

торы СВЧ малой мощности. Вопросы оптимизации параметров. М.: Сов. радио, 1977. [6] Малахов А. Н. Флуктуации в автоколебательных системах. М.: Наука, 1968. [7] Канавец В. И., Стабинис А. Ю. Изв. вузов. Сер. Радиофизика, 1972, 15, № 8, с. 1264. [8] Канавец В. И., Стабинис А. Ю. Радиотехн. и электроника, 1972, 17, № 10, с. 2124. [9] Гапонов А. В., Петелин М. И., Юлпатов В. К. Изв. вузов. Сер. Радиофизика, 1967, 10, № 9—10, с. 1414. [10] Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.

Поступила в редакцию
27.09.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 5

УДК 539.12

«КАРКАСНЫЕ» ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ В МНОГОЧАСТИЧНЫХ ВАРИАЦИОННЫХ РАСЧЕТАХ

П. П. Захаров, Н. Н. Колесников, В. И. Тарасов

(кафедра теоретической физики)

1. Эффективность вариационной процедуры расчета связанных систем многих частиц решающим образом зависит от того, насколько удачно при разложении пробной функции ψ по некоторому базису $\{\varphi_i\}$:

$$\psi = \sum_{i=1}^n C_i \varphi_i \quad (1)$$

найден компромисс между а) общностью разложения (1), б) гибкостью функций φ и в) экономичностью расчета матричных элементов гамильтониана и нормировки. Наибольшая общность и гибкость пробной функции достигается при наличии минимального числа специальных ограничений на ее вид. Однако в этом случае вычислительная процедура, как правило, становится громоздкой, поскольку матричные элементы, сводящиеся к многократным радиальным интегралам (кратности $3A-3$, A — число частиц), приходится оценивать численно, а это требует колоссальных вычислительных затрат (см., например, [1—4]). С другой стороны, в литературе имеются примеры вариационных расчетов, в которых при специальном выборе пробной функции удается частично или полностью рассчитать все средние аналитически, что на несколько порядков сокращает время счета на ЭВМ. При таком подходе, однако, сходимость вариационных оценок не всегда оказывается хорошей, ввиду чего для получения точных результатов может потребоваться учет большого числа членов в (1) (см., например, [5]). Правда, путем введения в базисные функции большого числа нелинейных вариационных параметров удается существенно повысить скорость сходимости оценок энергии [6, 7], однако в случае потенциалов сложной формы (знакопеременных с большой амплитудой, содержащих, в частности, мощное отталкивание на малых расстояниях) сходимость может оказаться недостаточно высокой и при таком подходе.

В качестве примера приведем некоторые результаты трех- и четырехчастичных расчетов с использованием базиса

$$\psi_i = \exp\{-\rho^+ \beta^i \rho\} \equiv \exp\left\{-\sum_{p,q=1}^{A-1} \beta_{pq}^i \rho_p \rho_q\right\}, \quad (2)$$

где ρ — якобиевские координаты, образующие (векторную) матрицу размера $(A-1) \times 1$, а β — матрица размера $(A-1) \times (A-1)$, содер-

жащая вариационные параметры. В случае чисто притягивающего NN -потенциала Бейкера [8] верхняя оценка энергии $E_U = -9,56$ МэВ оказывается весьма близкой к точному значению $E_0 = -9,782563$ (2) МэВ уже при $n=2$ в разложении (1), а при $n=10$ $E_U = -9,778$ МэВ (см. подробнее в [6, 9]). Для четырехчастичной же системы $E_U = -39,40$ МэВ ($n=2$) и $-40,068$ МэВ ($n=10$) при $E_0 = -40,07868$ (2) МэВ, так что относительная погрешность при одном и том же n оказывается даже несколько меньшей, чем в случае $A=3$. В то же время расчеты со знакопеременным NN -потенциалом Афна-на — Танга (вариант S I работы [10]) привели к $E_U = -7,59$ МэВ ($n=10$) и $-7,828$ МэВ ($n=30$) при $A=3$ ($E_0 = -7,859$ (1) МэВ) и $E_U = -30,6$ МэВ ($n=10$) и $-31,06$ МэВ ($n=30$) при $A=4$ ($E_0 = -31,225$ (30) МэВ), что заметно хуже, чем в случае знакопостоянного потенциала. Кроме того, относительная погрешность четырехчастичных расчетов оказывается в целом уже большей, чем трехчастичных.

Указанные закономерности связаны главным образом с ограниченностью возможностей учета в рамках базиса (2) многочастичных корреляционных эффектов, роль которых существенно повышается при переходе от потенциалов простой формы к знакопеременным, а также при увеличении числа частиц. Особенно отчетливо это проявляется при расчете трех- и четырехчастичных систем, связанных $\alpha\alpha$ -потенциалом Али—Бодмера [11], обладающим довольно высоким, а главное, широким кором. Так, если для варианта d_0 работы [11] $E_U = 3,4$ МэВ ($n=5$) и $-4,91$ МэВ ($n=20$) при $A=3$ ($E_0 = -5,126$ (2) МэВ, кулоновское взаимодействие не учитывалось), то при $A=4$ связанного состояния удастся достичь лишь начиная с $n \sim 20$, а при $n=50$ $E_U = -8,6$ МэВ, что значительно хуже оценки $E_U = -11,1$ МэВ, найденной в работе [4].

2. Отмеченные трудности естественно попытаться преодолеть посредством введения в функции (2) дополнительных вариационных параметров, обеспечивающих возможность достаточно гибкого учета корреляционных эффектов, при сохранении в максимальной степени основных достоинств базиса (полнота, наглядность, простота расчета матричных элементов, выражающихся для функций (2) в аналитическом виде для весьма широкого круга потенциалов). Одним из возможных приемов является введение в базис (2) системы вариационных векторов ϕ_k^i ($k=1, 2, \dots, A-1$), образующих своеобразный каркас, относительно которого пробная функция размазывается по гауссовскому закону:

$$\Phi^i = \int \exp \{ -(\rho - \rho^i) + \beta^i (\rho - \rho^i) \} P_L(\Omega^i) d\Omega^i / 8\pi^2. \quad (3)$$

Интегрирование в (3) по всевозможным ориентациям каркаса (включающее также и отражение осей) позволяет при соответствующем выборе весовой функции P_L строить состояния с определенным значением полного орбитального момента L и четности; в частном случае $L=0$, которым мы ограничимся для простоты в данной работе, $P_L \equiv 1$.

Для построения расчетной схемы основным является, как обычно, нахождение интеграла перекрытия

$$\langle i | j \rangle = \int \Phi^i \Phi^j d^3\rho_1 \dots d^3\rho_{A-1}. \quad (4)$$

Интегрируя по радиальным переменным, а также по Ω^j , получаем

$$\langle i | j \rangle = \{ \pi^{A-1} / \det(\beta^i + \beta^j) \}^{3/2} \exp \{ -\text{Sp} \{ (V^i + V^j) B^{ij} / 2 \} \} J^{ij} \quad (5)$$

где $B^{ij} \equiv 2\beta^i(\beta^i + \beta^j)^{-1}\beta^j$, V^i — матрица размера $(A-1) \times (A-1)$ с

элементами $V_{kl}^i = \mathbf{Q}_k^i \mathbf{Q}_l^i$, ($k, l=1, 2, \dots, A-1$), V^i — аналогично, а

$$J^{ij} \equiv \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \text{ch} \{ \rho^{i+} B^{ij} \rho^j \} d\chi^i \sin \theta^i d\theta^i d\omega^i / 8\pi^2. \quad (6)$$

Для расчета J^{ij} разложим каждый из векторов $\mathbf{Q}_k^i$ ($\mathbf{Q}_k^j$) по ортам $\mathbf{n}_1^i$, $\mathbf{n}_2^i$ и $\mathbf{n}_3^i$ ($\mathbf{n}_1^j$, $\mathbf{n}_2^j$ и $\mathbf{n}_3^j$), после чего с помощью унитарных преобразований $\mathbf{e}^i = U^i \mathbf{n}^i$ и $\mathbf{e}^j = U^j \mathbf{n}^j$, где $\mathbf{e}^i$ и $\mathbf{e}^j$ — новые орты, приведем подынтегральное выражение к виду $\text{ch}(\mathbf{e}^{i+} f^{ij} \mathbf{e}^j)$, где f^{ij} — диагональная матрица размера 3×3 с элементами $f_{\xi}^{ij} = \sum_{kq=1}^{A-1} (e_{\xi}^i \rho_k^i) B_{kq}^{ij} (e_{\xi}^j \rho_q^j)$. Выполняя в

(6) интегрирование по χ^i и θ^i (которое проводится теперь по ориентации тройки $\{\mathbf{e}_1^i, \mathbf{e}_2^i, \mathbf{e}_3^i\}$), получаем окончательно

$$J^{ij} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\omega \left\{ \frac{\text{sh}(f_{+}^{ij} \cos \omega + f_{-}^{ij})}{\sqrt{(2f_{+}^{ij} + f_{+}^{ij} \cos \omega)^2 - (f_{-}^{ij})^2}} + \frac{\text{sh}(f_{-}^{ij} \cos \omega + f_{+}^{ij})}{\sqrt{(2f_{-}^{ij} + f_{-}^{ij} \cos \omega)^2 - (f_{+}^{ij})^2}} \right\}, \quad (7)$$

где $f_{\pm}^{ij}$ — максимальный по модулю элемент (диагональной) матрицы f^{ij} , а $f_{\pm}^{ij} \equiv f_{+}^{ij} \pm f_{-}^{ij}$. Заметим, что квадраты величин f_{+}^{ij} , f_{-}^{ij} и $f_{\pm}^{ij}$ (от которых фактически и зависит J^{ij}) могут быть найдены из решения кубического уравнения *

$$(f^2)^3 + a_2 (f^2)^2 + a_1 (f^2)^1 + a_0 = 0, \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} a_0 &= \{3\text{Sp}(M) \text{Sp}(M^2) - 2\text{Sp}(M^3) - \text{Sp}^3(M)\}/6, \\ a_1 &= \{\text{Sp}^2(M) - \text{Sp}(M^2)\}/2, a_2 = -\text{Sp}(M); \\ M &\equiv BV^i BV^i. \end{aligned} \quad (9)$$

Матричные элементы оператора кинетической энергии можно найти, как обычно, путем дифференцирования интеграла перекрытия по вариационным параметрам:

$$\begin{aligned} \langle i|T|j \rangle &= \text{Sp} \{ 6\mu B^{ii} + 4B^{ii} \mu B^{ii} D^{ii} \} \langle i|j \rangle = \\ &= (\langle i|j \rangle / J^{ii}) \text{Sp} \{ \mu B^{ii} [6 - 4(V^i + V^i) B^{ii}] + 4B^{ii} \mu B^{ii} D^{ii} \} J^{ii}, \end{aligned} \quad (10)$$

где μ — матрица обратных масс (при традиционном определении якобиевских координат она диагональна, причем $\mu_{kk} = \hbar^2/2m_{k+1} + \hbar^2/2 \times \sum_{q=1}^k m_q$), а D^{ij} — матрица, составленная из операторов $\partial/\partial B_{kq}^{ij}$. По-

скольку известен явный вид J^{ij} , расчет $\langle i|T|j \rangle$ сводится к отысканию производных по вариационным параметрам величин f^{ij} , которые легко находятся из (8) — (9).

Действуя аналогично тому, как это сделано в работе [7], получаем для матричных элементов потенциала взаимодействия первой частицы со второй выражение

$$\langle i|V(|\rho_1\rangle)|j \rangle = (\langle i|j \rangle / J^{ii}) \pi^{3/2} \gamma_1^{i3/2} \times$$

* Степень уравнения (8) может быть и ниже трех. В частности, при $A=3$ всегда $a_0=0$ и уравнение оказывается квадратным.

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} V(R) R dR \int \exp \{-(R - t_i^{ij})^2 / \gamma_{ij}^{ij}\} \operatorname{ch} \{\rho^i + B^{ij} \rho^j\} / t_i^{ij} d\Omega^i / 8\pi^2, \quad (11)$$

где

$$t_i^{ij} \equiv \{(\beta^i + \beta^j)^{-1} (\beta^i \rho^i + \beta^j \rho^j)\}, \text{ а } \gamma_{ij}^{ij} \equiv (\partial / \partial \beta_{ij}^i) \ln \{\det (\beta^i + \beta^j)\}.$$

Матричные элементы потенциала для других пар частиц получаются отсюда простой процедурой перенумерации векторов $\mathbf{q}_h$. Как видно из (9), в случае гауссовского потенциала матричный элемент сводится к выражению, аналогичному $\langle i | j \rangle$; для потенциалов же другого вида может оказаться необходимым численный расчет уже как минимум двукратных интегралов. Несмотря на это, использование каркасных функций (3) вместо (2) может привести за счет ускорения сходимости вариационных оценок к более эффективной вычислительной схеме, особенно в случае потенциалов сложной формы.

3. В качестве иллюстрации использования каркасных функций приведем результаты простейших двухпараметрических расчетов систем трех и четырех тождественных частиц, связанных парными центральными спиновнезависимыми потенциалами. В разложении (1) полагалось $n=1$, каркас выбирался в виде правильного треугольника (при $A=3$) либо тетраэдра (при $A=4$) с ребром R_0 . Параметры β распределялись симметричным образом по всем междучастичным связям (матрица β бралась диагональной, причем

$$\beta_{11} = 3\beta_0/2, \beta_{22} = 2\beta_0 \text{ при } A=3 \text{ и } \beta_{11} = 2\beta_0, \beta_{22} = 8\beta_0/3 \text{ и } \beta_{33} = 3\beta_0 \text{ при } A=4);$$

минимизация проводилась, таким образом, по двум параметрам: R_0 и β_0 . В таблице представлены результаты расчета трех- и четырехчастичных систем для вариантов: (а) NN -потенциал Бейкера [8], (б) NN -потенциал Афнана—Танга (вариант SI работы [10]) и (в) $\alpha\alpha$ -потенциал Али—Бодмера (вариант d_0 работы [11]). Как видно из таблицы, наибольший эффект за счет введения в пробную функцию «каркасных» параметров достигается в наиболее сложном случае (системы 3α и, особенно, 4α), что находится в согласии с приведенными в п. 1 соображениями. Так, если при $A=3$ простейшая каркасная функция дает примерно тот же результат, что и суперпозиция трех (симметризованных) функций (2) общего вида, содержащих в общей сложности 11 вариационных параметров, то при $A=4$ использовавшаяся функция оказывается эквивалентной уже $n \approx 20$ (а с учетом симметризации $n \approx 500(!)$) функциям (2) с общим числом вариационных параметров ~ 140 . Для потенциалов более простой формы выигрыш, как и следо-

Верхние оценки E_U энергии, оптимальные значения вариационных параметров R_0 и β_0 , а также среднеквадратичные радиусы R_{rms} , найденные из расчетов с использованием простейшей двухпараметрической каркасной функции для различных трех- и четырехчастичных систем

Вариант	(а)		(б)		(в)	
А	3	4	3	4	3	4
E_U , МэВ	—6,91	—37,05	—0,90	—15,42	—0,96	—1,95
R_0 , Ф	0,11	0,07	0,23	0,08	3,73	3,69
β_0 , Ф ⁻²	0,10	0,11	0,06	0,06	0,25	0,17
R_{rms} , Ф	1,29	1,11	1,66	1,48	2,22	2,38

вало ожидать, уже не столь значителен, однако не исключено, что использование каркасных функций общего вида сможет заметно ускорить сходимость и в этих случаях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Schmid E. W. Nucl. Phys., 1962, 32, p. 82. [2] Kalos M. H. Phys. Rev., 1962, 128, p. 1791. [3] Delves L. M., Blatt J. M. Nucl. Phys., 1967, A98, p. 503. [4] Nakaichi-Maeda S. et al. Progr. Theor. Phys., 1980, 64, p. 1315. [5] Strayer M. R., Sauer P. U. Nucl. Phys., 1977, A231, p. 1. [6] Kukulin V. I., Krasnopol'sky V. M. J. Phys., 1977, G3, p. 795. [7] Колесников Н. Н., Тарасов В. И., Старосотников М. И. Деп. ВИНТИ, № 3832—80. [8] Baker G. A. et al. Phys. Rev., 1962, 125, p. 1754. [9] Колесников Н. Н., Тарасов В. И. Ядерная физика, 1982, 35, с. 619. [10] Afnan I. R., Tang Y. C. Phys. Rev., 1968, 175, p. 1337. [11] Ali S., Bodmer A. R. Nucl. Phys., 1966, 80, p. 99.

Поступила в редакцию
04.10.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 5

УДК 537.56

РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ ОДНО- И ДВУКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ ГЕЛИЯ ПРОТОНАМИ

В. А. Сидорович, В. С. Николаев

(НИИЯФ)

Ранее [1] было показано, что полные экспериментальные сечения ионизации водорода и гелия быстрыми ионами, атомами и молекулами, содержащими не более двух электронов, при относительных скоростях сталкивающихся частиц $v \geq 6 \cdot 10^8$ см/с в пределах 20% совпадают с вычисленными в приближении Борна с кулоновскими матричными элементами ионизационных переходов. Для дальнейшего изучения возможностей использования этого приближения в настоящей работе рассчитаны сечения одно- и двукратной ионизации атомов гелия σ^{i1} и σ^{i2} протонами с энергией E от 0,01 до 5 МэВ. Расчет выполнен в приближении независимых электронов, в котором рассматриваемые нами сечения σ^{in} ($n=1$ и 2) записываются в виде [2, 3]

$$\sigma^{in} = 2\pi \int P^{in}(b) b db \quad (1)$$

при

$$P^{i1}(b) = 2\omega_1(1 - \omega_2), \quad (2)$$

$$P^{i2}(b) = \omega_1\omega_2, \quad (3)$$

где $P^{in}(b)$ — вероятность n -кратной ионизации при заданном прицельном параметре b , ω_1 и ω_2 — вероятности перехода в континуум первого и второго электронов. Если вероятности берутся в первом приближении Борна, то формулы (1)–(3) соответствуют упрощенному второму борновскому приближению.

Борновские вероятности ω_m^B ($m=1$ и 2) вычислялись по методу, который основан на использовании известного выражения для борновского матричного элемента M_m ионизационного перехода водородоподобной системы и был применен впервые Шиффом [4] при расчете вероятностей перезарядки, а в расчетах вероятностей ионизации использовался в работах [5–15]. Однако в [5–13] при расчете величин ω^B была допущена ошибка [15–16]. Эффективные заряды ядер Z_m^* в матричных элементах M_m^B , как и в работе [1], определялись из энергии связи удаляемых электронов, которая считалась одинаковой для каж-