

Новый метод построения осцилляторных функций квантовой системы тождественных частиц в симметризованных координатах

А. А. Гусев

*Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, г. Дубна, Московской обл., 141980, Россия*

Сформулирована в новых симметризованных координатах квантовая модель кластера, состоящего из A тождественных частиц с внутренними парными взаимодействиями, во внешнем поле мишени. Разработан новый метод и реализован в системе компьютерной алгебры MAPLE символьный алгоритм построения собственных функций $(A - 1)$ -мерного осциллятора симметричных или антисимметричных относительно перестановок A частиц. Даны примеры построения симметричных и антисимметричных функций составной системы из нескольких тождественных частиц в одномерном евклидовом пространстве и выполнен анализ свойств симметрии решений. Выполнен анализ систем от трёх до шести частиц в одномерном евклидовом пространстве и выявлено соответствие между представлениями групп симметрии D_3 и T_d для $A = 3$ и $A = 4$ и симметризованными или антисимметризованными осцилляторными функциями.

Показано, что преобразование $(A - 1)$ -мерных осцилляторных функций в симметризованных координатах к якобиевским координатам сводится к перестановке координат и $(A - 1)$ -мерных конечных вращений, реализованных с помощью $(A - 1)$ -мерных осцилляторных функций Вигнера. Даны примеры построения с помощью предложенного алгоритма и метода математической индукции симметризованных или антисимметризованных осцилляторных функций в замкнутом аналитическом виде. Подход ориентирован на решение задачи туннелирования кластеров, состоящих из нескольких тождественных частиц через отталкивающие барьеры мишени.

Ключевые слова: метод и алгоритм, тождественные частицы, симметричные или антисимметричные осцилляторные функции, симметризованные координаты.

1. Введение

Квантовый гармонический осциллятор является базовой математической моделью в современной физике. Наиболее широкое применение осцилляторные функции находят при решении задач молекулярной, атомной и ядерной физики, где они используются в качестве базиса при разложении искомой волновой функции квантовой системы, состоящей из A тождественных частиц, которая должна быть в соответствие с принципом Паули полностью симметрична или антисимметрична относительно перестановки A тождественных частиц [1]. Конструирование искомого решения задачи в форме линейных комбинаций решений $(A - 1)$ -мерного гармонического осциллятора, которые полностью симметричны или антисимметричны относительно перестановки координат A тождественных частиц, традиционно реализуется с помощью различных трудоёмких рекуррентных методов, алгоритмов и программ [1–10]). Однако получение решения этой задачи в замкнутом аналитическом виде остаётся сложной и до конца нерешённой проблемой [11].

Один из перспективных подходов к конструированию осцилляторных базисных функций для четырёх тождественных частиц был предложен в [2–4]. В этих работах было показано, что можно сконструировать достаточно эффективный алгоритм для генерации симметричных (S) или антисимметричных (A) состояний,

Статья поступила в редакцию 30 мая 2013 г.

Работа выполнена в рамках темы ОИЯИ «Математическая поддержка экспериментальных и теоретических исследований, проводимых ОИЯИ» 09-6-1060-2005/2013 и программы Боголюбов–Инфельд. Работа поддержана грантами ОИЯИ 13-602-02, РФФИ 11-01-00523 и 13-01-00668. Автор благодарит С.И. Виницкого, В.П. Гердта, А. Гоздза, В.Л. Дербова и О. Чулуунбаатара за сотрудничество и поддержку.

используя симметризованные координаты вместо традиционно применяемых якобиевских координат. Однако до настоящего времени этот подход не был обобщён для квантовых систем, состоящих из произвольного конечного числа A тождественных частиц. Представляет интерес развить и применить этот подход для решения задачи туннелирования кластера, состоящего из нескольких связанных тождественных частиц, через отталкивающие потенциальные барьеры мишени. Ранее эта задача, имеющая важное значение для изучения механизма квантовой диффузии молекул, была решена только для пары связанных частиц [12, 13]. Такой подход можно адаптировать также и для анализа моделей тетраэдральной и октаэдральной симметрии ядер в базисе функций многомерного гармонического осциллятора [14].

Цель работы – представить новые формулировку, метод и алгоритм построения симметричных и антисимметричных осцилляторных функций квантовой системы тождественных частиц относительно их перестановки в новых симметризованных координатах, которые используются в качестве базиса при решении задачи для системы тождественных частиц с парными взаимодействиями осцилляторного типа во внешнем поле.

В настоящей работе мы рассмотрим модель квантовой составной системы – кластера, состоящей из A тождественных частиц, взаимодействующих короткодействующими парными потенциалами осцилляторного типа и находящихся во внешнем поле мишени. Спиновая часть волновой функции предполагается известной, поэтому рассматривается только пространственная часть волновой функции, которая должна быть симметричной или антисимметричной относительно перестановки A тождественных частиц [15–17]. Исходную задачу для квантовой составной системы A тождественных частиц в d -мерном евклидовом пространстве в декартовых координатах редуцируем к задаче в симметризованных координатах: с внутренними степенями свободы – движение в $(A - 1) \times d$ -мерном внутреннем конфигурационном пространстве в базисе $(A - 1) \times d$ -мерного гармонического осциллятора, и внешними степенями свободы – движение центра масс составной системы A -частиц в d -мерном евклидовом пространстве. Редукция в симметризованных координатах не нарушает свойства симметрии решаемой задачи для системы тождественных частиц, т.е. её можно назвать «демократической», в отличие от кластерной редукции трансляционно-инвариантной модели в традиционных якобиевских координатах, которая подразумевает разбиение системы на наборы неравноправных подсистем [6, 9]. Для наглядности изложения ограничимся так называемым s -волновым приближением [12], реализованным в одномерном евклидовом пространстве ($d = 1$).

Отметим, что основной выигрыш при введении симметризованных координат по сравнению с традиционными якобиевскими координатами состоит в обеспечении инвариантности по отношению к перестановкам A тождественных частиц гамильтониана, описывающего движение кластера во внешнем поле мишени. Это обстоятельство позволяет конструировать не только базисные функции симметричные (s) или антисимметричные (a) при перестановке $(A - 1)$ относительных (внутренних) координат, но и базисные функции симметричные (S) или антисимметричные (A) при перестановке исходных A декартовых координат. Будем называть разложение искомого решения задачи в базисе такого типа – представлением симметризованных координат (ПСК).

Структура работы. В разделе 2 дана постановка задачи в якобиевских и симметризованных координатах. В разделе 3 дана формулировка метода и алгоритма построения представления симметризованных координат. В заключении обсуждаются результаты и перспективы применения развитого подхода.

2. Постановка задачи

Рассмотрим модель квантовой составной системы – кластера, состоящей из A тождественных частиц с массой m и набором декартовых координат $x_i \in \mathbf{R}^d$ в d -мерном евклидовом пространстве, взаимодействующих короткодействующими

парными потенциалами $\tilde{V}^{\text{pair}}(\tilde{x}_{ij})$ по относительным координатам, $\tilde{x}_{ij} = \tilde{x}_i - \tilde{x}_j$, подобными потенциалу гармонического осциллятора $\tilde{V}^{\text{hosc}}(\tilde{x}_{ij}) = \frac{m\omega^2}{2}(\tilde{x}_{ij})^2$ с частотой ω . Динамика такой системы, находящейся во внешнем поле мишени с потенциалами взаимодействия $\tilde{V}(\tilde{x}_i)$ с каждой из частиц, в $A \times d$ -мерном конфигурационном пространстве $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_A) \in \mathbf{R}^{A \times d}$ описывается уравнением Шрёдингера, которое в осцилляторных единицах $x_{\text{osc}} = \sqrt{\hbar/(m\omega\sqrt{A})}$, $p_{\text{osc}} = \sqrt{(m\omega\sqrt{A})/\hbar} = x_{\text{osc}}^{-1}$, и $E_{\text{osc}} = \hbar\omega\sqrt{A}/2$, и безразмерных переменных $x_i = \tilde{x}_i/x_{\text{osc}}$, $x_{ij} = \tilde{x}_{ij}/x_{\text{osc}} = x_i - x_j$ имеет вид:

$$\left[-\sum_{i=1}^A \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i,j=1;i < j}^A \frac{(x_{ij})^2}{A} + \sum_{i,j=1;i < j}^A U^{\text{pair}}(x_{ij}) + \sum_{i=1}^A V(x_i) - E \right] \Psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (1)$$

где $E = \tilde{E}/E_{\text{osc}} = P^2$ – полная энергия системы A частиц, $P = \tilde{P}/p_{\text{osc}} = \tilde{P}x_{\text{osc}}$ – полный импульс системы A частиц,

$$V^{\text{pair}}(x_{ij}) = \tilde{V}^{\text{pair}}(x_{ij}x_{\text{osc}})/E_{\text{osc}}, \quad V^{\text{hosc}}(x_{ij}) = \tilde{V}^{\text{hosc}}(x_{ij}x_{\text{osc}})/E_{\text{osc}} = \frac{1}{A}(x_{ij})^2$$

и

$$V(x_i) = \tilde{V}(x_ix_{\text{osc}})/E_{\text{osc}}, \quad U^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{pair}}(x_{ij}) - V^{\text{hosc}}(x_{ij}),$$

т.е., если $V^{\text{pair}}(x_{ij}) = V^{\text{hosc}}(x_{ij})$, то $U^{\text{pair}}(x_{ij}) = 0$.

Цель работы найти решения $\Psi(\mathbf{x}) \equiv \Psi(x_1, \dots, x_A)$ уравнения (1), полностью симметричные (или антисимметричные) относительно операций перестановок A частиц, принадлежащих группе перестановок S_n . Под перестановками частиц, как обычно, подразумеваем перестановки соответствующих декартовых координат $x_i \leftrightarrow x_j$, $i, j = 1, \dots, A$.

Введём координаты Якоби, $\mathbf{y} = \mathbf{J}\mathbf{x}$, следуя одному из возможных определений

$$y_0 = \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{t=1}^A x_t, \quad y_s = \frac{1}{\sqrt{s(s+1)}} \left(\sum_{t=1}^s x_t - sx_{s+1} \right), \quad s = 1, \dots, A-1. \quad (2)$$

Обратное преобразование координат реализуется с помощью транспонированной матрицы $\mathbf{J}^{-1} = \mathbf{J}^T$, т.е. \mathbf{J} – ортогональная матрица с парой комплексно сопряжённых собственных значений, с абсолютными значениями равными единице. В координатах Якоби имеют место известные соотношения

$$\sum_{i=0}^{A-1} y_i y_i = \sum_{i=1}^A x_i x_i = r^2, \quad \sum_{i,j=1}^A x_{ij}^2 = 2A \sum_{i=0}^{A-1} y_i^2 - 2 \left(\sum_{i=1}^A x_i \right)^2 = 2A \sum_{i=1}^{A-1} y_i^2,$$

с учётом которых уравнение (1) принимает вид

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial y_0^2} + \sum_{i=1}^{A-1} \left(-\frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + (y_i)^2 \right) + U(y_0, \dots, y_{A-1}) - E \right] \Psi(y_0, \dots, y_{A-1}) = 0, \quad (3)$$

$$U(y_0, \dots, y_{A-1}) = \sum_{i,j=1;i < j}^A U^{\text{pair}}(x_{ij}(y_1, \dots, y_{A-1})) + \sum_{i=1}^A V(x_i(y_0, \dots, y_{A-1})),$$

В силу (2) уравнение (3) не является инвариантным относительно перестановок $y_i \leftrightarrow y_j$ при $i, j = 1, \dots, A - 1$.

Преобразование от декартовых координат x_i к одному из возможных наборов симметризованных координат ξ_i имеет вид, $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{C}\mathbf{x}$, ($C_{s1} = C_{1s} = C_{11} = 1/\sqrt{A}$, $C_{ss} = a_0/\sqrt{A}$, $C_{ss'} = a_1/\sqrt{A}$, $s, s' = 2, \dots, A$, $s \neq s'$):

$$\begin{aligned} \xi_0 &= \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{t=1}^A x_t, & \xi_s &= \frac{1}{\sqrt{A}} \left(x_1 + \sum_{t=2}^A a_0 x_t + \sqrt{A} x_{s+1} \right), & s &= 1, \dots, A - 1, \\ x_1 &= \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{t=0}^{A-1} \xi_t, & x_s &= \frac{1}{\sqrt{A}} \left(\xi_0 + \sum_{t=1}^{A-1} a_0 \xi_t + \sqrt{A} \xi_{s-1} \right), & s &= 2, \dots, A, \end{aligned} \quad (4)$$

где $a_0 = 1/(1 - \sqrt{A}) < 0$, $a_1 = a_0 + \sqrt{A}$. Обратное преобразование реализуется с той же матрицей $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}$, $\mathbf{C}^2 = \mathbf{I}$, т. е. $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$ – симметричная ортогональная матрица с собственными значениями $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = 1, \dots, \lambda_A = 1$ and $\det \mathbf{C} = -1$. При $A = 2$ симметризованные координаты (4) подобны с точностью до нормировочных множителей симметризованным координатам Якоби (2), рассмотренным в [10], тогда как при $A = 4$ они соответствуют другому выбору симметризованных координат $(\ddot{x}_4, \ddot{x}_1, \ddot{x}_2, \ddot{x}_3)^T = C(x_4, x_1, x_2, x_3)^T$, рассмотренных в [1–5], и упомянутых ранее в [18]. Принимая во внимание соотношения $a_1 - a_0 = \sqrt{A}$, $a_0 - 1 = a_0 \sqrt{A}$, относительные координаты $x_{ij} \equiv x_i - x_j$ пары частиц i и j выражаются в терминах только $(A - 1)$ внутренних симметризованных координат:

$$x_{ij} = \xi_{i-1} - \xi_{j-1} \equiv \xi_{i-1, j-1}, \quad x_{i1} = \xi_{i-1} + a_0 \sum_{i'=1}^{A-1} \xi_{i'}, \quad i, j = 2, \dots, A. \quad (5)$$

В рассматриваемой задаче достаточно рассмотреть только абсолютные значения x_{ij} , тогда $(A - 1)(A - 2)/2$ из «старых» относительных координат, определённых через исходные декартовы координаты, выражаются через «новые» относительные симметризованные координаты, а остальные $(A - 1)$ из «старых» относительных координат выражаются в терминах всех $(A - 1)$ внутренних симметризованных координат. Эти важные соотношения существенно упрощают процедуру симметризации (или антисимметризации) осцилляторных базисных функций и вычисления соответствующих интегралов парного взаимодействия $V^{\text{pair}}(x_{ij})$.

Симметризованные координаты связаны с якобиевскими координатами соотношением

$$\mathbf{y} = \mathbf{B}\boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{B} = \mathbf{J}\mathbf{C}. \quad (6)$$

Здесь $\text{diag} \mathbf{B} = \{1, b_1^0, \dots, b_{A-1}^0\}$, $B_{1j} = B_{j1} = 0$, $j = 2, \dots, A - 1$; $B_{ij} = b_j^-, j > i$; $B_{ij} = b_i^+, i > j$; где $b_s^+ = 1/((\sqrt{A} - 1)\sqrt{s(s+1)})$, $b_s^- = \sqrt{A}/((\sqrt{A} - 1)\sqrt{s(s+1)})$, и $b_s^0 = (1 + s - s\sqrt{A})/((\sqrt{A} - 1)\sqrt{s(s+1)})$. Координата центра масс в симметризованных и якобиевских координатах совпадает, $y_0 = \xi_0$, тогда как внутренние координаты относительно центра масс связаны ортогональным преобразованием с матрицей \mathbf{M} размерностью $(A - 1) \times (A - 1)$ с элементами $M_{ij} = B_{i+1, j+1}$ и $\det \mathbf{M} = (-1)^{A \times d}$, т.е. матрицей, полученной вычёркиванием в матрице \mathbf{B} первой строки и первого столбца. Обратное преобразование даётся матрицей $\mathbf{B}^{-1} = (\mathbf{J}\mathbf{C})^{-1} = \mathbf{C}\mathbf{J}^T = \mathbf{B}^T$, т.е., \mathbf{B} – ортогональная матрица.

Например, при $A = 3$ и $d = 1$, так что $((A - 2) \times d = 1)$ -мерные объекты даются линиями $\xi_i - \xi_j = 0$, (рис. 1), тогда как при $A = 4$ и $d = 1$, так что

$((A - 2) \times d = 2)$ -мерные объекты изображаются двумерными плоскостями. Линии в \mathbf{R}^4 , соответствующие пересечениям координатных пространств \mathbf{R}^3 (отмеченных 1, 2, 3, 4) и пространств парных соударений \mathbf{R}^3 (отмеченных 12, и т.д.) со сферой \mathbf{S}^2 , в пространстве центра масс \mathbf{R}^3 показаны на рис. 2. Схематическое трёхмерное изображение на левой панели рис. 1 показывает координатные плоскости (отмеченные $\boxed{1}$, $\boxed{2}$, $\boxed{3}$) и плоскость центра масс в конфигурационном пространстве \mathbf{R}^3 (его видимая часть имеет форму шестиугольника) вместе с линиями пересечения этих плоскостей с плоскостями парных ударов ($x_i = x_j$), которые соответствуют линиям парных соударений ($\{x_i = x_j, x_1 + x_2 + x_3 = 0\}$) (отмеченных 12, 23, 13) в плоскости центра масс $x_1 + x_2 + x_3 = 0$, принадлежащей \mathbf{R}^2 . Различные проекции этой геометрической картины проясняют природу и взаимосвязь якобиевских (y_1, y_2) и симметризованных (ξ_1, ξ_2) координат, изображённых, соответственно, на средней и правой панелях, связанных указанным выше преобразованием в плоскости центра масс \mathbf{R}^2 . Это преобразование иллюстрирует изоморфизм группы симметрии правильного треугольника D_3 в \mathbf{R}^2 и группы перестановок S_3 трёх тождественных частиц ($A = 3$).

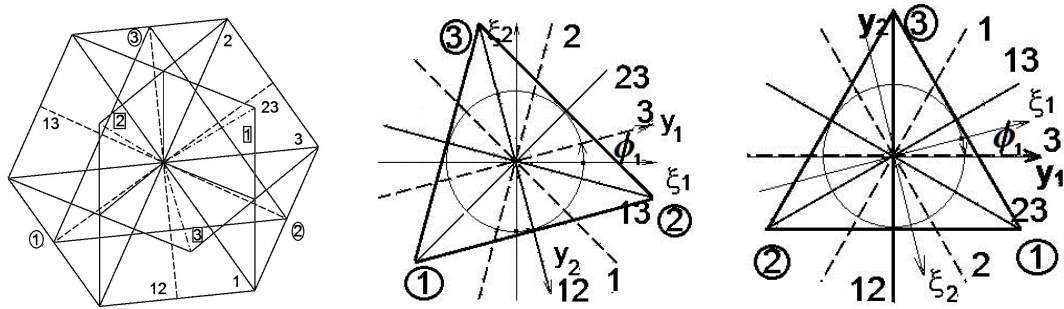


Рис. 1. Левая панель. Координатные плоскости $x_i = 0$ (отмеченные $\boxed{1}$, $\boxed{2}$, $\boxed{3}$), плоскость центра масс $x_1 + x_2 + x_3 = 0$ и линии пересечения $\{x_i = x_j, x_1 + x_2 + x_3 = 0\}$ (отмеченные 12, 23, 13) плоскостей парных ударов $x_i = x_j$ с плоскостью движения центра масс. Средняя и правая панели.

Симметризованные координаты (ξ_1, ξ_2) и координаты Якоби (y_1, y_2) , связанные несобственным ортогональным преобразованием (7) в плоскости движения центра масс, и равносторонний треугольник, иллюстрирующий изоморфизм между группой симметрии D_3 в \mathbf{R}^2 и группой перестановок S_3 трёх объектов 1, 2, 3 (отмеченных кружками)

При $A = 3$ и $d = 1$ соотношение между внутренними якобиевскими координатами

$$y_1 = 1/\sqrt{2}(x_1 - x_2), \quad y_2 = 1/\sqrt{6}(x_1 + x_2 - 2x_3)$$

и симметризованными координатами

$$\xi_1 = 1/\sqrt{3}(x_1 + 1/2(\sqrt{3} - 1)x_2 - 1/2(\sqrt{3} + 1)x_3),$$

$$\xi_2 = 1/\sqrt{3}(x_1 - 1/2(\sqrt{3} + 1)x_2 + 1/2(\sqrt{3} - 1)x_3)$$

даётся ортогональной матрицей $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1(\phi_1)\mathbf{M}_0$:

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \begin{pmatrix} b_1^0 & b_1^- \\ b_2^+ & b_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\sqrt{6} - \sqrt{2})/4 & (\sqrt{6} + \sqrt{2})/4 \\ (\sqrt{6} + \sqrt{2})/4 & -(\sqrt{6} - \sqrt{2})/4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi_1 & -\sin \phi_1 \\ \sin \phi_1 & \cos \phi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi_1 & \sin \phi_1 \\ -\sin \phi_1 & \cos \phi_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7) \end{aligned}$$

Это преобразование даётся произведением перестановки координат $(\xi_1, \xi_2) \rightarrow (\xi_2, \xi_1)$ и вращением против часовой стрелки на угол $\phi_1 = \pi/12$.

При $A = 4$ и $d = 1$ соотношение между внутренними якобиевскими координатами

$$y_1 = (x_1 - x_2)/\sqrt{2}, \quad y_2 = (x_1 + x_2 - 2x_3)/\sqrt{6}, \quad y_3 = (x_1 + x_2 + x_3 - 3x_4)/\sqrt{12}$$

и симметризованными координатами

$$\xi_1 = (x_1 + x_2 - x_3 - x_4)/2, \quad \xi_2 = (x_1 - x_2 + x_3 - x_4)/2, \quad \xi_3 = (x_1 - x_2 - x_3 + x_4)/2$$

даётся ортогональным преобразованием с матрицей \mathbf{M} :

$$M = \begin{pmatrix} b_1^0 & b_1^- & b_1^- \\ b_2^+ & b_2^0 & b_2^- \\ b_3^+ & b_3^+ & b_3^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{6}/3 & -\sqrt{6}/6 & \sqrt{6}/6 \\ \sqrt{3}/3 & \sqrt{3}/3 & -\sqrt{3}/3 \end{pmatrix}.$$

Представим одну из шести декомпозиций матрицы $\mathbf{M} = \mathbf{M}_3(\phi_3)\mathbf{M}_2(\phi_2)\mathbf{M}_1(\phi_1)$:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi_3 & \sin \phi_3 \\ 0 & -\sin \phi_3 & \cos \phi_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi_2 & \sin \phi_2 & 0 \\ -\sin \phi_2 & \cos \phi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi_1 & \sin \phi_1 \\ 0 & -\sin \phi_1 & \cos \phi_1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Это преобразование даётся произведением трёх вращений против часовой стрелки: первое из них — на угол $\phi_1 = 3\pi/4$ вокруг первой старой оси, второе — на угол $\phi_2 = \pi - \arctan(\sqrt{2}) \approx 16\pi/23$ вокруг новой третьей оси, и третье — на угол $\phi_3 = \pi/3$ вокруг новой первой оси. Вторым углом ϕ_2 является дополнительным к углу между ребром и гранью правильного тетраэдра, связанного с симметризованными координатами $\{\xi_1, \xi_2, \xi_3\} \in \mathbf{R}^3$, перпендикулярными к граням куба, в который вписан тетраэдр. Это преобразование иллюстрирует изоморфизм между группой правильного тетраэдра T_d in \mathbf{R}^3 и группой перестановок S_4 четырёх тождественных частиц ($A = 4$), обсуждаемой детально в [2] для случая $d = 3$. Три преобразования $\mathbf{M} = \mathbf{M}_3(\phi_3)\mathbf{M}_2(\phi_2)\mathbf{M}_1(\phi_1)$ показаны на рис. 2.

В симметризованных координатах уравнение (1) принимает вид

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_0^2} + \sum_{i=1}^{A-1} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + (\xi_i)^2 \right) + U(\xi_0, \dots, \xi_{A-1}) - E \right] \Psi(\xi_0, \dots, \xi_{A-1}) = 0, \quad (9)$$

$$U(\xi_0, \dots, \xi_{A-1}) = \sum_{\substack{i,j=1; \\ i < j}}^A U^{\text{pair}}(x_{ij}(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})) + \sum_{i=1}^A V(x_i(\xi_0, \dots, \xi_{A-1})).$$

Отметим, что преобразование из исходных декартовых координат к якобиевским даются вращениями в $A \times d$ -конфигурационном пространстве, тогда как преобразование из исходных декартовых координат к симметризованным координатам включает также перестановки и отражения. Преобразование между якобиевскими и симметризованными координатами в гиперплоскости центра масс даются вращениями в $(A-1) \times d$ -конфигурационном пространстве, но для нечётных $A \times d$ они включают также перестановки или отражения. Ключевой момент использования симметризованных координат состоит в том, что в этих координатах симметрия при перестановке двух тождественных частиц совпадает с симметрией относительно геометрического отражения в $(A-2) \times d$ -мерной плоскости $\xi_i - \xi_j = 0$.

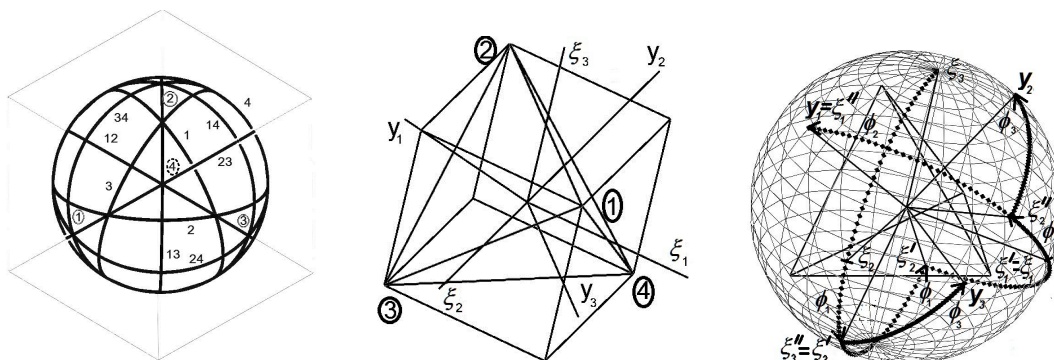


Рис. 2. Левая панель. Пересечения в \mathbf{R}^4 координатных пространств $x_i = 0$ (отмеченных 1, 2, 3, 4), плоскостей парных ударов $x_i = x_j$ (отмеченных 12, ...) на сфере S^2 в пространстве центра масс \mathbf{R}^3 . Средняя и правая панели. Симметризованные координаты (ξ_1, ξ_2, ξ_3) , координаты Якоби (y_1, y_2, y_3) , собственное ортогональное преобразование (8), как произведение $M = M_3(\phi_3)M_2(\phi_2)M_1(\phi_1)$ трёх поворотов относительно координатных осей ξ_1, ξ_2, ξ_3 , и $y_1 = \xi_1'$, и тетраэдр, иллюстрирующий изоморфизм между группой симметрии T_d в \mathbf{R}^3 и группой перестановок S_4 четырёх объектов 1, 2, 3, 4 (отмеченных кружками)

В силу (5) уравнение (9) *инвариантно* относительно перестановок $\xi_i \leftrightarrow \xi_j$ at $i, j = 1, \dots, A-1$, т.е. *инвариантность* уравнения (1) при перестановках $x_i \leftrightarrow x_j$, $i, j = 1, \dots, A$ сохраняется. Это факт – проявление одного из наиболее важных свойств предложенного подхода.

3. Представление симметризованных координат

Для наглядности изложения ограничимся рассмотрением решения уравнения (9) во внутренних симметризованных координатах $\{\xi_1, \dots, \xi_{A-1}\} \in \mathbf{R}^{A-1}$, $x_i \in \mathbf{R}^1$, в случае одномерного евклидова пространства ($d = 1$). Соответствующее уравнение описывает $(A-1)$ -мерный осциллятор с собственными функциями

$\Phi_j(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$ и собственными значениями энергии $E_j = 2 \sum_{k=1}^{A-1} i_k + A - 1$;

$$\left[\sum_{i=1}^{A-1} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + (\xi_i)^2 \right) - E_j \right] \Phi_j(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) = 0, \quad (10)$$

где $i_k, k = 1, \dots, A-1$ – целые числа, $i_k = 0, 1, 2, 3, \dots$. Собственные функции $\Phi_j(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$ выражаются в терминах собственных функций одномерного осциллятора в слое $\Omega(E_j) = \{i_1, \dots, i_{A-1} | 2 \sum_{k=1}^{A-1} i_k + A - 1 = E_j\}$

$$\Phi_j(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) = \sum_{\Omega(E_j)} \beta_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^{(j)} \bar{\Phi}_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}), \quad (11)$$

$$\bar{\Phi}_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) = \prod_{k=1}^{A-1} \bar{\Phi}_{i_k}(\xi_k), \quad \bar{\Phi}_{i_k}(\xi_k) = \frac{\exp(-\xi_k^2/2) H_{i_k}(\xi_k)}{\sqrt{4\pi} \sqrt{2^{i_k}} \sqrt{i_k!}},$$

где $H_{i_k}(\xi_k)$ – полиномы Эрмита [19].

В общем случае, уровень энергии $E_f = 2f + A - 1$, $f = \sum_{k=1}^{A-1} i_k$, $(A-1)$ -мерного осциллятора [20] имеет кратность вырождения $p = (A + f - 2)! / f! / (A - 2)!$ по

отношению к стандартным собственным функциям $\bar{\Phi}_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$, т.е. при $\beta_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^{(j)} = \delta_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}][i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}]}$. Это вырождение позволяет выполнить искомую симметризацию линейных комбинаций с помощью описанного ниже алгоритма подходящего выбора значений коэффициентов $\beta_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^{(j)}$ и оценить кратность вырождения собственных значений нижней части спектра энергии, используемых в приложениях.

Шаг 1. Симметризация относительно перестановок $A - 1$ частиц

Для состояний, симметричных относительно перестановок $i = [i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]$ ($A - 1$) частиц, коэффициенты имеют вид:

$$\beta_{[i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}]}^{(i)} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N_\beta}}, & [i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}] \text{ перестановка } [i_1, i_2, \dots, i_{A-1}], \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (12)$$

Здесь $N_\beta = (A - 1)! / \prod_{k=1}^{N_v} v_k!$, – число перестановок $[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]$, $N_v \leq A - 1$ – число различных значений i_k в мультииндексе $i = [i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]$, и v_k – число повторений данного значения i_k .

Табл. 1 демонстрирует правила соответствия между наборами квантовых чисел $[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]$ и сквозной нумерацией j собственных функций $\Phi_j^s(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$ для симметричных состояний $(A - 1)$ -мерного гармонического осциллятора с собственными значениями энергии E_j^s , нумерованных в неубывающем порядке, $E_1^s = A - 1 < E_2^s \leq E_3^s \leq E_4^s \leq \dots$, для A частиц с вырожденным спектром $E_j^s = 2 \sum_{k=1}^{A-1} i_k + A - 1$.

Таблица 1

Первые осцилляторные функции,
 $\Phi_j^s(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}) = |[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}] = \Phi_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^s(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$ **симметричные**
относительно перестановок $(A - 1)$ частиц, число перестановок с
повторениями N_β , и относительные собственные значения
 $\Delta E_j^s = E_j^s - E_1^s = 2 \sum_{k=1}^{A-1} i_k \leq 8, E_1^s = A - 1.$

A=3			A=4			A=5			ΔE_j^s
j	$ [i_1, i_2]\rangle$	N_β	j	$ [i_1, i_2, i_3]\rangle$	N_β	j	$ [i_1, i_2, i_3, i_4]\rangle$	N_β	
1	$ [0, 0]\rangle$	1	1	$ [0, 0, 0]\rangle$	1	1	$ [0, 0, 0, 0]\rangle$	1	0
2	$ [0, 1]\rangle$	2	2	$ [0, 0, 1]\rangle$	3	2	$ [0, 0, 0, 1]\rangle$	4	2
3	$ [0, 2]\rangle$	2	3	$ [0, 0, 2]\rangle$	3	3	$ [0, 0, 0, 2]\rangle$	4	4
4	$ [1, 1]\rangle$	1	4	$ [0, 1, 1]\rangle$	3	4	$ [0, 0, 1, 1]\rangle$	6	4
5	$ [0, 3]\rangle$	2	5	$ [0, 0, 3]\rangle$	3	5	$ [0, 0, 0, 3]\rangle$	4	6
6	$ [1, 2]\rangle$	2	6	$ [0, 1, 2]\rangle$	6	6	$ [0, 0, 1, 2]\rangle$	12	6
			7	$ [1, 1, 1]\rangle$	1	7	$ [0, 1, 1, 1]\rangle$	4	6
7	$ [0, 4]\rangle$	2	8	$ [0, 0, 4]\rangle$	3	8	$ [0, 0, 0, 4]\rangle$	4	8
8	$ [1, 3]\rangle$	2	9	$ [0, 1, 3]\rangle$	6	9	$ [0, 0, 1, 3]\rangle$	12	8
9	$ [2, 2]\rangle$	1	10	$ [0, 2, 2]\rangle$	3	10	$ [0, 0, 2, 2]\rangle$	6	8
			11	$ [1, 1, 2]\rangle$	3	11	$ [0, 1, 1, 2]\rangle$	12	8
						12	$ [1, 1, 1, 1]\rangle$	1	8

С увеличением A для данного $E' = E_j^s - E_1^s$ кратность вырождения мультиплетно, т.е. число $p_s \leq p$ симметричных собственных функций, соответствующих одному значению энергии, сначала резко возрастает, а затем выходит на плато. При фиксированном A с увеличением E' кратность вырождения возрастает быстрее для больших значений A . Например, для собственного значения $E' = 6$ при $A = 2$ оно не вырождено ($p_s = 1$), при $A = 3$ оно дважды вырождено ($p_s = 2$), и при $A \geq 4$ оно трижды вырождено ($p_s = 3$). Для $A = 4$, когда собственное значение возрастает от $E' = 8$ до $E' = 10$, кратность вырождения возрастает от $p_s = 4$ до $p_s = 5$, тогда как для $A = 6$ при тех же условиях кратность вырождения возрастает от $p_s = 5$ до $p_s = 7$.

Например, можно сконструировать состояния, антисимметричные относительно перестановок $(A - 1)$ частиц со спином $1/2$, в виде произведения двух детерминантов матриц размерностью $K \times K$ и $[(A - 1)K] \times [(A - 1)K]$, включающих $K [(A - 1)K]$ состояний пар частиц с скомпенсированными и нескомпенсированными спинами, соответственно, так что полный спин системы будет равен $(A - 1)/2 - K$, [15, 16]. Для наглядности рассмотрим ограниченный случай. Состояния $\Phi_j^a(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) \equiv \Phi_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^a(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$, антисимметричные относительно перестановок $(A - 1)$ частиц, конструируются традиционным способом, т.е. коэффициенты $\beta_{[i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}]}^{(i)}$ в (11) имеют вид $\beta_{[i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}]}^{(i)} = \varepsilon_{i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}} / \sqrt{(A - 1)!}$, где $\varepsilon_{i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}}$ — полностью антисимметричный тензор. Этот тензор определён соотношениями: $\varepsilon_{i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}} = +1(-1)$, если $i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}$ — чётная (нечётная) перестановка чисел $i_1 < i_2 < \dots < i_{A-1}$, и $\varepsilon_{i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}} = 0$ в противном случае, т.е., когда некоторые из двух чисел в наборе $i'_1, i'_2, \dots, i'_{A-1}$ равны. Следовательно, для антисимметричных состояний индексы i_k в (10) принимают целые значения $i_k = k - 1, k, k + 1, \dots, k = 1, \dots, A - 1$.

Табл. 2 демонстрирует правила соответствия между наборами различных квантовых чисел $[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]$ и сквозной нумерацией j собственных функций $\Phi_j^a(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$ для асимметричных состояний $(A - 1)$ -мерного гармонического осциллятора с собственными значениями энергии E_j^a , пронумерованными в порядке невозрастания, $E_1^a = (A - 1)^2 < E_2^a \leq E_3^a \leq E_4^a \leq \dots$, для A частиц с вырожденным спектром $E_j^a = 2 \sum_{k=1}^{A-1} i_k + A - 1$.

Таблица 2

Первые осцилляторные функции

$\Phi_j^a(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) = |[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}] \rangle = \Phi_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^a(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})$, антисимметричные относительно перестановок $(A - 1)$ частиц, и относительные собственные значения $\Delta E_j^a = E_j^a - E_1^a \leq 8$, $E_1^a = (A - 1)^2$

$A = 3, E_1^a = 4$		$A = 4, E_1^a = 9$		$A = 5, E_1^a = 16$		ΔE_j^a
j	$ [i_1, i_2] \rangle$	j	$ [i_1, i_2, i_3] \rangle$	j	$ [i_1, i_2, i_3, i_4] \rangle$	
1	$ [0, 1] \rangle$	1	$ [0, 1, 2] \rangle$	1	$ [0, 1, 2, 3] \rangle$	0
2	$ [0, 2] \rangle$	2	$ [0, 1, 3] \rangle$	2	$ [0, 1, 2, 4] \rangle$	2
3	$ [1, 2] \rangle$	3	$ [0, 2, 3] \rangle$	3	$ [0, 1, 3, 4] \rangle$	4
4	$ [0, 3] \rangle$	4	$ [0, 1, 4] \rangle$	4	$ [0, 1, 2, 5] \rangle$	4
5	$ [1, 3] \rangle$	5	$ [1, 2, 3] \rangle$	5	$ [0, 2, 3, 4] \rangle$	6
6	$ [0, 4] \rangle$	6	$ [0, 2, 4] \rangle$	6	$ [0, 1, 3, 5] \rangle$	6
		7	$ [0, 1, 5] \rangle$	7	$ [0, 1, 2, 6] \rangle$	6
7	$ [2, 3] \rangle$	8	$ [1, 2, 4] \rangle$	8	$ [1, 2, 3, 4] \rangle$	8
8	$ [1, 4] \rangle$	9	$ [0, 3, 4] \rangle$	9	$ [0, 2, 3, 5] \rangle$	8
9	$ [0, 5] \rangle$	10	$ [0, 2, 5] \rangle$	10	$ [0, 1, 4, 5] \rangle$	8
		11	$ [0, 1, 6] \rangle$	11	$ [0, 1, 3, 6] \rangle$	8
				12	$ [0, 1, 2, 7] \rangle$	8

Видно, что для данного $E' = E_j^a - E_1^a$ число $p_a < p$ вырожденных антисимметричных функций равно числу $p_s^{A-1} \leq p$ симметричных собственных функций с тем же значением энергии $E' = E_j^s - E_1^s$. Заметим, что мультинаборы, характеризующие симметричные состояния, связаны с мультинаборами, характеризующими антисимметричные состояния, следующим правилом: первое число слева не меняется, из второго числа следует вычесть единицу, из третьего числа следует вычесть два и т.д. Здесь и ниже верхние индексы s и a использованы для функций симметричных (антисимметричных) относительно перестановок $(A-1)$ внутренних координат, конструируемых на первом шаге алгоритма. В противоположность, верхние индексы S и A будут использованы для функций симметричных (антисимметричных) относительно перестановок A декартовых координат, конструируемых на втором шаге алгоритма. Это в действительности подразумевает симметрию относительно перестановок самих тождественных частиц; в этом смысле S и A состояния можно рассматривать как атрибуты частиц, подобных бозонам и фермионам с фиксированными значениями спинов. Однако для рассматриваемых координатных составляющих волновой функции естественно использовать обозначения $S(A)$.

Шаг 2. Симметризация относительно перестановки A частиц

Для $A = 2$ симметризованная координата ξ_1 соответствует разности $x_2 - x_1$ декартовых координат, так что функция чётная (нечётная) относительно ξ_1 становится симметричной (антисимметричной) относительно перестановки двух частиц $x_2 \leftrightarrow x_1$. Следовательно, чётная (нечётная) собственные функции с соответствующими собственными значениями энергии $E_j^s = 2(2n) + 1$ ($E_j^a = 2(2n+1) + 1$) описывают $S(A)$ решения.

Для $A \geq 3$ функции симметричные (антисимметричные) относительно перестановок декартовых координат $x_{i+1} \leftrightarrow x_{j+1}$, $i, j = 0, \dots, A-1$, функции

$$\Phi^{S(A)}(\dots, x_{i+1}, \dots, x_{j+1}, \dots) = \pm \Phi^{S(A)}(\dots, x_{j+1}, \dots, x_{i+1}, \dots)$$

также симметричные (антисимметричные) относительно перестановок симметризованных координат

$$\xi_i \leftrightarrow \xi_j, \quad i, j = 1, \dots, A-1: \quad \Phi^{S(A)}(\dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots) = \pm \Phi^{S(A)}(\dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots).$$

Обратное утверждение неверно:

$$\begin{aligned} \Phi^{s(a)}(\dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots) &= \pm \Phi^{s(a)}(\dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots) \not\equiv \\ &\not\equiv \Phi^{s(a)}(x_1, \dots, x_{i+1}, \dots) = \pm \Phi^{s(a)}(x_{i+1}, \dots, x_1, \dots), \end{aligned}$$

потому, что мы имеем дело с проекционным преобразованием $(\xi_1, \dots, \xi_{A-1})^T = \hat{C}(x_1, \dots, x_A)^T$, которое реализуется матрицей \hat{C} размерностью $(A-1) \times (A)$ с матричными элементами $\hat{C}_{ij} = C_{i+1,j}$, полученными из матрицы полного преобразования (4) вычёркиванием первой строки. Следовательно функции симметричные (антисимметричные) относительно перестановок симметризованных координат разделяется на два класса, а именно: $S(A)$ решения симметричные (антисимметричные) относительно перестановок $x_1 \leftrightarrow x_{j+1}$ at $j = 1, \dots, A-1$:

$$\Phi^{S(A)}(x_1, \dots, x_{i+1}, \dots) = \pm \Phi^{S(A)}(x_{i+1}, \dots, x_1, \dots),$$

и другие $s(a)$ решения, $\Phi^{s(a)}(x_1, \dots, x_{i+1}, \dots) \neq \pm \Phi^{s(a)}(x_{i+1}, \dots, x_1, \dots)$, которые следует исключить.

В силу (5) достаточно проверить симметричность (антисимметричность) собственной функции относительно перестановки $x_1 \leftrightarrow x_2$, что существенно упрощает практическую реализацию. Эти требования вместе с процедурой ортогонализации Грамма–Шмидта реализованы в *символьном алгоритме SCR*, с помощью которого мы получаем S и A собственные функции с требуемыми характеристиками

$$\Phi_i^{S(A)}(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) = \sum_{\Omega(E_i^{s(a)})} \alpha_{i[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^{S(A)} \Phi_{[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^{s(a)}(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}), \quad (13)$$

симметричные (антисимметричные) относительно перестановок A тождественных частиц, примеры которых приведены в табл. 3 и 4. Заметим, что для $A = 4$ первые четыре состояния из табл. 3 подобны состояниям трансляционно-инвариантной модели без возбуждений по переменной системы центра масс при $d = 3$, рассмотренной в [3]. Алгоритм *SCR* реализован в системе MAPLE и будет опубликован в последующих работах.

Таблица 3

Первые осцилляторные функции,
 $\Phi_i^S(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) = \sum \alpha_{i[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^S |i_1, i_2, \dots, i_{A-1}\rangle$ **симметричные относительно перестановок A частиц, и относительные собственные значения**
 $\Delta E_j^S = E_j^S - E_1^S \leq 10, E_1^S = A - 1.$

A=2		A=3		A=4		ΔE_j^S
j	$\Phi_j^S(\xi_1)$	j	$\Phi_j^S(\xi_1, \xi_2)$	j	$\Phi_j^S(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$	
1	$ [0]\rangle$	1	$ [0, 0]\rangle$	1	$ [0, 0, 0]\rangle$	0
2	$ [2]\rangle$	2	$ [0, 2]\rangle$	2	$ [0, 0, 2]\rangle$	4
		3	$\frac{1}{2} [0, 3]\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} [1, 2]\rangle$	3	$ [1, 1, 1]\rangle$	6
3	$ [4]\rangle$	4	$\frac{\sqrt{3}}{2} [0, 4]\rangle + \frac{1}{2} [2, 2]\rangle$	4	$ [0, 0, 4]\rangle$	8
		5	$\frac{\sqrt{5}}{4} [0, 5]\rangle - \frac{3}{4} [1, 4]\rangle - \frac{\sqrt{2}}{4} [2, 3]\rangle$	5	$ [0, 2, 2]\rangle$	8
				6	$ [1, 1, 3]\rangle$	10

Таблица 4

Первые осцилляторные функции,
 $\Phi_i^A(\xi_1, \dots, \xi_{A-1}) = \sum \alpha_{i[i_1, i_2, \dots, i_{A-1}]}^A |i_1, i_2, \dots, i_{A-1}\rangle$ **антисимметричные относительно перестановок A частиц, и относительные собственные значения**
 $\Delta E_j^A = E_j^A - E_1^A \leq 10, E_1^A = A^2 - 1$

A = 2, $E_1^A = 3$		A = 3, $E_1^A = 8$		A = 4, $E_1^A = 15$		ΔE_j^A
j	$\Phi_j^A(\xi_1)$	j	$\Phi_j^A(\xi_1, \xi_2)$	j	$\Phi_j^A(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$	
1	$ [1]\rangle$	1	$\frac{1}{2} [0, 3]\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} [1, 2]\rangle$	1	$ [0, 2, 4]\rangle$	0
2	$ [3]\rangle$	2	$\frac{\sqrt{5}}{4} [0, 5]\rangle + \frac{3}{4} [1, 4]\rangle - \frac{\sqrt{2}}{4} [2, 3]\rangle$	2	$ [0, 2, 6]\rangle$	4
		3	$\frac{1}{4} [0, 6]\rangle - \frac{\sqrt{15}}{4} [2, 4]\rangle$	3	$ [1, 3, 5]\rangle$	6
3	$ [5]\rangle$	4	$\frac{\sqrt{21}}{8} [0, 7]\rangle + \frac{3\sqrt{3}}{8} [1, 6]\rangle - \frac{1}{8} [2, 5]\rangle + \frac{\sqrt{5}}{8} [3, 4]\rangle$	4	$ [0, 4, 6]\rangle$	8
		5	$\frac{\sqrt{2}}{4} [0, 8]\rangle - \frac{\sqrt{14}}{4} [2, 6]\rangle$	5	$ [0, 2, 8]\rangle$	8
				6	$ [1, 3, 7]\rangle$	10

Якобиевские координаты (y_1, y_2) связаны с симметризованными координатами (ξ_1, ξ_2) ортогональным преобразованием (7), т.е. перестановкой координат $(\xi_1, \xi_2) \rightarrow (\xi_2, \xi_1)$ и вращением по часовой стрелке на угол $\phi_1 = \pi/12$. Следовательно, в якобиевских координатах прямые, соответствующие парным ударам частиц (x_2, x_3) , (x_1, x_2) и (x_1, x_3) , должны быть также повёрнуты на угол $\phi_1 = \pi/12$. Вращение против часовой стрелки системы координат $(\xi_2, \xi_1) \rightarrow (y_1, y_2)$ на угол $\phi_1 = \pi/12$ индуцирует унитарное преобразование соответствующих $A = 2$ -осцилляторных функций $\langle \xi_2, \xi_1 | i_2, i_1 \rangle = \bar{\Phi}_{[i_2, i_1]}(\xi_2, \xi_1)$ при $j = (i_2 + i_1)/2$:

$$\begin{aligned} \langle j + m', j - m' | y_1, y_2 \rangle &= \\ &= \sum_{m=-j}^{m=j} \langle j + m', j - m' | G_{21}(\phi_1) | j + m, j - m \rangle \langle j + m, j - m | \xi_2, \xi_1 \rangle. \end{aligned}$$

Матричные элементы $\langle j + m', j - m' | G_{21}(\phi_1) | j + m, j - m \rangle$ даются интегралами [21]:

$$\begin{aligned} \langle j + m', j - m' | G_{21}(\phi) | j + m, j - m \rangle &= d_{m'm}^j(2\phi_1) = \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi_2 d\xi_1 \langle j + m', j - m' | \xi_2 \cos \phi_1 + \xi_1 \sin \phi_1, -\xi_2 \sin \phi_1 + \xi_1 \cos \phi_1 \rangle \langle \xi_2, \xi_1 | j + m, j - m \rangle. \end{aligned}$$

где $d_{m'm}^j(2\phi_1) = N_{m'm}^j \sin^{|m'-m|} \phi_1 \cos^{|m'+m|} \phi_1 P_{j-(|m'-m|+|m'+m|)/2}^{|m'-m|, |m'+m|}(\cos 2\phi_1)$ – функции Вигнера [22], $N_{m'm}^j$ – нормировочный множитель, $P_s^{\mu\nu}(x)$ – полиномы Якоби [19]. Это простейшее интегральное представление *осцилляторных функций Вигнера* [23].

Для $A = 4$ трёхмерное вращение (8), приводящее координатную систему (ξ_1, ξ_2, ξ_3) к (y_1, y_2, y_3) , может быть представлено в виде произведения трёх вращений против часовой стрелки $\mathbf{M} = \mathbf{M}_3(\phi_3)\mathbf{M}_2(\phi_2)\mathbf{M}_1(\phi_1)$ в отдельных координатных плоскостях: на угол $\phi_1 = 3\pi/4$ вокруг первой старой оси, ξ_1 , на угол $\phi_2 = \pi - \arctan(\sqrt{2}) \approx 16\pi/23$ вокруг третьей новой оси, ξ_3' , и на угол $\phi_3 = \pi/3$ вокруг первой новой оси, $y_1 = \xi_1''$ (см. рис. 2). Это трёхмерное вращение индуцирует унитарное преобразование соответствующей $A = 3$ -осцилляторной функции $\langle \xi_1, \xi_2, \xi_3 | i_1, i_2, i_3 \rangle = \bar{\Phi}_{[i_1, i_2, i_3]}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, $n = i_1 + i_2 + i_3$:

$$\begin{aligned} \langle j' + m', j' - m', n - 2j' | y_1, y_2, y_3 \rangle &= \\ &= \sum_{j=0}^{n/2} \sum_{m=-j}^{m=j} \langle j' + m', j' - m', n - 2j' | G(3) | j + m, j - m, n - 2j \rangle \times \\ &\quad \times \langle j + m, j - m, n - 2j | \xi_1, \xi_2, \xi_3 \rangle. \end{aligned}$$

Здесь матричные элементы $\langle j' + m', j - m', n - 2j' | G(3) | j + m, j - m, n - 2j \rangle$ определены подобно [21]

$$\begin{aligned} \langle j' + m', j' - m', n - 2j' | G_{2,3}(\phi_3) G_{1,2}(\phi_2) G_{2,3}(\phi_1) | j + m, j - m, n - 2j \rangle &= \\ &= \sum_t^{\min(j, j')} d_{t-j', m'}^{j'}(2\phi_3) d_{2j'-(n+t)/2, 2j-(n+t)/2}^{(n-t)/2}(2\phi_2) d_{m, t-j}^j(2\phi_1), \end{aligned}$$

где значения t такие, что абсолютные значения всех t -зависимых нижних индексов в функциях Вигнера не превышают значений верхних индексов.

В общем случае, преобразования $(A - 1)$ -мерных осцилляторных функций индуцируются перестановкой координат и $(A - 1)$ -мерными конечными вращениями, представленных в виде произведения $(A - 1)(A - 2)/2$ вращений в отдельных координатных плоскостях, можно конструировать используя диаграммный метод, который сводит аналитические вычисления $(A - 1)$ -мерных осцилляторных функций Вигнера к простым геометрическим построениям [23].

Полное число p_S (p_A) состояний, симметричных (антисимметричных) относительно перестановок A исходных декартовых координат, суммированы в табл. 5 вместе с числом p_s (p_a) состояний симметричных (антисимметричных) относительно перестановок $(A - 1)$ симметричных внутренних координат и числа

$$p = \sum_{2 \sum_{k=1}^{A-1} i_k + A - 1 = E_j} N_\beta$$

всех состояний с данной энергией E_j нижней части спектра.

Таблица 5

Кратности вырождения p_\bullet , $\bullet = \emptyset, s, a, S, A$ в зависимости от относительной энергии $\Delta E_j = E_j^\bullet - E_1^\bullet$.

A	3	4	5	6	3	4	5	6	3	4	5	6
ΔE_j	p				$p_s(a)$				$p_S(A)$			
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	2	3	4	5	1	1	1	1	0	0	0	0
4	3	6	10	15	2	2	2	2	1	1	1	1
6	4	10	20	35	2	3	3	3	1	1	1	1
8	5	15	35	70	3	4	5	5	1	2	2	2
10	6	21	56	126	3	5	6	7	1	1	2	2
12	7	28	84	210	4	7	9	10	2	3	3	4

Отметим, что не существует S и A состояния с энергией $E' = E_1^{S,A} + 2$. Числа p_s (p_a) существенно меньше, чем полное число p всех состояний, что упрощает процедуру конструирования $S(A)$ состояний с возможными возбуждениями степеней свободы движения центра масс системы и позволяет использовать компактный базис с редуцированной кратностью вырождения p_S (p_A) для $S(A)$ состояний в финальных вычислениях. Поясним это замечание на примере $A = 3$, $d = 1$: $S(A)$ -функции, генерируемые алгоритмом SCR , в полярных координатах $\xi_1 = \rho \cos \varphi$, $\xi_2 = \rho \sin \varphi$ даются выражениями:

$$\begin{aligned} \Phi_{k,m}^S(\rho, \varphi) &= C_{km}^S(\rho^2)^{3m/2} \exp(-\rho^2/2) \cos(3m(\varphi + \pi/12)) L_k^{3m}(\rho^2), \\ \Phi_{k,m}^A(\rho, \varphi) &= C_{km}^A(\rho^2)^{3m/2} \exp(-\rho^2/2) \sin(3m(\varphi + \pi/12)) L_k^{3m}(\rho^2), \end{aligned} \quad (14)$$

где $C_{km}^{S(A)}$ – нормировочный множитель, $L_k^{3m}(\rho^2)$ – присоединённые полиномы Лаггера [19], $k = 0, 1, \dots$, $m = 0, 1, \dots$ для S состояний, тогда как $m = 1, 2, \dots$ для A состояний, классифицируются по неприводимым представлениям группы симметрии D_{3m} . Соответствующие уровни энергии $E_{k,m}^{S(A)} = 2(2k + 3m + 1) = E_{[i_1, i_2]}^{s(a)} = 2(i_1 + i_2 + 1)$ имеют кратность вырождения $K + 1$, при значениях энергии $E_{k,m}^{S(A)} - E_1^{S(A)} = 12K + K'$, где $K' = 0, 4, 6, 8, 10, 14$. Заметим, что собственные функции системы A -тождественных частиц в одномерном евклидовом пространстве ($d = 1$) соответствуют вырожденным собственным значениям энергии, что

не противоречит общим положениям [24], в противоположность анзацу с функциями, соответствующими невырожденному спектру [11].

4. Заключение и обсуждение результатов

Основные результаты работы следующие.

Сформулирована математическая модель кластера A тождественных частиц, взаимодействующих парными потенциалами осцилляторного типа при воздействии внешнего поля мишени в новых симметризованных координатах. Предложен новый конструктивный метод и алгоритм симметризации или антисимметризации базисных функций $(A - 1)$ -мерного гармонического осциллятора по отношению к перестановке координат A тождественных частиц.

Алгоритм реализован в системе компьютерной алгебры MAPLE 14. Эффективность алгоритма продемонстрирована генерацией первых одиннадцати симметричных (антисимметричных) функций с понижением кратности вырождения от 210 до 4, соответствующих собственному значению энергии $\Delta E_j = 12$, отсчитанного от основного состояния с числом частиц до $A = 6$, которая была выполнена, соответственно, за время CPU до 10 (600) секунд.

Показано, что преобразование $(A - 1)$ -мерных осцилляторных базисных функций в симметризованных координатах к якобиевским координатам сводится к перестановке координат и $(A - 1)$ -мерных конечных вращений (6), реализованных с помощью $(A - 1)$ -мерных осцилляторных функций Вигнера [21].

Выполнен анализ типичных примеров и выявлено соответствие между представлениями групп симметрии D_3 для $A = 3$ и T_d для $A = 4$ и симметричными или антисимметричными осцилляторными функциями. Показано, что с помощью предложенного метода и алгоритма, реализованного в системе компьютерной алгебры, применяя метод индукции, можно конструировать базисные функции в замкнутом аналитическом виде. Однако для практических расчётов матричных элементов между базисными функциями, принадлежащими нижней части спектра, это не является необходимым, поскольку вклад неучтённой части спектра нетрудно оценить, используя численный анализ скорости сходимости разложения приближенного решения, или подходящие асимптотические разложения при больших номерах базисных функций.

Применение развитого метода и алгоритма для решения задачи туннелирования кластера через потенциальные барьеры мишени будет рассмотрено в наших последующих работах. Предложенный подход при соответствующей адаптации применим для анализа тетраэдральной симметрии ядер, квантовой диффузии молекул и микрокластеров через поверхность, фрагментации нейтронно-избыточных лёгких ядер, а также механизмов подбарьерных реакций слияния тяжёлых ионов.

Литература

1. *Moshinsky M., Smirnov Y. F.* The Harmonic Oscillator in Modern Physics. — Informa Health Care, Amsterdam, 1996.
2. *Kramer P., Moshinsky M.* Group Theory of Harmonic Oscillators (III). States with Permutational Symmetry // Nucl. Phys. — 1966. — Vol. 82. — Pp. 241–274.
3. *Aguilera-Navarro V. C., Moshinsky M., Yeh W. W.* Harmonic-Oscillator States and the α Particle I. Form Factor for Symmetric States in Configuration Space // Ann. Phys. — 1969. — Vol. 51. — Pp. 312–336.
4. *Aguilera-Navarro V. C., Moshinsky M., Yeh W. W.* Harmonic-Oscillator States and the α Particle II. Configuration-Space States of Arbitrary Symmetry // J. Math. Phys. — 1969. — Vol. 54. — Pp. 379–393.
5. *Lévy-Leblond J.-M.* Global and Democratic Methods for Classifying N Particle States // Ann. Phys. — 1966. — Vol. 7. — Pp. 2217–2229.

6. *Неудачин В. Г., Смирнов Ю. Ф.* Нуклонные ассоциации в легких ядрах. — М.: Наука, 1969. [Neudatchin V. G., Smirnov Yu. F. Nuklonnye assotsiatsii v legkih yadrakh. — М.: Nauka, 1969]
7. *Novoselsky A., Katriel J.* Non-Spurious Harmonic Oscillator States with Arbitrary Symmetry // *Ann. Phys.* — 1989. — Vol. 196. — Pp. 135–149.
8. *Barnea N., Novoselsky A.* Construction of Hyperspherical Functions Symmetrized with Respect to the Orthogonal and the Symmetric Groups // *Ann. Phys.* — 1997. — Vol. 256. — Pp. 192–225.
9. *Вильдермут Л., Тан Я.* Единая теория ядра. — М.: Мир, 1980. [Wildermuth K., Tang Y. C. A Unified Theory of the Nucleus. — Vieweg Verlag, 1977]
10. The General Harmonic-Oscillator Brackets: Compact Expression, Symmetries, Sums and Fortran Code / G. P. Kamuntavičius, R. K. Kalinauskas, B. R. Barrett et al. // *Nucl. Phys. A.* — 2001. — Vol. 695. — Pp. 191–201.
11. Exact Eigenfunctions of N-body System with Quadratic Pair Potential / Z. Wang, A. Wang, Y. Yang, L. Xuechao // *arXiv.* — 2012. — P. 1108.1607v4.
12. *Пеньков Ф. М.* Квантовая прозрачность барьеров для структурных частиц // *ЖЭТФ.* — 2000. — Т. 118. — С. 806–815. [Pen'kov F.M. Kvantovaya prozrachnost bar'eroev dla strukturnykh chastits // *ZHETF.* — 2000. — Vol. 118. — P. 806–815]
13. Symbolic-Numerical Algorithms to Solve the Quantum Tunneling Problem for a Coupled Pair of Ions / A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar et al. // *Lecture Notes in Computer Science.* — 2011. — Vol. 6885. — Pp. 175–191.
14. Tetrahedral Symmetry in Nuclei: New Predictions Based on the Collective Model / A. Dobrowolski, A. Gózdź, A. Mazurek, K. Dudek // *International Journal of Modern Physics E.* — 2011. — Vol. 20. — Pp. 500–506.
15. *Fock V. A.* Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems // *Zs. Phys.* — 1930. — Vol. 61. — Pp. 126–148.
16. *Хамермеш М.* Теория групп и ее применение к физическим проблемам. — М.: Мир, 1981. [Hamermesh, M. Group Theory and its Application to Physical Problems. — Dover, 1989]
17. *Kanada-En'yo Y., Hidaka Y.* α -cluster Structure and Density Waves in Oblate Nuclei // *Phys. Rev. C.* — 2011. — Vol. 84. — Pp. 014313–1–16.
18. *Jepsent D. W., Hirschfelder J. O.* Set of Coordinate Systems which Diagonalize the Kinetic Energy Of Relative Motion // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* — 1959. — Vol. 45. — Pp. 249–256.
19. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. — М.: Наука, 1979. [Abramovits M., Stigun I. A. Handbook of Mathematical Functions. — New York. Dover, 1972]
20. *Baker Jr. G. A.* Degeneracy of the n-Dimensional, Isotropic, Harmonic Oscillator // *Phys. Rev.* — 1956. — Vol. 103. — Pp. 1119–1120.
21. *Pogosyan G. S., Smorodinsky Y. A., Ter-Antonyan V. M.* Oscillator Wigner Functions // *J. Phys. A.* — 1981. — Vol. 14. — Pp. 769–776.
22. *Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975. [Varshalovich, D. A., Moskalev A. N., Chersonsky, V. K. Quantum Theory of Angular Momentum: Irreducible Tensors, Spherical Harmonics, Vector Coupling Coefficients, 3nj Symbols. . — Singapore. World Sci. Pub., 1988]
23. Квантовые системы со скрытой симметрией. Межбазисные разложения / Л. Г. Мардоян, Г. С. Погосян, А. Н. Сисакян, В. М. Тер-Антонян. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. [Mardoyan L. G., Pogosyan G. S., Sissakyan A. N., Ter-Antonyan V. M. Kvantovye Sistemy so Skrytoy Simmetriey. Mezhbasisnye Razlozhenia. — M. FIZMATLIT, 2006]
24. *Lévy-Leblond J.-M.* Generalized Uncertainty Relations for Many-Fermion System // *Phys. Lett. A.* — 1968. — Vol. 26. — Pp. 540–541.

UDC 517.958:530.145.6

New Method for Constructing the Oscillator Functions of a Quantum System of Identical Particles in Symmetrized Coordinates

A. A. Gusev

*Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

The quantum model of a cluster, consisting of A identical particles, coupled by the internal pair interactions and affected by the external field of a target, is formulated in the new symmetrized coordinates. A new method and symbolic algorithm for generating $(A - 1)$ -dimensional oscillator eigenfunctions, symmetric or antisymmetric with respect to permutations of A identical particles, is elaborated and implemented using the MAPLE computer algebra system. Examples of generating the symmetrized coordinate representation for composite systems of several identical particles in one-dimensional Euclidean space are given and their symmetry properties are analyzed. The systems composed from three to six particles in one dimensional Euclidean space were analyzed a correspondence between the representations of the symmetry groups D_3 and T_d for $A = 3$ and $A = 4$ and symmetric or antisymmetric oscillator functions was found.

It is shown that the transformations of $(A - 1)$ -dimensional oscillator functions from the symmetrized coordinates to the Jacobi coordinates, reducible to permutations of coordinates and $(A - 1)$ -dimensional finite rotation, are implemented by means of the $(A - 1)$ -dimensional oscillator Wigner functions. The examples of construction of the symmetric or antisymmetric oscillator functions in closed analytical form by means of mathematical induction and the algorithm are given. The approach is aimed at solving the problem of tunnelling the clusters, consisting of several identical particles, through repulsive potential barriers of a target.

Key words and phrases: method and algorithm, identical particles, symmetric or antisymmetric oscillator functions, symmetrized coordinates.