ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4 - 8777

Г.Очирбат

К ВЫЧИСЛЕНИЮ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОДНОЧАСТИЧНЫХ СИЛ СОСТОЯНИЙ

1975

P4 - 8777

Г.Очирбат

К ВЫЧИСЛЕНИЮ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОДНОЧАСТИЧНЫХ СИЛ СОСТОЯНИЙ

Направлено в ТМФ

Очирбат Г. Р4 - 8777

К вычислению распределения одночастичных сил состояний

Метод функции Грина применен к вычислению фрагментации одночастичных состояний по ядерным уровням. Получены цепочки уравнений для этих функций в модели, основанной на взаимодействии квазичастиц с фононами. Замечено, что обрыву этой цепочки уравнений выбросом высших функций Грина соответствует приближение, сводящееся к выбросу высших компонент волновой функции в вариационном методе. Обсуждены одно- и двухфононное приближения. Отмечено удобство метода функции Грина для данной задачи.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований

Дубна 1975

Ochirbat G. P4 - 8777

Calculation of Distribution of Single-Particle State Forces

The method of Green's function has been applied to calculate the distribution of single-particle states among actual nuclear levels. A chain of equations for these functions has been obtained in a model of interacting phonons and quasiparticles. We noticed that neglecting the higher-order Green's function and thus cutting the chain of equations corresponds to neglecting the higher-order components of the wave function in the variational methods. The one- and two-phonon approximations are discussed and the convenience of the Green's function method for this case is demonstrated.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research

Dubna 1975

Простые квазичастичные и фононные состояния в средних и тяжелых ядрах являются достаточно чистыми лишь в низколежащей области возбуждения. С ростом энергии возбуждения из-за взаимодействия они перестают быть хорошо определенными состояниями и фрагментируются по многим ядерным уровням [1].

Фрагментацию простых состояний по ядерным уровням более детально описывают в терминах распределения силы состояния или силовой функции, представляющей собой усредненную около каждого значения энергии вероятность состояний. Непосредственное определение силовых функций, на основании полумикроскопического механизма взаимодействия, ответственного за фрагментацию, является важной задачей структуры ядер. Этому вопросу посвящены работы [2,3].

Целью настоящей работы является применение метода функции Грина [4,5] к вычислению фрагментации одночастичных состояний в рамках модели, основанной, как и в [2,3], на взаимодействии квазичастиц с фононами.

1. Исходные положения и обозначения

Гамильтониан, описывающий взаимодействие между нуклонами в ядре, запишем в следующем виде [6]:

$$H = H_{av} + H_{pair} + H_Q ; \qquad (1)$$

Здесь H_{av} – среднее поле нейтронной и протонной систем, H_{pair} – взаимодействия, приводящие к парным корреляциям сверхпроводящего типа, H_Q – мультиполь-мультипольное взаимодействие.

Рассмотрим нечетное по A деформированное ядро. Считаем, что в нечетном A ядре фононы и константы мультиполь-мультипольных взаимодействий такие же, как в четно-четном ядре с $A-1$.

Использованы следующие обозначения[6]: Q_g, ω_g, Y_g – оператор рождения, энергия и характеристики фонона; через g обозначена $\lambda\mu j$, причем $q\equiv\lambda\mu$; j – номер корня секулярного уравнения для фонона; $\epsilon(q)$, $a^+_{q\sigma}$ – энергия и оператор рождения квазичастицы. Через $q\sigma$ обозначена совокупность квантовых чисел, характеризующих одночастичный уровень, $\sigma=\pm 1$.

$$\Gamma^g_{qq'}=1/2\, v_{qq'}\, f^g_{qq'}\, Y_g^{-1/2},\quad \overline{\Gamma}^g_{qq'}=1/2\, v_{qq'}\, \overline{f}^g_{qq'}\, Y_g^{-1/2}, \qquad (2)$$

где $f^i_{qq'}$, $\overline{f}^i_{qq'}$ – матричные элементы мультиполь-мультипольного взаимодействия, $v_{qq'}=u_q u_{q'}-v_q v_{q'}$, u_q, v_q – коэффициенты преобразования Боголюбова.

2. Связь функции Грина с фрагментацией состояний

Рассмотрим распределение по уровням нечетного ядра состояния $a^+_{q\sigma}|0)$, где $a^+_{q\sigma}$ – оператор рождения частицы, скажем, нейтрона, $|0)$ – волновая функция основного состояния четно-четного ядра, которую определяем как квазичастичный и фононный вакуум.

В дальнейшем мы можем иметь задачу вычисления одноквазичастичной силы:

$$S_{q\sigma}(n)=|\langle n|a^+_{q\sigma}|0\rangle|^2, \qquad (3)$$

$|n\rangle$ – собственный вектор гамильтониана (1), так как

$$a^+_{q\sigma}|0)=u_q\, \alpha^+_{q\sigma}|0). \qquad (4)$$

Рассмотрим функции Грина:

$$G(t-t',q'\sigma'|q\sigma)=\frac{1}{i}\,\theta(t-t')(0|[\alpha_{q'\sigma'}(t),\alpha^+_{q\sigma}(t')]|0) \qquad (5.1)$$

$$G^g(t-t',q'\sigma'|q\sigma)=\frac{1}{i}\,\theta(t-t')(0|[\alpha_{q'\sigma'}(t)Q_g(t),\alpha^+_{q\sigma}(t')]|0) \qquad (5.2)$$

и т.д. Их спектральные представления:

$$G(t-t',q'\sigma'|q\sigma)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G(E,q'\sigma'|q\sigma)e^{-iE(t-t')}\,dE \qquad (6.1)$$

$$G^g(t-t',q'\sigma'|q\sigma)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G^g(E,q'\sigma'|q\sigma)e^{-iE(t-t')}\,dE \qquad (6.2)$$

и т.д. Заметим, что функция $G(E,q\sigma|q\sigma)$ содержит всю информацию, необходимую для нашей задачи, так как

$$G(E,q\sigma|q\sigma)=\sum_n\frac{|\langle n|\alpha^+_{q\sigma}|0\rangle|^2}{E-E_n+i\epsilon}, \qquad (7)$$

и остальные спектральные функции соответствуют всевозможным корреляционным эффектам, которых мы не рассматриваем в этой работе. Однако функция $G(E,q\sigma|q\sigma)$ связана с некоторыми другими функциями, которые в свою очередь выражаются через более сложные функции, так что для ее определения необходимо рассматривать систему уравнений:

$$(E-\epsilon_q)G(E,q'\sigma'|q\sigma)=\delta_{qq'}\delta_{\sigma\sigma'}-\sum_{q''}^{g}\Gamma^g_{q'q''}G^g(E,q''\sigma'|q\sigma)+$$
$$+\sigma'\sum_{q''}^{g}\overline{\Gamma}^g_{q'q''}G^g(E,q''-\sigma'|q\sigma) \qquad (8.1)$$

$$(E-\omega^g_q)G(E,q'\sigma'|q\sigma)=-\sum_{q''}\Gamma^g_{q''q'}G(E,q''\sigma'|q\sigma)+$$
$$+\sigma'\sum_{q''}\overline{\Gamma}^g_{q''q'}G(E,q''-\sigma'|q\sigma)-\sum_{q''}^{g'}\Gamma^g_{q'q''}G^{gg'}(E,q''\sigma'|q\sigma)+ \qquad (8.2)$$
$$+\sigma'\sum_{q''}^{g'}\overline{\Gamma}^g_{q'g}G^{gg'}(E,q''-\sigma'|q\sigma)$$

где

$$\omega^{g}_{q'} = \omega_{g} + \epsilon_{q'}, \quad \omega^{gg'}_{q'} = \omega_{g} + \omega_{g'} + \epsilon_{q'} . \tag{9}$$

Введя величины

$$-\sigma' G(E', q'' - \sigma' | q\sigma) = \bar{G}(E, q'' | q) \tag{10}$$

$$G(E, q''\sigma | q\sigma) = G(E, q'' | q) \tag{11}$$

и т.д. и затем перейдя к единым обозначениям с помощью фаз δ [7], запишем, что

$$(E - \epsilon_{q'}) G(E, q' | q) + \sum_{q''}^{g} \delta\, \Gamma^{g}_{q'q''} G^{g}(E, q'' | q) = \delta_{qq'} \delta_{\sigma\sigma'} \tag{12.1}$$

$$(E - \omega^{g}_{q'}) G^{g}(E, q' | q) + \sum_{q''} \delta\, \Gamma^{g}_{q'q''} G(E, q'' | q) + \sum_{q''}^{g'} \delta\, \Gamma^{g'}_{q'q''} G^{gg'}(E, q' | q) = 0 \tag{12.2}$$

и т.д.

Решение для $G(E, q | q)$:

$$G(E, q, q) = \frac{D_{q\sigma}}{D} \tag{13}$$

где D – определитель матрицы системы (12.1), (12.2) и т.д., $D_{q\sigma}$ – определитель матрицы, полученной из матрицы системы (13) вычеркиванием одного столбца и одной строки, на пересечении которых лежит элемент $E - \epsilon_q$.

Для полюса E_n функции Грина получаем уравнение

$$D = 0, \tag{14}$$

а для вероятности состояния:

$$S_{q\sigma}(n) = \frac{D_{q\sigma}(E_n)}{D'(E_n)}, \tag{15}$$

где

$$D'(E_n) = \frac{\partial}{\partial E} D(E) \Big|_{E = E_n} . \tag{16}$$

Однако из-за огромного числа смещающихся состояний при средних и высоких энергиях возбуждения невозможно точно вычислить D и $D_{q\sigma}$, и приходится поэтому довольствоваться приближенным решением в этой области возбуждения.

Для сравнения с вариационным методом приведем уравнения, полученные этим методом.

Для нормированной волновой функции вида:

$$\Psi(k^{\pi}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\sum_{\rho} C_{\rho\sigma} a^{+}_{\rho\sigma} + \sum_{q\sigma}^{g} D^{g}_{q\sigma} a^{+}_{q\sigma} Q^{+}_{g} + \sum_{q\sigma}^{gg'} F^{gg'}_{q\sigma} a^{+}_{q\sigma} Q^{+}_{g} Q^{+}_{g'} + \ldots \Big)$$

(здесь сумма берется по всем возможным состояниям с данной четностью π и спина K) вариационный принцип даст [8]

$$(E - \epsilon_{q'}) C_{q'} + \sum_{q''}^{g} \delta\, \Gamma^{g}_{q'q''} D^{g}_{q''} = 0, \tag{18.1}$$

$$(E - \omega^{g}_{q'}) D^{g}_{q'} + \sum_{q''} \delta\, \Gamma^{g}_{q'q''} C_{q''} + \sum_{q''}^{g'} \delta\, \Gamma^{g'}_{q'q''} F^{gg'}_{q''} = 0 \tag{18.2}$$

и т.д. Сравнивая систему (13) с (19), мы увидим, что при преобразовании

$$G(E, q' | q) \to C_{q'}, \; G^{g}(E, q' | q) \to D^{g}_{q'}, \; G^{gg'}(E, q' | q) \to 2 F^{gg'}_{q'}$$

и т.д.

Левая часть (12.1), (12.2) и т.д. переходит в левую часть (18.1), (18.2) и т.д. Это означает, что полюса функции Грина соответствуют решениям секулярного уравнения последней системы и обрыву цепочки уравнений для функций Грина выбросом высших функций Грина соответствует приближение, сводящееся к выбросу высших компонент волновой функции вида (17).

Отметим, что функция Грина $G(E,q|q)$ более удобна для задачи вычисления сил состояний, поскольку она выражается через них (см. (7)).

Теперь переходим к вопросу приближенного решения системы (12).

Поскольку квазичастичное состояние прямо связано с состоянием квазичастица + фонон, и только через них оно связывается с состоянием квазичастица + два фонона, посредством которых оно дальше может вступать в связь с состояниями квазичастица + три фонона, ожидается, что непрямая связь с состояниями типа квазичастица + два (и больше двух) фонона не сильно влияет на распределение состояния.

Ввиду этого обстоятельства при вычислении вероятности квазичастичного состояния принимается в (12) приближение, где опускается либо $G^{gg'}$, либо $G^{gg'g''}$, что и соответствует или однофононному, или двухфононному приближениям для системы (18)[2].

Рассмотрим однофононное приближение

$$(E-\epsilon_{q'})G(E,q'|q)+\sum_{q''}^{g}\delta\Gamma^{g}_{q'q''}G^{g}(E,q''|q)=\delta_{qq'}\delta_{\sigma\sigma'} \qquad (19)$$

$$(E-\omega^{g}_{q'})G^{g}(E,q'|q)+\sum_{q''}\delta\,\Gamma^{g}_{q'q''}G(E,q''|q)=0. \qquad (20)$$

Отметим, что здесь число неизвестных все еще велико, так как в (19) и (20) фигурируют не только квазичастицы с данным K^{π}, но и состояния типа квазичастица + фонон с тем же K^{π}. Из формул (19) и (20) имеем:

$$(E-\epsilon_{q'})G(E,q'|q)+\sum_{q''}\Pi_{q'q''}G(E,q''|q)=\delta_{qq'}\delta_{\sigma\sigma'}, \qquad (21)$$

где

$$\Pi_{q'q''}=-\sum_{q_s}^{g}\frac{\Gamma^{g}_{q'q_s}\Gamma^{g}_{q_sq''}}{E-\omega^{g}_{q_s}}. \qquad (22)$$

Если в этой системе пренебречь членами, содержащими некогерентную сумму $\Pi_{q'q''}$ при $q'\neq q''$, то

$$G(E,q|q)\equiv G_0(E,q,q)=\frac{1}{E-\epsilon_q+\Pi_{qq}}. \qquad (23)$$

Это же приближение учитывает прямое взаимодействие квазичастицы с состояниями квазичастица + фонон.

Из (23) следует

$$S_{q\sigma}(n)=\frac{1}{1+\sum_{q'}^{g}\frac{(\Gamma^{g}_{qq'})^2}{(E_n-\omega^{g}_{q'})^2}}, \qquad (24)$$

где E_n – корень уравнения

$$\tilde{\epsilon}_q\equiv E-\epsilon_q+\Pi_{qq}=0. \qquad (25)$$

Формула (24) получена впервые в работе[9] и была использована при расчете нейтронных силовых функций в[2].

Итерируя (22), находим:

$$G(E,q|q)=G_0(E,q|q)+G_1(E,q|q)+\dots, \qquad (26)$$

где

$$G_1(E,q|q)=\sum_{q'}\frac{\Pi_{qq'}\Pi_{q'q}}{\tilde{\epsilon}_q\tilde{\epsilon}_{q'}\tilde{\epsilon}_q};\quad G_2(E,q|q)=\sum_{q'q''}\frac{\Pi_{qq'}\Pi_{q'q''}\Pi_{q''q}}{\tilde{\epsilon}^2_q\tilde{\epsilon}_{q'}\tilde{\epsilon}_{q''}}. \qquad (27)$$

Производя суммирование, перепишем (26) в виде:

$$G(E,q|q)=\frac{1}{\tilde{\epsilon}_q}+\frac{1}{\hat{\epsilon}^2_q}\sum_{q'\neq q}\frac{P^2_{q'}}{\tilde{\epsilon}_{q'}}. \qquad (28)$$

Здесь

$$P_{q'} = \Pi_{qq'} + \sum_{q'' \neq q'} \frac{\Pi_{qq''}\Pi_{q''q'}}{\tilde{\epsilon}_{q''}} + \dots \qquad (29)$$

Функции $G_1(E,q|q)$, $G_2(E,q|q)$, ... учитывают взаимодействие квазичастицы a^+ с остальными квазичастицами, которое осуществляется через состояние типа квазичастица + фонон. Вклад этого взаимодействия, как явствует из (28), не ниже четвертого порядка по матричным элементам. Строго говоря, когда учитывается величина $P^2_{q'}$, необходимо рассматривать двухфононное приближение, причем здесь имеет смысл оставить только первый член в (29). К тому же в двухфононном приближении в правой части (28) должен появиться член, описывающий связь квазичастицы с состояниями типа квазичастица + два фонона:

$$\frac{1}{\tilde{\epsilon}_q(\epsilon_q - E)} \sum_{q_1 q_2 q_3}^{gg'} \left(\frac{\delta' f^{g'}_{qq_1} f^{g'}_{q_1q_2} f^{g'}_{q_2q_3} f^{g}_{q_3q}}{(\omega^g_{q_1} - E)(\omega^{gg'}_{q_2} - E)\tilde{\omega}^g_{q_3}} + \frac{\delta' f^{g}_{qq_1} f^{g'}_{q_1q_2} f^{g}_{q_2q_3} f^{g'}_{q_3q}}{(\omega^g_{q_1} - E)(\omega^{gg'}_{q_2} - E)\tilde{\omega}^{g'}_{q_3}} \right) \qquad (30)$$

где $\delta' = \pm 1$ и зависит от введенной выше фазы δ,

$$\tilde{\omega}^g_{q_3} \equiv \omega^g_{q_3} - E - \sum_{q'} \frac{(\Gamma^{g'}_{q,q'})^2 (1 + \delta^{gg'})}{\omega^{gg'}_{q'} - E}.$$

Мы рассмотрели вопрос о вычислении вероятности состояний, для которого обязательно решение секулярного уравнения (15). Когда число уровней настолько велико, что имеет смысл говорить о вероятности, приходящейся на единичный энергетический интервал, удобно переходить к более грубому описанию фрагментации на языке силовой функции.

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность Л.А.Малову и В.Г.Соловьеву за советы.

Литература

1. В.Г.Соловьев. Изв. АН СССР. сер. физ., 35, 666 (1971).
2. Л.А.Малов, В.Г.Соловьев. Препринт ОИЯИ, Е4-8558, Дубна, 1975.
3. Л.А.Малов, В.О.Нестеренко, В.Г.Соловьев. Препринт ОИЯИ, Р4-8499, Дубна, 1975.
4. Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов. ДАН СССР №6, 53 (1959).
5. Д.Н.Зубарев. УФН, 71, 71 (1960).
6. В.Г.Соловьев. Теория сложных ядер. М., Наука, 1971.
7. Л.А.Малов, В.Г.Соловьев. Препринт ОИЯИ, Р4-7639, Дубна, 1973.
8. Л.А.Малов, Г.Очирбат. Препринт ОИЯИ, Р4-8492, Дубна, 1974.
9. V.G.Soloviev. Phys.Lett., 16,308 (1965).

Рукопись поступила в издательский отдел
9 апреля 1975 года.