

2  
1169



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

---

И.Н. Михайлов

P-1259

О ТОЧНОСТИ МЕТОДА  
 $u$  -,  $v$  - ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Дубна 1963 год

И.Н. Михайлов

P-1259

1889/2 48-

О ТОЧНОСТИ МЕТОДА  
и  $\alpha$ ,  $\gamma$  - ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Объединенный институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

Дубна 1983 год

В теории ядра широко используются методы, в которых закон сохранения какого-либо квантового числа учитывается приближенно. Примером является метод  $u, v$  - преобразования в сверхтекучей модели ядра. В данном случае приближенно учитывается закон сохранения числа частиц  $N$ . Возможность использования подобных методов и преимущества их использования для описания протяженных систем показаны в работе <sup>/1/</sup>. Однако представляет существенный интерес оценить точность таких методов и разработать эффективный способ уточнения результатов подобных методов для решения реальных задач ядерной физики. В данной работе предложен один весьма простой прием, позволяющий улучшить точность методов, описанных выше. Метод связан с использованием приближенных выражений для оператора проектирования на пространство функций с нужным значением квантового числа, соответствующего закону сохранения. На примере сверхтекучей модели ядра показано, что такая процедура приводит лишь к незначительному усложнению формул исходного метода (здесь - метода  $u, v$  - преобразования). В заключительной части работы приведено сравнение результатов вычислений по формулам, полученным в данной работе, с данными, приведенными в работе <sup>/2/</sup> для модельной системы, состоящей из 6 частиц, распределенных на 5 двукратно вырожденных уровнях. Сравнение показывает, что предложенный метод, действительно, дает более точное решение уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$H = \sum_{s,\sigma} E(s) a_{s\sigma}^+ a_{s\sigma} - G \sum_{s,s'} a_{s+}^+ a_{s-}^+ a_{s-} a_{s+}. \quad (1)$$

Развитый метод применен нами для оценки точности метода  $u, v$  преобразования для систем, моделирующих реальные ядра. Аналогичные оценки были приведены в работе <sup>/3/</sup>. Однако в цитированной работе был использован метод, слишком сложный для получения сведений о точности определения волновых функций системы. Тем не менее уже в ней было показано (и подтверждено оценками данной статьи), что ошибки метода  $u, v$  - преобразования в некоторых случаях могут приводить к заметным погрешностям при описании реальных ядер.

Пусть  $\hat{H}$  и  $\hat{N}$  соответственно гамильтониан и оператор числа частиц системы. Мы предполагаем, что выполнено условие

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0, \quad (2)$$

конкретный же вид операторов для вывода наших основных формул значения не имеет.

Пусть также определен некоторый класс функций  $\Psi$ , о котором мы будем предполагать, что вместе с определенной функцией  $\Psi_1$  этот класс содержит также функции

$$\Psi_1(z) = z^{\hat{N}} \Psi_1, \quad (3)$$

соответствующие всем значениям комплексной переменной  $z$ . Подчеркнем, что функции  $\Psi$  не являются, вообще говоря, собственными функциями оператора  $\hat{N}$ , а поэтому функция  $\Psi(z)$  может существенно отличаться от  $\Psi = \Psi(0)$ .

Легко убедиться, что выражение

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z} \Psi(z) / z^{N_0} \quad (4)$$

представляет собой проекцию функции  $\Psi$  на пространство состояний системы  $N_0$  частиц, а выражение

$$H_B = \frac{\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z} \langle \Psi, H \Psi(z) \rangle}{\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z} \langle \Psi, \Psi(z) \rangle} \quad (5)$$

определяет среднее значение оператора энергии в состоянии (4). (В формулах (4), (5) интегрирование происходит по замкнутому контуру в плоскости  $z$ , содержащему точку  $z=0$ ). Цель настоящей работы заключается в том, чтобы получить достаточно простую формулировку вариационной задачи, поставленной Бейманом в работе<sup>/4/</sup>

$$\delta H_B = 0, \quad (6)$$

которая определяет функцию  $\Psi_B$  и минимальное значение функционала (5)  $E_B = \min H_B$ , аппроксимирующие волновую функцию и энергию основного состояния системы. Говоря о простой формулировке, мы имеем в виду, что решение задачи

$$\begin{aligned} \delta \langle \Psi, \hat{H} \Psi \rangle &= 0 \\ \langle \Psi, \hat{N} \Psi \rangle &= N_0 \end{aligned} \quad (7)$$

известно и будем стремиться свести задачу (5) к задаче, сходной с (7).

Введем обозначения

$$O(z) = \frac{\langle \Psi, \hat{O} \Psi(z) \rangle}{\langle \Psi, \Psi(z) \rangle} = \overline{O_z} \quad (8)$$

для матричного элемента от произвольного оператора  $\hat{O}$ . Этот матричный элемент зависит также от всех параметров, определяющих функции  $\Psi$ . Определим также функцию

$$\phi(z) = \ln \frac{\langle \Psi, \Psi(z) \rangle}{z^{N_0}}. \quad (9)$$

Выражение для среднего значения произвольного оператора  $\hat{O}$  в состоянии (4) в новых обозначениях имеет вид

$$O_B = \frac{\oint \frac{dz}{z} O(z) e^{\phi(z)}}{\oint \frac{dz}{z} e^{\phi(z)}}. \quad (10)$$

Предположим, что функция  $\phi(z)$  обладает резко выраженной седловой точкой, так что интегралы, которые фигурируют в формуле (10), можно вычислить по методу перевала. Из формулы (3) следует, что  $z_0$  является седловой точкой функции  $\phi(z)$ , если

$$N(z_0) = N_0, \quad (11)$$

и что функция  $\phi(z)$  в окрестности этой точки имеет вид:

$$\phi(z) = \phi(z_0) + \frac{(z - z_0)^2}{2z_0^2} \Delta N_{z_0}^2, \quad (12)$$

где

$$\Delta N_{z_0}^2 = \overline{(\hat{N} - N_0)^2}_{z_0} . \quad (13)$$

Предположим, что в интегралы формулы (10) вносит вклад только одна точка перевала и что выполнено неравенство

$$\Delta N_{z_0}^2 \gg 1 . \quad (14)$$

Предположим также, что зависимость матричного элемента некоторого оператора  $O(z)$  от  $z$  значительно менее резкая, чем зависимость функции  $\phi(z)$ . Тогда для среднего значения этого оператора мы получаем оценку:

$$O_B = O(z_0) - \frac{1}{2\Delta N_{z_0}^2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} O(z_0 e^\rho) \right]_{\rho=0} . \quad (15)$$

Уравнение (11) в общем случае имеет большое число решений, но если существенной является только одна точка  $z_0$ , то можно утверждать, что она расположена на действительной оси и имеет положительное значение. Отсюда следует, что  $N(z_0)$ ,  $\Delta N_{z_0}^2$  и  $O(z_0)$  имеют смысл средних значений соответствующих операторов в состоянии  $\Psi(z_0^{1/2})$  (см. /4/).

Используя формулу (15), легко получить следующие выражения для среднего значения числа частиц и энергии

$$H_B = H(z_0) - \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta N_{z_0}^2} \left( \frac{\partial^2 H}{\partial \rho^2} \right)_{\rho=0} \quad (16)$$

$$N_B = N(z_0) - \frac{1}{2} \frac{\Delta N_{z_0}^3}{\Delta N_{z_0}^2} . \quad (17)$$

Последний член в формуле (17) характеризует погрешность, вносимую приближенным методом вычисления контурных интегралов. Легко видеть, что эта погрешность тем меньше, чем симметричнее представлены состояния с  $N > N_0$  и  $N < N_0$  в функции  $\Psi(z_0^{1/2})$

Формулы (11), (16) содержат основной результат работы /4/, показывая, что среднее значение энергии в состоянии (4) при сформулированных выше предположениях мало отличается от среднего значения в состоянии  $\Psi(z_0^{1/2})$ , определенном формулой (11). Второй член в правой части формулы (16) дает возможность оценить величину ошибок, которые возникают при замене вариационной задачи (6) более простой задачей (7). Если использование метода перевала оправдано, задача (6) сводится к отысканию минимума выражения (17) при выполнении дополнительного условия (11), которое можно заменить, оставаясь в пределах точности метода, на условие

$$N_B = N_0 .$$

При этом различие в энергии и значениях параметров, определяющих те функции  $\Psi$ , которые удовлетворяют условиям стационарности функционалов (7) и (16), должны быть малы. Ограничиваясь поправками первого порядка по величине дополнительных членов в формулах (16), (17), для величины  $\Delta E = \min H_B - \min H$  можно получить выражение:

$$\Delta E = - \frac{1}{2 \Delta N^2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} ( H(z_0 e^\rho) - \lambda(z_0 e^\rho) ) \right]_{\rho=0} \quad (19)$$

В формуле (19) средние значения операторов  $\hat{H}$ ,  $\hat{N}$ ,  $(\hat{N} - N_0)^2$  и химический потенциал  $\lambda$  определяются решением задачи (7). Отметим, что вследствие положительности второй производной от величины  $H - \lambda N$  в точке минимума поправка к энергии в рассмотренном приближении оказывается отрицательной.

До сих пор мы нигде не использовали конкретный вид гамильтониана, пробных функций и даже вид оператора  $\hat{N}$ . Единственное свойство оператора  $\hat{N}$ , которое существенно для вывода формул (16)–(19), – это наличие спектра собственных значений, отличающихся друг от друга на целое число. Поэтому аналогичные выкладки можно провести, например, для уточнения методов, в которых неточно учтен закон сохранения момента количества движения.

Перейдем к определению поправок, к которым приводят написанные выше выражения при решении уравнения Шредингера с гамильтонианом (1). Мы имеем

$$N = \sum_{s,\sigma} a_{s\sigma}^+ a_{s\sigma} \quad (20)$$

Функции  $\Psi$  определим обычным образом

$$\Psi = \prod_s ( u_s + v_s a_{s+}^+ a_{s-}^+ ) |0\rangle \quad (21)$$

После простых вычислений в этом случае легко получить

$$\Delta E = - \frac{1}{G \Delta N^2} ( C^2 - C_1^2 ), \quad (22)$$

где

$$\Delta N^2 = 4 \sum_s u_s^2 v_s^2,$$

$$C = G \sum_s u_s v_s, \quad (23)$$

$$C_1 = G \sum_s u_s v_s (u_s^2 - v_s^2).$$

Для среднего значения оператора числа частиц получаем выражение

$$N_B = \sum_s \bar{N}_s = 2 \sum_s v_s^2 \left[ 1 - \frac{1}{\Delta N^2} u_s^2 (u_s^2 - v_s^2) \right]. \quad (24)$$

Для того, чтобы получить поправки к волновым функциям системы, оказывается целесообразным упростить задачу, воспользовавшись тем, что при достаточно плавной зависимости  $u_s^2$  ( $v_s^2$ ) от  $s$  выполняются неравенства

$$\Delta N^3 \ll \Delta N^2 \quad (25)$$

$$C_1 \ll C.$$

Мы видели, что отношение  $\frac{\Delta N^3}{2\Delta N^2}$ , строго говоря, определяет точность метода. Поэтому естественно пренебречь величинами  $\Delta N^3$ ,  $C_1$  в выражениях (22), (24), после чего функционалы  $H_B$  и  $N_B$  принимают вид:

$$\begin{aligned} H_B &\approx 2 \sum_s E_s v_s^2 - G_{\text{эфф}} \left( \sum_s u_s v_s \right)^2, \\ N_B &\approx 2 \sum_s v_s^2, \end{aligned} \quad (26)$$

где

$$G_{\text{эфф}} = \left( 1 + \frac{1}{\Delta N^2} \right) G. \quad (27)$$

В этом приближении проектирование приводит к перенормировке константы взаимодействия  $G$ . Варьируя уравнение (26), легко получить обычные уравнения сверхтекучести, в которых вместо константы  $G$  стоит величина  $G_{\text{эфф}}$ , а перенормированные значения уровней энергии равны:

$$\tilde{E}_i = E_i - v_i^2 G_{\text{эфф}} - \frac{2(u_i^2 - v_i^2)}{G(\Delta N^2)^2} \frac{\tilde{C}^2}{(1 + 1/\Delta N^2)^2}$$

где

$$\tilde{C} = G_{\text{эфф}} \sum_s u_s v_s.$$

Приведенные выше формулы позволяют получить поправки как к энергии основного состояния системы, так и к параметрам  $u$ ,  $v$ , определяющим решение вариационной задачи. Однако прежде чем переходить к вычислениям, заметим следующее. В сверхтекучей модели ядра величина  $G$  является параметром, который определяется из условия, связывающего экспериментально известное значение парной энергии с расчётным значением этой величины (см./3/). Корреляционная функция  $C$  и параметры  $u$ ,  $v$  связаны достаточно сложными соотношениями с физическими параметрами системы. Поэтому представляет большой интерес изучение спектра возбужденных состояний системы в зависимости от величины парной энергии. В рассмотренном случае, когда гамильтониан имеет вид (1), приведенные выше формулы описывают значительную часть низколежащих возбужденных состояний. Действительно, функция состояния с квантовыми числами  $v_i, v_j \neq 0$  (см./2/) в терминах вторичного квантования имеет вид:

$$\Psi_{i,j} = a_{i\mu}^+ a_{j\eta}^+ \Psi'_{i,j} (a_{s\sigma}^+) |0\rangle, \quad (28)$$

причем  $\Psi'$  содержит операторы  $a_{s\sigma}^+$  с  $s \neq i, j$ . Функция  $\Psi'_{ij}$  является собственной функцией гамильтониана (1), из которого исключены слагаемые, соответствующие  $s=i, j$  или  $s'=i, j$ .

В теории  $u$ ,  $v$  преобразования состояния, описываемые этими функциями, называются двухквaziчастичными состояниями с квазичастицами на уровнях  $i, j$ .

Приведенные выше формулы основаны на предположении, что седловая точка в интегралах формулы (5) является весьма резко выраженной. В применении к сверхтекучей модели ядра это означает, что величина дисперсии числа частиц  $\Delta N^2$  предполагается большой по сравнению с единицей. Расчеты систем, моделирующих реальные ядра, показывают, что эта величина обычно принимает значения

$$\Delta N^2 \approx 5 - 7$$

при описании основных состояний ядер и значения

$$\Delta N^2 \approx 2-5$$

при описании двухквазичастичных состояний. Поэтому возникает вопрос - дает ли описанный метод реальное улучшение точности расчетов. Таблицы 1, 2 и графики 1, 2 позволяют сравнить точность приведенного метода и метода  $u, v$  преобразования на основании данных работы /2/ о точности решении модельной задачи, рассмотренной в этой работе. На графиках и таблицах величины с индексом  $r$  представляют точное значение соответствующей величины, индекс  $u, v$  означает, что величина найдена методом  $u, v$  - преобразования; величина без индекса определена по формулам данной статьи. Приведенные данные показывают, что описанный метод существенно уменьшает ошибки в определении энергетического спектра системы. Сравнение точных результатов при  $G=1$  с результатами метода  $u, v$  - преобразования и нашего метода при тех значениях константы  $G$ , которые дают одинаковую парную энергию системы, показывает, что использованная процедура приводит к уменьшению ошибки в определении возбуждения первого уровня более чем в 4 раза (неточность определения энергии возбуждения нашим методом составляет в данном случае всего (3,4%). Изменения в распределении частиц по уровням, к которым приводит описанный метод, оказываются небольшими (можно показать, что при  $\Delta N^2 \gg 1$  изменение степени заполнения уровня  $s \delta_{N_s} \approx \frac{1}{(\Delta N^2)^2}$ ).

Аналогичные расчеты были проведены для двух систем, близких к тем, которые описывают реальные ядра (ядра с числом нейтронов  $N=102$ ). Результаты этих вычислений представлены в таблице 3. Там же представлены результаты вычислений методом  $u, v$  - преобразования. Сравнение этих результатов показывает, что уточнение метода  $u, v$  - преобразования может привести к 15%-изменениям энергии первого возбужденного состояния четно-четных ядер. Изменение энергии возбуждения более высоко расположенных уровней не существенно. Из таблицы видно также, что изменение корреляционной функции  $\bar{C}$ , к которому приводит учет проектирования, существенно даже для основного состояния и весьма велико для низких возбужденных состояний. Аналогичные результаты следуют также и из расчетов модельной задачи. В соответствии с нашими расчетами все двухчастичные состояния имеют весьма близкие значения величины  $\bar{C}$ . Отметим, что величина  $\bar{C}$  в нашем методе связана другими соотношениями со значениями разных физических величин, чем в методе  $u, v$  - преобразования. Вследствие этого изменение  $\bar{C}$  по сравнению с расчетами методом  $u, v$  - преобразования не сопровождается существенным изменением распределения частиц по уровням. Чем больше величина  $\bar{C}$ , тем более отличается волновая функция системы от антисимметризованного произведения одночастичных волновых функций. Сравнимая величина корреляционной функции в основном и двухквазичастичных возбужденных состояниях системы показывает, что волновая функция этих возбужденных состояний все еще далека от функции типа функции Хартри-Фока.

В заключение пользуюсь случаем выразить признательность В.Г.Соловьеву и И.Петкову за интерес к работе и многочисленные обсуждения. Расчеты, описанные выше, были выполнены в Вычислительном центре ОИЯИ М.В. Михайловой, которой я также искренне благодарен.



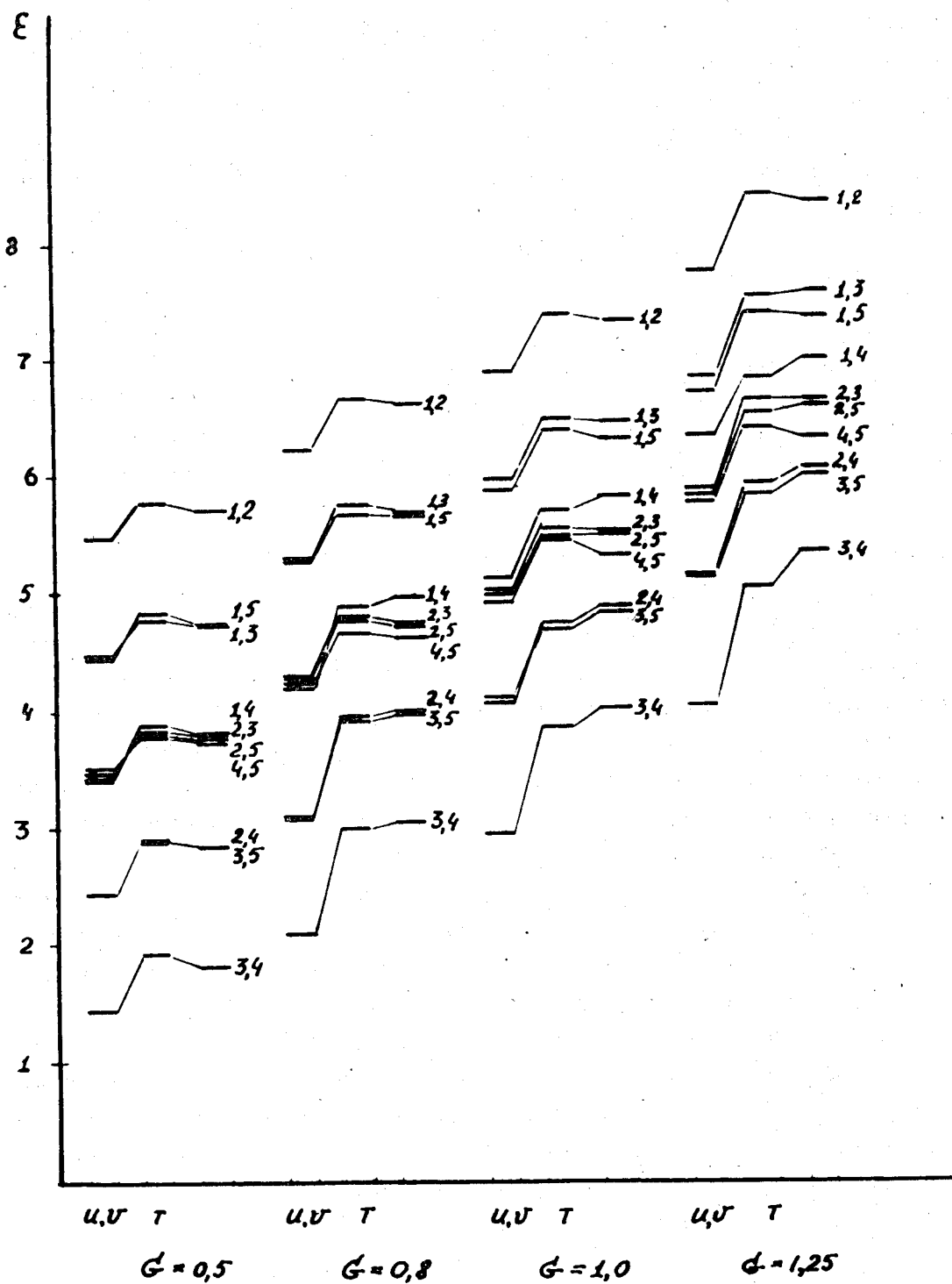


Рис. 1.

Энергия возбуждения двухквазичастичных состояний модельной системы при разных значениях константы  $G$ .

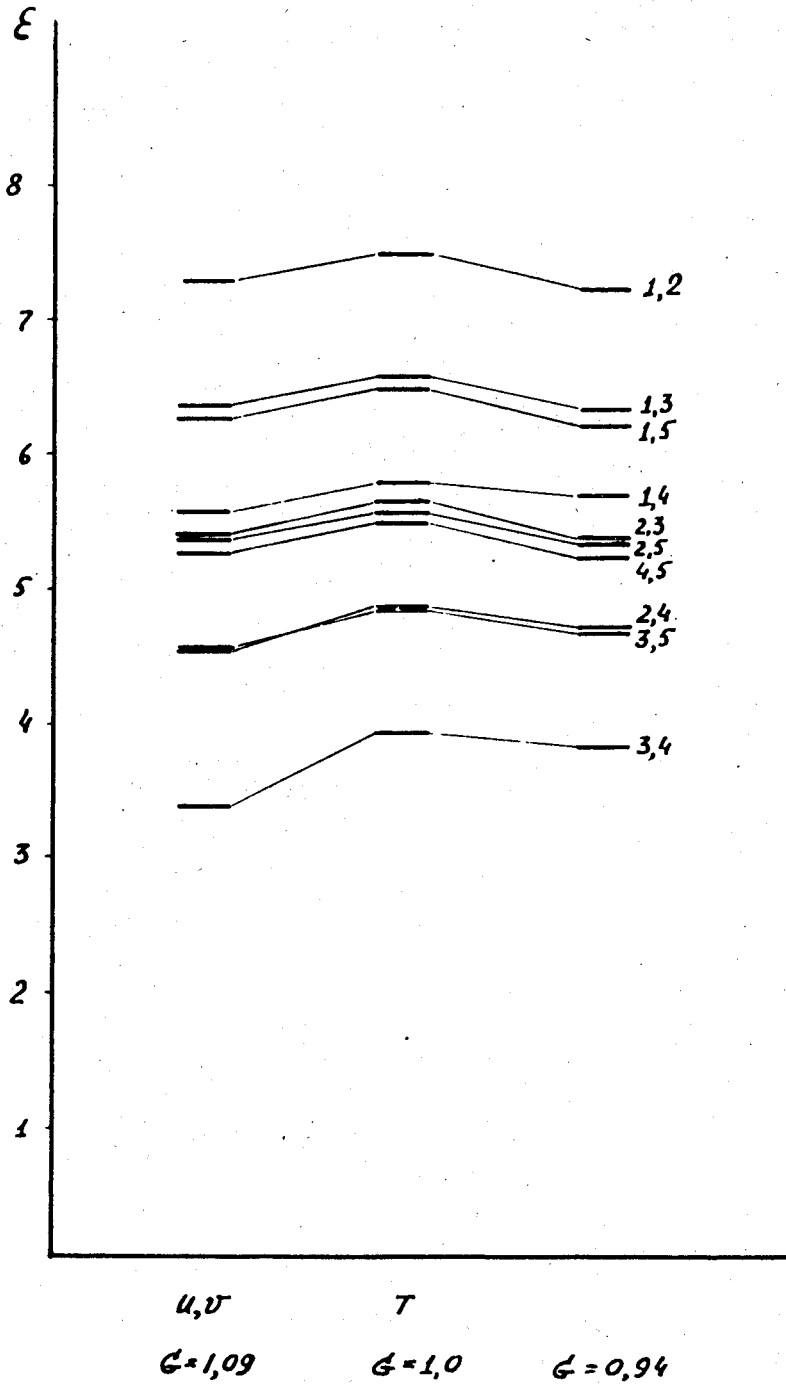


Рис. 2.

Энергии возбуждения двухквазичастичных состояний модельной системы, найденные разными методами при фиксированном значении величины парной энергии ( $P = 3,603$ ).

Таблица 1.

$G$	0,5	0,8	1,0	1,25
$E_{0T}$	10,00	8,21	6,83	4,95
$E_0$	10,22	8,42	7,00	5,09
$E_{0u,v}$	10,56	9,22	8,08	6,51

Энергия основного состояния  $E_0$  - модельной системы, описанной в работе <sup>[2]</sup>, при разных значениях констант  $G$  (величины даны в единицах расстояния между одночастичными уровнями  $E_i$ ).

Таблица 2.

Состояние	Точное значение при $G=1$ .	Значение, найденное методом $u, v$ преобразования		Значение, найденное методом, описанным в статье		
		$G=1,0$	$G=1,09$	$G=0,94$	$G=1,0$ .	
0	$P$	3,603	3,083	3,603	3,605	3,954
	$E_0$	6,828	8,084	7,532	7,442	7,004
	$G_{эфф}$	-	1	1,09	1,182	1,251
	$\tilde{C}$	-	2,092	2,338	2,585	2,771
	$\lambda$	-	3,654	3,688	3,723	3,751
	$N-N_0$	-	0	0	-0,133	-0,138
	$\delta$	0	0,025	0,032	0,024	0,029
3,4	$E$	3,850	2,916	3,288	3,722	4,025
	$G_{эфф}$	-	1	1,09	1,639	1,697
	$\tilde{C}$	-	0,010	0,024	1,619	1,733
	$\lambda$	-	3,000	3,214	3,776	3,798
	$N-N_0$	-	0	0	-0,127	-0,137
	$\delta$	0	0,012	0,012	0,008	0,009
1,2	$E$	7,394	6,867	7,171	7,101	7,329
	$G_{эфф}$	-	1	1,09	1,347	1,426
	$\tilde{C}$	-	1,218	1,360	1,755	1,857
	$\lambda$	-	4,651	4,684	4,785	4,819
	$N-N_0$	-	0	0	-0,247	-0,256
	$\delta$	0	0,031	0,037	0,036	0,040

Сравнения результатов расчета модельной системы, найденных методом  $u, v$  - преобразования и методом, описанным в данной статье, с точными значениями.  $P = 2(E_0)_{N-1} - E_N - E_{N-2}$  - парная энергия системы, состоящей из  $N$  частиц,  $\epsilon$  - энергия возбуждения;  $\tilde{C}$  - корреляционная функция, равная  $\tilde{C} = G \sum_s u_s v_s$  в методе  $u, v$  - преобразования и  $\tilde{C} = G_{эфф} \sum_s u_s v_s$  в методе, описанном в данной статье;  $\lambda$  - химический потенциал системы,  $N - N_0 = -\frac{\Delta N^2}{2\Delta N}$ ; наконец,  $\delta = \frac{1}{5} [\sum_{s=1}^5 (N_s - N_{sT})^2]^{1/2}$  - среднеквадратичная ошибка определения степени заполнения одночастичных уровней.

Таблица 3

	0	K-2 K	K-2 K+2	K-I K	K-I K+1	K-I K+2	K K+1	K K+2	K K+3	
$P = 0,170$	$G_{эфф}$	0,0236	0,0250	0,0255	0,0256	0,0263	0,0254	0,0267	0,0257	0,0254
	$\epsilon$	0	0,400	0,363	0,258	0,222	0,297	0,190	0,278	0,344
	$\epsilon_{u,v}$	0	0,398	0,353	0,254	0,204	0,294	0,164	0,273	0,340
	$\bar{C}$	0,150	0,125	0,124	0,121	0,120	0,121	0,120	0,120	0,122
	$\bar{C}_{u,v}$	0,120	0,073	0,041	0,061	0,003	0,070	0	0,060	0,065
	$\lambda$	1,342	1,400	1,381	1,391	1,368	1,332	1,354	1,318	1,314
	$\lambda_{u,v}$	1,341	1,409	1,387	1,408	1,402	1,331	1,313	1,313	1,311
	$N-N_0$	-0,014	0,122	0,056	0,170	0,080	-0,018	0,037	-0,061	-0,038
$P = 0,205$	$G_{эфф}$	0,0246	0,0259	0,0262	0,0264	0,0269	0,0263	0,0272	0,0265	0,0262
	$\epsilon$	0	0,420	0,388	0,282	0,251	0,320	0,222	0,303	0,367
	$\epsilon_{u,v}$	0	0,418	0,380	0,278	0,236	0,316	0,196	0,297	0,362
	$\bar{C}$	0,170	0,141	0,140	0,136	0,135	0,136	0,134	0,136	0,138
	$\bar{C}_{u,v}$	0,139	0,090	0,068	0,077	0,039	0,083	0,002	0,075	0,081
	$\lambda$	1,342	1,396	1,380	1,387	1,366	1,332	1,353	1,320	1,315
	$\lambda_{u,v}$	1,342	1,406	1,386	1,404	1,379	1,331	1,329	1,314	1,312
	$N-N_0$	-0,007	0,120	0,060	0,163	0,078	-0,018	0,037	0,060	-0,040

Сравнение результатов метода  $u, v$  - преобразования и метода, описанного в статье, для системы, моделирующей ядро со 102 нейтронами при двух значениях парной энергии. Энергетические величины даны в единицах  $\hbar \omega_0 = 7,37$  Мэв. Обозначения те же, что и в таблице 2.

#### Л и т е р а т у р а

1. Н.Н.Боголюбов. Препринт ОИЯИ Д-781 (1981).
2. А.Павликовски и В.Рыбарска. ЖЭТФ, **43**, 543 (1982).
3. В.Г.Соловьев. Препринт ОИЯИ Е-1154 (1982).
4. В.Ф.Ваутан. Nucl. Phys. **15**, 33 (1960).

Рукопись поступила в издательский отдел  
4 апреля 1983 года.