

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



23/11-76

P4 - 9339

Д-421

626/2-76

Р.В.Джолос, Д.Янссен

МЕТОД РАСЧЕТА МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
МИКРОСКОПИЧЕСКОГО ГАМИЛЬТониАНА ЯДРА
В ПРОСТРАНСТВЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ
ФЕРМИОННЫХ СОСТОЯНИЙ

1975

P4 - 9339

Р.В.Джолос, Д.Янссен

**МЕТОД РАСЧЕТА МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
МИКРОСКОПИЧЕСКОГО ГАМИЛЬТОНИАНА ЯДРА
В ПРОСТРАНСТВЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ
ФЕРМИОННЫХ СОСТОЯНИЙ**

Направлено в Изв. АН СССР (сер. физ.)

ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальную информацию о коллективных квадрупольных возбуждениях ядер можно условно разделить на две части. К первой отнесем коллективные состояния, о которых можно сказать, что они являются возбуждениями того же самосогласованного поля, к которому относится и основное состояние ядра. Коллективное движение в таких состояниях, как правило, имеет сложный характер и не сводится ни к гармоническим колебаниям, ни к идеальным вращениям. Ко второй части отнесем коллективные квадрупольные возбуждения, основанные на двухквазичастичных состояниях или на состояниях с иной равновесной деформацией, чем основное. Описание этих состояний требует рассмотрения не только коллективных, но и одночастичных степеней свободы ядра.

Не исключено, однако, что даже в состояниях, отнесенных к первой группе, происходит постепенное изменение структуры коллективной переменной с ростом энергии возбуждения^{/1/}. Учет этого эффекта, по существу, требует рассмотрения связи определенных первоначально коллективных переменных с одночастичными степенями свободы.

В этой работе мы предполагаем, что микроскопическая структура коллективной переменной слабо меняется с ростом энергии возбуждения. Метод, развитый ниже, позволит вычислять матричные элементы микроскопического гамильтониана ядра между коллективными состояниями, т.е. построить коллективный гамильтониан, не используя явным образом представления фермионных операторов через операторы коллективных бозонов. Это

устранит неоднозначность при учете ряда членов в микроскопическом гамильтониане, возникающую при использовании приближенных бозонных разложений. Подобный метод развивался в работе /2/, где, однако, не был учтен принцип Паули. Метод, развитый в данной работе, позволяет приближенно учесть принцип Паули.

МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ КОЛЛЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА

1. Пространство коллективных фермионных состояний

При относительно малых изменениях коллективных параметров ядра, таких, как деформация, волновая функция коллективных состояний записывается весьма простым образом. Например, в методе генератора координат она имеет следующий вид:

$$\Psi = \int da_{-2} da_{-1} da_0 da_1 da_2 F(a) \exp \left\{ \sum_{\mu=-2}^2 a_{\mu}^* A_{2\mu}^+ \right\}.$$

где $A_{2\mu}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\rho\nu} \psi_{\rho\nu} [a_{\rho}^+ a_{\nu}^+]_{2\mu}$; a_{ν}^+ - оператор рождения квазичастицы в состоянии ν .

Отсюда следует, что пространство векторов состояний, в котором ищется волновая функция ядра, может быть построено при помощи только операторов $A_{2\mu}^+$.

Все пять компонент оператора $A_{2\mu}^+$ линейно независимы и коммутируют друг с другом в полной аналогии с компонентами оператора квадрупольного фонона $b_{2\mu}^+$. Этой аналогией можно воспользоваться для построения базиса коллективных фермионных состояний.

Состояния, построенные при помощи операторов $b_{2\mu}^+$, однозначно определяются пятью квантовыми числами, в качестве которых используются собственные значения операторов:

$$\hat{N}_B = \sum_{\mu} b_{2\mu}^+ b_{2\mu}, \quad \hat{I}_B^2 = 10 \sum_{\mu} (-)^{\mu} [b_{2\mu}^+ b_{2\mu}]_{4\mu} [b_{2\mu}^+ b_{2\mu}]_{1-\mu}$$

$$(\hat{I}_B)_z = \sqrt{10} [b_{2\mu}^+ b_{2\mu}]_{10},$$

$$\hat{T}_B^2 = 2! \sum_{\mu} (-)^{\mu} [b_2^+ b_2]_{3-\mu} [b_2^+ b_2]_{3\mu} + \sum_{\mu} (-)^{\mu} [b_2^+ b_2]_{\mu} [b_2^+ b_2]_{1-\mu},$$

$$\hat{\Omega} = \sum_{\mu} (-)^{\mu} \{ [b_2^+ b_2]_{3\mu} [b_2^+ b_2]_{1-\mu} \}_{2\mu} \{ [b_2^+ b_2]_{3\mu} [b_2^+ b_2]_{1-\mu} \}_{2-\mu}. \quad /1/$$

Физический смысл операторов \hat{N}_B , \hat{T}_B^2 , $(\hat{I}_B)_z$ хорошо известен. Собственные значения \hat{T}_B^2 можно записать следующим образом:

$$v(v+3).$$

где v - положительное целое число, называемое сеньорити. В случае гамильтониана Бора-Моттельсона сеньорити является хорошим квантовым числом, если потенциальная энергия не зависит от γ . Оператор $\hat{\Omega}_B$ необходим для полного определения фононных состояний.

Так как все пять операторов $\Lambda_{2\mu}^+$ линейно независимы и коммутируют друг с другом, то в принципе можно однозначным образом определить операторы \hat{N}_F , \hat{T}_F^2 , $(\hat{I}_F)_z$, \hat{T}_F^2 , $\hat{\Omega}_F$ требованием, чтобы они действовали на фермионные состояния $|\mu_1 \dots \mu_n\rangle_F = \Lambda_{\mu_1}^+ \dots \Lambda_{\mu_n}^+ |0\rangle$ таким же образом, как бозонные операторы /1/ на соответствующие бозонные состояния $|\mu_1 \dots \mu_n\rangle_B = b_{\mu_1}^+ \dots b_{\mu_n}^+ |0\rangle$. Это означает, что набор фермионных состояний $|\mu_1 \dots \mu_n\rangle_F$ эк-

вивалентен набору фермионных состояний $|N, \Omega, M\rangle$, характеризуемых квантовыми числами: N - число операторов $\Lambda_{2\mu}^+$; v - сеньорити; I, M - момент и его проекция, Ω - дополнительное квантовое число. Состояния $|N, \Omega, M\rangle$ формируют в нашем случае пространство коллективных фермионных состояний.

Нужно, однако, помнить об отличии фермионных коллективных состояний от соответствующих бозонных. Если пространство бозонных состояний неограниченно, то пространство коллективных фермионных состояний конечно /при ограниченном пространстве одночастичных фермионных состояний/. Границы пространства коллективных фермионных состояний будут определяться амплитудами $\psi_{\rho\nu}$.

2. Вычисление матричных элементов микроскопического гамильтониана

Микроскопический гамильтониан ядра можно записать следующим образом:

$$H = H_{11} + (H_{40} + \text{h.c.}) + (H_{31} + \text{h.c.}) + H_{22},$$

$$H_{11} = \sum_{\rho} \epsilon_{\rho} a_{\rho}^{\dagger} a_{\rho},$$

$$H_{40} = \sum_{\rho\rho', \nu\nu'} G_{40}(\rho\rho' | \nu\nu') a_{\rho}^{\dagger} a_{\rho'}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'},$$

$$H_{31} = \sum_{\rho\rho', \nu\nu'} G_{31}(\rho\rho' | \nu\nu') a_{\rho}^{\dagger} a_{\rho'}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger} (-)^{j_{\nu} + m_{\nu'}} a_{\bar{\nu}},$$

$$H_{22} = \sum_{\rho\rho', \nu\nu'} G_{22}(\rho\rho' | \nu\nu') a_{\rho}^{\dagger} a_{\rho'}^{\dagger} (-)^{j_{\nu} + m_{\nu'} + j_{\nu'} + m_{\nu}} a_{\nu} a_{\bar{\nu}} \dots /2/$$

Здесь ϵ_{ν} - однокванзичастичные энергии, ν - квантовые числа одночастичных состояний; $G_{ik}(\rho\rho' | \nu\nu')$ - матричные элементы взаимодействия. Набор квантовых чисел $\bar{\nu}$ отличается от ν изменением знака проекции момента.

Задача состоит в том, чтобы вычислить матричные элементы гамильтониана /2/ между коллективными состояниями, построенными в предыдущем разделе. Это нетрудно сделать точно для состояний с небольшими числами квазичастиц, но для вычисления матричных элементов между состояниями с большими значениями необходимо разработать приближенную процедуру.

Рассмотрим для примера матричные элементы от H_{40} . Это слагаемое в гамильтониане меняет N на две единицы, поэтому отличны от нуля только следующие матричные элементы:

$$\begin{aligned} &\langle N+2, \nu' \Omega' IM | H_{40} | N \nu \Omega IM \rangle = \\ &= \sum_K \langle N+2, \nu' \Omega' IM | [A_2^{\dagger} \dots A_2^{\dagger}]_{N \nu \Omega IM} | K \rangle \langle K | H_{40} | 0 \rangle, \end{aligned}$$

где $|K\rangle$ - полный набор четырехквазичастичных состояний с моментом $l = 0$. Среди состояний $|K\rangle$ есть коллективное $-[A_2^+ A_2^+]_{00} |0\rangle$. Матричный элемент $\langle K | H_{40} | 0 \rangle$ будет наибольшим, если $|K\rangle$ - коллективное состояние, поскольку в этом случае происходит когерентное усиление вкладов отдельных компонент волновой функции. Вследствие этого приближенно можно полагать:

$$\begin{aligned} \langle N+2, v' \Omega' | M | H_{40} | N v \Omega | M \rangle &\approx \\ &\approx \frac{1}{2} \mathcal{N}_{2000}^{-1} \langle N+2, v' \Omega' | M | [A_2^+ \dots A_2^+]_{N v \Omega | M} [A_2^+ A_2^+]_{00} | 0 \rangle \langle 0 | [A_2 A_2]_{00} H_{40} | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{N}_{2000}^{-1} \sqrt{(N+2)(N+1)} \times \\ &\times \sum_{v' \Omega'} \langle N v \Omega | 0, 2 | N+2, v' \Omega' | 0 \rangle \mathcal{N}_{N+2, v' \Omega'} \langle 0 | [A_2 A_2]_{00} H_{40} | 0 \rangle. \quad /3/ \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{N}_{N v \Omega} = \langle N v \Omega | M | N v \Omega | M \rangle.$$

Сравнение точного и рассчитанного по формуле /3/ матричного элемента при $N = 1$, проведенное на примере ^{126}Ba , показало, что отклонение приближенного результата от точного - около 1%. Расхождение, однако, будет увеличиваться с ростом N .

Таким образом, расчет произвольного матричного элемента гамильтониана сводится к вычислению нормировочного множителя $\mathcal{N}_{N v \Omega}$ и простейшего матричного элемента гамильтониана между состояниями с минимально возможными числами квазичастиц.

При использовании соотношения /3/ простейший матричный элемент вычисляется точно, а все остальные - приближенно. Можно последовательно улучшить это соотношение, так чтобы два или большее число простейших матричных элементов вычислялись точно.

Следует отметить, что при расчете матричных элементов от H_{31} необходима известная осторожность, поскольку эти матричные элементы не имеют когерентных частей. В этом случае могут оказаться существенными дополнительные слагаемые в правой части /3/.

И если эти дополнительные слагаемые не малы, то они могут явиться источником интересных качественных изменений в свойствах коллективных квадрупольных возбуждений. Бозонный образ Π_{31} , который при вычислении матричных элементов между бозонными состояниями дает то же выражение, что и полученное по аналогии с /3/, имеет следующую структуру:

$$\Pi_{31} = [[b_2^+ b_2^+]_2 b_2]_{00} \hat{F}, \quad /4/$$

где \hat{F} - эрмитовский оператор, диагональный в базисе $|N\nu\Omega IM\rangle_B$. Дополнительное слагаемое имело бы следующий бозонный образ:

$$\sum_{IM} \xi_1 [b_2^+ b_2^+ b_2^+]_{IM} [b_2 b_2]_{IM} \hat{F}. \quad /5/$$

При переходе от фононных операторов $b_{2\mu}^+$ к переменным β , γ , $\vec{\theta}$, выражение /4/ дает вклад в потенциальную энергию колебаний, пропорциональный $\beta^3 \cos 3\gamma$, а /5/ - пропорциональный $\beta^5 \cos 3\gamma$. Если константы при обоих выражениях одного знака, то /5/ эффективно можно учесть перенормировкой константы перед /4/. Если знаки констант различны и константа при выражении /5/ достаточно велика, то потенциальная энергия, имеющая, как функция β , два минимума, будет иметь более глубокий минимум при меньшей деформации. В результате может наблюдаться такое интересное явление, как изменение знака равновесной деформации при увеличении момента вращения. По-видимому, это явление обнаружено в легких изотопах Hg /3/.

ВЫЧИСЛЕНИЕ НОРМИРОВОЧНЫХ КОНСТАНТ

Расчет нормировочных констант коллективных фермионных состояний можно выполнить в различных приближениях, эффективность которых будет определяться конкретными условиями задачи.

В случае сильно коллективизированных состояний большое число амплитуд $\psi_{\rho\nu}$ отлично от нуля, и величина

на ω - число двухквазичастичных компонент, дающих вклад в оператор $A_{2\mu}^+$ много больше единицы.

Нормировочный коэффициент $\mathcal{N}_{N\nu\Omega}$ удовлетворяет следующему точному соотношению:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{N\nu\Omega} = & \sqrt{\Omega} \sum_{\nu' \Omega' I' M'} (N-1, \nu' \Omega' I'; 2 | N\nu\Omega \rangle)^2 \mathcal{N}_{N-1, \nu' \Omega' I' +} \\ & + \frac{\sqrt{N-1}}{2} \sum_{\substack{\nu'' \Omega'' I'' J \\ M'' \mu \nu \nu'}} (N-1, \nu' \Omega' I'; 2 | N\nu\Omega \rangle) (N-2, \nu'' \Omega'' I''; J, 2 | N\nu\Omega \rangle) C_{2\mu' I' M'}^{IM} \\ & * C_{2\nu' 2\nu}^{JM} C_{J\mu I' M}^{IM} \leq (N-1, \nu' \Omega' I' M' | [A^+ \dots A^+]_{N-2, \nu'' \Omega'' I'' M''} \times \\ & \times [[A_{2\mu} \rightarrow A_{2\nu}^+], A_{2\nu}^+] | 0 \rangle, \end{aligned} \quad /6/$$

где

$$(N-1, \nu' \Omega' I'; 2 | N\nu\Omega \rangle), (N-2, \nu'' \Omega'' I''; J, 2 | N\nu\Omega \rangle)$$

- генеалогические коэффициенты; $C_{j_m j_n}^{im}$ - коэффициенты Клебша-Гордона. Второе слагаемое в /6/ мало по сравнению с первым, так как двойной коммутатор имеет фактор малости порядка $\frac{1}{\omega}$. Поэтому второе слагаемое будем вычислять приближенно, выделяя в нем главную часть. Сделаем это следующим образом. Перед двойным коммутатором в /6/ поставим единичный оператор $\sum_K |K\rangle \langle K|$, где $|K\rangle$ в данном случае - полный набор двухквазичастичных состояний, среди которых есть и коллективное $A_{2\mu}^+ |0\rangle$. Приближение состоит в том, чтобы в сумме по „K” сохранить только коллективное состояние. Это эквивалентно выделению из суммы по одночастичным состояниям, которая возникает при расчете нормировочных коэффициентов, когерентной части. В результате для $\mathcal{N}_{N\nu\Omega}$ получается следующее рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{N\nu\Omega} = & \sum_{\nu' \Omega' I'} (N-1, \nu' \Omega' I'; 2 | N\nu\Omega \rangle)^2 \mathcal{N}_{N-1, \nu' \Omega' I' +} \\ & + (N-1) \sum (N-1, \nu' \Omega' I'; 2 | N\nu\Omega \rangle) (N-2, \nu'' \Omega'' I''; J, 2 | N\nu\Omega \rangle) \times \\ & \times [22(J) I'' I' | 22 I'' (I') I] * \\ & * (N-2, \nu'' \Omega'' I''; 2 | N-1, \nu' \Omega' I') C_J \mathcal{N}_{N-1, \nu' \Omega' I' +} \end{aligned}$$

где $[22(0)1^{-1}|221^{-1}(1^{-1})1]$ - коэффициент Рака

$$C_{J-1} = 1 - \frac{1}{2} < 0 [A_2 A_2]_{JM} [A_2^+ A_2^+]_{JM} | 0 \rangle, \quad /7/$$

Сравнение точного нормировочного коэффициента и рассчитанного по формуле /7/ для состояний с $N=3$, проведенное на примере ^{126}Ba , показало, что отклонение приближенного результата от точного менее 1%.

Расчет величины $\mathcal{N}_{N\nu\Omega}$ можно выполнить с помощью бозонных представлений фермионных операторов. С этой целью удобно использовать приближенные бозонные представления, полученные в /4/:

$$A_{2\mu}^+ \rightarrow \phi^{-1/2} b_{2\mu}^+ \phi^{1/2}, \quad /8/$$

где ϕ - эрмитовский оператор, диагональный в базисе $|N\nu\Omega\rangle_B$. Подставив /8/ в выражение для $\mathcal{N}_{N\nu\Omega}$, получаем следующий результат:

$$\mathcal{N}_{N\nu\Omega} = \phi^{-1} (N\nu\Omega). \quad /9/$$

Если предположить, что ϕ /а следовательно, и $\mathcal{N}_{N\nu\Omega}$ / зависит только от N и ν и искать выражение для ϕ в виде конечного ряда по степеням N и ν , то такое выражение может быть найдено /4/. Используя его и соотношение /9/, получим следующие рекуррентные формулы для $\mathcal{N}_{N\nu}$:

$$\frac{\mathcal{N}_{N+1, \nu+1}}{\mathcal{N}_{N\nu}} = \left(1 - \frac{N+\nu}{2K}\right) \left(1 - \frac{N}{L}\right),$$

$$\frac{\mathcal{N}_{N+1, \nu-1}}{\mathcal{N}_{N\nu}} = \left(1 - \frac{N-\nu-3}{2K}\right) \left(1 - \frac{N}{L}\right),$$

где K, L - константы.

В общем случае отношение $\mathcal{N}_{N+1, \nu+1} / \mathcal{N}_{N\nu}$ задается бесконечным рядом по степеням N , ν и L . Зная из решения модельных задач, как должно себя вести это отношение при больших значениях N и подбирая пара-

метры так, чтобы воспроизводить точные значения нормировочного коэффициента при $N=2,3$ можно построить функцию, удовлетворительным образом аппроксимирующую этот ряд.

КВАЗИРОТАЦИОННЫЕ ПОЛОСЫ, ПОСТРОЕННЫЕ НА ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЯХ ИЗОТОПОВ Se

На стр. 11 в качестве примера применения метода, развитого в настоящей работе, приведены теоретические и для сравнения - экспериментальные значения энергий уровней основных квазиротационных полос в $^{72,76,78}\text{Se}$. Теоретические результаты получены с использованием парных и квадрупольных остаточных сил и одночастичных состояний потенциала Саксона-Вудса со стандартным набором параметров. Константы парных сил фиксировались так, чтобы значения нейтронной Λ_n и протонной Λ_p корреляционных функций совпадали с результатами работы /5/.

Константа квадрупольных сил подбиралась так, чтобы удовлетворительным образом описать энергии первых 2^+ состояний. Следует подчеркнуть, что в наших расчетах зависимость энергии первого 2^+ состояния от константы квадрупольных сил оказалась значительно более слабой, чем в расчетах, выполненных в приближении хаотических фаз.

Согласие теоретических результатов с экспериментальными удовлетворительное. Однако в ^{72}Se расхождения между теоретическими и экспериментальными значениями энергий быстро возрастают с ростом углового момента.

ЛИТЕРАТУРА

1. С.Т.Беляев, В.Г.Зелевинский. ЯФ, 16, 1195, 1972.
2. H.Feshbach and F.Iachello. Ann. of Phys., 84, 211, 1974.

3. *S.Frauendorf, V.V.Pashkevich. Preprint JINR, E2-8087, Dubna, 1974.*
4. *D.Janssen, R.V.Jolos. Communications of JINR, E4-8692, Dubna, 1975.*
5. *L.S.Kislinger, R.A.Sorensen. Rev.Mod.Phys., 35, 853, 1963.*

*Рукопись поступила в издательский отдел
25 ноября 1975 года.*