объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P4-80-22

Х.Л.Молина

УЧЕТ ПРИНЦИПА ПАУЛИ В КВАЗИЧАСТИЧНО-ФОНОННОЙ МОДЕЛИ ЯДРА

Направлено в "Известия АН СССР" /сер. физ./

1980

Молина Х.Л.

Р4-80-22

Учет принципа Паули в квазичастично-фононной модели ядра

В рамках полумикроскопической теории ядра изучается влияние корреляции в основном состоянии на одно- и двухфононные состояния четно-четных деформированных ядер. Получено секулярное уравнение для однофононных возбуждений, учитывающее в среднем точные коммутационные соотношения между операторами квазичастиц. Предложено приближение, сводящее встречающиеся суммы по однофононному пространству к интегралу по параметру. Это приближение, заимствованное из метода силовых функций, может оказаться полезным при расчетах среднего числа квазичастиц в основном состоянии. Показано, что учет корреляции в основном состоянии может существенно влиять на норму двухфононных компонент волновой функции.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1980

Molina H.L.

P4-80-22

The Pauli Principle in Quasiparticle Phonon Nuclear Model

The influence of ground state correlation in one-

Квазичастично-фононная модель ядра, построенная в рамках полумикроскопической теории, сформулирована [1,2] в результате описания низколежащих состояний ядер как квазичастичных и однофононных, обобщения фононов и взаимодействия квазичастиц с фононами. Методы описания низколежащих состояний были обобщены и применены к изучению структуры состояний при промежуточных и высоких энергиях. Квазичастично-фононная модель корректно описывает одноквазичастичные и однофононные ядерные состояния, распределение сил таких состояний по энергетическим уровням промежуточных и высоких энергий. При этом свойства высоколежащих состояний описаны без свободных параметров, поскольку константы взаимодействий фиксированы при анализе низколежащих состояний. Большинство расчетов в рамках этой модели проделаны в квазибозонном приближении, при котором точное коммутационное соотношение [3]

$$[A_{ik}, A^+_{j\ell}] = \delta^s_{ikj\ell} - \frac{1}{2}\{\delta_{ij}B_{\ell k} + \delta_{k\ell}B_{ji} + \delta_{i\ell}B_{jk} + \delta_{kj}B_{\ell i}\},$$
$$\delta^s_{ikj\ell} \equiv \delta_{ij}\delta_{k\ell} + \delta_{i\ell}\delta_{kj} \qquad /1/$$

между операторами пар квазичастиц

$$A_{ik} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_\sigma \sigma\alpha_{k\sigma}\alpha_{i-\sigma} \quad \text{или} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_\sigma \alpha_{i\sigma}\alpha_{k\sigma}$$
$$B_{ik} = \sum_\sigma \alpha^+_{i\sigma}\alpha_{k\sigma} \quad \text{или} \quad \sum_\sigma \sigma\alpha^+_{i-\sigma}\alpha_{k\sigma} \qquad /2/$$

сводится к приближению

$$[A_{ik}, A^+_{j\ell}] = \langle 0|[A_{ik}, A^+_{j\ell}]|0\rangle = V_{ikj\ell}, \qquad /3/$$

$$\langle 0|B_{ik}|0\rangle = 0. \qquad /4/$$

Последнее условие означает пренебрежение корреляцией в основном состоянии $|0\rangle$. Таким образом, при построении однофононного базиса

$$Q^+_g|0\rangle = \{\frac{1}{2}\sum_{ik}\psi^g_{ik}A^+_{ik} - \phi^g_{ik}A_{ik}\}|0\rangle \qquad /5/$$

происходит частичное нарушение принципа Паули. Поскольку волновые функции в квазичастично-фононной модели ядра содержат компоненты квазичастицы плюс фонон, два фонона и т.д., происходит еще дополнительное нарушение принципа Паули. Учет точных перестановочных соотношений фононных операторов с пренебрежением корреляций в основном состоянии выполнен для деформированных ядер в работах [4-6]. В данной работе мы учтем эффект корреляции в основном состоянии, в однофононных и двухфононных состояниях четно-четных деформированных ядер. Для решения основной трудности, встречающейся при этом и связанной с суммированием по полному однофононному базису, предложено приближенное интегральное представление соответствующих сумм.

1. Рассмотрим гамильтониан, включающий симметризованные частично-дырочные взаимодействия

$$H_0 = \sum_i \epsilon(i) B_{ii} - \frac{1}{4}\sum_{\lambda\mu} \kappa^{\lambda} \Big[\sum_{ik} f^{\lambda\mu}_{ik} u_{ik} (A^+_{ik} + A_{ik})\Big]^2 , \qquad /6/$$

где $f^{\lambda\mu}_{ik}$ - матричные элементы от оператора мультипольного момента λ с проекцией μ, κ^{λ} - константа мультиполь-мультипольного взаимодействия, $\epsilon(i) = \sqrt{C^2 + (E(i)-\lambda')^2}$, где $E(i)$ - одночастичная энергия, C - корреляционная функция, λ' - химический потенциал, $u_{ik} = u_i v_k + u_k v_i$, где u_i, v_i - коэффициенты преобразования Боголюбова. Откажемся от условия /4/, тогда, используя уравнения движения

$$[P^g, H_0] = -i\omega_g X^g , \quad [X^g, H_0] = i\omega_g P^g ,$$
$$[X^g, P^{g'}] = i\delta_{gg'} , \qquad /7/$$

и написав

$$P^g = i\sum_{ik} P^g_{ik} (A^+_{ik} - A_{ik}) ,$$
$$X^g = \sum_{ik} X^g_{ik} (A^+_{ik} + A_{ik}) , \qquad /8/$$

нетрудно получить вид обобщенных координат и импульсов

$$P^g_{ik} = \frac{1}{\sqrt{2Y_g}} \frac{f^g_{ik}\epsilon_{ik} u_{ik}}{\epsilon^2_{ik} - \omega^2_g} , \quad X^g_{ik} = \frac{1}{\sqrt{2Y_g}} \frac{f^g_{ik}\omega_g u_{ik}}{\epsilon^2_{ik} - \omega^2_g} , \qquad /9/$$

$$Y_g = \frac{\omega_g}{2} \sum_{ikj\ell} \frac{f^g_{ik} V_{ikj\ell} u_{j\ell} \epsilon_{j\ell}}{\epsilon^2_{j\ell} - \omega^2_g} , \qquad /10/$$

где индекс $g = \lambda\mu n$, n - номер корня. С помощью /7/, /9/, /10/ найдем секулярное уравнение для собственных частот системы:

$$1 = \kappa^{\lambda} \sum_{ikj\ell} \frac{f^g_{ik} V_{ikj\ell} f^g_{j\ell} \epsilon_{j\ell} u_{j\ell}}{\epsilon^2_{j\ell} - \omega^2_g} . \qquad /11/$$

Оно должно решаться совместно с уравнением для $V_{ikj\ell}$, вытекающим из точного соотношения /1/. Однако в дальнейшем мы сделаем приближение

$$\langle 0 | B_{ik} | 0 \rangle = 0 , \quad i \neq k \qquad /12/$$

которое приводит к известному уравнению [7]

$$1 = \kappa^{\lambda} X(\omega\ \ ) , \qquad /13/$$

где

$$X(\omega_g) = 2\sum_{ik} \frac{(f^g_{ik})^2 \rho_{ik} \epsilon_{ik} u_{ik}}{\epsilon^2_{ik} - \omega^2_g} , \quad \rho_{ik} \equiv V_{ikik} .$$

Введем операторы фононов

$$Q^+_g = \frac{1}{2} \sum_{ik} \Psi^g_{ik} b^+_{ik} - \Phi^g_{ik} b_{ik} , \qquad /14/$$

где бозонные операторы b_{ik} имеют вид

$$b_{ik} = \frac{A_{ik}}{\sqrt{\rho_{ik}}} , \quad b^+_{ik} = \frac{A^+_{ik}}{\sqrt{\rho_{ik}}} . \qquad /15/$$

Тогда нетрудно получить из /1/ уравнение для ρ_{ik}:

$$\rho_{ik} = 1 - \frac{1}{2}\sum_{ns} \{ (\Phi^{\lambda\mu n}_{is})^2 + (\Phi^{\lambda\mu n}_{ks})^2 \} . \qquad /16/$$

Фононные амплитуды имеют вид

$$\Psi^g_{ik} = \frac{f^g_{ik}\sqrt{\rho_{ik}}\, u_{ik}}{\sqrt{2Y_g}(\epsilon_{ik} - \omega_g)} , \quad \Phi^g_{ik} = \frac{f^g_{ik}\sqrt{\rho_{ik}}\, u_{ik}}{\sqrt{2Y_g}(\epsilon_{ik} + \omega_g)} . \qquad /17/$$

Основная трудность нелинейного уравнения /16/ связана с суммированием по всем однофононным решениям системы, поэтому сведем эту сумму к интегралу, используя приближение, идентичное методу силовых функций [8,9,10]

$$\sum_n (\Phi^{\lambda\mu n}_{ik})^2 \simeq \sum_n \frac{\Delta}{2\pi} \int_0^\infty (\Phi^{\lambda\mu n}_{ik}(\omega))^2 \frac{d\omega}{(\omega-\omega_n)^2 + \Delta^2/4}, \qquad /18/$$

где Δ - параметр усреднения. Тогда после несложных преобразований получим следующее интегральное представление:

$$\sum_n (\Phi^{\lambda\mu n}_{ik})^2 \simeq \frac{2f^{\lambda\mu}_{ik}\rho_{ik}}{\pi} \operatorname{Im} \int_0^\infty \frac{d\omega}{(\epsilon_{ik}+\omega+i\Delta/2)(1/\kappa^\lambda - X(\omega+i\Delta/2))}. \qquad /19/$$

Как нетрудно видеть, сходимость интеграла обеспечена быстрым убыванием подынтегральной функции на бесконечности. Рассмотрим теперь двухфононные состояния $Q^+_{g_1}Q^+_{g_2}|0\rangle$. Учет принципа Паули можно проводить [4-6], вычисляя скалярные произведения

$$\langle Q_{g_1} Q_{g_2} Q^+_{g_3} Q^+_{g_4} \rangle = \delta^s_{g_1 g_2 g_3 g_4} + K(g_1 g_2 g_3 g_4). \qquad /20/$$

Учитывая точные коммутационные соотношения между фононными операторами, нетрудно получить вид величин $K(g_1 g_2 g_3 g_4)$:

$$K(g_1 g_2 g_3 g_4) = -\frac{1}{2} \sum_{q_1 q_2} T^{g_2 g_3}_{q_1 q_2} F^{g_4 g_1}_{q_1 q_2}, \qquad /21/$$

где

$$T^{g_2 g_3}_{q_1 q_2} = \sum_q \frac{1}{\sqrt{\rho_{qq_1}\rho_{qq_2}}} (\Psi^{g_2}_{qq_2}\Psi^{g_3}_{qq_1} - \Phi^{g_2}_{qq_1}\Phi^{g_3}_{qq_2}),$$

$$F^{g_4 g_1}_{q_1 q_2} = \sum \sqrt{\frac{\rho_{qq_2}}{\rho_{qq_1}}}\, \Psi^{g_4}_{qq_2}\Psi^{g_1}_{qq_1} + \sqrt{\frac{\rho_{qq_1}}{\rho_{qq_2}}}\, \Phi^{g_4}_{qq_1}\Phi^{g_1}_{qq_2}.$$

Как и следовало ожидать, /21/ отличается от полученного в работах [4-6] выражения для $K(g_1 g_2 g_3 g_4)$ лишь присутствием величины $\rho_{qq'}$.

Таким образом, учет корреляции в основном состоянии в диагональном приближении /12/ приводит к появлению величин $\rho_{qq'} \leq 1$ в секулярном уравнении для нахождения собственных мод системы. Это уравнение должно решаться совместно с условием /16/. Для решения задачи удобно использовать итерационный метод. Как показали численные расчеты, итерационный ряд сходится доста-

точно быстро, и в большинстве случаев можно ограничиться третьей итерацией. Большая трудность, которая представляет собой суммирование по однофононному пространству в уравнении для $\rho_{qq'}$, облегчается использованием интегрального представления /20/. В *табл.1* представлены нижайшие решения /13/ /столбец ω /, а также приближенные решения /столбец ω_R /, когда $\rho_{qq'} = 1$ для ядер ^{166}Er и ^{228}Th. Основное влияние корреляции в основном состоянии оказывают на нижайшие коллективные состояния. Сдвиг этого уровня для $\lambda\mu = 22$ - около 200 кэВ, для $\lambda\mu = 30$ - ~100 кэВ, для $\lambda\mu = 31, 32$ сдвиг незначителен.

Таблица 1

Энергии нижайших однофононных состояний ω и приближение $\omega_R(\rho_{qq'}=1)$

Ядро $\lambda\mu$ x	i	ω_R кэв	ω кэв	q	q'	$\rho_{qq'}$
^{166}Er	I	786	962	522	520	0,925
	2	2055	2058	52I	520	0,923
22	3	2302	2302			
2,54I0^{-3}	4	2400	2399			
	5	2594	2594			
^{166}Er	I	I663	I760	642	522	0,986
30	2	2207	2232	642	5I2	0,996
4,I5 I0^{-5}	3	2596	2624	403	523	0,993
	4	2900	2902	6I5	505	0,972
	5	3007	3008			
^{166}Er	I	I830	I834			
3I	2	2073	2078			
3,4II0^{-5}	3	2327	2328			
	4	2598	2599			
	5	2622	2662			
^{228}Th	I	977	I060	53I	530	0,982
22	2	2I33	2I34	752	770	0,97I
I,5 I0^{-3}	3	2308	2308	63I	630	0,966
	4	2389	2389	752	500	0,97I
	5	2437	2437			

В *табл.1* также представлены главные величины $\rho_{qq'}$, входящие в структуру первого коллективного состояния; состояния характеризованы асимптотическими квантовыми числами в модели Нильссона. Положение первого коллективного состояния можно фиксировать по экспериментальным данным и свести эффект корреляции в основном состоянии к перенормировке константы мультиполь-мультипольного взаимодействия. В *табл.2* представлены первые 2^+ состояния /столбец а/, в столбце δ - решения с $\rho_{qq'}=1$. Изменения κ невелики, и при этом спектре в обоих случаях идентичны. В той же таблице представлены значения приведенной вероятности электрических квадрупольных переходов в обоих вариантах. Видно, что изменение коллективности невелико по сравнению с расчетами в приближении $\rho_{qq'}=1$.

Таблица 2

Энергии и приведенные вероятности электрических переходов нижайших 2^+ состояний в ^{166}Er при $\rho_{qq'}<1$ и в приближении $\rho_{qq'}=1$ с разными κ^λ

i	ω_R $\varkappa=2{,}54\cdot10^{-3}$	ω $\varkappa=2{,}66\cdot10^{-3}$	$B(E2)_{sp}$ $\rho_{qq'}=1$	$B(E2)_{sp}$
I	786	786	3,44	3,59
2	2055	2053	0,I24	0,I22
3	2502	2302	0,00I2	0,00I3
4	2400	2396	0,323	0,304
5	2594	2593	0,0I05	0,0I02

Согласно выражению /20/, дополнительное нарушение принципа Паули имеет место при наличии двухфононных компонент в волновой функции возбужденного состояния. Как показано в работах /4,5/ при $\rho_{qq'}=1$, влияние принципа на свойства двухфононных состояний главным образом определяется величинами $K(gg'g'g)$. Эти величины определяют изменение нормы состояний $Q^+_g Q^+_{g'}|0\rangle$ и особенно велики, когда $g=g'$, если состояние $Q^+_g|0\rangle$ имеет структуру, близкую к двухквазичастичному состоянию. В этом случае $K(gggg)$ стремится к -1. При учете корреляции в основном состоянии ситуация может существенно меняться, поскольку, как видно из /21/, $K(gggg)$ будет стремиться к $-\rho^{-1}_{qq'}$. Если $\rho_{qq'}$ значительно отклоняется от единицы, то величина $K(gggg)$ может приближаться к максимально допустимому значению 2.

В *табл.3* показаны величины $K(gg'g'g)$, подсчитанные по формуле /21/ /третий столбец/, а также при $\rho_{qq'}=1$ /четвертый столбец/ для случая $\lambda\mu=22$ в ^{166}Er. Видно, что абсолютные значения $K(gg'g'g)$ увеличиваются при отклонении $\rho_{qq'}$ от единицы. В последней строке имеем дело с двухквазичастичным состоянием $Q^+_{223}Q^+_{223}|0\rangle$, для которого $\Psi_{512,520}=0{,}983$. Величина $\rho_{512,520}=0{,}901$ фактически определяет значение $K(223,223,223,223)=-1{,}10$.

Итак, в рамках квазичастично-фононной модели ядра можно корректно учесть эффекты антисимметризации волновой функции относительно перестановки квазичастиц.

Таблица 3

Изменение нормы двухфононных состояний $K(g_1 g_2 g_2 g_1)$ при $\rho_{qq'}<1$ и $\rho_{qq'}=1$ в ^{166}Er

g_1	g_2	$K(g_1 g_2 g_2 g_1)$	$K(g_1 g_2 g_2 g_1)$ $\rho_{qq'}=1$
22I	22I	- 0,698	-0,643
22I	222	-0,425	-0,383
22I	223	-0,445	-0,406
222	222	-0,963	-0,852
222	223	-0,5I6	-0,46I
223	223	-I,I06	-0,996

ЛИТЕРАТУРА

1. Соловьев В.Г. Влияние парных корреляций сверхпроводящего типа на свойства атомных ядер. Госатомиздат, М., 1963. Soloviev V.G. In: Selected Topics in Nuclear Theory. Vienna, IAEA, 1963, p.233.
2. Soloviev V.G. Atomic Energy Rev., 1965, v.3, No.2, p.117.
3. Соловьев В.Г. Теория сложных ядер. "Наука", М., 1971; Pergamon Press, Oxford, 1976.

4. Джолос Р.В., Молина Х.Л., Соловьев В.Г. ТМФ, 1979, т.40, №2, с.245.
5. Джолос Р.В., Молина Х.Л., Соловьев В.Г. ОИЯИ, Р4-12603, Дубна, 1979.
6. Соловьев В.Г. ОИЯИ, Е4-12623, Дубна, 1979.
7. Hara K. Progr. Theor.Phys., 1967, 32, p.88.
8. Bohr A., Mottelson B. Nuclear Structure. Benjamin, New York, 1969, v.1;
Русский перевод. "Мир", М., 1971.
9. Малов Л.А., Нестеренко В.О., Соловьев В.Г. ТМФ, 1977, т.32, №1, с.134.
10. Молина Х.Л., Михайлов И.Н., Назмитдинов Р.Г. ОИЯИ, Р4-12034, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 января 1980 года.