ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаборатория теоретической физики

И.Н. Михайлов

Р - 1187

ЧАСТИЧНО ПРОЕКТИРОВАННЫЕ ФУНКЦИИ В СВЕРХТЕКУЧЕЙ МОДЕЛИ ЯДРА

Дубна 1963

1791/6 ng.

И.Н.Михайлов

Р - 1187

ЧАСТИЧНО ПРОЕКТИРОВАННЫЕ ФУНКЦИИ В СВЕРХТЕКУЧЕЙ МОДЕЛИ ЯДРА

Дубна 1963

Аннотация

В работе предложен новый класс функций для вариационной задачи нахождения решений уравнения Шредингера для системы N_0 частиц со "сверхтекучим" гамильтонианом взаимодействия. Вес компонент, соответствующих числу частиц $N \neq N_0$ в предложенных функциях значительно меньше, чем в Бардиновских функциях. Исследованы свойства этих функций и получены формулы, определяющие собственные значения энергии системы.

I.N.Mikhailov

PARTIALLY PROJECTED FUNCTIONS IN A SUPERFLUID NUCLEAR MODEL

Abstract

A new set of trial functions is suggested for solving variational problem arising in the superfluid model of a nucleus. These functions satisfy additional invariance conditions which follow from the particle number conservation law. From another point of view the new functions contain only small part of those superfluous components which are present in functions of a standart kind. The properties of the new functions are investigated. The energy of a system in the state described by the function which satisfies the stationarity condition is found.

В настоящее время установлена большая роль тех членов гамильтониана системы нуклонов, которые описывают взаимодействия частиц на одном уровне [1]. В широком круге явлений, рассматриваемых в ядерной физике, "сверхтекучая" модель ядра либо полностью решает проблему, либо используется как нулевое приближение. Однако в обоих случаях чрезвычайно много неудобств как принципиального, так и чисто технического характера вызывает то обстоятельство, что модельная функция в этом случае не описывает состояние с фиксированным числом частиц. Метод проектирования решений на пространство функций системы с фиксированным числом частиц в том виде, в каком он представлен в работах [3,4,5], приводит к весьма сложным выражениям для волновых функций. В данной работе предлагается несколько отличающийся от стандартного класс пробных функций для того, чтобы уменьшить те трудности, о которых шла речь выше. Конкретные вычисления характеристик ядер с использованием указанных функций будут представлены в дальнейшем. Как известно, гамильтониан системы нуклонов в сверхтекучей модели имеет вид

$$H = \sum_{s,\sigma} E_0(s)\, a^+_{s\sigma} a_{s\sigma} - G \sum_{s,s'} a^+_{s+} a^+_{s-} a_{s'-} a_{s'+} \qquad /1/$$

Мы будем, в основном, рассматривать системы, состоящие из четного числа фермионов, поскольку обобщение полученных результатов на случай систем с нечетным числом частиц выполняется тривиально. Будем исходить из известного вида пробных функций, которые в пределе бесконечно большого числа фермионов дают точное значение энергии основного состояния системы и точные выражения для функций Грина [2]

$$\Psi_0 = \prod_s \left(u_s + v_s a^+_{s+} a^+_{s-} \right) |0\rangle . \qquad /2/$$

Здесь $|0\rangle$ –состояние вакуума. Коэффициенты u_s, v_s предполагаются нормированными в обычном смысле

$$u_s^2 + v_s^2 = 1 .$$

В функцию Ψ_0 входят, вообще говоря, состояния, соответствующие всем четным значениям числа частиц n от 0 до максимально возможного. Это обстоятельство не имеет значения, если мы определяем энергию основного состояния или одно-, двухчастичные функции Грина протяженной системы [2]. Однако применение таких функций к задачам теории ядра, в которых активно проявляются 20-40 частиц, приводит к заметным погрешностям [3,4].

Однако класс пробных функций /2/ нетрудно изменить таким образом, чтобы число "лишних" компонент функций значительно уменьшилось и тем не менее, чтобы функции имели бы еще достаточно простой вид. К построению нужных функций проще всего можно подойти, используя свойства инвариантности гамильтониана /1/ по отношению к преобразованию [2]

$$a_{i\sigma} \to \exp(i\phi)\, a_{i\sigma}\,,$$

$$a^+_{i\sigma} \to \exp(-i\phi)\, a^+_{i\sigma}\,. \qquad /3/$$

Легко убедиться, что собственная волновая функция гамильтониана, описывающая состояние с $n_\circ$ частицами $\Psi_{n_\circ}$ преобразуется при преобразовании /3/ согласно формуле

$$\Psi_{n_\circ} \to \exp\{-in_\circ\,\phi\}\,\Psi_{n_\circ}. \qquad /4/$$

Закон преобразования пробной волновой функции /2/ при произвольных ϕ /отличных от 0 и π / не имеет ничего общего с формулой /4/. Однако нетрудно написать функцию, которая удовлетворяла бы формуле /4/ лишь для дискретного набора углов ϕ. Так, функция

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\Psi_\circ + e^{i\pi/2n_\circ}\,\Psi'_\circ), \qquad /5/$$

где $\Psi_\circ$ –функция, определенная формулой /2/, а

$$\Psi'_\circ = \prod_s (u_s - v_s\, a^+_{s+}\, a^+_{s-})\,|0\rangle \qquad /6/$$

преобразуется в соответствии с формулой /4/ при $\phi = 0, \pi/2, \pi$. В то время как в функциях $\Psi_\circ$ присутствуют компоненты, соответствующие всевозможным четным значениям n, в функции Ψ_1 присутствуют лишь компоненты, соответствующие n равным

$$\ldots(n_\circ - 8),\ (n_\circ - 4),\ n_\circ,\ (n_\circ + 4),\ (n_\circ + 8),\ldots$$

Аналогично можно сконструировать функцию, удовлетворяющую закону преобразования /4/ при при $\phi = \frac{\pi}{2^\ell}k$, где ℓ –некоторое фиксированное число, а k принимает значения $k = 0, 1, 2, \ldots, 2^\ell - 1$. Эта функция имеет вид

$$\Psi_\ell = \frac{1}{2^{\ell/2}} \sum_{k'=0}^{2^\ell - 1} e^{i\frac{\pi}{2^\ell}n_\circ \cdot k'}\,\Psi_0(e^{-i\frac{\pi}{2^\ell}k'}\,a^+), \qquad /7/$$

где

$$\Psi_0(e^{i\phi}a^+) = \prod_s (u_s + e^{2i\phi}\,v_s\, a^+_{s+}\, a^+_{s-})\,|0\rangle. \qquad /8/$$

В функции Ψ_ℓ присутствуют компоненты, соответствующие числу частиц $n_\circ,\ n_\circ \pm 2^{\ell+1}, \ldots$. Функции Ψ_ℓ мы будем называть частично проектированными. Очевидно, что если число одночастичных уровней системы конечно и равно Ω, то функция $\Psi_{\ell_\circ}$ при $\ell_\circ \geq \frac{\ln(\max\{2\Omega - n_\circ, n_\circ\})}{\ln 2}$ совпадает с функцией, представляющей проекцию $\Psi_\circ$ на состояния, соответствующие $n = n_\circ$.

Отсутствие части лишних компонент в функциях Ψ_ℓ делает более близким соответствие их точным функциям системы. С формальной точки зрения использование функций Ψ_ℓ можно оправдать совершенно так же, как это сделано в работе [6]. Именно, поскольку эти функции удовлетворяют дополнительным условиям инвариантности по сравнению с функциями $\Psi_\circ$, они осуществляют решение вариационной проблемы на отыскание стационарных решений функционала

$$\delta < \Psi, \hat{H} \Psi > = 0$$

/8/

при условии

$$< \Psi, \hat{N} \Psi > = n_o$$

/ $\hat{N} = \sum_{s,\sigma} a^+_{s\sigma} a_{s\sigma}$ –оператор числа частиц/ на более широком классе функций, чем Ψ_o . Как показано в работе[6], если функционалы

$$< \Psi_\ell , H \Psi_\ell > , \quad < \Psi_\ell , N \Psi_\ell >$$

мало отличаются от функционалов

$$< \Psi_o , H \Psi_o >, \quad < \Psi_o , N \Psi_o >$$

при тех значениях параметров u_s , v_s , которые являются решением вариационной задачи /8/ среди функций, принадлежащих классу Ψ_c ,то поправки к собственным значениям энергии первого порядка по величине дополнительных членов, которые мы получим, решая вариационную задачу[8] среди функций Ψ_ℓ определяются параметрами u° , v° , доставляющими решение аналогичной вариационной задачи среди функций Ψ_o . Среднее значение энергии RE_ℓ , в состоянии Ψ_ℓ , удовлетворяющем условию стационарности, приближенно равно

$$E_\ell = \bar{H}_\ell - \lambda_0 (\bar{N}_\ell - N_0) \ . \qquad /9/$$

В формуле /9/ черта над оператором и индекс ℓ означает усреднение по функции $\Psi_\ell (u^\circ_s , v^\circ_s)$:

$$O_\ell = \frac{< \Psi_\ell (u^\circ_s , v^\circ_s) , \ O \Psi_\ell (u^\circ_s , v^\circ_s) >}{< \Psi_\ell (u^\circ_s , v^\circ_s), \Psi_\ell (u^\circ_s , v^\circ_s) >}$$

/функции Ψ_ℓ при $\ell \neq 0$ ненормированы/. Величина λ_o – химический потенциал, значение которого определяется при решении вариационной задачи /8/ среди функций, принадлежащих классу /2/.

Приведем выражения для H_ℓ и N_ℓ при тех значениях ℓ , которые могут представлять интерес при практических применениях частично проектированных функций. При $\ell = 1$ имеем

$$H_1 = \sum_s 2 v_s^2 [E_0 (s) - \frac{G}{2} v_s^2] - \frac{1}{G} C^2 - \frac{(-1)^{n_0/2} q_1}{1 + (-1)^{n_0/2} q_1} \times$$

$$\times [\sum_s \frac{4 u_s^2 v_s^2}{u_s^2 - v_s^2} [E_0 (s) + G \frac{v_s^4}{u_s^2 - v_s^2}] - \frac{1}{G} (C^2 + C_1^2)] \qquad /10/$$

$$C = G \sum_s u_s v_s , \quad C_1 = G \sum_s \frac{u_s v_s}{u_s^2 - v_s^2} , \quad q_1 = \prod_s (u_s^2 - v_s^2) . \qquad /11/$$

$$\bar{N}_1 = \sum_s 2 v_s^2 - \frac{(-1)^{n_0/2} q_1}{1+(-1)^{n_0/2} q_1} \sum_s \frac{4 u_s^2 v_s^2}{u_s^2 - v_s^2} \qquad /12/$$

Используя вариационные уравнения для u_s и v_s, возникающие при варьировании функционалов $\bar{H}_0$ и $\bar{N}_0$, легко найти поправку к энергии первого порядка

$$E_1 - E_{90} = - \frac{(-1)^{n_0/2} q_1}{1+(-1)^{n_0/2} q_1}$$

$$\times \left[\frac{1}{G} (C^2 - C_1^2) + 2 G \sum_s \frac{v_s^4 u_s^2}{(u_s^2 - u_s^2)^2} \right] . \qquad /13/$$

Поправки к энергии, возникающие при использовании функций Ψ_2, выражаются через величины q_1, C_1, C /см. формулы /11/ /, а также через величины

$$q_2 = \prod_s (u_s^4 + v_s^4)^{1/2},$$

$$\Phi = \frac{\pi}{4} n_0 - \sum_s \operatorname{arc\,tg} \frac{v_s^2}{u_s^2} ,$$

$$C_2 = G \sum_s \frac{u_s v_s}{u_s^4 + v_s^4} , \quad C_3 = G \sum_s \frac{u_s v_s (u_s^2 - v_s^2)}{u_s^4 + v_s^4} \qquad /14/$$

$$C_4 = G \sum_s \frac{u_s^3 v_s^3}{u_s^4 + v_s^4} .$$

Поправка к энергии основного состояния в этом случае равна

$$E_2 - E_0 = - [1 + (-1)^{n_0/2} q_1 + 2 q_2 \cos \Phi]^{-1}$$

$$\times \{ \frac{1}{G} [(-1)^{n_0/2} q_1 (C^2 - C_1^2) + q_2 (\cos \Phi \; (C_2^2 - C_3^2 - 4 C \; C_4)$$

$$- 2 \sin \Phi \;\; C_3 \; (C - C_2))] + 2 G \sum_s v_s^4 u_s^2 \qquad /15/$$

$$\times [\frac{(-1)^{n_0/2} q_1}{(u_s^2 - v_s^2)^2} - \frac{q_2}{(u_s^4 + v_s^4)^2} (\cos \Phi + (u_s^2 - v_s^2) \sin \Phi)] \} ,$$

Использование функций вида /2/ в теории сверхпроводимости обладает тем преимуществом, что при любых фиксированных значениях параметров u_s, v_s можно сразу же построить совокупность функций, образующих полную систему ортонормированных функций, которые хотя бы с формальной точки зрения дают возможность приступить как к задаче построения более точной функции основного состояния системы, так и к задаче построения спектра возбужденных состояний. Такими функциями являются " P -квазичастичные" функции, имеющие вид

$$\Psi^{(0)}_{i_1\sigma_1, \ldots, i_p\sigma_p} = a^+_{i_1\sigma_1} \ldots a^+_{i_p,\sigma_p} \Psi , \qquad /16/$$

где оператор a определяется формулой

$$a_{s\sigma} = u_s a_{s,-\sigma} + v_s \sigma a^+_{s\sigma} . \qquad /17/$$

Построение системы ортонормированных функций вида /17/ представляет собой более сложную задачу. Для решения этой задачи можно использовать функции, которые связаны с функциями /16/ соотношениями, аналогичными соотношению между функцией /7/ и функцией /2/. Введем в рассмотрение функции

$$\Psi^{(\ell)}_{i_1\sigma_1,\dots,i_p\sigma_p} = \frac{1}{(2^{\ell})^{1/2}} \sum_{k=0}^{2^{\ell}-1} e^{i\frac{\pi n_p k}{2^{\ell}}} \Psi^{(0)}_{i_1\sigma_1,\dots,i_p\sigma_p} \left(e^{-i\frac{\pi k}{2^{\ell}}} a^{+} \right). \qquad /18/$$

Эти функции удовлетворяют закону преобразования /4/ для случая, когда число частиц равно n_p, при $\phi = 0,\ \frac{1\pi}{2^{\ell}},\ \frac{2\pi}{2^{\ell}},\ \dots\ 2\pi$.

Легко проверить следующие утверждения, справедливые для любого фиксированного значения числа ℓ.

1. Функции /18/, соответствующие разным значениям n_p, ортогональны между собой.

2. Если в функции $\Psi^{(\ell)}_{i_1\sigma_1,\dots,i_p\sigma_p}$ среди индексов $i_\gamma\sigma_\gamma$ отсутствует $i_1, -\sigma_1$, то данная функция имеет вид

$$\Psi^{(\ell)}_{i_1\sigma_1,\dots,i_p\sigma_p} = a^{+}_{i_1\sigma_1} \Psi'^{(\ell)}_{i_2\sigma_2,\dots,i_p\sigma_p}, \qquad /19/$$

где

$$\Psi'^{(\ell)}_{i_2\sigma_2,\dots,i_p\sigma_p} = \frac{1}{(2^{\ell})^{1/2}} \sum_{k=0}^{2^{\ell}-1} e^{i\frac{\pi}{2^{\ell}}(n_p-1)k} \Psi'^{(0)}_{i_2\sigma_2,\dots,i_p\sigma_p} \left(e^{-i\frac{\pi}{2^{\ell}}k} a^{+} \right), \qquad /20/$$

а

$$\Psi'^{(0)}_{i_2\sigma_2,\dots,i_p\sigma_p} = a^{+}_{i_2\sigma_2} \dots a^{+}_{i_p\sigma_p} \prod_{s\neq i_1} \left(u_s + v_s a^{+}_{s+} a^{+}_{s-} \right) |0\rangle, \qquad /21/$$

Функции такого типа описывают состояние с "непарной" квазичастицей на уровне i_1, σ_1.

3. Функции /18/ ортогональны, если они отличаются индексами уровней i, σ, занятых непарными квазичастицами.

Вышеперечисленные свойства сводят задачу к ортогонализации функций с одинаковыми индексами непарных квазичастиц. Ортогонализацию функций с минимальныи числов парных квазичастиц, описывающих наиболее интересные с физической точки зрения возбужденные состояния ядер оказывается возможным провести аналитически. Рассмотрим функции, описывающие состояния с двумя квазичастицами на уровне i

$$\Psi^{(\ell)}_{i+,\,i-} \equiv \Psi^{(\ell)}_{i} = \frac{1}{2^{\ell/2}} \sum_{k=0}^{2^{\ell}-1} e^{i\frac{\pi}{2^{\ell}}nk} \Psi^{(0)}_{i} \left(e^{-i\frac{\pi}{2^{\ell}}k} a^{+} \right)$$

$$\Psi^{(0)}_{i}(a^{+}) = (v_i - u_i a^{+}_{i+} a^{+}_{i-}) \prod_{s\neq i} (u_s + v_s a^{+}_{s+} a^{+}_{s-}) |0\rangle. \qquad /22/$$

Скалярное призведение двух таких функций можно представить в виде

$$\langle \Psi^{(\ell)}_{i}, \Psi^{(\ell)}_{j} \rangle = \Big(A_i - \sum_{k=0}^{2^{\ell}-1} (x'_i(k))^2 \Big) \delta_{ij} + \sum_{k=0}^{2^{\ell}-1} x'_i(k)\, x'_j(k), \qquad /23/$$

причем

$$A_l = \sum_{k=0}^{2^\ell-1} Q(k)\,\frac{v_l^2 + u_l^2\, e^{-i\frac{2\pi}{2^\ell}k}}{u_l^2 + v_l^2\, e^{-i\frac{2\pi}{2^\ell}k}}\,,$$

$$x'_l(k) = Q^{1/2}(k)\,\frac{u_l\, v_l\,\left(1 - e^{-i\frac{2\pi}{2^\ell}k}\right)}{u_l^2 + v_l^2\, e^{-i\frac{2\pi}{2^\ell}k}} \qquad /24/$$

$$Q(k) = \prod_s \left(u_s^2 + v_s^2\, e^{-i\frac{2\pi}{2^\ell}k} \right) e^{i\frac{\pi}{2^\ell}n\frac{k}{2}}$$

Нормируем функции $\Psi_l^{(\ell)}$, для чего введем в рассмотрение функции

$$\Psi_i^{(\ell)} = \frac{1}{A_i^{1/2}}\,\Psi_i^{(\ell)}. \qquad /25/$$

Введем также обозначение

$$x_i(k) = \frac{1}{A_i^{1/2}}\,x'_i(k).$$

Скалярное произведение нормированных функций $\Psi_l^{(\ell)}$ имеет вид

$$<\Psi_l^{(\ell)}, \Psi_j^{(\ell)}> = \left(1 - \sum_{k=0}^{2^\ell-1} x_l^2(k)\right)\delta_{lj} + \sum_{k=0}^{2^\ell-1} x_l(k)\, x_j(k). \qquad /26/$$

Пусть нам известна функция Ψ_0 такая, что

$$<\Psi_l, \Psi_0> = x_l(k_0),$$

$$<\Psi_0, \Psi_0> = \lambda. \qquad /27/$$

Тогда легко проверить, что скалярное произведение функций Φ'_l, равных

$$\Phi'_l = \Psi_l + a\, x_l\, \Psi_0, \qquad /28/$$

имеет вид

$$<\Phi'_l, \Phi'_j> = \left(1 - \sum_k x_l^2(k)\right)\delta_{lj} + \sum_{k\neq k_0} x_l(k)\, x_j(k), \qquad /29/$$

если

$$a = 1/\lambda\,\left[1 \pm \sqrt{1-\lambda}\,\right], \qquad /30/$$

Будем искать функцию Ψ_0 в виде

$$\Psi_0 = \sum_l C_l\, \Psi_l. \qquad /31/$$

Используя уравнения /26/ и /27/, для коэффициентов C_i легко получить уравнения

$$C_i = \frac{x_i(k_0) - \sum_{k=0}^{2^\ell-1} x_i(k)\,\zeta(k)}{1 - \sum_{k=0}^{2^\ell-1} x_i^2(k)}, \tag{/32/}$$

где

$$\zeta(k) = \sum_j x_j(k)\,C_j . \tag{/33/}$$

Умножая уравнения /37/ на $x_j(k)$ и суммируя по i, легко получить систему уравнений, определяющих параметры $\zeta(k)$

$$\zeta(k) = A(k_0, k) + \sum_{k'=0}^{2^\ell-1} A(k, k')\,\zeta(k'), \tag{/34/}$$

где

$$A(k_0, k) = \sum_i \frac{x_i(k_0)\,x_i(k)}{1 - \sum_{k'} x_i^2(k)} . \tag{/35/}$$

Решая уравнения /34/ и вычисляя функции Φ_i', мы сводим исходную задачу к более простой задаче, когда число слагаемых в сумме $\sum_k x_i(k)\,x_j(k)$ на единицу меньше. Нормируя функции Φ_i', то есть вводя функции

$$\Phi_i = \left(\frac{1 - \sum_{k \neq k_0} x_i^2(k)}{1 - \sum_k x_i^2(k)} \right)^{1/2} \Phi_i'$$

и повторяя процедуру, описанную выше, несколько раз, можно добиться ортогональности функций, заменяющих двухквазичастичные функции обычного вида.

В заключение статьи пользуюсь возможностью выразить благодарность за интерес к работе и обсуждения Б.Захарьеву, И.Петкову и В.Г.Соловьеву.

Л и т е р а т у р а

1. В.Г.Соловьев. Парные корреляции сверхпроводящего типа в атомных ядрах. Докторская диссертация. Препринт ОИЯИ. 1961.
2. Н.Н.Боголюбов. К вопросу о модельном гамильтониане в теории сверхпроводимости. Препринт ОИЯИ. 1960.
3. *A.K.Kerman, R.D.Lawson, M.M.Macferlane Phys. Rev. 124, 162 (1961).*
4. А Павликовски, В.Рыбарска. Изучение точности метода Н.Н.Боголюбова в теории четно-четно несферических ядер. ЖЭТФ, 43, 543 /1962/.
5. *B.F.Bayman. Nucl. Phys. 15, 33 (1960).*
6. И.Н.Михайлов. Об использовании оператора проектирования при решении вариационных задач / в печати /.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 января 1963 г.