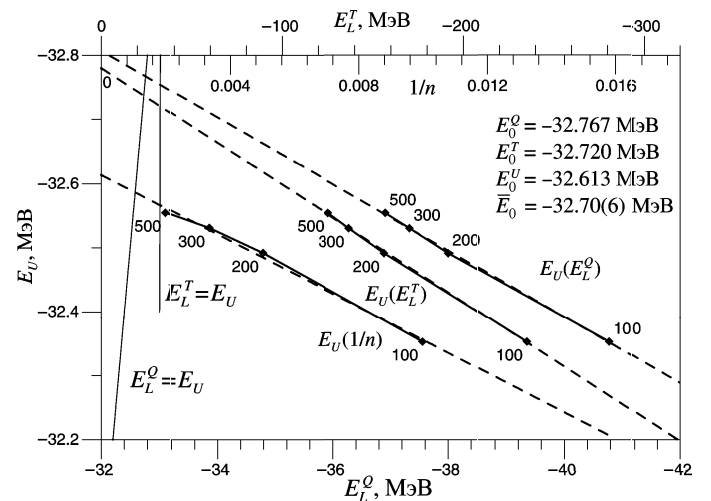


Рис. 3. График сходимости для системы  ${}^5_\Lambda\text{He}$

по горизонтальной оси откладывались также значения  $1/n$  и строилась зависимость  $E_U$  от  $1/n$ . Точка пересечения линии  $E_U = E_U(E_L^T)$  с линией  $E_U = E_L^T$  соответствует экстраполированному к  $n \rightarrow \infty$  значению энергии  $E_0^T$ . Аналогично пересечение линий  $E_U = E_U(E_L^Q)$  и  $E_U = E_L^Q$  определяет экстраполированное к  $n \rightarrow \infty$  значение  $E_0^Q$ . Усредненное по

двум экстраполяциям значение энергии находится как  $\bar{E}_0 = \frac{1}{2} (E_0^T + E_0^Q)$ , а точность расчета  $\bar{E}_0$  определяется как среднеквадратичное отклонение от среднего.

В случае когда зависимость  $E_U$  от  $\frac{1}{n}$  приближалась к линейной (как это имеет место на рис. 2 и 3), кроме  $E_0^T$  и  $E_0^Q$  находилось также экстраполированное значение  $E_0^U$ , а  $\bar{E}_0$  вычислялось с учетом тройной экстраполяции.

Для проверки надежности и точности определения энергии путем двойной (или тройной) экстраполяции проводились контрольные расчеты для систем  $2\alpha$ ,  $3\alpha$  и  $4\alpha$ . Для этого  $E_U$  и  $E_L^T$  рассчитывались при значениях  $n$ , намного превосходящих те  $n_{\max}$ , которыми ограничивались расчеты, использовавшиеся для экстраполяции.

Так, для системы  $3\alpha$  при расчетах с числом функций до  $n_{\max} = 70$ , путем экстраполяции были найдены значения  $E_0^T = -5.124112$  МэВ,  $E_0^Q = -5.124135$  МэВ и  $\bar{E}_0 = -5.124125(20)$  МэВ, а расчет при  $n = 200$  дал  $E_U(n = 200) = -5.122038$  МэВ

и  $E_L^T(n = 200) = -5.125085$  МэВ. Таким образом, значение  $\bar{E}_0$  не выходит за пределы интервала между  $E_U(200)$  и  $E_L^T(200)$ .

Аналогично для системы  $4\alpha$  при расчете с числом функций  $n_{\max} = 200$  путем экстраполяции были найдены значения  $E_0^T = -11.150$  МэВ,  $E_0^Q = -11.160$  МэВ и  $\bar{E}_0 = -11.155(5)$  МэВ, а расчет с  $n = 1000$  привел к  $E_U(n = 1000) = -11.154$  МэВ,  $E_L^T(n = 1000) = -11.322$  МэВ.

В случае системы  $2\alpha$  при  $n_{\max} = 7$  было найдено  $E_0^T = -1.3498$  МэВ,  $E_0^Q = -1.3502$  МэВ,  $\bar{E}_0 = -1.3500(1)$  МэВ, что совпадает со значением  $E_0$ , найденным без использования вариационного метода путем пошагового интегрирования уравнения Шрёдингера.

Приведенные примеры контрольных расчетов, а также рис. 1, 2 и 3 демонстрируют общую для систем ядерного типа линейную (с хорошей степенью точности) зависимость  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  от  $E_U$ , причем это оказывается справедливым и в тех случаях, когда зависимость  $E_U$  от  $\frac{1}{n}$  далека от линейной. Основы-

Таблица 1

Энергии  $E_U$ ,  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  (МэВ) для ядерных систем

	$E_1$	$n$	$E_U$	$E_L^T$	$E_L^Q$	$E_0$	$B_\Lambda$
${}^3\text{H}$	-0.429	20	-8.37	-24	-13.2	-8.455(1)	
		50	-8.446	-10.1	-9.07		
		100	-8.4535	-8.56	-8.497		
		120	-8.4542	-8.489	-8.468		
${}^4\text{He}$	-8.4548	100	-29.38	-39.5	-32.9	-29.508(5)	
		200	-29.448	-34.17	-31.17		
		300	-29.472 1	-32.010	-30.40		
		500	-29.485 1	-31.068	-30.071		
$3\alpha$	-1.35	20	-5.107 505	-5.533 946	-5.262 030	-5.124 125(20)	
		50	-5.122 207	-5.187 867	-5.146 328		
		60	-5.123 155	-5.157 298	-5.135 712		
		70	-5.123 370	-5.147 416	-5.131 830		
${}^3_\Lambda\text{H}$	-2.225	150	-2.3602	-77.7	-4.20	-2.369(3)	0.144(3)
		200	-2.36061	-71.9	-4.11		
		250	-2.36068	-70.9	-4.09		
${}^4_\Lambda\text{H}$	-8.4548	100	-10.39	-72.3	-15.41	-10.48(2)	2.03(2)
		300	-10.43	-44.4	-13.64		
		500	-10.444	-35.52	-12.93		
${}^4_\Lambda\text{He}$	-7.7623	100	-10.01	-84.319	-16.69	-10.16(6)	2.44(6)
		200	-10.047	-68.863	-15.75		
		300	-10.069	-56.372	-14.93		
		500	-10.094	-44.333	-13.99		
${}^5_\Lambda\text{He}$	-29.5	100	-32.35	-235.27	-40.78	-32.70(6)	3.19(6)
		200	-32.49	-156.35	-38.00		
		300	-32.53	-136.71	-37.33		
		500	-32.56	-125.14	-36.91		
${}^9_\Lambda\text{Be}$	-3.12	30	-6.477	-6.740	-6.557	-6.4816(2)	6.4816(2)
		50	-6.480	-6.589	-6.511		
		90	-6.481	-6.517	-6.491		

ваясь на этом, можно, ограничиваясь сравнительно небольшим числом пробных функций с  $n \leq n_{\max}$ , находить посредством экстраполяции  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  энергию системы  $\bar{E}_0$  при неопределенности в величине  $\bar{E}_0$ , значительно меньшей (а точности значительно большей), чем разность  $|E_L^T(n_{\max}) - E_U(n_{\max})|$  и  $|E_L^Q(n_{\max}) - E_U(n_{\max})|$ .

Результаты расчетов энергии  $E_U$ ,  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  для различных значений  $n$  для трех-, четырех- и пятичастичных ядерных и гиперядерных систем  ${}^3\text{H}$ ,  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^3_\Lambda\text{H}$ ,  ${}^4_\Lambda\text{H}$ ,  ${}^4_\Lambda\text{He}$  и  ${}^5_\Lambda\text{He}$ , а также для  ${}^9_\Lambda\text{Be}$  (как кластерной системы  $\alpha + \alpha + \Lambda$ ) и для модельных систем  $3\alpha$  и  $4\alpha$  представлены в табл. 1 в четвертом, пятом, и шестом столбцах. В предпоследнем столбце даются найденные посредством описанной выше процедуры экстраполяции значения полной энергии  $\bar{E}_0$  с приведенной в скобках оценкой точности расчета, а в последнем столбце для гиперядер указана энергия связи  $\Lambda$ -частицы, вычисленная как разность между полной энергией связи гиперядра

и энергии связи ядра-остова. Используемые для расчета  $E_L^T$  энергии  $E_1$  содержатся во втором столбце табл. 1.

Результаты расчетов верхней и нижних оценок энергии для систем кулоновского типа собраны в табл. 2. Для кулоновских систем, в отличие от ядерных, зависимость  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  от  $E_U$  отклоняется от линейной, поэтому экстраполяция к  $n \rightarrow \infty$  ненадежна. В связи с этим в табл. 2 приведены только рассчитанные значения  $E_U$ ,  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  для различного числа пробных функций  $n$ . В качестве дополнительной характеристики точности расчета в последнем столбце таблицы приводится величина вириального индекса  $\delta_\nu = -\lg \left| 1 + \frac{2\langle T \rangle}{\langle V \rangle} \right|$ . Для атомных и молекулярных систем энергии выражаются в атомных единицах, а для мезоатомных систем — в мезоатомных. Во втором столбце указывается энергия  $E_1$ . В расчетах используются следующие значения отношений масс:  $\frac{m_p}{m_e} = 1836.1524$ ;  $\frac{m_\alpha}{m_e} = 7294.2996$ ;  $\frac{m_\mu}{m_e} = 206.76826$  и  $\frac{m_\nu}{m_e} = 8.8802444$ .

Таблица 2

Энергии  $E_U$ ,  $E_L^T$  и  $E_L^Q$  (МэВ) для трех- и четырехчастичных кулоновских систем

	$E_1$	$n$	$E_U$	$E_L^T$	$E_L^Q$	$\delta_\nu$
${}^\infty\text{He}$	-2.146	10	-2.903 723 6	-2.903 83	-2.903 737	
		30	-2.903 724 373	-2.903 725 8	-2.903 724 6	
		100	-2.903 724 377 01	-2.903 724 414	-2.903 724 381	
		300	-2.903 724 377 033 15	-2.903 724 380 41	-2.903 724 37747	
$\alpha e^- e^-$	-2.146	300	-2.903 304 557 732 27	-2.903 304 561 11	-2.903 304 558 17	12.6
${}^\infty\text{H}^-$	-0.500	10	-0.527 750 54	-0.528 06	-0.527 759	
		30	-0.527 751 009 4	-0.527 764	-0.527 751 3	
		50	-0.527 751 016 10	-0.527 752 7	-0.527 751 06	
		100	-0.527 751 016 400	-0.527 751 66	-0.527 751 033	
$p e^- e^-$	-0.500	100	-0.527 445 880 971	-0.527 446 533	-0.527 445 898	9.2
$\mu e e$	-0.500	100	-0.525 054 806 098	-0.525 055 501	-0.525 054 827	8.6
$e^+ e^- e^-$	-0.250	10	-0.262 003 5	-0.262 74	-0.262 020 5	
		30	-0.262 005 053	-0.262 026	-0.262 005 53	
		50	-0.262 005 068 6	-0.262 008 7	-0.262 005 220	
$p p \mu$	-0.450	10	-0.494 374	-0.495 7	-0.494 434	
		30	-0.494 386 64	-0.494 408	-0.494 387 6	
		50	-0.494 386 790	-0.494 391 1	-0.494 387 12	
$\mu \mu e$	-0.560	10	-0.583 3	-0.604	-0.599	
		30	-0.584 75	-0.600	-0.592 1	
		50	-0.584 971	-0.594 4	-0.586 55	
		50	-0.585 126 095 200*)			
$p p e$	-0.580	10	-0.591	-0.745	-0.702	
		30	-0.595 0	-0.652	-0.636	
		50	-0.595 67	-0.618	-0.600 6	
		50	-0.597 139 063 059*)			
$p p e^- e^-$	-1.145	200	-1.158	-9.8	-1.21	
$(\text{H}_2)$		300	-1.159 2	-6.73	-1.196	
		500	-1.160 2	-4.78	-1.187	
		200	-1.164 01*)			
$p \alpha e^- e^-$ ( $\text{HeH}^+$ )	-2.9567	200	-2.964	-75	-3.068	
		300	-2.965 0	-61	-3.053	
		200	-2.970 9*)			

\*) Рассчитано с использованием каркасных функций [18].

Для атома гелия приводятся результаты расчетов как для стандартной системы  ${}^{\infty}\text{He}$  (соответствующей бесконечно тяжелому ядру), так и для реальной системы  $\alpha e^- e^-$ . Для отрицательного иона водорода аналогичным образом расчеты проводились как для стандартной системы  ${}^{\infty}\text{H}^-$ , так и для реальной системы  $pe^- e^-$ . Остальные кулоновские системы рассчитывались с частицами реальных масс. В случае систем кулоновского типа о точности расчетов и ее зависимости от  $n$  можно судить по разности между  $E_U$  и  $E_L^T$ , а также  $E_U$  и  $E_L^Q$  (а кроме того, по величине  $\delta_\nu$ ). Как видно из табл. 2, точность расчета выше для атомных (одноцентровых) систем и ниже всего для двухцентровых систем. Отметим, что точность расчетов кулоновских систем с гауссовскими функциями намного ниже, чем с экспоненциальными. Использование для расчета двухцентровых систем вместо экспоненциальных функций обобщенно-экспоненциальных (каркасных) функций [18] резко улучшает точность расчета. Однако это относится только к расчету  $E_U$ , но не к  $E_L$ , поскольку с каркасными функциями не удастся вычислить матричные элементы  $H^2$ .

Авторы выражают благодарность В. Б. Беляеву, В. Г. Неудачину, Н. П. Юдину, Г. Я. Коренману, В. С. Ростовскому за обсуждение результатов работы и ценные замечания.

#### Литература

1. Колесников Н.Н., Тарасов В.И. // Ядерная физика. 1982. **35**. С. 609.
2. Дончев А.Г., Колесников Н.Н., Тарасов В.И. // Ядерная физика. 2000. **63**. С. 419.
3. Schwartz C. // Phys. Rev. 1962. **128**. P. 1146.
4. Thakkar A.J., Koga T. // Phys. Rev. A. 1994. **50**. P. 854.
5. Frankowski K., Pekeris C.L. // Phys. Rev. 1966. **150**. P. 366.
6. Temple G. // Proc. Roy. Soc. 1928. **119**. P. 276.
7. Romberg W. // Physik Zs, Sowjetunion. 1935. **8**. P. 516.
8. Stvenson A.F. // Phys. Rev. 1938. **53**. P. 199.
9. Weinstein D.H. // Proc. Nat. Acad. Sci. 1934. **20**. P. 529; MacDonald J.K.L. // Phys. Rev. 1934. **46**. P. 828.
10. Колесников Н.Н., Тарасов В.И., Старосотников М.И. // Деп. ВИНТИ. 1980. № 3822-80.
11. Дончев А.К., Колесников Н.Н., Тарасов В.И. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1999. № 2. С. 15 (Moscow University Phys. Bull. 1999. N 2. P. 16).
12. Ali S., Bodmer A.R. // Nucl. Phys. 1966. **80**. P. 99.
13. Колесников Н.Н., Тарасов В.И. // Изв. АН СССР, Сер. Физ. 1981. **45**. С. 2183.
14. Kolesnikov N.N., Kalachev S.A., Tarasov V.I. // European Few Body XIX Conference Handbook. Groningen, 2004. P. 142.
15. Колесников Н.Н., Калачев С.А. // Препринт физфака МГУ. М., 2004. № 18/2004.
16. Kukulin V.I., Krasnopolsky V.M. // J. Phys. G. 1977. **63**. P. 795; Кукулин В.И. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1975. **39**. С. 535.
17. Delves L.M. // Adv. Nucl. Phys. 1973. **5**. P. 1.
18. Donchev A.G., Kalachev S.A., Kolesnikov N.N., Tarasov V.I. // Phys. Rev. A. 2004. **69**. P. 034501.

Поступила в редакцию  
12.01.05