

9

И Н С Т И Т У Т  
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

ПРЕПРИНТ И ЯФ 77-104

О.Я.Савченко

ОЦЕНКИ СОБСТВЕННЫХ ЧИСЕЛ УРАВ-  
НЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СИСТЕМЫ  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

Новосибирск

1977

ОЦЕНКИ СОБСТВЕННЫХ ЧИСЕЛ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА  
ДЛЯ СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

О.Я. Савченко

А Н Н О Т А Ц И Я

Уточняются собственные числа системы частиц, связанных монотонным потенциалом  $-|\vec{z}_i - \vec{z}_j|^{-1}$ . Относительная ошибка в определении собственного числа антисимметричного состояния этой системы снижена до  $\pm 0,16$ .

Предлагаются способы оценок сверху и снизу собственных чисел частиц, связанных немонотонным потенциалом. Эффективность этих способов иллюстрируется оценкой энергии связи атомов благородных газов.

В последних разделах приводятся два способа уточнения нижних границ спектра собственных чисел и вариационный метод оценки спектра сумм собственных чисел.

В дополнении оцениваются максимальные средние плотности нейтронных и водородных звезд, а также температурные зависимости плотностей звезд и давления их насыщенных паров. В последних разделах дополнения оцениваются уровни энергий системы кулоновских частиц.

## I. Введение

I.1. Для системы частиц, связанных потенциалом тяготения, наиболее исследован самый низкий уровень. Энергия основного состояния системы  $N$  частиц  $E_N^{0s}$  была определена с точностью до  $\pm 8,1\%$  /1/:

$$-\frac{1}{32} N^2(N-1) < E_N^{0s} < -\frac{1}{12\pi} N^2(N-1). \quad (I.1)$$

Для системы из трёх и четырех частиц точность оценки была увеличена до  $\pm 4\%$  и  $\pm 5,5\%$  соответственно /2,3/. Уточнение значения  $E_N^{0s}$  при больших  $N$  связано с использованием приближения Хартри. В /4,5/, исходя из предположения, что при  $N \rightarrow \infty$  система вырождается к одночастичному движению, было доказано, что энергия основного состояния и наименьшая энергия антисимметричного состояния в асимптотическом пределе большого числа частиц даётся приближением Хартри. При  $N \rightarrow \infty$  для основного состояния этот предел был найден в /6/:

$$E_N^{0s} \rightarrow -0,0273... N^3. \quad (I.2)$$

I.2. Точность определения наименьшей энергии антисимметричного состояния системы существенно ниже. Было найдено /7/, что при больших  $N$  наименьшая энергия этого состояния уменьшается как  $-\alpha N^{7/3}$ . Коэффициент  $\alpha$  определен с точностью около трёх порядков:  $0,000528... < \alpha < 0,125$ . Для трёх частиц уровень антисимметричного состояния был определен намного точнее /2,3/:

$$-0,140... \leq E_N^{0a} \leq -0,0502... \quad (I.3)$$

I.3. В предлагаемой статье уточнены оценки наименьших энергий антисимметричных состояний и проведены оценки энергий остальных состояний системы частиц, связанных гравитационным потенциалом. Методы, с помощью которых оценивались энергии частиц с гравитационным потенциалом, обобщаются на более широкий класс потенциалов взаимодействия и используются для оценок энергий систем частиц, связанных негравитационным потенциалом.

### 2. Верхние оценки энергий систем частиц, связанных гравитационным потенциалом

2.1. Уровни энергий системы  $N$  частиц, связанных гравитационным потенциалом  $-|z_i - z_j|^{-1}$  являются собственными числами

ми уравнения Шредингера:

$$\left(-\sum_{i=1}^N \Delta_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} |\vec{z}_i - \vec{z}_j|^{-1}\right) \Psi = E_N^{(k)} \Psi, \quad (2.1)$$

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2},$$

$E_N^{(k)}$  - энергия  $k$  - уровня системы.

2.2. Наименьшую энергию антисимметричного состояния можно оценить сверху вариационным методом /8-9/. Верхней границей наименьшей энергии для системы  $N$  частиц является величина:

$$-\langle \Psi_a | \sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} |\vec{z}_i - \vec{z}_j|^{-1} | \Psi_a \rangle \geq E_N^{oa} \quad (2.2)$$

$\Psi_a$  - функция, антисимметричная по отношению к перестановкам координат любой пары частиц. Для функции  $\Psi_a$ , которая является антисимметричной суперпозицией функций типа

$$\Psi_{l_i m_i} = Y_{l_i m_i}(\vartheta_i, \varphi_i) \cdot f(R_N), \quad R_N = \left(\sum_{i=1}^N z_i^2\right)^{1/2}, \quad (2.3)$$

справедливы следующие соотношения:

$$\langle \Psi_a | z_i^2 | \Psi_a \rangle = \frac{(3N-1)(3N-2)}{3N-3} \langle \Psi_a | R_N^{-2} | \Psi_a \rangle, \quad (2.4)$$

$$\langle \Psi_a | |\vec{z}_i - \vec{z}_j|^{-1} | \Psi_a \rangle > \langle \Psi_a | |z_i^2 - z_j^2|^{-1/2} | \Psi_a \rangle = \frac{3}{8} (3N-1) \cdot F_{3N-2} \cdot \langle \Psi_a | R_N^{-1} | \Psi_a \rangle$$

$$F_k = \int_0^{\pi/2} \sin^k \vartheta d\vartheta.$$

Поэтому формулу (2.2) для такой функции  $\Psi_a$  можно переписать в виде:

$$-\langle f | \left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_N^2} + (3N-1) \left[ \frac{1}{R_N} \frac{\partial}{\partial R_N} - \frac{1}{R_N} \cdot \frac{3}{16} N(N-1) \cdot F_{3N-2} - \frac{1}{R_N^2} \frac{3N-2}{3N-3} \sum_{i=1}^N l_i(l_i+1) \right] \right\} | f \rangle \geq E_N^{oa} \quad (2.5)$$

Следовательно, верхней границей  $E_N^{oa}$  является наименьшее собственное число уравнения

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_N^2} - (3N-1) \left[ \frac{1}{R_N} \frac{\partial}{\partial R_N} - \frac{3}{16} N(N-1) F_{3N-2} + \frac{1}{R_N^2} \left( \frac{3}{4} (N-1) + \frac{3N-2}{3N-3} \sum_{i=1}^N l_i(l_i+1) \right) + E_1 \right] \right\} f = 0, \quad (2.6)$$

$E_1$  определяется следующей формулой:

$$E_1 = - \left[ \frac{3(3N-1)N(N-1) F_{3N-2}}{16 \left( 1 + \sqrt{1 + (3N-1)(3N-3 + 4 \frac{3N-2}{3N-3} \sum_{i=1}^N l_i(l_i+1))} \right)} \right]^2 \quad (2.7)$$

$l_i$  - орбитальные собственные числа угловых функций  $Y_{l_i m_i}$  заполняют все  $N$  нижние уровни. При больших  $N$

$$\sum_{i=1}^N l_i(l_i+1) \approx \int_0^{\sqrt{3N}} dx \int_0^x (2x+1)x(x+1)dx \approx \frac{1}{10} (3N)^{5/3} \quad (2.8)$$

$$F_{3N-2} \approx F_{3N} \approx \sqrt{\frac{\pi}{6N}}.$$

Поэтому при больших  $N$

$$E_1 \approx - \frac{5\pi\sqrt{3}}{1024} \cdot N^{7/3} = -0,0225... N^{7/3} \geq E_N^{oa} \quad (2.9)$$

2.4. Верхние вариационные оценки (2.7, 2.9) для состояний с заполненными  $l$ -оболочками можно улучшить, используя следующее свойство угловых функций  $Y_{l_i m_i}$ . Сумма квадратов модулей нормированных угловых функций по азимутальным квантовым числам  $m$  даёт постоянную величину. Поэтому

$$\langle \Psi_a | \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} |\vec{z}_i - \vec{z}_j|^{-1} | \Psi_a \rangle = \frac{N(N-1)}{2\sqrt{2} F_{3N-1}} \langle \Psi_a | R_N^{-1} | \Psi_a \rangle \quad (2.10)$$

и верхняя граница определяется наименьшим собственным числом уравнения:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_N^2} - (3N-1) \left[ \frac{N(N-1)}{4\sqrt{2} (3N-1) F_{3N-1}} + \frac{1}{R_N^2} \left( \frac{3}{4} (N-1) + \frac{3N-2}{3N-3} \sum_{i=1}^N l_i(l_i+1) \right) + E_2 \right] \right\} f = 0 \quad (2.11)$$

$E_2$  определяется следующей формулой:

$$E_2 = - \frac{1}{8} \left[ \frac{N(N-1)}{F_{3N-1} \left( 1 + \sqrt{1 + (3N-1)(3N-3 + 4 \frac{3N-2}{3N-3} \sum_{i=1}^N l_i(l_i+1))} \right)} \right]^2 \quad (2.12)$$

Поэтому при больших  $N$  для верхней границы наименьшей энергии антисимметричного состояния получаем более точный результат:

$$E_2 \approx - \frac{5\sqrt{3}}{72\pi} \cdot N^{7/3} = -0,0315... N^{7/3} \geq E_N^{oa} \quad (2.13)$$

2.5. Формулу (2.7), а если  $l$ -оболочки заполнены, - формулу (2.12) можно использовать для оценки наименьшей энергии состояний с любой симметрией. Например, при  $l_i = 0$  (2.12) даёт верхнюю границу наименьшей энергии симметричного состояния системы:

$$-\frac{1}{8} \left[ \frac{N(N-1)}{(3N-1) F_{3N-1}} \right]^2 \geq E_N^{os} \quad (2.1)$$

Эта верхняя оценка верна для любого числа частиц. При больших  $N$  получается более простая формула /1/:

$$E_N^{os} < - \frac{1}{12\pi} N^3 = -0,0265... N^3 \quad (2.14)$$

Для наименьшей энергии системы, состоящей из  $N$  одинаковых антисимметричных групп частиц, формула (2.12) даёт при больших следующий результат:

$$E_N^{(m)} < -\frac{5\sqrt{3}}{72\pi} \cdot n^{2/3} N^{7/3} = -0,0315... n^{2/3} N^{7/3} \quad (2.15)$$

При  $n=2$

$$E_N^{(2)} < -0,0500... N^{7/3} \quad (2.16)$$

2.6. Формулы (2.7) и (2.12) можно использовать и для оценок некоторых возбужденных состояний. Например, согласно (2.7) верхняя граница наименьшего состояния, в котором  $i$ -ая частица имеет средний орбитальный момент меньше  $\sqrt{l_i(l_i+1)}$  при  $l_i \gg \sqrt{N}$  определяется формулой:

$$-\frac{1}{2}\pi \left(\frac{3}{64}\right)^2 N^4 \left(\sum_{i=1}^N l_i^2\right)^{-1} = -0,0133... N^4 \left(\sum_{i=1}^N l_i^2\right)^{-1} > E_N^{0l_i} \quad (2.17)$$

Если же состояние имеет заполненные  $l$ -оболочки, согласно (2.12)

$$-\frac{1}{16\pi} N^4 \left(\sum_{i=1}^N l_i^2\right)^{-1} = -0,0190... N^4 \left(\sum_{i=1}^N l_i^2\right)^{-1} \geq E_N^{0l_i} \quad (2.18)$$

### 3. Нижние оценки энергий системы частиц, связанных гравитационным потенциалом

3.1. В работе Поста [I], а затем в работах других авторов [9-II] для нижних оценок собственных чисел уравнения Шредингера использовали следующее очевидное неравенство:

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq \sum \min \langle \Psi_i | \hat{H}_i | \Psi_i \rangle, \quad (3.1)$$

если:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \geq \langle \Psi | \sum \hat{H}_i | \Psi \rangle, \quad (3.2)$$

$\hat{H}$  - гамильтониан системы,  $\Psi_i$  - класс функций, включающих в себя собственную функцию уравнения Шредингера  $\Psi$ . Варирование усредненного гамильтониана "по частям" даёт возможность получить как простые и грубые, так и сравнительно точные нижние оценки. Например, неравенства, которые сразу же следует из

(3.1,2)

$$E_0(u) \geq E_0(\varphi) + \min(u - \varphi) \quad (3.3)$$

и

$$n E_0\left(\sum_{i=1}^n u_i\right) \geq \sum_{i=1}^n E_0(n u_i), \quad (3.4)$$

$E_0(u)$ -основное собственное число уравнения Шредингера с потенциалом  $u$ , - можно использовать для грубых оценок снизу, в случае, если в правые части неравенств входят известные величины. Более точные оценки приведены в последующем тексте, в котором, повидимому, впервые обсуждаются способы использования этого метода и его точность.

3.2. Неравенство (3.1) использовалось, в основном, для оценок собственных чисел системы частиц, связанных гравитационным потенциалом [I, 7. II-12]. В этом случае гамильтониан системы имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \Delta_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N-1} |\vec{z}_i - \vec{z}_j|^{-1}. \quad (3.5)$$

Пусть

$$\hat{H}_i = -\sum_{j=1}^{N-1} \left(\frac{1}{N-1} \Delta_j + \frac{1}{2} |\vec{z}_i - \vec{z}_j|^{-1}\right), \quad (3.6)$$

а суперпозиция минимизирующих функций  $\Psi_i$  является антисимметричной функцией. Этому условию удовлетворяют  $\Psi_i^s$ , которые являются произведением нечетных функций типа:

$$\Psi_i^s = \prod_{j=1}^{N-1} \Psi_j(\vec{z}_j - \vec{z}_i). \quad (3.7)$$

Каждая из функций  $\Psi_j$  входящее в произведение (3.7) является разным решением одночастичного уравнения:

$$-(\Delta + \frac{1}{2}(N-1)\tau^{-1})\Psi_j = \lambda_j \Psi_j, \quad (3.8)$$

которое определяет одночастичные уровни  $\lambda_j$ . Следовательно

$$E_N \geq -\frac{N(N-1)}{16} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{n_i^2} \quad (3.9)$$

$n_i$  - главные квантовые числа, взятые по мере заполнения нечетных уровней. При  $N \rightarrow \infty$ , формула (3.7) даёт в пределе следующее неравенство

$$E_N \geq -\frac{\sqrt[3]{6}}{32} N^{7/3} = -0,0567... N^{7/3}. \quad (3.10)$$

3.3. Более точную оценку при больших  $N$  можно получить, используя координаты Якоби [I, 13]:

$$\varepsilon_{1x} = X_0, \quad \varepsilon_{1y} = Y_0, \quad \varepsilon_{1z} = Z_0$$

$$\varepsilon_{2x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_2 - x_1), \quad \varepsilon_{2y} = \frac{1}{\sqrt{2}} (y_2 - y_1), \quad \varepsilon_{2z} = \frac{1}{\sqrt{2}} (z_2 - z_1).$$

$$\varepsilon_{i\alpha} = [i(i-1)]^{-1/2} \left\{ (i-1)\alpha_i - \sum_{z=1}^{i-1} \alpha_z \right\} \quad (3.11)$$

В этих координатах при четных  $N$  справедливо соотношение:

$$\langle \Psi_N^+ | \hat{H}_N | \Psi_N^- \rangle = 2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \langle \Psi_N^+ | \sum_{j=1}^{N/2} (-\Delta_{(2j-1)2j} - \frac{1}{2} N |\vec{\varepsilon}_{(2j-1)2j}|^2) | \Psi_N^- \rangle. \quad (3.12)$$

Введены следующие обозначения

$$\vec{\varepsilon}_{(2j-1)2j} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{z}_{2j} - \vec{z}_{2j-1}), \quad \Delta_{(2j-1)2j} = \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon_{(2j-1)2j x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon_{(2j-1)2j y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon_{(2j-1)2j z}^2}. \quad (3.13)$$

Оператор  $\Delta_{(2j-1)2j}$  означает частное дифференцирование  $\Psi_N^+$  в системе координат Якоби с

$$\varepsilon_{2x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_{2j} - x_{2j-1}), \quad \varepsilon_{2y} = \frac{1}{\sqrt{2}} (y_{2j} - y_{2j-1}), \quad \varepsilon_{2z} = \frac{1}{\sqrt{2}} (z_{2j} - z_{2j-1}). \quad (3.14)$$

Следовательно,

$$E_N \geq 2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \min \sum_{j=1}^{N/2} \langle \Psi_j | (-\Delta_{2j} - \Delta_{2j-1} - \frac{1}{2} N |\vec{z}_{2j} - \vec{z}_{2j-1}|^2) | \Psi_j \rangle \quad (3.15)$$

и поэтому основное собственное число  $E_0$  не меньше

$$(N-1) \min \langle \Psi | -2\Delta - \frac{1}{2} N |\vec{z}|^2 | \Psi \rangle = \frac{1}{32} N^2 (N-1) \quad (3.16)$$

Этот результат совпадает с результатом работы /1/, в которой находилась нижняя граница энергии  $N$  бозонов, связанных гравитационным потенциалом. Сравнивая (1.2) и (3.16) получаем, что точность нижней оценки основного собственного числа по формуле (1.15), при  $N \rightarrow \infty$  близка к 11%.

3.4. При нижних оценках с помощью неравенства (3.15) собственных чисел других состояний важно удачно выбрать класс минимизирующих функций  $\Psi_j$ . Например, требуется оценить снизу наименьшее собственное число антисимметричного состояния системы из  $N$  частиц. Функция  $\Psi_N$  обращается в нуль, когда координаты с индексами  $2j$  и  $2k$  или координаты с индексами  $2j-1$  и  $2k-1$  совпадают. Поэтому  $\Psi_N$  входит в класс функций, которые обращаются в нуль при совпадении как координат  $2j$  и  $2k$ , так и координат  $2j-1$  и  $2k-1$ . Так же включает в себя  $\Psi_N^+$  и класс функций, которые антисимметричны по координатам с индексами  $2j$  и  $2j-1$ . Можно искать минимум (3.15) как в пер-

вом, так и во втором классе функций. Однако, третий класс функций, который является пересечением первых двух классов, даёт наиболее точную оценку. В этом классе функций минимум осуществляется суперпозицией произведений нечетных функций типа

$$\Psi = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{z}_{2i} - \vec{z}_{2i-1}) \quad (3.17)$$

Каждая из функций  $\psi_i$  входящая в произведение (3.17), является разным решением одночастичного уравнения

$$(\Delta + \frac{1}{4} |\vec{z}|^2 + \lambda_i) \psi_i = 0, \quad \vec{z} = \vec{z}_{2j} - \vec{z}_{2j-1} \quad (3.18)$$

которое определяет одночастичные уровни  $\lambda_i$ . Следовательно,

$$E_N^{oa} \geq 4 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \sum_{i=1}^{N/2} \lambda_i = -\frac{1}{16} N(N-1) \sum_{i=1}^{N/2} \frac{1}{n_i^2} \quad (3.19)$$

$n_i$  - главные квантовые числа, взятые по мере заполнения  $\frac{1}{2}N$  нижних нечетных уравнений. При больших  $N$  формула (3.19) приводит к следующему неравенству /13/:

$$E_N^{oa} \geq -\frac{\sqrt[3]{3}}{32} N^{7/3} = -0,0449... N^{7/3} \quad (3.20)$$

Этот результат аналогичен результату работы /7/, в которой находилась нижняя граница энергии  $N$  антисимметричных частиц, связанных гравитационным потенциалом. Однако оценка (3.20) точнее. Нижняя граница, полученная по формуле из работы /7/ лежит при  $N \rightarrow \infty$  в два раза ниже границы (3.20).

3.5. Если функция  $\Psi_N$  антисимметрична к перестановке  $2k$  и  $2j$  частиц внутри этих двух групп, нижняя граница наименьшего собственного числа, определяется формулой:

$$E_N \geq -\frac{1}{16} N(N-1) \cdot \left( \sum_{i=1}^k \frac{1}{m_i^2} + \sum_{i=1}^j \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (3.21)$$

$m_i, n_i$  - главные квантовые числа, взятые по мере заполнения соответственно  $k$  и  $j$  нижних нечетных уровней.

Если система состоит из  $\frac{N}{n}$  одинаковых групп антисимметричных частиц, нижняя граница собственных чисел системы определяется формулой

$$E_N \geq -\frac{1}{16} N(N-1) \cdot n \cdot \sum_{i=1}^{\frac{N}{2n}} \frac{1}{n_i^2} \quad (3.22)$$

если  $\frac{N}{n}$  четное число. При  $N \rightarrow \infty$  формула (3.22) даёт в пределе следующее неравенство:

$$E_N \geq -\frac{\sqrt[3]{3}}{32} N^{2/3} N^{7/3}, \quad (3.23)$$

которое для системы состоящей из двух групп антисимметричных частиц переходит в неравенство

$$E_N \geq -\frac{\sqrt[3]{12}}{32} N^{7/3} = -0,0712... N^{7/3} \quad (3.24)$$

Собственные числа состояний, в которых  $i$ -ая частица имеет средний момент количества движения больше  $\sqrt{l_i(l_i+1)}$  ограничены снизу неравенством:

$$E_N^{ol_i} \geq -\frac{1}{32} N(N-1) \sum_{i=1}^N \frac{1}{(l_i+1)^2}. \quad (3.25)$$

Поэтому при  $N \rightarrow \infty$  и  $l_i \gg \sqrt{N}$  наименьший уровень таких состояний оценивается неравенством:

$$-0,0190... N^4 \left( \sum_{i=1}^N l_i^2 \right)^{-1} > E_N^{ol_i} > -0,03125 N^2 \sum_{i=1}^N l_i^2. \quad (3.26)$$

Из (3.26) следует: чем больше разброс значений  $l_i$ , тем грубее (3.26) оценивает  $E_N^{ol_i}$ . Оценки наимизших состояний с определённой симметрией точнее. Собственное число основного состояния системы оценивается неравенством (I.I) с точностью до  $\pm 8,1\%$ .

Наименьшее собственное число антисимметричного состояния при  $N \rightarrow \infty$  ограничено неравенствами:

$$-0,0315... N^{7/3} \geq E_N^{oa} \geq -0,0449... N^{7/3}, \quad (3.27)$$

а наименьшее собственное число системы, состоящей из двух одинаковых групп антисимметричных частиц - неравенствами:

$$-0,0500... N^{7/3} \geq E_N \geq -0,0712... N^{7/3} \quad (3.28)$$

3.6. Для системы частиц, связанных гармоническим потенциалом

$$V = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N-1} (x_i - x_j)^2 \quad (3.29)$$

известны все собственные числа [19-20]. Основное собственное число этой системы определяется формулой:

$$E_N^{os} = (N-1)\sqrt{N}, \quad (3.30)$$

а наименьшее собственное число антисимметричного состояния - формулой

$$E_N^{oa} = (N^2-1)\sqrt{N} \quad (3.31)$$

Нижние оценки этих чисел, полученные с помощью аналога формулы (3.16)

$$E_N \geq 2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} \min \langle \Psi_j | -\frac{\partial^2}{\partial x_{2j}^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_{2j-1}^2} + \frac{1}{2} N (x_{2j} - x_{2j-1})^2 | \Psi_j \rangle \quad (3.32)$$

совпадает с оцениваемыми числами.

#### 4. Оценки энергий систем частиц, связанных немонотонным потенциалом

4.1. Результаты II и III раздела легко обобщаются на произвольный потенциал взаимодействия  $V(\vec{z}_i - \vec{z}_j)$ . Для  $N$  частиц верхняя граница наименьшего состояния с определенной симметрией определяется собственным числом уравнения:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_N^2} + \frac{3N-1}{R_N} \frac{\partial}{\partial R_N} - \frac{N(N-1)}{2} \bar{V}_1 - \frac{1}{R_N^2} \frac{(3N-1)(3N-2)}{3(N-1)} \cdot \sum_{i=1}^N l_i(l_i+1) \right\} \psi = -E_N \psi \quad (4.1)$$

Для состояний с заполненными  $l$ -оболочками верхняя граница более точно определяется собственным числом уравнения:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial R_N^2} + \frac{3N-1}{R_N} \frac{\partial}{\partial R_N} - \frac{N(N-1)}{2} \bar{V} - \frac{1}{R_N^2} \frac{(3N-1)(3N-2)}{3N-3} \cdot \sum_{i=1}^N l_i(l_i+1) \right\} \psi = -E_N \psi \quad (4.2)$$

В уравнении (4.1) и (4.2) числа  $l_i$  определяются симметрией состояния; функции  $\bar{V}_1$  и  $\bar{V}$  - средние значения функции  $V(\sqrt{z_i^2+z_j^2})$  и  $V(\vec{z}_i - \vec{z}_j)$  на гиперсфере радиуса  $R_N$ .

4.2. Собственные числа одночастичного уравнения

$$\left( \Delta - \frac{1}{4} N \cdot V(\vec{z}) \right) \psi_i = -E^{(i)} \psi_i, \quad \vec{z} = \vec{z}_i - \vec{z}_j \quad (4.3)$$

определяют нижнюю границу наимизшего уровня состояния с определённой симметрией:

$$E_N \geq 4 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \cdot \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} E^{(i)}. \quad (4.4)$$

В случае антисимметричного состояния в сумме (4.4) собственные числа  $E^{(i)}$  выбираются по мере заполнения  $\frac{1}{2}N$  нечётных уровней уравнения (4.3).

В работе Калоджеро [13], повидимому, впервые приводятся точные собственные числа системы частиц с немонотонным потенциалом взаимодействия. Он определил ряд собственных чисел системы час-

тиц с потенциалом взаимодействия

$$V_{ij} = (x_i - x_j)^2 + q \cdot (x_i - x_j)^{-2} \quad (4.5)$$

В частности, наименьшее собственное число антисимметричного состояния этой системы, определяется формулой:

$$E_N^{oa} = (N-1)\sqrt{N} \cdot \left( \frac{1}{2}N + 1 + \frac{1}{2}N\sqrt{1+2q} \right) = E'_N(q). \quad (4.6)$$

Поэтому имеется возможность оценить точность метода (4.4) в случае немонотонного потенциала (4.5). Нижняя граница собственных чисел антисимметричных состояний определяется через сумму  $\varepsilon_i$  разных собственных чисел уравнения

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{4}N(x^2 + q x^{-2}) \right) \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (4.7)$$

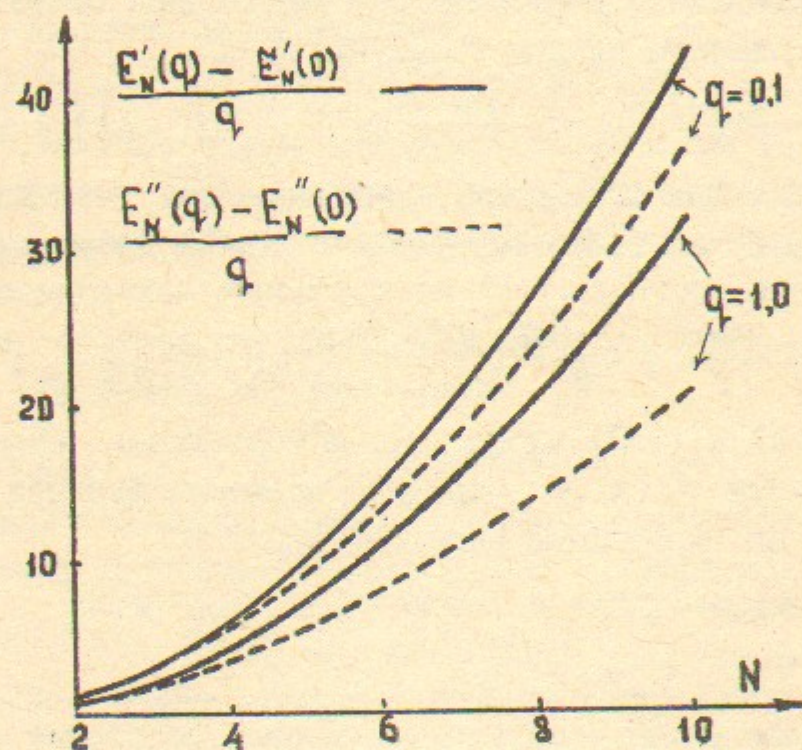


Рис. I

по формуле

$$E_N^{oa} \geq 2 \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \varepsilon_i. \quad (4.8)$$

Собственные числа  $\varepsilon_i$  выбираются по мере заполнения  $\frac{1}{2}N$  нижних нечетных уровней.  $\varepsilon_i$  определяются равенствами [14]:

$$\varepsilon_i = \sqrt{N} \left( 2i + \frac{1}{2}\sqrt{1+qN} + 1 \right). \quad (4.9)$$

Поэтому

$$E_N^{oa} \geq (N-1)\sqrt{N} (N + \sqrt{1+qN}) = E''_N(q). \quad (4.10)$$

В линейном приближении по  $q$ , точное значение (4.6) и оценка (4.10) совпадают:

$$E_N^{oa} = (N-1)\sqrt{N} \cdot \left( N + 1 + \frac{1}{2}qN + \dots \right). \quad (4.11)$$

Однако при больших  $q$ , например при  $q=1$ , точное значение (4.6) и оценки (4.10) сильно отличаются (рис. I). Поэтому лишь в случае, когда отталкивающий потенциал можно рассматривать как малое возмущение, метод вариации "по частям" в форме (4.4) даёт хорошие нижние оценки и для немонотонного потенциала.

4.3. Собственные числа системы частиц, которые сильно отталкиваются на малых расстояниях, при больших  $N$  пропорционально  $N$ , если на достаточно больших расстояниях можно этим притяжением пренебречь. Однако аналоги формул (4.4) не дают этого очевидного результата. Поэтому способ использования формул (3.1) для нижних оценок собственных чисел таких систем следует изменить. Рассмотрим сначала потенциал взаимодействия, который на расстоянии между частицами меньше  $z_0$  равен  $\infty$ , а на больших расстояниях отрицателен. Уравнение Шредингера для частиц, связанных этим потенциалом имеет следующий вид:

$$\left( -\sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} V_{ij}(\vec{z}_i - \vec{z}_j) + U_{z_0} \right) \Psi_N = E_N \Psi_N \quad (4.12)$$

$U_{z_0}$  - функция, обращающаяся в  $\infty$  при  $z_0 > |\vec{z}_i - \vec{z}_j|$  и в нуль при других  $z_i, z_j$ ;  $V_{ij}(\vec{z}_i - \vec{z}_j)$  - отрицательная часть энергии взаимодействия  $i$  и  $j$ -ой частицы. Используя формальное равенство

$$U_{z_0} = N U_{z_0}, \quad (4.13)$$

оператор уравнения (2.8) можно записать в виде следующей суммы:

$$-\sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} V_{ij} + U_{z_0} = \sum_{i=1}^N \left( -\Delta_i + U_{z_0} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N V_{ij} \right), \quad V_{ij} = V_{ji}. \quad (4.14)$$

Поэтому, согласно (1.2):

$$E \geq \sum_{i=1}^N \varepsilon^{(i)} \quad (4.15)$$

где  $\varepsilon^{(i)}$  - собственные числа уравнения

$$\left( -\Delta_i + U_{z_0} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N V_{ij} \right) \psi_i = \varepsilon^{(i)} \psi_i \quad (4.16)$$



взяты при значениях  $\zeta_j$ , которые осуществляют максимум величины  $\varepsilon^{(4)}$  [15]. Таким образом, нижнюю границу собственных чисел можно найти как сумму собственных чисел частиц, каждая из которых двигается в половинном поле остальных частиц, закрепленных в точках, обеспечивающих минимальное собственное число для частицы, при условии, что расстояние между закрепленными частицами больше  $\zeta_0$ . Для системы  $N$  одинаковых частиц нижняя граница собственного числа будет равна умноженному на  $N$  собственному числу одной из движущихся частиц. Если монотонный отрицательный потенциал достаточно глубок, чтобы вызвать появление связанных уровней в системе из двух частиц, минимизирующее расстояние меньше  $\zeta_0 \sqrt{3}$ . В этом случае движущаяся частица будет "упакована" в одной из ячеек закрепленными частицами, которые ограничивают область движения выделенной частицы бесконечным потенциальным барьером. Если ширина отрицательной частицы потенциала меньше  $(\sqrt{\frac{8}{3}} - 1)\zeta_0 = 0,632 \dots \zeta_0$ , при расчётах можно пренебречь действием заряженных частиц, которые расположены за границей ячейки. Эти частицы находятся на расстояниях больших

$\zeta_0 \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,63 \dots \zeta_0$  и поэтому их потенциал в области ячейки будет очень мал. В этом случае собственное число частицы, движущейся в ячейке определяется действием на неё лишь двенадцати ближайших частиц.

4.4. К частицам, связанных потенциалом с сильным отталкиванием на малых расстояниях, относятся атомы благородных элементов. Взаимодействие между этими системами хорошо аппроксимируется потенциалом Ленарда-Джонса [16, 17]

$$V(\vec{z}) = \varepsilon_0 \left[ \left( \frac{\zeta_0}{z} \right)^{12} - \left( \frac{\zeta_0}{z} \right)^6 \right], \quad \vec{z} = \vec{z}_i - \vec{z}_j \quad (4.17)$$

$\varepsilon_0, \zeta_0$  - постоянные величины. В случае потенциала Ленарда-Джонса собственное число частицы, движущейся в ячейке определяются не только действием на неё двенадцати ближайших закрепленных частиц. В энергию связи вносят существенный вклад и частицы, которые лежат и вне ячейки.

В этом случае лучше "закреплять" лишь минимальное количество частиц, которые ограничивают движение оставшихся частиц в отдельных ячейках. Закрепленные частицы в одной из плоскостей

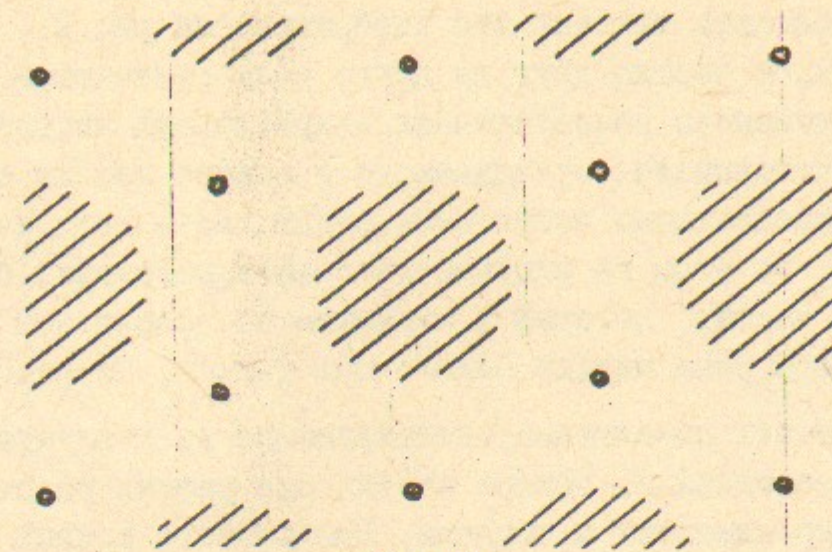


Рис. 2.

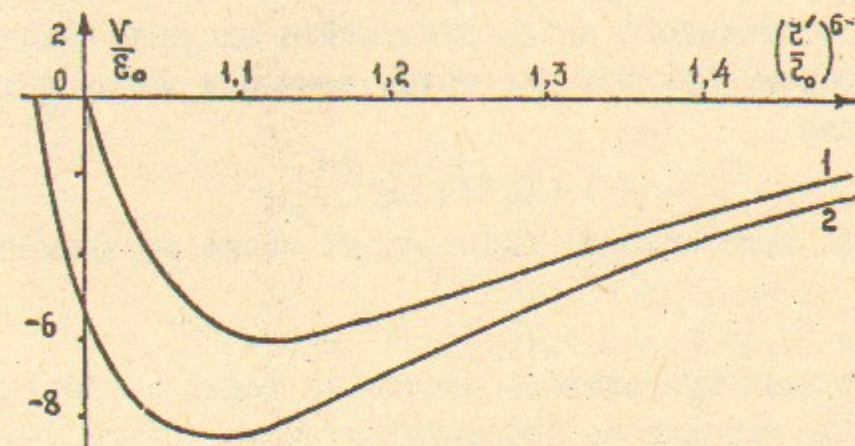


Рис. 3

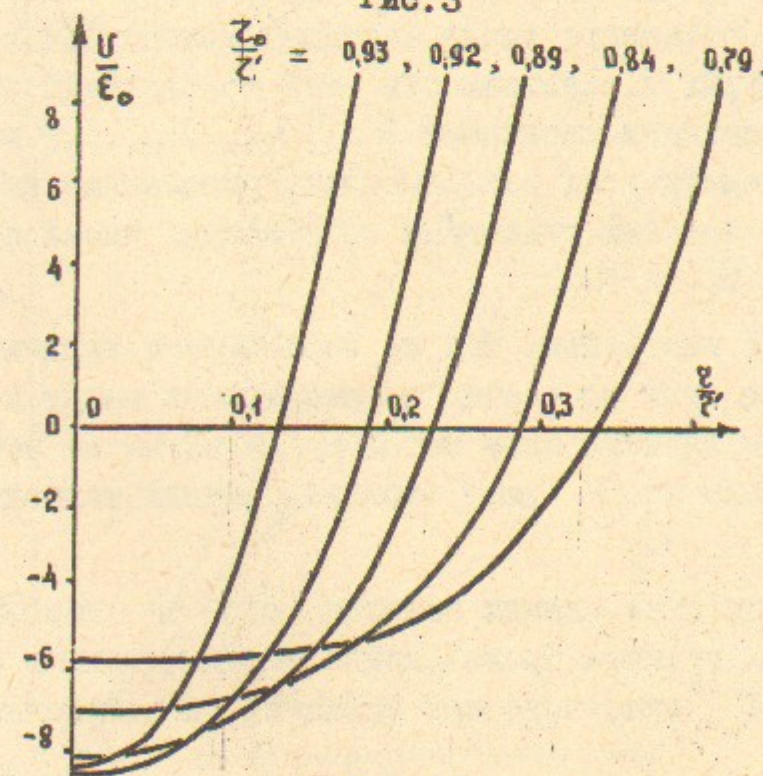


Рис. 4

следует расположить так как это изображено на рис.2., если действия движущихся частиц друг на друга мало отличаются от действия на них одинаково расположенных закрепленных частиц. Тогда зависимость потенциала, создаваемого в центре ячейки от расстояния между закрепленными частицами, будет иметь вид, изображенный на рис.3. На этом же рисунке изображен потенциал ближайших закрепленных частиц, который в минимуме по абсолютной величине почти в полтора раза меньше общего потенциала. На рис.4 изображены зависимости потенциала, действующего на движущуюся частицу, от её расстояния от центра ячейки при разных расстояниях  $z'$  между закрепленными частицами. Большинство кривых вблизи центра ячейки хорошо аппроксимируются параболой.

Поэтому нижняя граница собственного числа движущейся частицы находилась следующим образом. Бралась две точки кривой и через них проводилась парабола

$$U' = \epsilon_0 [-c_1(z') + c_2(z') \left(\frac{z}{z_0}\right)^2], \quad (4.18)$$

которая лежала ниже кривой. Собственное число потенциала (4.18) равно :

$$E' = \epsilon_0 (-c_1 + 3\Lambda\sqrt{c_2}), \quad \Lambda' = z_0\sqrt{2E'}. \quad (4.19)$$

Для каждой кривой приводилось несколько таких парабол и для каждой параболы находилось собственное число. Самое большое собственное число было самым лучшим приближением к действительному значению собственного числа частицы, движущейся в потенциальном поле кривых 4. Зависимости этих приближений от расстояния между закрепленными частицами He, H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, Ne изображены на рис.5. Минимумы на этих зависимостях, умноженные на число частиц, являются нижними границами собственных чисел систем частиц He, H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub> и Ne.

4.4. На рис.5 изображены так же зависимости верхних границ собственных чисел этих же частиц от расстояния между ними, вычисленных обычным вариационным методом. Минимумы на этих зависимостях умноженные на N дают верхние границы наименьших собственных чисел.

Нижние вариационные оценки энергии связи N частиц были получены с использованием произведения ограниченных в объёме сферы радиуса  $z''$  одночастичных функций, расположенных в цент-

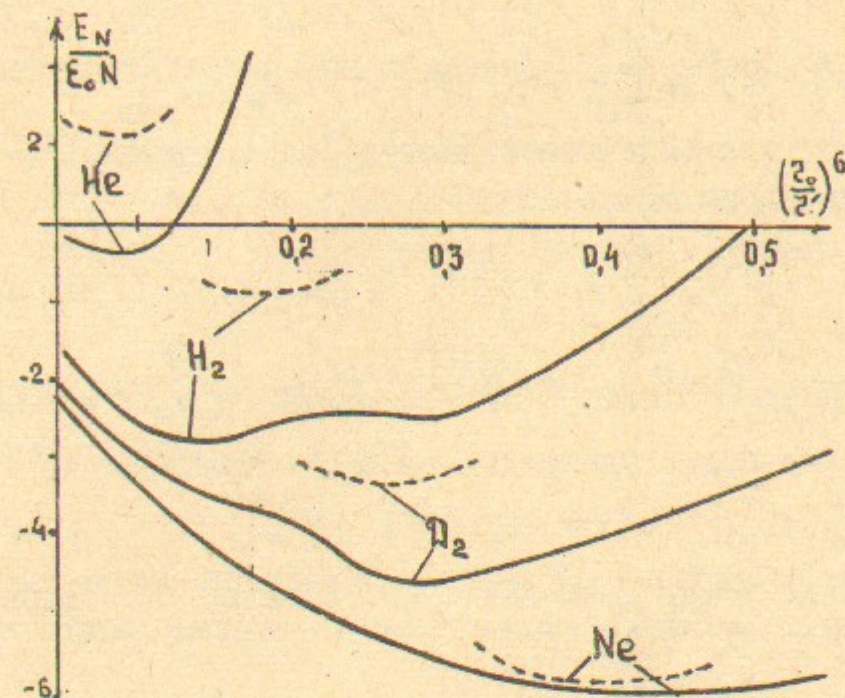


Рис.5

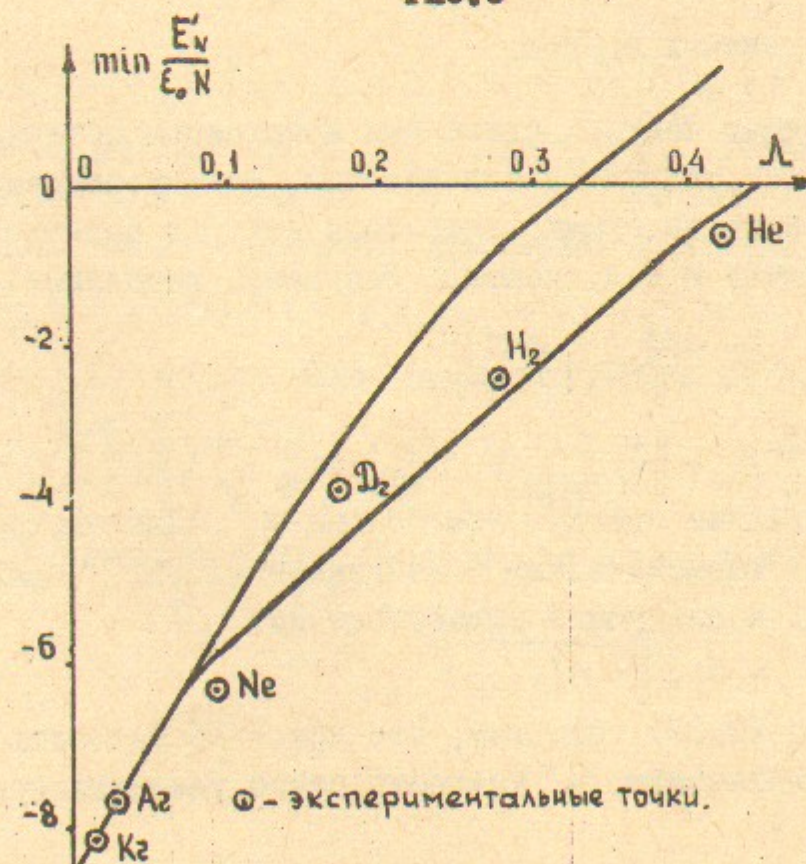


Рис.6

рах плотно упакованных сфер радиуса  $\frac{1}{2}z''$  :

$$\Psi_N'' = (2\pi z'')^{-\frac{1}{2}N} \prod_{i=1}^N z_i^{-1} \sin \pi \frac{z_i}{z''}, \quad (4.20)$$

$$E_N \leq \frac{1}{2} N \varepsilon_0 \cdot (\pi \Lambda \cdot \frac{z_0}{z''})^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} \langle \Psi_N'' | V(\vec{z}_i - \vec{z}_j) | \Psi_N'' \rangle = E_N''.$$

При вычислениях взаимодействие частиц, расположенных в соседних сферах рассчитывалось точно:

$$\langle \Psi_N'' | V(\vec{z}_i - \vec{z}_j) | \Psi_N'' \rangle = -\varepsilon_0 \int_0^{z''} \int_0^{z''} [F_6(z_i, z_j) - F_{12}(z_i, z_j)] dz_i dz_j, \quad (4.21)$$

$$F_n = \frac{z_0^{n-2}}{(n-2)(n-3)z'' z_i z_j} \cdot (\sin \pi \frac{z_i}{z''} \cdot \sin \pi \frac{z_j}{z''})^2 \cdot \left[ \frac{1}{(z'' - z_i - z_j)^{n-3}} + \frac{1}{(z'' + z_i + z_j)^{n-3}} - \frac{1}{(z'' - z_i + z_j)^{n-3}} - \frac{1}{(z'' + z_i - z_j)^{n-3}} \right],$$

а взаимодействие более удаленных частиц - приближенно:

$$\langle \Psi_N'' | V(\vec{z}_i - \vec{z}_j) | \Psi_N'' \rangle \approx -\varepsilon_0 \left[ \left( \frac{z_0}{R} \right)^6 - \left( \frac{z_0}{R} \right)^{12} \right], \quad (4.22)$$

$R$  - расстояние между центрами сфер. Радиус  $z''$  выбирался из условия минимума  $E''$ .

Из рисунка 5 следует, что при  $\Lambda < 0,2$  точность нижней оценки лучше 40%, а при  $\Lambda < 0,1$  нижняя оценка практически совпадает с собственным числом.

### 5. Уточнение нижних оценок.

5.1. Для системы частиц, связанных монотонным потенциалом, точность оценок как правило увеличивается, если усредненный гамильтониан разбивать на суммы, операторы которых содержат координаты трёх, четырёх и т.д. частиц. Например, неравенства

$$E_N^{(0)} = \langle \Psi_N | -\sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} V_{ij} | \Psi_N \rangle \gg$$

$$\gg \frac{N}{K} \min \langle \Psi_K | -\sum_{i=1}^K \Delta_i + \frac{N-1}{K-1} \sum_{i=1}^K \sum_{j < i}^{K-1} V_{ij} | \Psi_K \rangle = \frac{N}{K} E_K^{(0)} \left( \frac{N-1}{K-1} \sum_{i=1}^K \sum_{j < i}^{K-1} V_{ij} \right), \quad (5.1)$$

тем точнее даёт нижнюю оценку, чем больше  $K$ . Для системы частиц, связанных гармоническим потенциалом (1.23), неравенства (5.1) приводят к следующей нижней оценки:

$$E_N^{(0)} > N \sqrt{(N-1) \left( 1 - \frac{1}{K} \right)}. \quad (5.2)$$

Сравнивая (3.2) с (3.29), находим, что при  $K=2$  точность оценки около 40%. При увеличении  $K$  точность резко увеличивается и

уже при  $K=10$  становится лучше 5%.

3.2. Если число частиц невелико для оценок снизу в (3.1) удобно использовать операторы  $\hat{H}_i$  следующего вида [18]:

$$\hat{H}_{ij} = -\frac{1}{N-1} (\Delta_i + \Delta_j) + V_{ij} + C_{ij}, \quad \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} C_{ij} = 0. \quad (5.3)$$

Тогда наилучшая оценка снизу определяется формулой

$$E'_N = \max \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} \min \langle \Psi_{ij} | -\frac{1}{N-1} (\Delta_i + \Delta_j) + V_{ij} + C_{ij} | \Psi_{ij} \rangle \right), \quad (5.4)$$

в которой пробными функциями являются не только  $\Psi_{ij}$ , но и  $C_{ij}$ . Эта оценка совпадает с собственным числом. Поэтому

$$E'_N = \langle \Psi_N | \hat{H}_N | \Psi_N \rangle, \quad H_N = -\sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} V_{ij}. \quad (5.5)$$

Сопоставление (3.4) и (3.5) даёт следующее: максимум суммы минимумов осуществляется, когда

$$\Psi_{ij} = \Psi_N, \quad C_{ij} = \Psi_N^{-1} \left[ \frac{1}{N-1} (\Delta_i + \Delta_j) - V_{ij} + \frac{2}{N(N-1)} \hat{H}_N \right] \Psi_N, \quad (5.6)$$

$\Psi_N$  - собственная функция уравнения Шредингера. Следовательно, для более точных нижних оценок, можно воспользоваться неравенством

$$E'_N \geq \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} \min \langle \Psi'_{ij} | -\frac{1}{N-1} (\Delta_i + \Delta_j) - V_{ij} + C'_{ij} | \Psi'_{ij} \rangle, \quad \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} C'_{ij} = 0, \quad (5.7)$$

в котором  $C'_{ij}$  выбирается как можно близкие к  $C_{ij}^0$ , например, в виде:

$$C'_{ij} = (\Psi'_N)^{-1} \left[ \frac{1}{N-1} (\Delta_i + \Delta_j) - V_{ij} + \frac{2}{N(N-1)} \hat{H}_N \right] \Psi'_N. \quad (5.8)$$

$\Psi'_N$  - функция близкая к  $\Psi_N$ , получаемая обычным вариационным методом. Из (3.7) следует, что нижняя граница находится через собственные числа следующих одномерных уравнений

$$\left( -\frac{2}{N-1} \Delta + V_{ij}(z) + C'_{ij}(z, z_{k=i,j}) \right) \Psi'_{ij} = \varepsilon'_{ij} \Psi'_{ij}, \quad \vec{z} = \vec{z}_i - \vec{z}_j, \quad (5.9)$$

в которых  $z_k$  играет роль параметра. Если из уравнений (5.9) найдено  $\varepsilon'_{ij}$  и  $\Psi'_{ij}$ , то

$$E_N \geq \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} \langle \Psi'_{ij} | \varepsilon'_{ij} | \Psi'_{ij} \rangle. \quad (5.10)$$

Из (3.10) вытекает более простое, но менее точное неравенство:

$$E_N \geq \sum_{i=1}^N \sum_{j < i}^{N-1} \min \varepsilon'_{ij}. \quad (5.11)$$

которое удобно использовать для быстрых оценок снизу.

3.3. Обобщением формул (5.9-5.11) являются следующие неравенства

$$E_N \geq (C_N^n)^{-1} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N-1} \dots \sum_{k=1}^{N-n+2} \sum_{l=1}^{N-n+1} \langle \Psi_{ij..lk}^{(m)} | \varepsilon_{ij..lk}^{(m)} | \Psi_{ij..lk} \rangle. \quad (5.12)$$

Собственные числа  $\varepsilon_{ij..lk}^{(m)}$  определяются уравнениями:

$$(\Delta_i + \Delta_k + \dots + \Delta_l + \Delta_k + V_{ij..kl}) \Psi_{ij..kl}^{(m)} = \varepsilon_{ij..kl}^{(m)} \Psi_{ij..kl}^{(m)},$$

$$(C_N^n)^{-1} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N-1} \dots \sum_{k=1}^{N-n+1} V_{ij..kl} = V_N. \quad (5.13)$$

Как пример использования неравенств (5.12), получим с помощью этого неравенства нижнюю оценку основного собственного числа уравнения

$$\left( - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_N \right) \Psi_N = E_N \Psi_N, \quad V_N = \left( \sum_{i=1}^N x_i^2 \right)^{-1/2}. \quad (5.14)$$

Согласно (5.12)

$$E_N \geq \frac{N}{K} \cdot E_K, \quad (5.15)$$

где  $E_K$  - основное собственное число уравнения

$$\left( \sum_{i=1}^K \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{K}{N} V_N \right) \Psi_K = E_K \Psi_K, \quad (5.16)$$

которое определяется формулой

$$E_K = - \left( \frac{N}{1-K} \right)^2. \quad (5.17)$$

Следовательно,

$$E_N > - \frac{K}{N} (K-1)^{-2}. \quad (5.18)$$

Точное основное число уравнения определяется формулой

$$E_N = (N-1)^{-2}. \quad (5.19)$$

Сопоставление (3.18) и (3.19) находим, что начиная с  $N=4$ , при выборе  $K=N-1$ , точность нижних оценок лучше 34%.

#### VI. Оценка спектра сумм собственных чисел

6.1. Обычный вариационный метод, который так удобен для оценки основного собственного числа уравнения Шредингера

$$\hat{H} \Psi = E \Psi, \quad \hat{H} = V(x_i) - \sum_{i=1}^{\ell} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}, \quad (6.1)$$

можно использовать и для оценки суммы  $k$  первых собственных

чисел, если воспользоваться функционалом:

$$L_k = \sum_{j=1}^k \langle \Psi_j | \hat{H} | \Psi_j \rangle. \quad (6.2)$$

В предлагаемом разделе доказывается, что минимум этого функционала в классе ортонормированных вещественных функций  $\Psi_j$  совпадает с суммой  $k$  первых собственных чисел уравнения (6.1), и используется это свойство функционала (6.2) для вариационной оценки спектра сумм собственных чисел уравнения Шредингера и для оценки суммы по состояниям.

6.2. Для определения минимума этого функционала в классе  $k$  ортонормированных вещественных функций  $\Psi_j$ , разложим эти функции в ряд по собственным вещественным функциям оператора  $\hat{H}$ :

$$\Psi_j = \sum_{n=1}^{\infty} a_{jn} \Psi^{(n)}. \quad (6.3)$$

Коэффициенты  $a_{jn}$  вещественны и связаны друг с другом соотношениями:

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_{in} a_{jn} = \delta_{ij}. \quad (6.4)$$

Определение минимума функционала (6.2) при условии (6.4) сводится к отысканию минимума следующего выражения:

$$F_k = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sum_{j=1}^k (E^{(n)} + c_j) a_{jn}^2 + \sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^k (1 - \delta_{ij}) c_{ij} a_{in} a_{jn} \right], \quad (6.5)$$

$E^{(n)}$  - собственные числа оператора  $\hat{H}$ ;  $c_j$  и  $c_{ij}$  - постоянные Лагранжа. Поэтому  $a_{jn}$ ,  $c_j$ ,  $c_{ij}$  определяются следующей системой уравнений:

$$2 a_{jn} (E^{(n)} + c_j) + \sum_{i=1}^k c_{ji} (1 - \delta_{ji}) a_{in} = 0 \quad (6.6)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_{jn} a_{in} = \delta_{ji}.$$

Не нулевым решением этой системы являются  $k$  чисел  $a_{jn}$ , у которых второй индекс принимает  $k$  разных значений. Для этих чисел справедливо следующее соотношение:

$$a_{jn} = \delta_{jn}, \quad n_j \leq n, \quad n_j < n_{j+1} \quad (6.7)$$

Но условие (6.7) вместе с условием (6.3) означает, что экстремум функционала (2) равен сумме  $k$  собственных чисел оператора  $\hat{H}$ , а минимум функционала (6.2) равен сумме  $k$  первых собственных чисел оператора  $\hat{H}$ . Поэтому сумма  $k$  операторов  $\hat{H}$ , усредненных по любым  $k$  ортонормированным функциям, оценивают

сверху сумму  $k$  первых собственных чисел оператора  $\hat{H}$ . Оценки суммы  $k$  первых чисел с помощью функционала (6.2) отличается от обычных вариационных оценок тем, что вместо одной пробной функции берётся  $k$ -ортогональных пробных функций, которые зависят от нескольких варьируемых параметров. Чем больше таких параметров, тем точнее минимум функционала (6.2) оценивает сверху сумму  $k$  первых чисел.

6.3. Неравенство:

$$\sum_{j=1}^k E^{(j)} \leq \sum_{j=1}^k \langle \psi_j | \hat{H} | \psi_j \rangle \quad (6.8)$$

можно использовать не только для верхних оценок суммы  $k$  первых собственных чисел, но и для верхней вариационной оценки последующего собственного числа, если известны предыдущие:

$$E^{(k)} \leq \sum_{j=1}^k \langle \psi_j | \hat{H} | \psi_j \rangle - \sum_{j=1}^{k-1} E^{(j)} \quad (6.9)$$

Для таких оценок нужно взять  $k$  вещественных ортонормированных функций  $\psi_j$ , зависящих от нескольких варьируемых параметров и затем найти минимум суммы средних значений  $\hat{H}$ . Чем больше будет параметров, тем точнее минимум суммы без суммы  $k-1$  предыдущих собственных чисел определит сверху  $k$ -ое собственное число. Но второе собственное число часто сравнительно хорошо определяется уже при использовании одного параметра. Например, второе собственное число уравнения

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{z}\right) R = ER, \quad E^{(1)} = -\frac{1}{4}, \quad (6.10)$$

оценивается сверху неравенством:

$$E^{(2)} \leq \langle \psi_1 | -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{z} | \psi_1 \rangle + \langle \psi_2 | -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{z} | \psi_2 \rangle + \frac{1}{4}, \quad (6.11)$$

где  $\psi_1$  и  $\psi_2$  любые ортонормированные функции. Если в качестве таких функций возьмём выражения:

$$\psi_1 = 2\lambda^{3/2} z \exp(-\lambda z), \quad \psi_2 = 2\sqrt{3} \lambda^{3/2} z \left(1 - \frac{3}{2} \lambda z\right) \exp(-\lambda z) \quad (6.12)$$

и найдём минимум (6.11) по  $\lambda$ , то получим:

$$E^{(2)} < -\frac{1}{20}. \quad (6.13)$$

Верхняя оценка (13) лишь на 20% отличается от точного значения  $-\frac{1}{16}$ , хотя при этой оценке использовался только один параметр  $\lambda$ .

6.4. Верхние оценки спектра сумм первых собственных функций можно использовать для нижних оценок суммы по состояниям [17]:

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} \exp \alpha E^{(n)}, \quad \alpha < 0, \quad (6.14)$$

так как

$$Z \geq \sum_{n=1}^{\infty} \exp \alpha \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle, \quad (6.15)$$

где  $\langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle$  — слагаемые, входящие в верхние оценки сумм первых собственных чисел. Для доказательства неравенства (6.15), которое выполняется при условии:

$$\sum_{j=1}^k E^{(j)} \geq \sum_{j=1}^k \langle \psi_j | \hat{H} | \psi_j \rangle \quad (6.16)$$

достаточно доказать, что функция:

$$f(x) = \sum_{j=1}^n \exp \varepsilon^{(j)}(x), \quad n \rightarrow \infty \quad (6.17)$$

имеет положительную производную по  $x$ , если

$$\varepsilon_{j+1}^{(j+1)} < \varepsilon_j^{(j)}, \quad \sum_{j=1}^k \frac{\partial \varepsilon^{(j)}}{\partial x} > 0, \quad k \geq 1. \quad (6.18)$$

Для доказательства представим производную функцию в виде следующего ряда по  $i$

$$\sum_{j=1}^n \exp \varepsilon^{(j)} \cdot \frac{\partial \varepsilon^{(j)}}{\partial x} = \sum_{i=1}^{n-1} \left( \sum_{j=1}^{n-i} \frac{\partial \varepsilon^{(j)}}{\partial x} \right) \cdot \left( \sum_{j=n-i}^n (-1)^{i+j-n} \exp \varepsilon^{(j)} \right). \quad (6.19)$$

Из неравенств (18) следует, что ряды, которые входят в  $i$ -тый член ряда (19) в качестве сомножителя, положительны. Следовательно и весь ряд (19), который совпадает с производной функции  $f(x)$ , положителен.

Таким образом для оценки суммы по состояниям снизу достаточно усреднить гамильтониан уравнения Шредингера по любым ортогональным функциям и результаты усреднения подставить в формулу для суммы по состояниям вместо собственных чисел.

Д. I. Оценка плотности звезд

Д. I. I. Максимальную среднюю плотность системы частиц, связанных гравитационным потенциалом, можно оценить, используя формулу:

$$\rho \approx \bar{\rho} = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi} \left\langle \frac{1}{z} \right\rangle^3 = \frac{48}{\pi} E_N^3 N^{-5}, \quad \text{Д. I. I.}$$

где  $E_N$  - энергия основного состояния. Для нейтронной звезды справедливо неравенство 3.36. Поэтому формулу Д. I. I можно переписать в виде:

$$\rho \approx \bar{\rho} = (3,6 \pm 1,7) \cdot 10^{-3} N^2 \quad \text{Д. I. 2.}$$

или

$$\rho \approx \bar{\rho} = (0,7 \pm 0,3) \cdot 10^{39} M_\odot^2, \text{ см}^{-3}, \quad \text{Д. I. 3.}$$

если  $M_\odot$  - масса звезды в солнечных массах, а  $\rho$  - число нейтронов в  $\text{см}^3$ . Из Д. I. 3. следует, что при массе звезды близкой к  $1 M_\odot$  среднее расстояние между нейтронами близко к ядерным расстояниям. Поэтому для звезд массы больше  $1 M_\odot$  оценка Д. I. 3. уже не верна, так как в этих звездах определяющим будет ядерное взаимодействие частиц.

Д. I. 2. Для водородной звезды энергию основного состояния легко оценить, если принять, что из-за электрического взаимодействия среднее расстояние между частицами не зависит от их заряда. Тогда при условии

$$e^2 \ll \gamma M^2 N^{5/3}, \quad N_e = N_p = \frac{1}{2} N \quad \text{Д. I. 4.}$$

выполняются следующие неравенства

$$-0,014 \cdot \alpha N^{7/3} < E_N < -0,010 \cdot \alpha N^{7/3} \quad \text{Д. I. 5.}$$

В формулах Д. I. 4, Д. I. 5  $m$  - масса протона,  $e$  - заряд электрона,  $\gamma$  - гравитационная постоянная,  $\alpha$  - отношение массы электрона к массе протона. Поэтому плотность водородной звезды можно оценить по формуле:

$$\rho \approx (2,7 \pm 1,8) \cdot 10^{-5} \alpha^3 N^2 \quad \text{Д. I. 6.}$$

или, в обозначениях Д. I. 3, по формуле

$$\rho \approx (1,7 \pm 0,7) \cdot 10^{27} M_\odot^2, \text{ см}^{-3}. \quad \text{Д. I. 7.}$$

Формула Д. I. 7, повидимому, вне диапазона  $0,01 \div 0,1$  неверна, так как при массах больших  $0,1$  в водородной звезде энергетически выгодно образование нейтронного центра, а при массе  $< 0,01$  энергетически выгодным становится образование химической связи. Аналог формулы Д. I. 7. для элементов с атомным номером  $Z$  и атомным весом  $A$  имеет следующий вид:

$$\bar{\rho}_{Z,1} = (1,7 \pm 0,7) \cdot (A/Z)^5 \cdot A^{-1} M_\odot^2, \text{ см}^{-3}. \quad \text{Д. I. 8.}$$

Диапазон использования формулы I.8 ограничен со стороны малых масс образованием химической связи между частицами, а со стороны больших масс, ядерными превращениями, которые приводят к увеличению  $\frac{A}{Z}$ .

Д. 2. Плотность частиц в окрестностях звезд.

Д. 2. I. К реальным системы, термодинамические свойства которых можно рассчитывать без привлечения более или менее удачной модели, относится система частиц, связанных гравитационным потенциалом. В предлагаемом дополнении оценивается сумма по состояниям этой системы, и затем оценивается плотность свободных частиц, которые находятся в термодинамическом равновесии с частицами, связанными гравитационным взаимодействием.

Д. 2. 2. Для верхней оценки  $k$  первых собственных чисел системы связанных частиц возьмем в качестве  $k$  пробных функций  $\Psi_i$  (см. раздел VI) произведения собственных функций частиц движущихся внутри сферы радиуса  $z_0$ :

$$\Psi_i = \prod_{l=1}^N Y_{l,m_l}(\varphi_l, \vartheta_l) \cdot z_l J_{l_i}(z_l \sqrt{\alpha_{l_i, k_i}}) \quad \text{Д. 2. I}$$

При  $z_l \sqrt{\alpha_{l_i, k_i}}, l_i, k_i \gg 1$

$$J_{l_i}(z_l) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z_l}} \cdot \cos(z_l \pm \frac{1}{2} \pi l_i - \frac{1}{4} \pi), \quad z_l = \sqrt{z_0^2 \alpha_{l_i, k_i}}, \quad \text{Д. 2. 2.}$$

$$z_0 \sqrt{\alpha_{l_i, k_i}} = x_{l_i, k_i} \approx (k_i + \frac{1}{2} l_i - \frac{1}{4}) \pi - \beta, \quad \beta > 0.$$

Поэтому усреднение гамильтониана в (6. I5) при больших  $l_i, k_i$  приводит к следующим неравенствам

$$\sum_{i=1}^k E_N^{(i)} < -\frac{1}{2} z_0^{-1} \cdot k N(N-1) + \pi^2 z_0^{-2} \sum_{i=1}^k E_N^{(i)}, \quad \text{Д. 2. 3.}$$

$$E_N^{(i)} = \sum_{j=1}^N (k_j^{(i)} + \frac{1}{2} l_j^{(i)})^2 \approx \frac{1}{4} \sum_{j=1}^N (m_j^{(i)})^2. \quad \text{Д. 2. 4.}$$

Для антисимметричных состояний  $\frac{1}{2} (m_i^{(j)})^2$  - кратно вырожденные целые числа  $m_i^{(j)}$  в каждом слагаемом суммы (Д.2.4) должны быть разными, а каждое слагаемое должно отличаться от остальных хотя бы одним из этих чисел. Минимальная сумма (Д.2.4), удовлетворяющая этим условиям и даёт наилучшую верхнюю оценку суммы  $k$  первых чисел антисимметричных состояний. Поэтому сумма  $k$  первых членов ряда

$$\alpha_j = -\frac{1}{2} N(N-1) \zeta_0^{-1} + \frac{1}{4} \pi^2 \zeta_0^{-2} \sum_{i=1}^N (m_i^{(j)})^2, \quad \text{Д.2.5}$$

в котором члены расположены в порядке их возрастания, даёт наилучшую верхнюю оценку  $k$  первых собственных чисел антисимметричных состояний.

Д.2.3. Точность верхних оценок можно улучшить, если ввести две области движения частиц; например, внутреннюю радиуса  $\zeta_0$ , где движутся  $N-N'$  частиц, и внешнюю, где движутся  $N'$  частиц. Внешние частицы дают нулевой вклад. Поэтому лучшую верхнюю оценку суммы  $k$  первых собственных чисел даёт теперь сумма  $k$  первых членов ряда

$$\alpha'_j = -\frac{1}{2} N'(N'-1) \zeta_0^{-1} + \frac{1}{4} \pi^2 \zeta_0^{-2} \sum_{i=1}^{N'} (m_i^{(j)})^2, \quad \text{Д.2.6.}$$

в котором члены расположены в порядке их возрастания. Точность таких верхних оценок будет улучшаться, если выделить несколько таких областей с варьируемыми границами. В пределе большого числа областей при  $N \rightarrow \infty$  такая процедура приводит к полуклассической модели ферми-газа, связанного макроскопическими силами тяготения.

Д.2.4. Если движение частиц ограничено жесткими стенками сферы радиуса  $\zeta_0'$ , верхняя оценка Д.2.5 будет верна до тех пор, пока

$$\zeta_0 < \zeta_0' \quad \text{Д.2.7}$$

Если же, начиная с некоторого  $k$

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i(\zeta_0) > \sum_{i=1}^k \alpha_i(\zeta_0'), \quad \text{Д.2.8.}$$

аналог ряда Д.2.6 имеет следующий вид

$$\alpha'_j = -\frac{1}{2} N(N-1) \zeta_{01}^{-1} + \frac{1}{4} \pi^2 \zeta_{01}^{-2} \sum_{i=1}^N (m_i^{(j)})^2, \quad \text{Д.2.9}$$

а аналог ряда Д.2.7 определяется формулой:

$$\alpha''_j = -\frac{1}{2} N'(N'-1) \zeta_{01}^{-1} + \frac{1}{4} \pi^2 \zeta_{01}^{-2} \sum_{i=1}^{N'} (m_i^{(j)})^2. \quad \text{Д.2.10}$$

Д.2.5. Функционал (6.1) можно использовать и для нижних оценок спектра сумм. Действительно,

$$\sum_{j=1}^k E_N^{(j)} > \sum_{j=1}^k \sum_i \min \langle \Psi_i^{(j)} | \hat{H}_i | \Psi_i^{(j)} \rangle, \quad \sum_i \langle \hat{H}_i \rangle = \langle \hat{H}_N \rangle, \quad (2.1)$$

если пробные функции  $\Psi_i^{(j)}$  входят в класс функций включающих в себя первые собственные функции уравнения (2.1). Неравенство (2.1) явно определяет нижнюю границу спектра сумм собственных чисел, если известны или собственные числа операторов  $\hat{H}_i$  или их нижние границы.

Д.2.6. В координатах Якоби справедливо соотношение [1,13]  $\langle \hat{H}_N \rangle = \langle \Psi_N^r | \hat{H}_N | \Psi_N^r \rangle = 2(1-N^{-1}) \sum_{i=1}^{N'} \langle \Psi_N^r | -\Delta_i - \frac{1}{2} N | \vec{\xi}_i |^{-1} | \Psi_N^r \rangle$ , Д.2.11 если в операторе

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial \xi_{2x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_{2y}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_{2z}^2}, \quad \vec{\xi}_i = \vec{\xi}_2, \quad \text{Д.2.12}$$

дифференцирование происходит в системе координат

$$\xi_{2x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_{2i} - x_{2i-1}), \quad \xi_{2y} = \frac{1}{\sqrt{2}} (y_{2i} - y_{2i-1}), \quad \xi_{2z} = \frac{1}{\sqrt{2}} (z_{2i} - z_{2i-1}). \quad \text{Д.2.13}$$

Поэтому

$$\hat{H}_i = 2(1-N^{-1}) [-\Delta_{2i} - \Delta_{2i-1} - \frac{1}{2} N |\vec{z}_{2i} - \vec{z}_{2i-1}|^{-1}] \quad \text{Д.2.14}$$

Следовательно,

$$\sum_{j=1}^k E_N^{(j)} \geq 2(1-N^{-1}) \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{N'} \min [-\Delta_{2i} - \Delta_{2i-1} - \frac{1}{2} N |\vec{z}_{2i} - \vec{z}_{2i-1}|^{-1}] = \quad \text{Д.2.15}$$

$$= -\frac{1}{16} (N-1) N \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{N'} (m_i^{(j)})^{-2}.$$

Для антисимметричных состояний  $\frac{1}{2} (m_i^{(j)})^2$  - кратно вырожденные числа  $m_i^{(j)}$ , в каждом слагаемом суммы Д.2.6 должны быть разными, а каждое слагаемое отличаться от остальных хотя бы одним таким числом. Минимальная сумма Д.2.6, удовлетворяющая перечисленным условиям оценивает снизу сумму  $k$  первых чисел антисимметричных состояний. Поэтому сумма  $k$  первых членов ряда

$$\beta_j^{(j)} = -\frac{1}{16} N(N-1) \sum_{i=1}^{N'} (m_i^{(j)})^{-2}, \quad \text{Д.2.16}$$

в котором члены расположены в порядке их возрастания, даёт наилучшую нижнюю оценку суммы  $k$  первых собственных чисел антисимметричных состояний.

Д.2.7. Если движение частиц ограничено жесткими стенками сферы радиуса  $z_0$ , нижние оценки определяются через собственные числа уравнений

$$(-\Delta_{2i} - \Delta_{2i-1} - \frac{1}{4} N |\vec{z}_{2i} - \vec{z}_{2i-1}|^{-1}) \psi^{(i)} = \lambda^{(i)} \psi^{(i)} \quad \text{Д.2.17}$$

с нулевыми граничными условиями в нуле и на поверхности сферы. Но

$$\lambda^{(i)} > \lambda_1^{(i)} + \lambda_2^{(i)}, \quad \text{Д.2.18}$$

где  $\lambda_1^{(i)}$  и  $\lambda_2^{(i)}$  собственные числа уравнений

$$[\gamma(-\Delta_{2i} - \Delta_{2i-1}) - \frac{1}{4} N |\vec{z}_{2i} - \vec{z}_{2i-1}|^{-1}] \psi_1^{(i)} = \lambda_1^{(i)} \psi_1^{(i)}, \quad \text{Д.2.19}$$

$$(1-\gamma)(-\Delta_{2i} - \Delta_{2i-1}) \psi_2^{(i)} = \lambda_2^{(i)} \psi_2^{(i)}, \quad 0 < \gamma < 1.$$

Первое уравнение имеет нулевые граничные условия на  $\infty$ , второе - на поверхности сферы радиуса  $z_0$ . Поэтому

$$\sum_{j=1}^k E_N^{(j)} \geq \sum_{j=1}^k \left[ -\frac{1}{16} \gamma^{-1} N(N-1) \sum_{i=1}^N (m_i^{(j)})^{-2} + \frac{1}{4} \pi^2 z_0^{-2} (1-\gamma) \sum_{i=1}^N (n_i^{(j)})^2 \right] \quad \text{Д.2.20}$$

и аналог ряда Д.2.16 имеет следующий вид:

$$b^{(j)} = -\frac{1}{16} \gamma^{-1} N(N-1) \sum_{i=1}^N (m_i^{(j)})^{-2} + \frac{1}{4} \pi^2 z_0^{-2} (1-\gamma) \sum_{i=1}^N (n_i^{(j)})^2, \quad \text{Д.2.21}$$

$\frac{1}{2} (m_i^{(j)})^{-2}$  кратно вырожденные числа  $m_i^{(j)}$  и  $\frac{1}{2} (n_i^{(j)})^2$  кратно вырожденные целые числа  $n_i^{(j)}$  в каждом члене ряда должны быть разными, а каждый член должен отличаться от остальных набором чисел  $n_i^{(j)}$  и  $m_i^{(j)}$ .

Д.2.8. Если оценки сумм собственных чисел получены в виде сумм следующих чисел

$$\sum_{j=1}^k a^{(j)} > \sum_{j=1}^k E_N^{(j)} > \sum_{j=1}^k b^{(j)}, \quad \text{Д.2.22}$$

то сумма по состояниям

$$Z_N = \sum_{j=1}^{\infty} \exp(-\beta E_N^{(j)}), \quad \beta > 0, \quad \text{Д.2.23}$$

ограничена сверху и снизу неравенством (см. раздел VI)

$$\sum_{j=1}^{\infty} \exp(-\beta a^{(j)}) < Z_N < \sum_{j=1}^{\infty} \exp(-\beta b^{(j)}). \quad \text{Д.2.24}$$

Для частиц, связанных гравитационным потенциалом и движущихся внутри сферы радиуса  $z_0$ , такими числами может служить ряд чисел (Д.2.10) и (Д.2.21). Поэтому сумма по состояниям этой системы ограничена неравенствами:

$$A_N \leq Z_N \leq B_N$$

$$A_N = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{\substack{m_i \\ n_i}} \exp \beta \left[ \frac{1}{2} N'(N'-1) z_0^{-1} - \frac{1}{4} \pi^2 z_0^{-2} \sum_{i=1}^{N'} (m_i^{(j)})^2 - \frac{1}{4} \pi^2 z_0^{-2} \sum_{i=1}^{N-N'} (n_i^{(j)})^2 \right],$$

$$B_N = \sum_{j=1}^{\infty} \exp \beta \left[ \frac{1}{16} \gamma^{-1} N(N-1) \sum_{i=1}^N (m_i^{(j)})^{-2} - \frac{1}{4} \pi^2 (1-\gamma) z_0^{-2} \sum_{i=1}^N (n_i^{(j)})^2 \right] \quad \text{Д.2.25}$$

Для антисимметричных состояний  $\frac{1}{2} (m_i^{(j)})^2$  и  $\frac{1}{2} (n_i^{(j)})^2$  кратно вырожденные числа  $m_i^{(j)}$  и  $n_i^{(j)}$  в каждом слагаемом ряда  $A_N$  должны быть разными, а каждое слагаемое ряда отличается от остальных хотя бы одним таким числом, а в ряде  $B_N$  каждое слагаемое должно отличаться как числом  $m_i^{(j)}$  так и числом  $n_i^{(j)}$ . Но тогда

$$A_N \geq \exp \beta \cdot \frac{1}{2} N'(N'-1) z_0^{-1} \cdot Q_{N'}(z, \beta) \cdot Q_{N-N'}(z, \beta). \quad \text{Д.2.26}$$

и

$$B_N < \sum_{\substack{m_i \\ n_i}} \exp \frac{1}{16} \frac{\beta}{\gamma} N(N-1) \sum_{i=1}^N (m_i^{(j)})^{-2} + \exp \frac{1}{32} N^2 (N-1) m_0^{-2} \cdot Q_N(z_0 \sqrt{1-\gamma}, \beta), \quad \text{Д.2.27}$$

где  $Q(z, \beta)$  - сумма по антисимметричным состояниям  $N$  свободных частиц, движущихся внутри сферы радиуса  $z_0$ . Обычно для получения термодинамических функций системы объем, ограничивающий движения частиц, выбирается в виде куба с ребром  $a$  [17].

В этом случае в формулах Д.2.26 и Д.2.27 вместо  $Q_{N-N'}(z, \beta)$  и  $Q_N(z_0 \sqrt{1-\gamma}, \beta)$  нужно взять суммы по антисимметричным состояниям  $N-N'$  и  $N'$  свободных частиц, движущихся соответственно в кубе с ребром  $a$  и  $a \sqrt{1-\gamma}$ .

Д.2.9. Использование формул (Д.2.25-27) для оценки суммы по состояниям, при условиях

$$z_0, N' \gg 1$$

$$-E_{N-N'} \beta \gg (N-N') [\ln(N-N') + 3 \ln z_0], \quad \text{Д.2.28}$$

для ферми-частиц приводит к следующей формуле.

$$Z_N^F = \sum_{N'=1}^N Q_{N'}(a, \beta) \cdot Z_{N-N'}^{F1}, \quad \text{Д.2.29}$$

$$Q_{N'}(a, \beta) = [a^3 / N' \cdot (4\pi\beta)^{-3/2}]^{N'}, \quad \text{Д.2.30}$$

$$Z_{N-N'}^{F2} = \exp(-E_{N-N'}^F \beta), \quad E_{N-N'}^F = (0,061 \pm 0,011)(N-N')^{7/3}, \quad \text{Д.2.31}$$



если

$$1 \ll \beta N_c^{1/3}, \quad N_c = N - N', \quad \text{Д.2.32}$$

и

$$Z_{N_c}^{F2} = \exp \left[ -E_{N_c}^F \beta + (6,8 \pm 3,6) N_c^{-1/3} \beta^{-1} \right], \quad \text{Д.2.33}$$

если

$$1' \gg \beta N_c^{1/3} \gg 10 N_c^{-1/3} (\ln N_c + 3 \ln \alpha) \quad \text{Д.2.34}$$

В сумме (Д.2.29) определяющими являются слагаемые близкие к максимальному слагаемому. Индекс  $N_m$  максимального слагаемого легко определить из уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial N_m} [Q_{N_m}(\alpha, \beta) \cdot Z_{N-N_m}^{F1}] = 0. \quad \text{Д.2.35}$$

В случае (Д.2.32),

$$\frac{N_m}{\alpha^3} = (4\pi\beta)^{-3/2} \exp \left[ -(0,14 \pm 0,02) \beta N_c^{4/3} \right] = \rho_n, \quad \text{Д.2.36}$$

и в случае (Д.2.33),

$$\frac{N_m}{\alpha^3} = (4\pi\beta)^{-3/2} \exp \left[ -(0,14 \pm 0,02) \beta N_c^{4/3} - (2,3 \pm 1,2) (\beta N_c^{5/3})^{-1} \right]. \quad \text{Д.2.37}$$

Величину  $N_m/\alpha^3$  можно интерпретировать как плотность свободных частиц, которые находятся в термодинамическом равновесии с  $N_c$  частицами, связанными гравитационным взаимодействием. На рисунке 7 приведены результаты оценок плотности свободных нейтронов по формуле (Д.2.37). Равновесную плотность протонов над этими же звездами можно оценить через плотность нейтронов только в случае, когда задана плотность нейтрино, а плотность электронов равна плотности протонов. Если плотность нейтрино будет равна плотности протонов, тогда

$$n_p \approx 2^{1/6} \pi^{-7/3} m_e^{-1/2} (kT)^{3/2} c^{-1} \hbar^{-2} n_n^{1/3} \exp(E_{np}/kT), \quad \text{Д.2.38}$$

$n_p$  и  $n_n$  — плотность протонов и нейтронов,  $E_{np}$  — энергия распада свободного нейтрона,  $m_e$  — масса электрона,  $k$  и  $2\pi\hbar$  — постоянная Больцмана и постоянная Планка,  $c$  — скорость света,

Д.2.10. Для разнозарядных частиц одинаковой массы с зарядами  $\pm e$  условие

означает, что электрическим взаимодействием частиц можно пренебречь, если полный заряд системы равен нулю. При условиях Д.2.32) и Д.2.39) система состоящая из  $\frac{1}{2} N_c$  положительных фермионов и  $\frac{1}{2} N_c$  отрицательных фермионов имеет при температуре  $\beta^{-1}$  следующую сумму по состояниям:

$$Z_{N_c}^{F1} = \exp \left[ -(0,10 \pm 0,02) N_c^{7/3} \beta \right]. \quad \text{Д.2.40}$$

Плотности свободных частиц, находящихся в равновесии с этой системой, равны

$$\rho_p = N_m/\alpha^3 = (4\pi\beta)^{-3/2} \exp \left[ -(0,22 \pm 0,03) N_c^{4/3} \beta \right]. \quad \text{Д.2.41}$$

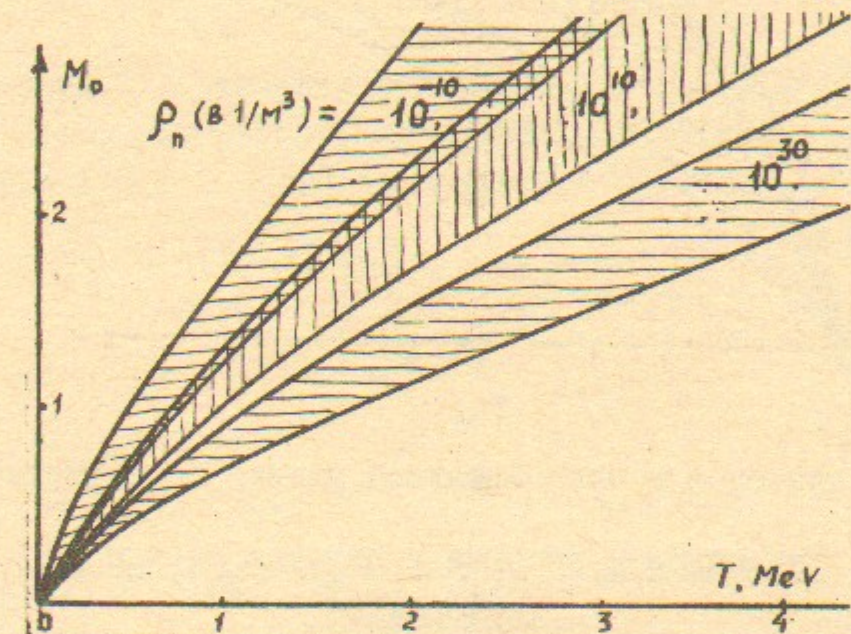


Рис.7.

Сумма по состояниям системы, состоящей из двух одинаковых групп разноименно заряженных частиц с разными массами  $m_e \ll m_p$ , легко оценивается, если предполагать, что из-за электрического взаимодействия среднее расстояние любой выделенной частицы не зависит от масс частиц. Если выполняется это предположение и условия Д.2.32) и Д.2.39), сумма по состояниям системы рав-

на

$$Z_{N_c}^{F_1} = \exp \left[ -\frac{\mu_e}{\mu_p} \cdot (0,012 \pm 0,002) N_c^{7/3} \beta \right], \quad \text{Д.2.42}$$

а плотность свободных частиц, которые находятся в равновесии с этой системой, определяется формулой:

$$N_m / \text{cm}^3 = 2 (4\pi\beta)^{3/2} \left(\frac{\mu_e}{\mu_p}\right)^{3/4} \exp \left[ -\frac{\mu_e}{\mu_p} (0,028 \pm 0,05) N_c^{4/3} \beta \right]. \quad \text{Д.2.43}$$

На рисунке 8 приведены результаты оценок плотности

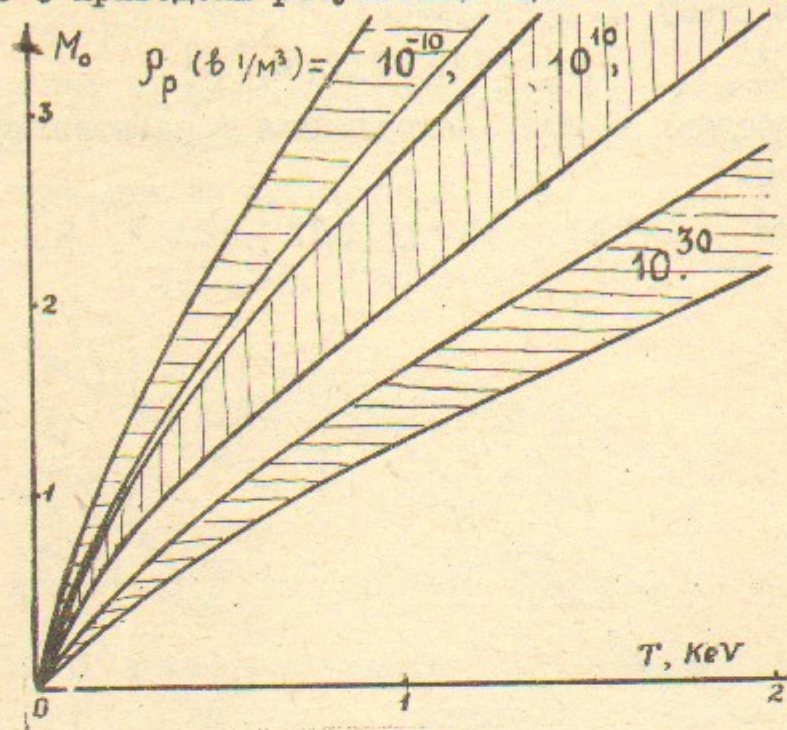


Рис. 8

свободных протонов в околозвездной плазме по формуле (Д.2.43).

### Д.3. Зависимость энергии и радиуса звезды от температуры

Оценки суммы по состояниям, приведённое в дополнении Д.2 можно использовать для оценки влияния температуры на среднюю энергию и средний радиус звезды. Средняя энергия звезды определяется через сумму по состояниям по формуле [17]:

$$\bar{E}_c^F = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_c^{F_1} \quad \text{Д.3.1}$$

При условии (Д.2.34) средняя энергия  $N_c$  одинаковых фермионов равна

$$\bar{E}_c^F = -(0,061 \pm 0,011) N_c^{7/3} + (6,8 \pm 3,6) (\beta N_c^{1/3})^{-2} \quad \text{Д.3.2}$$

Средняя энергия водородной звезды при условии

$$\beta \Delta E_c \ll 1, \quad \Delta E_c = (2,0 \pm 0,5) \cdot \left(\frac{\mu_e}{\mu_p}\right)^2 \cdot N_c^{1/3} \quad \text{Д.3.3}$$

определяется формулой

$$\bar{E}_c = -(0,012 \pm 0,02) \cdot \frac{\mu_e}{\mu_p} \cdot N_c^{7/3} + \Delta E_c \exp(-\beta \Delta E_c) \quad \text{Д.3.4}$$

и при условии

$$N \beta \cdot \Delta E_c \gg 1 \gg \beta \cdot \Delta E_c \quad \text{Д.3.5}$$

формулой

$$\bar{E}_c = -(0,012 \pm 0,02) \cdot \frac{\mu_e}{\mu_p} \cdot N_c^{7/3} + 2 (\beta \Delta E_c)^{-2} \beta. \quad \text{Д.3.6}$$

Средняя атомная теплоемкость  $C_{1,2}$  и коэффициент линейного теплового расширения водородной звезды  $\alpha_{1,2}$  в диапазоне температур Д.3.3 и Д.3.5 определяются соответственно формулами:

$$C_1 = \frac{N_o}{N_p} \cdot \Delta E \cdot \exp(-\beta \Delta E), \quad N_p = \frac{1}{2} N_c; \quad \text{Д.3.10}$$

$$\alpha_1 \approx \frac{N_p}{N_o} \cdot \frac{C_1}{\bar{E}_c}, \quad \text{Д.3.10}$$

$$C_2 = (1,7 \pm 0,8) \cdot 10^{-18} \cdot M_o^{-5/3} \cdot T^{\lambda}, \quad \text{кал/град}, \quad \text{Д.3.12}$$

$$\alpha_2 \approx 2 \cdot 10^{-27} \cdot M_o^{-3} \cdot T^2, \quad 1/\text{град}, \quad \text{Д.3.12}$$

если  $T$  — температура в градусах Кельвина.

### Д.4. Нижние оценки энергии связи кулоновских частиц.

Д.4.1. Из обычного вариационного метода следует, что энергия низшего состояния системы из  $N$  положительных и  $N$  отрицательных частиц с зарядами  $\pm e$  и массами  $\mu_{\pm}$  ограничивается сверху неравенством:

$$a_1^{-1} E_{2N} = E_N \leq \langle \Psi | -\sum_{i=1}^N \Delta_{i+} - \gamma \sum_{i=1}^N \Delta_{i-} - \sum_{(i,j) \in C_+} \tau_{ij}^{-1} - \sum_{(i,j) \in C_-} \tau_{ij}^{-1} - \sum_{(i,j) \in C_{+-}} \tau_{ij}^{-1} | \Psi \rangle$$

$$a_1 = 2\mu e^4 \hbar^{-2}, \quad \gamma = \frac{\mu}{m^*}, \quad \tau_0 = e^2 a^{-1}; \quad \text{Д.4.1}$$

$E'_{2N}$  и  $\bar{z}_{i_{\pm}}$  — приведенная энергия системы и приведенная координата  $i_{\pm}$ -ой частицы. При  $\gamma \ll 1$  и  $N \gg 1$

$$E'_{2N} \leq \frac{\pi^2}{a^2} \sum_{i=1}^N (m_i^2 + n_i^2 + k_i^2) - K_1 \frac{N^{4/3}}{a}, \quad K_1 = \frac{9}{5\sqrt{2}} = 1,428\dots, \quad \text{Д.4.2}$$

если  $\Psi$  — произведение  $2N$  одночастичных функций (одночастичные функции отрицательно заряженных частиц — волновые функции частиц, движущихся в кубе с ребром  $a$ , а одночастичные функции положительно заряженных частиц —  $\delta$ -функции, равномерно распределенные в этом же кубе). Целые числа  $m_i, n_i, k_i$ , входящие в неравенство Д.4.2, определяются симметрией низшего состояния системы. Для бозе-частиц  $m_i = n_i = k_i = 1$ . Поэтому

$$E'_{2N} \leq \min_a \left( 3 \frac{\pi^2}{a^2} N - K_1 \frac{N^{4/3}}{a} \right) = -0,0187\dots N^{5/3}. \quad \text{Д.4.3}$$

Из Д.4.3 следует, что приведенная энергия связи бозе-частиц при увеличении числа частиц  $2N$  растет не медленнее  $0,0187\dots N^{2/3}$ , а приведенное среднее расстояние между частицами уменьшается не медленнее  $41,4\dots N^{-2/3}$ .

Д.6.2. Для антисимметричных состояний

$$\pi^2 \sum_{i=1}^N (m_i^2 + n_i^2 + k_i^2) \approx K_2 = \frac{\pi^3}{10} \left( \frac{6N}{\pi} \right)^{5/3} = 9,11\dots N^{5/3} \quad \text{Д.4.4}$$

Поэтому

$$E'_{2N} \leq \min_a \left( \frac{K_2}{a^2} - K_1 \frac{N^{4/3}}{a} \right) = -0,0560\dots N \quad \text{Д.4.5}$$

Из Д.4.5 следует, что приведенная энергия связи частицы в антисимметричном состоянии не меньше  $-0,0560\dots$ , а среднее приведенное расстояние между частицами не больше  $12,76\dots$ . Аналогичный результат получается и для ферми-частиц: приведенная энергия связи ферми-частиц в основном состоянии не меньше  $0,088\dots$

а среднее приведенное расстояние между ферми-частицами не больше  $8,06\dots$ . Энергия же связи элементов с атомным номером  $Z$  в состоянии, когда все электроны участвуют в "металлической связи", не меньше  $Z \cdot 4,88\dots$  эВ, а среднее расстояние между атомами не больше  $Z^{1/3} \cdot 2,1 \cdot 10^{-8}$  см.

Д.4.3. Можно получить более точные результаты, если, учитывая движение положительно заряженных частиц, их одночастичные функции взять не в виде  $\delta$ -функций, а в виде волновых функций свободных частиц, движущихся внутри сферы радиуса  $r < a N^{1/3}$ . Тогда, при  $\gamma \ll 1$  получаем следующие аналоги формул Д.4.3 и Д.4.5.

$$E'_{2N}^{(a)} < -0,0187\dots N^{5/3} + 0,032\dots \gamma^{1/2} N,$$

$$E'_{2N}^{(s)} < (-0,0560\dots + 0,193\dots \gamma^{1/2}) N,$$

$$\gamma \leq 4\pi^2 (2-3\pi^{-2}) \rho^{-1/3}, \quad \rho = N a^{-3}, \quad \text{Д.4.7}$$

и следующую верхнюю границу приведенной энергии связи в металлическом водороде:

$$E_H < -0,0885\dots + 0,193\dots \gamma^{1/2} = -0,0840\dots \quad \text{Д.4.8}$$

Д.4.4. Неравенство Д.4.2 позволяет оценить сверху энергию частиц, заключенных в объеме  $V$ . В случае

$$\rho = \frac{N}{V} < 0,00190\dots, \quad \gamma \ll 1, \quad \text{Д.4.9}$$

верхняя граница приведенной энергии  $2N$  ферми-частиц определяется неравенством

$$E^{(f)} < (-1,427\dots \rho^{1/3} + 5,74\dots \rho^{2/3} + 4,20\dots \gamma^{1/2} \rho^{1/2}) N. \quad \text{Д.4.10}$$

Поэтому обязательно существует диапазон объемов, когда

$$P = -\frac{\partial E^{(f)}}{\partial V} > -0,476\dots \rho^{4/3} + 3,81\dots \rho^{5/3} + 4,2\dots \gamma^{1/2} \rho^{3/2}. \quad \text{Д.4.11}$$

Для металлического водорода неравенство Д.4.11 можно переписать в виде:

$$P_1 > (-5,63\dots \rho_1^{4/3} + 10,0\dots \rho_1^{5/3} + 0,579\dots \rho_1^{3/2}) \cdot 10^5 \text{ атм} = P'_1, \quad \text{Д.4.12}$$

$\rho_1$  — плотность металлического водорода в г/см<sup>3</sup>. Аналог формулы Д.4.12 для элементов с зарядом  $Z$  и атомным весом  $A$  имеет вид:

$$\rho'_z = \rho'_1 \left( \frac{Z}{A} \rho_z \right) \quad \text{Д.4.13}$$

$\rho_z$  — плотность вещества в г/см<sup>3</sup>.

Д.4.5. Если одночастичные функции отрицательно заряженных частиц брать в виде водородоподобных волновых функций, центры которых совпадают с  $\delta$  — функциями положительно заряженных частиц, это приведет к неравенству:

$$E'_{2N} \leq (-3,513... \rho^{1/3} + 24,81... \rho^{3/2} + 6,6... \gamma^{1/2} \rho^{1/2}) N. \quad \text{Д.4.14}$$

При малых  $V$  неравенство Д.4.14 дает заведомо более грубую оценку, чем неравенство Д.4.10. Этот результат означает, что внутри достаточно малого объема ферми-частицы, по-видимому, находятся в металлическом состоянии.

Д.5. Верхние оценки энергии связи кулоновских частиц.

Д.5.1. Если гамильтониан в неравенстве Д.4.1 разбить на следующие четыре слагаемых

$$\hat{H}_{2N} = \left[ -\sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i-} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} + \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) \right] + \left[ -\gamma \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i+} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) \right] +$$

$$+ \left[ -\sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i-} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) \right] + \left[ -\gamma \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i+} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) \right], \quad \text{Д.5.1}$$

и найти минимум каждого слагаемого, то сумма этих минимумов будет меньше  $E'_{2N}$ . Следовательно, сумма собственных чисел уравнений

$$\left[ -\sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i-} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(1)} \right] \psi^{(1)} = 0,$$

$$\left[ -\sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i-} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(2)} \right] \psi^{(2)} = 0,$$

$$\left[ -\gamma \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i+} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(3)} \right] \psi^{(3)} = 0,$$

$$\left[ -\gamma \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i+} \pm \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(4)} \right] \psi^{(4)} = 0. \quad \text{Д.5.2}$$

если параметры  $\vec{z}_j$  выбраны при условии

$$\langle z_{i_1 j_+} \rangle = \langle z_{k l} \rangle, \quad \text{Д.5.3}$$

так, что  $E^{(4)}$  минимальны, будет также меньше  $E'_{2N}$ . Это означает, что нижнюю границу  $E'_{2N}$  можно определить через собственное число положительной частицы и через собственное число отрицательной частицы, которые движутся в половинном кулоновском поле  $\frac{1}{2}N$  закрепленных положительных и  $\frac{1}{2}N$  закрепленных отрицательных частиц, так как  $E'_{2N}$  больше в  $\frac{1}{2}N$  раз увеличенной энергии этих частиц + кулоновская энергия закрепленных частиц при условии, когда эта сумма достигает минимума. Более точную нижнюю оценку энергии системы частиц с разными массами  $M^\pm$  можно получить, если использовать следующий аналог уравнений Д.5.2

$$\left[ -\sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i-} \pm k \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(1)} \right] \psi^{(1)} = 0,$$

$$\left[ -\sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i-} \pm k \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(2)} \right] \psi^{(2)} = 0,$$

$$\left[ -\gamma \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i+} \pm (1-k) \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(3)} \right] \psi^{(3)} = 0,$$

$$\left[ -\gamma \sum_{i=1}^{\frac{1}{2}N} \Delta_{i+} \pm (1-k) \sum_{j=1}^{\frac{1}{2}N} (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + E^{(4)} \right] \psi^{(4)} = 0,$$

$$0 < k \leq 1. \quad \text{Д.5.4}$$

В случае Д.5.4 параметр  $k$  выбирается из условия максимума суммы  $E^{(4)}$  по  $k$ .

Д.5.2. В случае, когда движение частиц ограничено стенками куба с ребрами  $a$ , собственное число движущихся частиц больше суммы собственных чисел уравнений:

$$\left[ -\alpha_\pm (1 \mp 1 + \gamma \pm \gamma) \Delta_{i_\pm} + (k - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) (\sum_{i_1=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_1 j_+}^{-1} - \sum_{i_2=1}^{\frac{1}{2}N} z_{i_2 j_-}^{-1}) + \lambda_{i_\pm}^{(1)} \right] \psi_{i_\pm}^{(1)} = 0, \quad \text{Д.5.5}$$

$$\text{и} \quad \left[ -(\frac{1}{2} - \alpha_\pm) (1 \mp 1 + \gamma \mp \gamma) \Delta_{i_\pm} + U_0(\vec{z}) + \lambda_{i_\pm}^{(2)} \right] \psi_{i_\pm}^{(2)} = 0, \quad 0 \leq \alpha_\pm \leq \frac{1}{2}; \quad \text{Д.5.6}$$

$$U_0(\vec{z}) = 0, \quad 0 < z_\alpha < a; \quad U_0(\vec{z}) = \infty, \quad z_\alpha < 0 \text{ и } z_\alpha > a.$$

В уравнении Д.5.4 закрепленные частицы из-за условия Д.5.3 распределены равномерно во всем пространстве на расстоянии  $(\frac{a}{N})^{1/3}$  друг от друга, однако вклад в собственное число в виде кулоновской энергии дают только те частицы, которые находятся внутри куба. Можно показать, что основное собственное число уравнения Д.5.5. не больше основного собственного числа уравнения

$$[-c_{\pm} \Delta_{i_{\pm}} - d_{\pm} (V_{\pm} - \lambda_{\pm})] \Psi_{\pm} = D, \quad c_{\pm} = \alpha_{\pm} (1 \pm 1 + \gamma \mp \gamma), \quad d_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm 1 + 2k) \quad \text{Д.5.7}$$

так как

$$d_{\pm} V_{\pm} = d_{\pm} (\frac{\psi_{i_{\pm}}^2}{\varphi} + \lambda_{\pm}), \quad \psi(z_{i_{\pm}j_{\pm}} < \alpha_1) = z_{i_{\pm}j_{\pm}} \exp \frac{1}{2} \frac{d_{\pm}}{c_{\pm}} z_{i_{\pm}j_{\pm}} (\frac{1}{2} \frac{z_{i_{\pm}j_{\pm}}}{\alpha_1} - 1) \quad \text{Д.5.8}$$

в любой области пространства меньше потенциала уравнения Д.5.5.

$$\text{если } \alpha_1 \leq \frac{a\sqrt{2}}{N^{1/3}}, \quad \lambda_{\pm} = -\frac{1}{4} \frac{d_{\pm}}{c_{\pm}} - \frac{3}{2} \frac{1}{\alpha_1} \quad \text{Д.5.9.}$$

Поэтому  $E'_{2N}$  ограничено снизу неравенством

$$E'_{2N} \geq -2,37 \dots \frac{N^{4/3}}{a} - \frac{N(1-k)^2}{8\alpha_+} - \frac{Nk^2}{8\alpha_-} + \frac{\pi^2}{a^2} \sum_{l_{\pm}=1}^N (2 - \alpha_{\pm}) (1 \pm 1 + \gamma \mp \gamma) (n_{l_{\pm}}^2 + m_{l_{\pm}}^2 + k_{l_{\pm}}^2) \quad \text{Д.5.10.}$$

Для бозе-частиц  $n_{l_{\pm}} = m_{l_{\pm}} = k_{l_{\pm}} = 1$ . Следовательно,

$$E_{2N}^{(5)} \geq -2,37 \dots \frac{N^{4/3}}{a} + (12,5 \dots + 39,8 \dots \gamma) \frac{N}{a^2} \quad \text{Д.5.11}$$

Из Д.5.9 и Д.4.3 вытекает, что при условии  $\gamma \rightarrow 0$ , приведенная энергия связи и приведенное среднее расстояние между бозе-частицами определяются следующими приближенными формулами:

$$E_{2N}^{(5)} / N = (0,065 \pm 0,048) N^{2/3} \quad \text{Д.5.12}$$

$$a_m / N^{1/3} = (23,5 \pm 17,9) N^{-2/3} \quad \text{Д.5.13}$$

а неравенство Д.4.13 и неравенство, полученное при использовании неравенства Д.5.8, приводит к следующим приближенным формулам, связывающим давление в веществе (в атм.) с его плотностью (в г/см<sup>3</sup>).

$$P_z = 10,0 \dots (\frac{z}{A} \rho_z)^{5/3} - (12,2 \dots \pm 6,6 \dots) (\frac{z}{A} \rho_z)^{4/3}, \quad \text{атм.} \times 10^5, \quad \text{Д.5.14}$$

$z$  и  $A$  - атомный номер и атомный вес вещества.

Д.5.3. Когда имеются группы частиц, которые ведут себя одинаково (например, две группы ферми-частиц, которые отличаются только спином), нижнюю границу энергии этих частиц можно определить через минимум гамильтониана Д.4.1, в потенциалах которого координаты некоторых частиц заменены на координаты других частиц. Поэтому нижнюю границу энергии  $2N$  взаимодействующих частиц можно определить, если найти энергию  $2N$  невзаимодействующих частиц, движущихся в <sup>половинном</sup> поле  $2N$  закрепленных частиц, при условии, что часть параметров движущихся и закрепленных частиц (например, средние расстояния) совпадают. Использование этого приема приводит к неравенству

$$E_{2N}^{(4)} \geq -4,51 \dots \frac{N^{4/3}}{a} + 5,74 \dots (1 + \gamma) \frac{N^{5/3}}{a^2}, \quad \text{(5.15)}$$

которое верно при  $a \ll 1$ .

## Д.6. З а м е ч а н и я

Д.6.1. При анализе гравитационного взаимодействия частиц энергия, как правило, приводилась в единицах  $2\gamma^2 \mathcal{H}^5 \hbar^{-2}$ , а длина - в единицах  $\hbar^2 (2\gamma \mathcal{H}^3)^{-1}$ ,  $\gamma$  - гравитационная постоянная,  $2\pi \hbar$  - постоянная Планка. В случае, когда использовались другие единицы, это обязательно отмечалось.

Д.6.2. При оценках суммы по состояниям частиц, связанных гравитационным взаимодействием, расстояние между возбужденными уровнями оценивалось по формулам:

$$\varepsilon_i - \varepsilon_{i+1} = E_{i(i+1)} / \Omega_i \Omega_{i+1}$$

где  $E_{i(i+1)}$  - расстояние между  $\Omega_{i(i+1)}$  кратновыраженными уровнями в верхних или нижних оценках, так как предполагалось, что в реальной системе нет (или очень мало вырожденных уровней). Если это предположение не оправдано, условия Д.2.32, Д.2.33 и Д.3.3, Д.3.5 не верны.

Д.6.3. По максимальной энергии связи кулоновский частиц  $\varepsilon_m$  можно, используя метод, изложенный в разделе Д.2.7, найти верхнюю границу энергии связи частиц, заключенных в объем  $V$ :

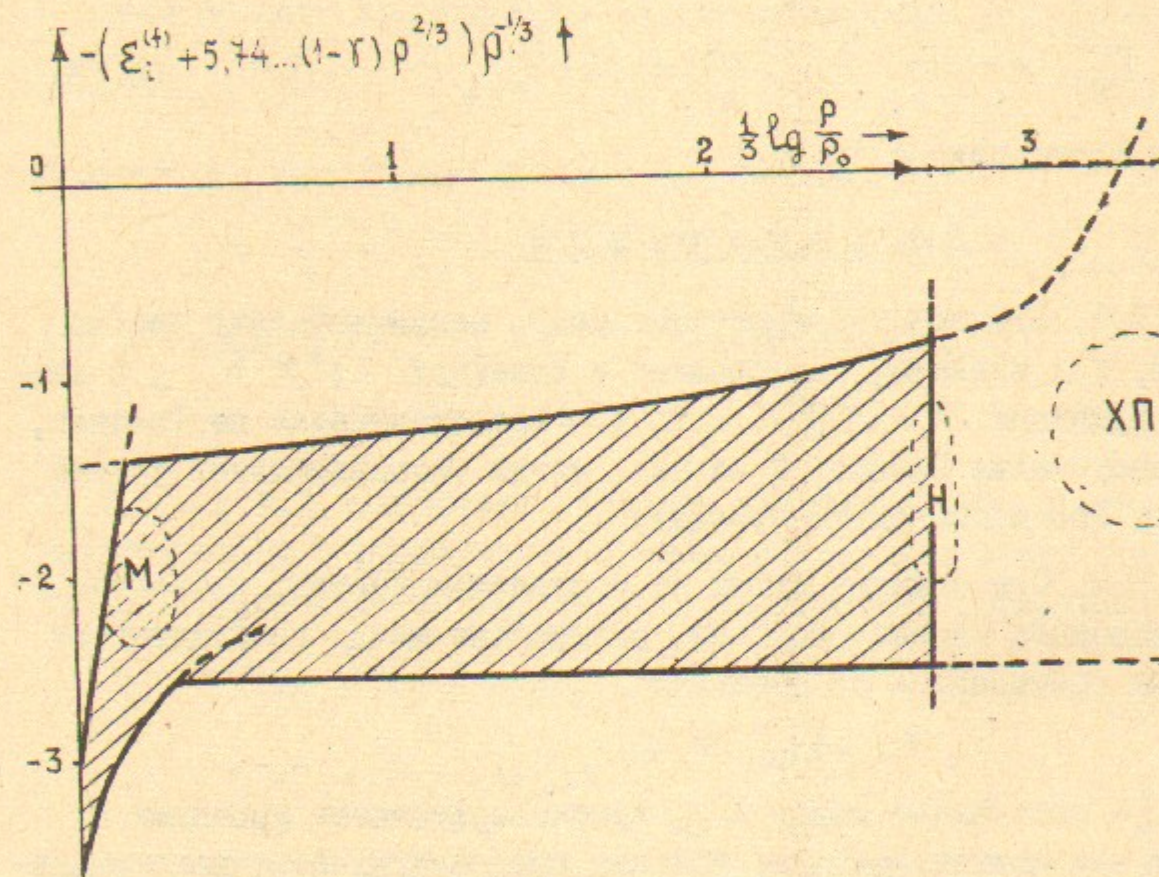
$$\varepsilon_v \leq -E_v + 2\sqrt{\varepsilon_m E_v}, \quad \varepsilon_m \leq E_v.$$

$E_v$  - средняя кинетическая энергия невзаимодействующих частиц.

Для водорода  $\epsilon_m = 0,293\dots$  Поэтому

$$\epsilon_v^{(4)} < 2,59\dots \rho^{1/3} - 5,74\dots \rho^{2/3}$$

На рисунке снизу изображена зависимость нижних и верхних оценок энергии водорода от его плотности. Нижние оценки получены из последнего неравенства, верхние оценки получены из уточненного неравенства Д.4.14 и из неравенства Д.4.10.  $\rho_0$  - плотность кристаллического водорода; область возможных значений энергии



связи водорода при заданной плотности заштрихована, М, Н, ХП - соответственно вероятные области металлизации, нейтронизации и холодного плавления водорода.

## Л и т е р а т у р а

1. H.R.Post. Proc. Phys. Soc., A79, 819, 1962.
2. F.Calogero, Y.A.Simonov. Phys.Rev. 169, 789, 1968.
3. F.Calogero, C.Marchioro. J. Math.Phys. 10, 569, 1969.
4. I.V.Simenog. Phys. Lett. 40B, 53, 1972.
5. И.В.Сименог, ТМФ, 20, 235, 1974.
6. Л.Г.Заставенко, ТМФ, 15, 307, 1973.
7. J.M.Levi-Leblong, J. Math.Phys. 10, 806, 1969.
8. B.H.Post. Proc. Phys. Soc. A69, 936, 1956.
9. M.E.Fescher, D.Ruelle. J. Math. Phys. 7, 260, 1966.
10. R.L.Hall. Proc. Phys. Soc. 91, 16, 787, 1967.
11. О.Я.Савченко, ЯФ, 6, 645, 1967.
12. О.Я.Савченко, ЯФ 21, 737, 1975.
13. F.Calogero J. Math. Phys. 10, 2197, 1969.
14. F.Calogero. J. Math. Phys. 10, 2191, 1969.
15. О.Я.Савченко. ЯФ, 13, II96, 1971.
16. J.E.Lennard-Jones, A.F.Devonshire. Proc. Roy. Soc. A163, 53, 1937.
17. Дж.Майер, М.Гешперт-Майер. Статистическая механика. ИИЛ,М., 1952.
18. О.Я.Савченко. ЯФ, 8, 1959, 1968.

## С о д е р ж а н и е

|   |     |
|---|-----|
| I. В в е д е н и е .....  | 3   |
| 2. Верхние оценки энергий систем частиц, связанных гравитационным потенциалом ..... | 3   |
| 3. Нижние оценки энергий системы частиц, связанных гравитационным потенциалом ..... | 6   |
| 4. Оценки энергий систем, связанных немонотонным потенциалом .....                  | II  |
| 5. Уточнение нижних оценок .....  | 18  |
| 6. Оценка спектра сумм собственных чисел .....                                      | 20  |
| Д.1. Оценка плотности звезд .....   | 24. |
| Д.2. Плотность частиц в окрестности звезды .....                                    | 25  |
| Д.3. Зависимость энергии и радиуса звезды от температуры.                           | 32  |
| Д.4. Нижние оценки энергии связи кулоновских частиц .....                           | 34  |
| Д.5. Верхние оценки энергии связи кулоновских частиц .....                          | 36  |
| Д.6. З а м е ч а н и я .....  | 39  |
| Л и т е р а т у р а .....   | 4I  |

Работа поступила - 21 января 1977 г.

---

Ответственный за выпуск - С.Г.ПОПОВ  
Подписано к печати 27.I-1977 г. МН 03041  
Усл. 2,5 печ.л., 2,0 учетно-изд.л.  
Тираж 150 экз. Бесплатно  
Заказ № 104.

---

Отпечатано на ротапринтере ИЯФ СО АН СССР