СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4 - 6258

Р.В.Джолос, В.Рыбарска

ПАРНЫЕ ВРАЩЕНИЯ И ПРОБЛЕМА ИСКЛЮЧЕНИЯ "ДУХОВЫХ" СОСТОЯНИЙ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1972

P4 - 6258

Р.В.Джолос, В.Рыбарска

ПАРНЫЕ ВРАЩЕНИЯ
И ПРОБЛЕМА ИСКЛЮЧЕНИЯ
"ДУХОВЫХ" СОСТОЯНИЙ

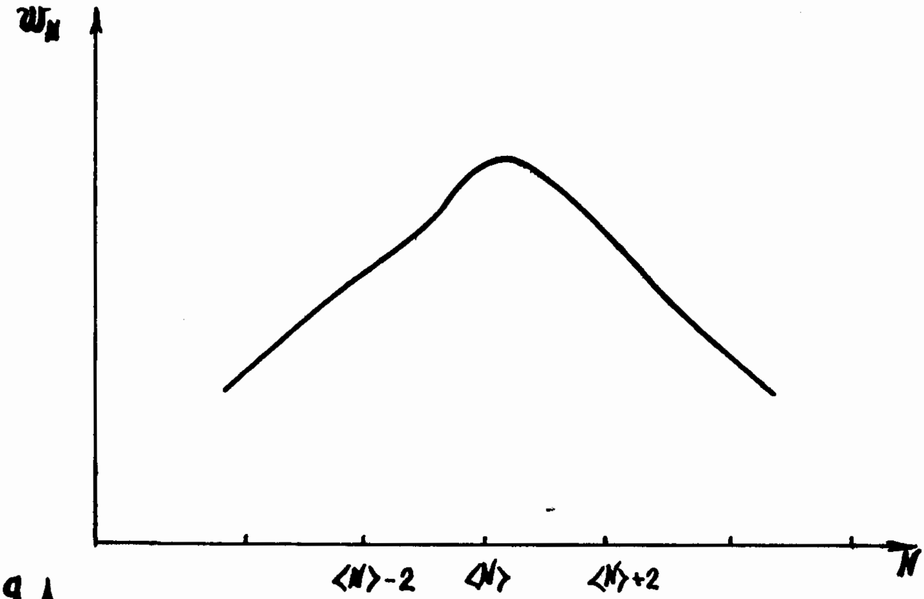

Рис. 1. Структура волновой функции основного состояния $(|BCS>)$.

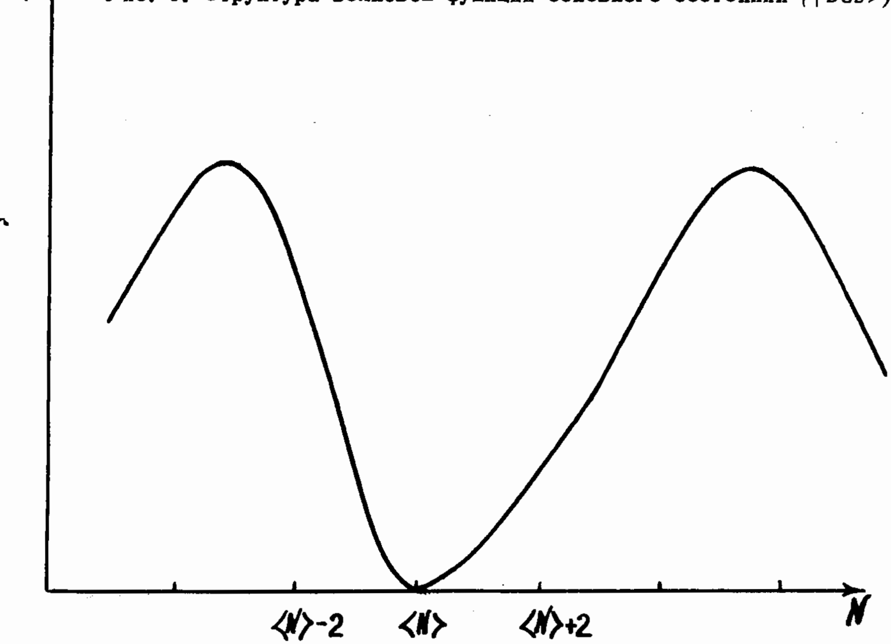

Рис. 2. Структура волновой функции $(\hat{N} - <\hat{N}>)|BCS>$.

Проблема лишних состояний, казалось, была решена в рамках RPA [1], где "нефизические" (т.е. не имеющие отношения к системе с заданным числом частиц) состояния образовали набор, ортогональный физическим состояниям. Такое заключение делалось на том основании, что в RPA, кроме основного состояния, имеется еще и однофононное состояние с $\omega = 0$, ортогональное основному. А такие состояния считаются нефизическими ("духовые" состояния).

Однако при более внимательном рассмотрении оказалось, что решение RPA неудовлетворительно, поскольку фононные амплитуды при $\omega \to 0$ расходятся, и разговор о фононах становится бессмысленным. Кроме того, из уравнений движения для фононных операторов:

$$[H, b^+] = \omega b^+, \quad [H, b] = -\omega b$$

следует, что при $\omega \to 0$ исчезает различие между операторами b^+ и b, и встает проблема построения двух операторов, необходимых для описания таких векторов состояний. В работе [1] был найден лишь один оператор: $(\hat{N} - \langle\hat{N}\rangle)$.

Правильную физическую интерпретацию факту появления в RPA решений с $\omega=0$ удалось дать лишь после появления работы [2]. В этой работе была доказана следующая теорема. Если какой-либо оператор коммутирует с точным гамильтонианом $([\hat{H}, \hat{N}] = 0)$, то это соотношение выполняется и в RPA, если все вычисления проводились с той точностью, которая принята в RPA, т.е. $[\hat{H}_{RPA}, \hat{N}_{RPA}]_{RPA} = 0$. Другими словами, все точные законы сохранения имеют место и в RPA. Из этой теоремы следовало, что с той точностью, которая принята в RPA, волновые функции, найденные в рамках RPA, являются собственными функциями оператора числа частиц. Кроме того, в [3] было показано, что в тех случаях, когда среди решений RPA есть решение с $\omega=0$, для описания состояний удобно использовать не операторы фононов, а линейно связанные с ними операторы координаты и импульса:

$$b_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}(p_k + i\omega_k q_k), \quad b_k = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}(p_k - i\omega_k q_k), \; [p_k, q_{k'}] = i\delta_{kk'}.$$

Тогда

$$H_{RPA} = \frac{1}{2}\sum_k (p_k^2 + \omega_k^2 q_k^2)$$

$$[H_{RPA}, p_k] = i\omega_k^2 q_k, \qquad [H_{RPA}, q_k] = -i\, p_k .$$

При $\omega_0 = 0\,[H_{RPA}, p_0] = 0$ и мы получаем сохраняющийся оператор. Можно показать, что $p_0 \approx (\hat{N} - <\hat{N}>)_{RPA}$ и, следовательно,

$$H_{RPA} = \frac{(\hat{N} - <\hat{N}>_{RPA}^2}{2\mathcal{J}} + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}(p_k^2 + \omega_k^2 q_k^2),$$

где $\mathcal{J}$ - константа. Первое слагаемое в H_{RPA} по форме совпадает с гамильтонианом двумерных вращений, поэтому связанное с ним коллективное движение было названо парными вращениями. Уровни, формирующие ротационные полосы, являются состояниями ядер с различными числами частиц.

Таким образом, если в приближении BCS для ядра с числом частиц $<\hat{N}>$ мы получили слишком много состояний по сравнению с числом точных решений, что было связано с присутствием примесей состояний соседних ядер (рис. 3), то в RPA, благодаря выполнению закона сохранения числа частиц, из этих состояний выделились состояния соседних ядер (рис. 4). Можно показать, что энергия парных ротационных состояний $(\approx \frac{1}{\mathcal{J}})$ мала по сравнению с энергией парных вибрационных состояний $(\approx 2\,\Delta)$. В пренебрежении энергией вращения как малой величиной, мы получаем набор состояний с нулевой энергией - основные состояния соседних ядер.

Координата q_0 оказывается пропорциональной угловой переменной $\hat{\phi}$, канонически сопряженной оператору числа частиц $[N, \hat{\phi}] = -i$:

$$q_0 = \sqrt{\mathcal{J}}\;\phi .$$

По определению ϕ - циклическая переменная.

Перейдем к построению волновой функции основного состояния ядра с $N = <\hat{N}>$. Такая волновая функция должна быть собственной функцией оператора $(\hat{N} - <\hat{N}>_{RPA}) = \sum_s \frac{\Delta}{E_s}(a_{\bar{s}} a_s + a_s^+ a_{\bar{s}}^+)$ (где E_s - энергии (квази-

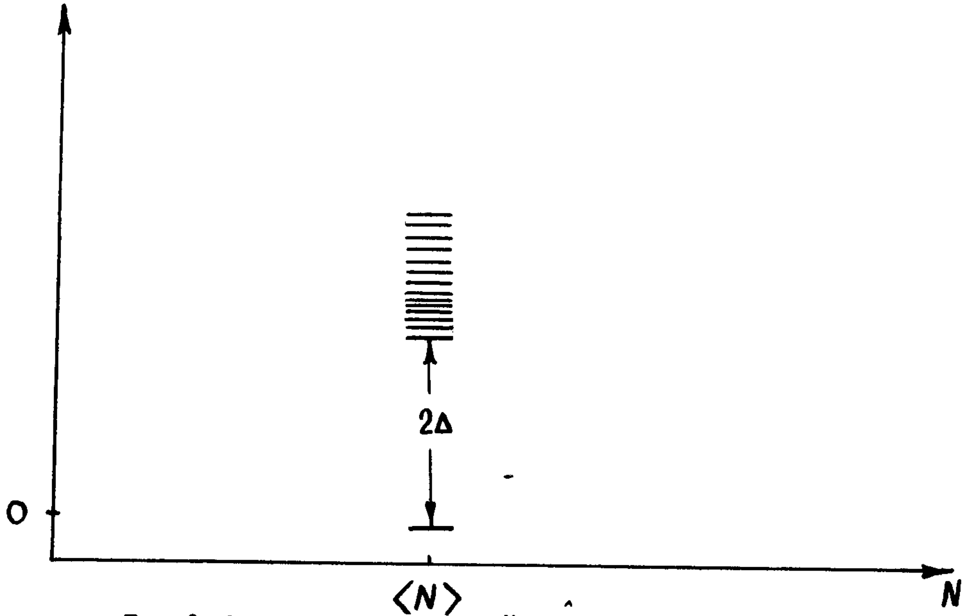

Рис. 3. Схема уровней ядра с $N = \langle\hat{N}\rangle$ в приближении BCS .

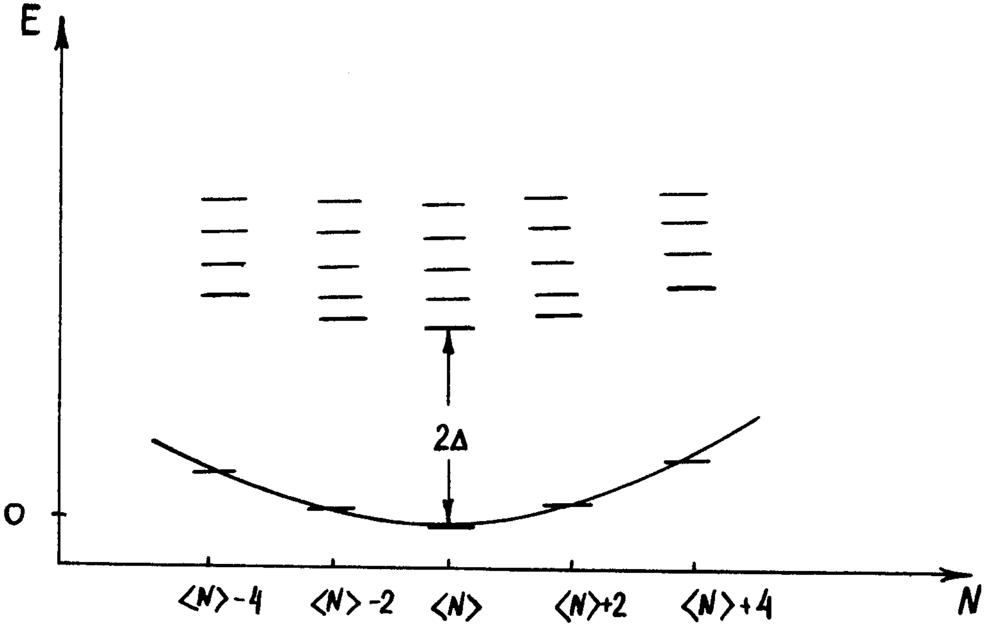

Рис. 4. Схема уровней ядер с $N = \langle\hat{N}\rangle$, $\langle\hat{N}\rangle \pm 2$, $\langle\hat{N}\rangle \pm 4$, полученная в рамках RPA .

частицы) с нулевым собственным значением. В пренебрежении парными вибрациями эта волновая функция имеет вид (Приложение 1):

$$|RPA> = e^{-\gamma\left(\sum_s \frac{a_s^+ a_{\bar{s}}^+}{E_s}\right)^2} |BCS>, \quad \gamma = \frac{1}{2\sum_s E_s^{-2}} . \qquad (1)$$

Можно показать, что норма такого состояния расходится (Приложение 2), т.е. $<RPA|RPA> \to \infty$. Кроме того, расходятся и средние значения различных операторов. Например,

$$\frac{<RPA|a_s^+ a_s + a_{\bar{s}}^+ a_{\bar{s}}|RPA>}{<RPA|RPA>} \to \infty .$$

(Приложение 3). Против этих утверждений существует формальное возражение, состоящее в том, что число фермионных состояний конечно, поэтому экспоненту в (1) следует заменить полиномом. В этом случае норма и все средние станут конечными величинами. Но, благодаря большой величине коэффициентов при компонентах с большими числами квазичастиц, все результаты будут сильно зависеть от параметра обрезания (т.е. от числа учитываемых однофермионных состояний), что лишает их физического смысла. Учет нулевых парных вибраций /4/ не устраняет расходимостей.

Подводя итоги, можно сказать, что подход, основанный на использовании операторов p_k и q_k вместо фононных операторов, дал правильную интерпретацию факту появления в RPA решений с $\omega = 0$, дал полный набор переменных, необходимых для построения волновых функций основных состояний ядер $((\hat{N} - <\hat{N}>, \phi)$, позволил вычислить энергии парных ротационных состояний. Однако на этом пути не удалось построить математический аппарат, пригодный для вычисления матричных элементов различных одночастичных операторов.

Причина появления указанных выше расходимостей состоит в том, что из-за обращения в нуль частоты ω_0 обращается в нуль и жесткость по отношению к колебаниям по координате q_0. Благодаря этому, q_0 (а значит, и угол ϕ) могут принимать любые, сколь угодно большие значения, что нарушает лежащее в основе RPA предположение о малости амплитуд колебаний. Кроме того, угол ϕ линейно входит в выражения для одночастичных операторов, что не позволяет учесть условие цикличности. Наконец, еще одна ошибка, связанная с введением угла ϕ, состоит в том, что коммутационное соотношение $[\hat{N}, \phi]=-i$ неверно [5]. (Приложение 4).

Выход из этого затруднения был найден Дираком, и состоит он в том, что вместо коммутатора $[\hat{N}, \phi]$ нужно использовать правильное коммутационное соотношение:

$$[\hat{N}, e^{i\phi}] = e^{i\phi}.$$

Таким образом, с точки зрения коммутационных соотношений нужно использовать функцию $e^{i\phi}$, а не угловую переменную ϕ. Кроме того, при использовании функций $e^{i\phi}$ автоматически учитывается условие цикличности угловой переменной. Переход от ϕ к $e^{i\phi}$ позволяет решить и другую проблему. Пусть $|n>$ - собственные функции оператора $(\hat{N} - <\hat{N}>)$:

$$(N - <N>)|n> = n|n>.$$

Действие оператора $\hat{\phi}$ на векторы состояния $|n>$ неизвестно, и при расчетах необходимо знать квазичастичную структуру ϕ и $|n>$. При работе с операторами $e^{i\phi}$ такая трудность не возникает, поскольку

$$e^{i\phi}|n> = |n + 1>.$$

Далее, так как мы не разлагаем экспоненты $e^{i\phi}$ в ряды по степеням ϕ, то и не нуждаемся в характерном для RPA предложении о малости ϕ.

Подход к описанию вращательных возбуждений, основанный на использовании операторов типа $e^{i\phi}$ вместо ϕ, развивался в работах [6,7]. Ниже мы будем следовать работе [7]. Мы не будем рассматривать парных вибраций, поскольку включение их в общую схему не связано с какими-либо трудностями.

Основная идея работы [7] состоит в том, что гамильтониан и одночастичные операторы, входящие в задачу, нужно представить как некоторые функции от $e^{i\phi}$ и $(\hat{N} - <\hat{N}>)$, а конкретный вид этих функций определить с помощью уравнений движения и дополнительных условий, возникающих при постановке задачи. При этом зависимость от $e^{i\phi}$ нужно учесть точно, так как ϕ - немалая величина. Это нетрудно сделать, поскольку операторы, не изменяющие общего числа частиц, от ϕ не зависят, а операторы, изменяющие число частиц на две, пропорциональны $e^{2i\phi}$ или $e^{-2i\phi}$. Что касается зависимости от $(\hat{N}-<\hat{N}>)$, то, так как энергия парных вращений мала по сравнению с энергией одноквазичастичных возбуждений, все операторы можно разлагать в ряды по степеням $(\hat{N}-<\hat{N}>)$, ограничиваясь при этом лишь несколькими первыми членами разложения.

В случае парных корреляций в сферических ядрах гамильтониан записывается следующим образом:

$$H = \sum_j (\epsilon_j - \lambda) N_j - G \sum_{jj'} \sqrt{(j+\frac{1}{2})(j'+\frac{1}{2})}\, \bar{A}_j A_{j'}$$

$$N_j = \sum_m a^+_{jm} a_{jm}, \quad A_j = \sum \frac{(-)^{j-m}}{\sqrt{2(2j+1)}} a_{j-m} a_{jm}. \tag{1}$$

Уравнение движения для операторов A^+_j имеет вид:

$$[H, A^+_j] = 2(\epsilon_j - \lambda) A^+_j - G \sum_{j'} \sqrt{j'+½}\; A^+_{j'} \cdot \sqrt{j+\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{N_j}{j+\frac{1}{2}}\right). \tag{2}$$

Так как гамильтониан (1) обладает дополнительной симметрией, связанной с сохранением квазиспина /8/, то мы должны использовать еще и условие сохранения квазиспина:

$$\frac{2}{j+\frac{1}{2}} (A_j A^+_j + A^+_j A_j) + \left(1 - \frac{N_j}{j+\frac{1}{2}}\right)^2 = 1. \tag{3}$$

Представим операторы H , A^+_j , N_j следующими выражениями

$$H = \frac{(\hat{N} - <\hat{N}>)^2}{2\mathcal{J}} \tag{4}$$

$$A^+_j = e^{2i\phi}(a_j + b_j(\hat{N} - <\hat{N}>)), \tag{5}$$

$$N_j = <N_j> + \alpha_j(\hat{N} - <\hat{N}>). \tag{6}$$

Подставляя выражения (4), (5) и (6) в (2) и (3), мы найдем параметры a_j , b_j , α_j , $<N_j>$:

$$a_j = \frac{\sqrt{j+\frac{1}{2}}\,\Delta}{2E_j}, \quad E_j = \sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}, \quad 1 = \frac{G}{2}\sum_j \frac{j+\frac{1}{2}}{E_j}$$

$$<N_j> = (j+\frac{1}{2})(1-\frac{\epsilon_j-\lambda}{E_j}), \quad b_j = \frac{(\epsilon_j-\lambda)\,a_j}{4\Delta\sqrt{j+\frac{1}{2}}}$$

$$a_j = \frac{(j+\frac{1}{2})\Delta^2}{\mathcal{J} E_j^3} + \gamma(j+\frac{1}{2})\frac{\epsilon_j-\lambda}{E_j^3}$$

$$\gamma = \frac{1}{\mathcal{J}}\,\frac{\sum_j \frac{(j+\frac{1}{2})(\epsilon-\lambda)}{E_j^3}}{\sum_j \frac{(j+\frac{1}{2})}{E_j^3}}$$

Величину $\mathcal{J}$ найдем следующим образом. Так как $\sum_j <N_j> = <\hat{N}>$, то $\sum_j a_j = 1$. Воспользовавшись этим требованием, мы получим для $\mathcal{J}$ следующее выражение:

$$\mathcal{J} = \sum_j \frac{(j+\frac{1}{2})\Delta^2}{E_j^3} + \frac{\left(\sum_j \frac{(j+\frac{1}{2})(\epsilon-\lambda)}{E_j^3}\right)^2}{\sum_j \frac{j+\frac{1}{2}}{E_j^3}}.$$

Выражение для момента инерции (7) совпадает с тем, которое было получено в RPA /4/. Но, кроме этого, благодаря формулам (5) и (6), мы можем вычислить любые матричные элементы от операторов A_j^+ и N_j, что невозможно сделать в рамках RPA.

Приложение 1.

В RPA предполагается, что $[a_{\bar{s}}a_s, a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+] = \delta_{s\nu}$, поэтому

$$(\hat{N} - <\hat{N}>_{RPA})\,|RPA> = \sum_s \frac{a_{\bar{s}}a_s + a_s^+ a_{\bar{s}}^+}{E_s}\, e^{-\gamma(\sum \frac{a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+}{E_\nu})^2}\,|BCS> =$$

$$e^{-\gamma(\sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+}{E_\nu})^2}\, e^{\gamma(\sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+}{E_\nu})^2} \sum_s \frac{a_{\bar{s}}a_s + a_s^+ a_{\bar{s}}^+}{E_s}\, e^{-\gamma(\sum \frac{a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+}{E_\nu})^2}\,|BCS> =$$

$$e^{-\gamma\left(\sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar\nu}^+}{E_\nu}\right)^2}\left\{\sum_s \frac{a_{\bar s} a_s}{E_s} - 2\gamma \sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar\nu}^+}{E_\nu} \sum \frac{1}{E_s^2} + \sum_s \frac{a_s^+ a_{\bar s}^+}{E_s}\right\} |BCS> =$$

$$= e^{-\gamma\left(\sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar\nu}^+}{E_\nu}\right)^2}\left\{- \sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar\nu}^+}{E_\nu} + \sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar\nu}^+}{E_\nu}\right\} |BCS> = 0 .$$

Приложение 2.

Так как в рамках RPA

$$\left[\sum_s \frac{a_{\bar s} a_s}{E_s}, \quad \sum_\nu \frac{a_\nu^+ a_{\bar\nu}^+}{E_\nu}\right] = \sum_s \frac{1}{E_s^2} = \frac{1}{2\gamma},$$

то можно полагать

$$\sqrt{2\gamma} \sum_s \frac{a_{\bar s} a_s}{E_s} = b, \qquad \sqrt{2\gamma} \sum_s \frac{a_s^+ a_{\bar s}^+}{E_s} = b^+,$$

где b и b^+ – операторы идеальных бозонов: $[b, b^+] = 1$. Тогда:

$$<RPA|RPA> = <BCS| e^{-\gamma\left(\sum \frac{a_{\bar s} a_s}{E_s}\right)^2} e^{-\gamma\left(\sum_s \frac{a_s^+ a_{\bar s}^+}{E_s}\right)^2} |BCS> = <BCS| e^{-\frac{1}{2} b b} e^{-\frac{1}{2} b^+ b^+} |BCS> .$$

Введем в рассмотрение функцию

$$F(\lambda) = <BCS| e^{-\frac{\lambda}{2} bb} e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} |BCS>, \quad F(1) = <RPA|RPA> .$$

$$\frac{dF(\lambda)}{d(\lambda)} = -\frac{1}{2} <BCS| e^{-\frac{\lambda}{2} bb} bb \, e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} |BCS> + h.c. =$$

$$= -\frac{1}{2} <BCS| e^{-\frac{\lambda}{2} bb} e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} e^{\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} bb \, e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} |BCS> + h.c. =$$

$$= -\frac{1}{2} <BCS| e^{-\frac{\lambda}{2} bb} e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} \left\{ bb - \frac{\lambda}{2}[bb, b^+ b^+] + \frac{\lambda^2}{8}[[bb, b^+ b^+], b^+ b^+] \right\} |BCS> +$$

$$+ h.c. = -\frac{1}{2} <BCS| e^{-\frac{\lambda}{2} bb} e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} \left\{ bb - \lambda - 2\lambda b^+ b + \lambda^2 b^+ b^+ \right\} |BCS> + h.c. =$$

$$= -\frac{1}{2} <BCS| e^{-\frac{\lambda}{2} bb} \left\{ -\lambda + \lambda^2 b^+ b^+ \right\} e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} |BCS> + h.c. =$$

$$= -\frac{1}{2} <BCS| e^{-\frac{\lambda}{2} bb} (-2\lambda + \lambda^2 b^+ b^+ + \lambda^2 bb) \, e^{-\frac{\lambda}{2} b^+ b^+} |BCS> =$$

$$= \lambda F(\lambda) + \lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda},$$

$$F(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{1-\lambda^2}}. \qquad \langle RPA|RPA\rangle = \lim_{\lambda\to 1} F(\lambda) = \infty .$$

Приложение 3.

Известно /1/, что в RPA оператор $a_s^+ a_s + a_{\bar s}^+ a_{\bar s}$ эквивалентен оператору $2a_s^+ a_{\bar s}^+ \cdot a_{\bar s} a_s$. Тогда

$$\langle RPA|a_s^+ a_s + a_s^+ a_s|RPA\rangle = 2\langle RPA|a_s^+ a_{\bar s}^+ \cdot a_{\bar s} a_s|RPA\rangle =$$

$$= 2\langle BCS|\, e^{-\gamma\left(\sum_v \frac{a_{\bar v} a_v}{E_v}\right)^2} a_s^+ a_{\bar s}^+ e^{\gamma\left(\sum_v \frac{a_{\bar v} a_v}{E_v}\right)^2} e^{-\gamma\left(\sum_v \frac{a_{\bar v} a_v}{E_v}\right)^2} e^{-\gamma\left(\sum_v \frac{a_v^+ a_{\bar v}^+}{E_v}\right)^2} \times$$

$$\times e^{\gamma\left(\sum_v \frac{a_v^+ a_{\bar v}^+}{E_v}\right)} a_{\bar s} a_s e^{-\gamma\left(\sum_v \frac{a_v^+ a_{\bar v}^+}{E_v}\right)} |BCS\rangle =$$

$$= 2\langle RPA|\left(-2\gamma \frac{1}{E_s}\right)^2 \sum_\mu \frac{a_{\bar\mu} a_\mu}{E_\mu} \sum_v \frac{a_v^+ a_{\bar v}^+}{E_v} |RPA\rangle =$$

$$= \frac{4\gamma}{E_s^2} \langle BCS|\, e^{-\frac{1}{2} bb}\, bb\, e^{-\frac{1}{2} b^+ b^+} |BCS\rangle .$$

Так как

$$b\, e^{-\frac{1}{2} b^+ b^+} |BCS\rangle = -b^+ e^{-\frac{1}{2} b^+ b^+} |BCS\rangle ,$$

$$\langle RPA|a_s^+ a_s + a_{\bar s}^+ a_{\bar s}|RPA\rangle = -\frac{2\gamma}{E_s^2} \langle BCS|\, e^{-\frac{1}{2} bb} (bb + b^+ b^+)\, e^{-\frac{1}{2} b^+ b^+} |BCS\rangle =$$

$$= \frac{4\gamma}{E_s^2} \lim_{\lambda\to 1} \frac{dF(\lambda)}{d\lambda}$$

$$\frac{\langle RPA|a_s^+ a_s + a_{\bar s}^+ a_{\bar s}|RPA\rangle}{\langle RPA|RPA\rangle} = \frac{4\gamma}{E_s^2} \lim_{\lambda\to 1} \frac{d \ln F(\lambda)}{d\lambda} = \frac{4\gamma}{E_s^2} \lim_{\lambda\to 1} \frac{1}{1-\lambda^2} = \infty$$

Приложение 4.

В представлении собственных функций оператора $(\hat{N} - \langle\hat{N}\rangle)$:

$$(\hat{N} - \langle\hat{N}\rangle)\,\psi_n = n\,\psi_n\,, \qquad \psi_n = e^{in\phi}$$

матричные элементы угла ϕ равны

$$\phi_{nm} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} e^{i\phi(m-n)}\,\phi\,d\phi = \begin{cases} \dfrac{i(-1)^{m-n}}{m-n} & m \neq n \\ 0 & m = n\,. \end{cases}$$

Тогда

$$[(\hat{N} - \langle\hat{N}\rangle), \phi]_{nm} = \sum_k (\hat{N} - \langle\hat{N}\rangle)_{nk}\,\phi_{km} - \sum_k \phi_{nk}\,(\hat{N} - \langle\hat{N}\rangle)_{km} =$$

$$= (n-m)\,\phi_{nm} = \begin{cases} i(-1)^{m-n} & m \neq n \\ 0 & m = n \end{cases}$$

т.е.

$$[\hat{N} - \langle\hat{N}\rangle, \phi] \neq -i\,.$$

Литература

1. M. Baranger, Phys.Rev. 120, 957 (1960).
2. D.J.Thouless, Nucl,Phys. 22, 78 (1961).
3. D.J.Thouless and J.G.Valatin, Nucl.Phys. 31,211 (1962).
4. E.R.Marshalek and J.Weneser, Ann. of Physics, 53,569 (1969).
5. P.Jordan, Z.Phys. 44,1 (1927).
6. I.N.Miklailov, E.Nadjakov, Preprint ICTP (1969),IC/69/20.
7. С.Т.Беляев, В.Г.Зелевинский, ЯФ, 11, 741 (1970).
8. Д.Таулес. Квантовая механика систем многих частиц, ИЛ, 1963, стр. 147.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 февраля 1972 года.