

А. Ф. ЦАНДЕР

К ПРОБЛЕМЕ МНОГИХ ЧАСТИЦ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

(Представлено академиком В. А. Фоком 20 IV 1953)

Свойства атомного ядра в значительной мере определяются значением собственного спина ядра S , приближенно являющегося интегралом движения, изотопическим спином T и требованием соблюдения обобщенного принципа Паули. В этом направлении Вигнером (¹, ²) были выполнены работы, в которых он, пользуясь методами теории групп, при некоторых условиях, налагаемых на ядерные силы, получил ряд экспериментально наблюдающихся закономерностей в энергии основных состояний атомных ядер (насыщение ядерных сил, условия для наименьшей энергии каждого из типов ядер: $A = 4n + k$, $k = 0, 1, 2$).

С точки зрения понимания и изучения структуры атомных ядер представляет значительный интерес получить в общем виде волновую функцию основного состояния, зависящую лишь от тех координат, от которых зависят силы, из волновой функции, зависящей от всех видов координат, удовлетворяющей обобщенному принципу Паули и соответствующей спинам S и T , и изучить свойства симметрии полученных функций.

Шредингеровы функции можно получить из соответствующим образом построенных полных волновых функций путем фиксирования значений спиновых и зарядных координат. В результате для ядер с общим числом нуклеонов A будем иметь функции $\Psi(\mathbf{r})$ вида:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(r_{a_1}, r_{a_2}, \dots, r_{a_k} | r_{a_{k+1}}, \dots, r_{a_l} | r_{a_{l+1}}, \dots, r_{a_m} | r_{a_{m+1}}, \dots, r_{a_A}). \quad (1)$$

Они антисимметричны относительно транспозиций внутри каждой из четырех групп аргументов, отделенных черточками, которые мы будем обозначать I, II, III, IV, и обладают свойством циклической симметрии, впервые установленным Фоком (³) при рассмотрении проблемы многоэлектронных систем, относительно транспозиций аргументов между любыми двумя группами, т. е. имеем:

$$\sum P_{a_i a_j} \Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где суммирование производится по индексам i , относящимся к группе с большим числом координат, другой индекс j при суммировании остается постоянным и может быть равен любому из индексов, относящихся к другой из рассматриваемых групп; если число координат в обеих группах одинаково, то индексы i и j могут меняться ролями. Кроме того, в функции $\Psi(\mathbf{r})$ две группы относятся к протонам, две — к нейтронам, и в каждой из этих пар групп одна соответствует положительным, другая отрицательным значениям спиновых координат. Для функций основных состояний ядер характерно, что число аргументов в обеих группах ней-

тронов будет либо одинаково, либо отличаться на единицу, и то же справедливо для групп протонов.

Исходя из приведенных здесь свойств симметрии шредингеровых функций, легко показать, что для полной потенциальной энергии взаимодействия всех частиц наш результат совпадает с результатом Вигнера (1) (если учесть его ошибку: вместо $\frac{A(A-1)}{2}$ он написал $A(A-1)$) при тех же предположениях о ядерных силах, что и у Вигнера, а именно, принятая для потенциальной энергии взаимодействия двух частиц

$$V(r_{ik}) = J(r_{ik})(P_{ik} + 1/4), \quad (3)$$

где P_{ik} — оператор перестановки пространственных координат r_i и r_k и, кроме того (второй пункт статьи Вигнера),

$$J(r_{ik}) = \text{const} = J(0),$$

а также считая, что $A = 4n$, $N = Z$, N — число нейтронов, Z — число протонов.

При силах Гейзенберга нужно взять ту же полную волновую функцию, что и раньше, и фиксировать только зарядные координаты. При этом для потенциальной энергии системы частиц, при тех же предположениях, что и у Вигнера, также получаем исправленный результат Вигнера.

В качестве примера более подробной записи функции $\Psi(\mathbf{r})$ приводим случай основного состояния ядер типа $A = 2m + 1$, Z четное, N нечетное, $N > Z$:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}) &= \Psi(r_{a_1}, r_{a_2}, \dots, r_{a_p} | r_{a_{p+1}}, \dots, r_{a_{2p}} | r_{a_{2p+1}}, \dots \\ &\quad \dots, r_{a_{2p+n}} | r_{a_{2p+n+1}}, \dots, r_{a_{2p+2n+1}}) = \\ &= \sum \delta(P'(I)) \delta(P(II)) \delta(P'(III)) \delta(P(IV)) P'(I) P(II) P'(III) P(IV) \times \\ &\times \Psi_{[a_1 a_{p+1} a_{2p+1} a_{2p+n+1}] \dots [a_p a_{2p} a_{3p} a_{3p+n}] [a_{3p+1} a_{3p+n+1}] \dots [a_{2p+n} a_{2p+2n}] a_{2p+2n+1}} \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь I и II группы относятся к протонам, III и IV — к нейтронам; Ψ^+ — пространственная волновая функция, зависящая от координат $r_{a_1}, r_{a_2}, \dots, r_{a_A}$ и симметричная относительно перестановок внутри каждой из групп индексов, заключенной в квадратные скобки, причем от изменения порядка следования скобок функция Ψ^+ не изменяется; $P(I)$, $P(II)$ и т. д. — перестановки внутри индексов, соответствующих I, II и т. д. группам; штрихи у $P(I)$ и $P(III)$ означают, что берутся не все $P(I)$ и $P(III)$, а лишь такие, которые дают перестановки $P = P'(I) P(II) P'(III) P(IV)$, среди которых не существует двух перестановок, приводящих к функциям Ψ^+ , отличающимся друг от друга порядком скобок; символ δ означает + или — в зависимости от четности или нечетности перестановки.

Полную функцию, соответствующую функции (4), можно написать в виде суперпозиции по перестановкам индексов a_i , необходимой для антисимметризации, отдельных слагаемых, каждое из которых берется с соответствующим данной перестановке знаком и состоит из функции Ψ^+ , умноженной на собственную функцию ϕ спина S и изотопического спина T , являющуюся произведением функций ϕ для α -частиц, ди-нейтронов, одного нейтрона, в соответствии с индексами, заключенными в квадратные скобки.

Аналогичное утверждение имеет место и для других типов ядер. Исходя из (4) пространственные функции $\Psi(\mathbf{r})$ нетрудно написать

и в виде разложения по системе ортогональных функций. Для случая A, N, Z четных, $N > Z$, имеем:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{k, k', k'', k'''} C_{k_1 k_1' k_1'' k_1'''} \dots k_i k_i' k_i'' k_i''' \dots k_p k_p' k_p'' k_p''' \dots k_{p+1} k_{p+1}' k_{p+1}'' k_{p+1}''' \dots k_n k_n'' k_n'''} \times \quad (5)$$

$$\times \sum_{P_{k_1 k_1' k_1'' k_1'''}} \dots \sum_{P_{k_n k_n'' k_n'''}} P_{k_1 k_1' k_1'' k_1'''} \dots P_{k_i k_i' k_i'' k_i'''} \dots P_{k_p k_p' k_p'' k_p'''} P_{k_{p+1} k_{p+1}' k_{p+1}'' k_{p+1}'''} \dots P_{k_n k_n'' k_n'''} \times \Psi_{k_1 \dots k_n}^a$$

$$\Psi_{k_1 \dots k_n}^a = \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(r_1) \dots \psi_{k_p}(r_1) & \psi_{k_1'}(r_{p+1}) \dots \psi_{k_p'}(r_{p+1}) \\ \dots & \dots \\ \psi_{k_1}(r_p) \dots \psi_{k_p}(r_p) & \psi_{k_1'}(r_{2p}) \dots \psi_{k_p'}(r_{2p}) \end{vmatrix} \times$$

$$\begin{vmatrix} \psi_{k_1''}(r_{2p+1}) \dots \psi_{k_n''}(r_{2p+1}) & \psi_{k_1'''}(r_{2p+n+1}) \dots \psi_{k_n'''}(r_{2p+n+1}) \\ \dots & \dots \\ \psi_{k_1''}(r_{2p+n}) \dots \psi_{k_n''}(r_{2p+n}) & \psi_{k_1'''}(r_{2p+2n}) \dots \psi_{k_n'''}(r_{2p+2n}) \end{vmatrix}$$

Первая сумма означает суммирование по всем индексам k, k', k'', k''' ; $P_{k_1 k_1' k_1'' k_1'''}, \dots, P_{k_n k_n'' k_n'''} — перестановки соответствующих индексов.$

Считая ортогональные функции плоскими волнами, получим для кинетической энергии выражение вида

$$\frac{\sum_{k, k', k'', k'''} |C_{k_1 \dots k_n}|^2 \left\{ \sum_{h=k_1}^{k_p} + \sum_{h=k_1'}^{k_p'} + \sum_{h=k_1''}^{k_n''} + \sum_{h=k_1'''}^{k_n'''} \right\} \frac{\hbar^2}{2M} k^2}{\sum_{k, k', k'', k'''} |C_{k_1 \dots k_n}|^2} \quad (6)$$

Следовательно, для ядер типа $A = 4n$ наименьшая кинетическая энергия будет при $Z = N$. Аналогично для ядер типа $A = 2n, n$ нечетное, $N > Z$, получаем, что кинетическая энергия для случая Z, N нечетных больше, чем для ядра с Z, N четными, получающегося из исходного путем превращения нейтрона в протон.

Для потенциальной энергии при ядерных силах (3) с помощью (5) получается выражение, которое в случае четно-четных ядер и $N = Z$ не содержит произведений плотностей обычного типа, а в остальных случаях имеются такие произведения, причем они дают эффект отталкивания и их роль возрастает по мере увеличения разницы между N и Z . Это говорит о том, что, во-первых, имеет место насыщение ядерных сил, во-вторых, без учета кулоновых сил четно-четные ядра с $N = Z$ обладают наиболее низкой энергией на частицу по сравнению с остальными, например, с ядрами с нечетными A . Здесь также получается неустойчивость ядер типа $A = 2n$ при n, N, Z нечетных, $N \neq Z$. Учет кулоновых сил, как обычно, ведет к тому, что для достаточно больших A являются более устойчивыми ядра с $N > Z$. Возможны стабильные изобары с четными A и Z , отличающимися на 2 по заряду.

Как видно из формулы (5), модель независимых частиц у нас представлена (при ядерных силах, зависящих только от пространственных координат) волновой функцией, являющейся произведением четырех детерминантов, а не двух, как для электронов; при этом, подобно случаю

электронов, каждый детерминант, в который входит большее число ортогональных функций, включает в себе все функции, входящие в детерминанты с меньшим числом функций. Тот же результат дает обобщенный на случай ядра метод Хартри — Фока.

Из всего вышеизложенного можно сделать вывод, что если в качестве ядерных сил принять комбинацию сил обычного типа, сил Майорана и сил Гейзенберга, считая их одинаковыми между нуклонами обоих типов, то требование закона сохранения для S и T и требование обобщенного принципа Паули допускают для основных состояний ядер модели двух элементарных типов: модель независимых частиц и модели, которые мы условно, ради наглядности, назовем молекулярными. К молекулярным моделям принадлежат: модель ядра из α -частиц, из совокупности α -частиц, ди-нейтронов, «валентного нейтрона» (или N^3), из α -частиц и дейтерона и т. д. Какая именно из этих молекулярных моделей получается, зависит от того, какие заданы A , N , Z . Отметим, что термин «молекулярная модель» мы понимаем не в буквальном смысле, так как соответствующая этому термину волновая функция ядра равна не произведению волновых функций отдельных молекул (α -частиц и т. д.), а суперпозиции таких произведений, которая необходима для соблюдения обобщенного принципа Паули.

Для случая многоэлектронных систем наш метод приводит к шредингеровой функции со свойствами симметрии, установленными В. А. Фоком иным путем (3). При некоторых простейших частных предположениях относительно функции Ψ^+ , входящей в выражение для нашей электронной функции $\Psi^-(\mathbf{r})$:

$$\Psi^-(\mathbf{r}) = \sum \delta(P(I)) P(I) \Psi^+_{[a_1 a_2] [a_3 a_4] \dots [a_{p-1} a_p] a_{p+1} a_{p+2} \dots a_A},$$

где к I группе относятся координаты с индексами: $a_1, a_2, \dots, a_{p-1}, a_p, a_{p+1}, \dots, a_A$, последняя совпадает с функциями, ранее построенными В. А. Фоком при рассмотрении конкретных проблем (атомные электроны, химическая связь) (4, 5).

Поступило
16 II 1953

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ E. P. Wigner, Proc. Nat. Acad. Sci., **22**, 662 (1936). ² E. P. Wigner, Phys. Rev., **56**, 519 (1939). ³ В. Фок, ЖЭТФ, **10**, 9—10, 961 (1940). ⁴ В. Фок, ДАН, **73**, № 4, 735 (1950). ⁵ В. Фок, Z. f. Phys., **61**, 126 (1930).