

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4-99-234

А.Н.Стороженко, А.И.Вдовин

ОБОБЩЕННОЕ ТЕПЛОВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ
СЛУЧАЙНОЙ ФАЗЫ НА ПРИМЕРЕ
МОДЕЛИ ЛИПКИНА

1999

Обобщенное тепловое приближение случайной фазы на примере модели Липкина

На примере модели Липкина исследованы возможности ранее предложенного нами теплового обобщенного приближения случайной фазы (ТОПСФ). Для этой модели получена система нелинейных уравнений, связывающих между собой параметр преобразования Хартри — Фока, энергии хартри-фоковских квазичастиц, энергию фононного возбуждения, амплитуды его волновой функции и среднее число тепловых квазичастиц в вакууме тепловых фононов (основном тепловом состоянии системы). Рассчитана зависимость от температуры T внутренней энергии системы $\langle H \rangle$ и чисел заполнения одночастичных уровней. С формальной точки зрения ТОПСФ работает лучше других приближений при всех T и любой силе взаимодействия. Однако наиболее заметны его преимущества в той области T , где происходит перестройка среднего поля (фазовый переход). В ТОПСФ температура фазового перехода оказывается ниже, чем в других приближениях. Кроме того, ТОПСФ с хорошей точностью описывает поведение $\langle H \rangle$ и без перехода в «деформированную» фазу. Причина этого в согласованном изменении коллективных и хартри-фоковских переменных.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им.Н.Н.Боголюбова ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1999

Перевод авторов

Storozhenko A.N., Vdovin A.I.

P4-99-234

A Generalized Thermal Random Phase Approximation with the Lipkin Model

An accuracy and a range of validity of the recently proposed generalized thermal random phase approximation (GTRPA) are studied by comparing with the exact grand canonical calculations for the two-level Lipkin model. A system of nonlinear equations that couple a parameter of the Hartree — Fock (HF) transformation, energies of HF quasiparticles, energy of collective phonon excitation, amplitudes of a phonon wave function and a number of thermal quasiparticles in a thermal vacuum state (or a ground thermal state of the heated Lipkin system) is evaluated. The dependence of the intrinsic energy $\langle H \rangle$ on the temperature T is calculated. At all temperatures and all values of a coupling strength GTRPA gives better results than other approximations (e.g. the thermal HF method or the thermal RPA or the thermal renormalized RPA). Advantages of GTRPA are most obvious at the values of T near the phase transition point. In GTRPA the phase transition takes place at lower T than in other approximations. Moreover, a statistical behavior of the Lipkin model is described within GTRPA with an appropriate accuracy even in the case when the HF transformation parameter is fixed at a zero value, thus corresponding to the «spherical» phase of a mean field. The reason is that within GTRPA HF and collective variables of the system are coupled and change their values consistently.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1999

1. Введение

Настоящая работа представляет собой продолжение публикации [1], где, используя формализм термополевой динамики [2], мы сформулировали обобщенное тепловое приближение случайной фазы (ТПСФ). Эта обобщенная версия ТПСФ, основанная на том же классе вариационных функций системы взаимодействующих N фермионов, что и стандартное ТПСФ, учитывает ряд новых моментов, которые не рассматривались ранее для нагретых систем. Среди них: наличие в тепловом вакууме нагретой системы некоторого количества тепловых квазичастиц; взаимное влияние коллективных и хартри-фоковских переменных и изменение из-за этого взаимодействия тепловых чисел заполнения; слагаемые типа $\beta^+ \beta \beta^+ \beta$ в тепловом гамильтониане системы.

Некоторые из перечисленных эффектов в отдельности уже рассматривались в наших предыдущих работах [3-7], а роль новых корреляций в тепловом вакууме, которые возникают из-за появления в нем тепловых квазичастиц, численно исследовалась на примере модели Липкина. Цель настоящего исследования – проанализировать на примере той же модели возможности обобщенного ТПСФ, в котором учтены все указанные эффекты.

2. Формулы обобщенного ТПСФ для модели Липкина

Модель Липкина [8] – это система N фермионов, расположенных на двух уровнях с вырождением $\Omega = N$. Энергии нижнего и верхнего уровней равны $-\varepsilon/2$ и $+\varepsilon/2$, соответственно. При $T = 0$ нижний уровень заполнен, верхний – пуст. Взаимодействие фермионов – притягивающее, не зависит от состояния и характеризуется параметром V . Гамильтониан системы имеет вид:

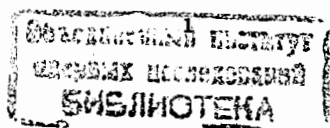
$$H_{LMG} = \varepsilon \hat{J}_0 - \frac{1}{2} V (\hat{J}_+ \hat{J}_+ + \hat{J}_- \hat{J}_-), \quad (1)$$

где операторы компонент квазиспина $\hat{J} - \hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_0$ определены следующим образом:

$$\hat{J}_0 = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{\Omega} (a_{2p}^+ a_{2p} - a_{1p}^+ a_{1p}), \quad \hat{J}_+ = \sum_{p=1}^{\Omega} a_{2p}^+ a_{1p}, \quad \hat{J}_- = (\hat{J}_+)^+.$$

$a_{1,2p}^+$ и $a_{1,2p}$ – операторы рождения и уничтожения частицы на нижнем (1) или верхнем (2) уровне. Индекс p нумерует подуровни. Операторы $\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_0$ образуют SU(2)-алгебру.

В своих главных чертах схема обобщенного ТПСФ такова [1]: параметры преобразования Хартри – Фока и теплового преобразования Боголюбова (т.е. тепловые



числа заполнения оптимального одночастичного базиса системы) определяются одновременно минимизацией большого термодинамического потенциала нагретой системы Ω . При этом входящая в Ω внутренняя энергия системы вычисляется как среднее значение гамильтониана по тепловому фоновому вакууму $|\Psi_0(T)\rangle$, в котором присутствует некоторое количество тепловых квазичастиц. Параметры же фоновых возбуждений находятся из уравнений движения, в которых учтено отличие построенных из тепловых квазичастиц фононов от "истинных бозонов", а также вклад слагаемых теплового гамильтониана типа $\beta_1^+ \beta_1 \beta_2^+ \beta_2$.

Итак, сначала перейдем в гамильтониане (1) с помощью унитарного преобразования \mathbf{D} от операторов частиц к операторам хартри-фоковских (ХФ) квазичастиц α^+, α :

$$\begin{pmatrix} a_{1p} \\ a_{2p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1p} \\ \alpha_{2p} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Коэффициенты преобразования \mathbf{D} удобно параметризовать следующим образом [9]:

$$D_{11} = D_{22} = \cos \theta, \quad D_{12} = -D_{21} = \sin \theta.$$

Генераторы группы $\hat{J}_+, \hat{J}_-, \hat{J}_0$ связаны с генераторами в новом базисе $\hat{S}_+, \hat{S}_-, \hat{S}_0$ посредством соотношений

$$\hat{J}_0 = \hat{S}_0 \cos 2\theta - \frac{1}{2} \sin 2\theta (\hat{S}_+ + \hat{S}_-), \quad \hat{J}_+ = \hat{S}_0 \sin 2\theta - \hat{S}_- \sin^2 \theta + \hat{S}_+ \cos^2 \theta.$$

В соответствии с общей схемой ТОПСФ вариационный параметр θ будет определен позже.

Теперь мы должны ввести в рассмотрение температуру системы и построить ее тепловой гамильтониан. Для этого сначала следует формально удвоить число степеней свободы системы введением тильда-состояний и тильда-операторов $\tilde{\alpha}^+, \tilde{\alpha}$, а затем с помощью унитарного теплового преобразования Боголюбова перейти к операторам тепловых квазичастиц $\beta^+, \tilde{\beta}^+, \beta, \tilde{\beta}$ [2]. Тепловое преобразование Боголюбова имеет вид

$$\begin{aligned} \beta_1 &= x_1 \alpha_1 - y_1 \tilde{\alpha}_1^+, \\ \tilde{\beta}_1 &= x_1 \tilde{\alpha}_1 + y_1 \alpha_1^+. \end{aligned} \quad (3)$$

Коэффициенты x_i, y_i зависят от температуры и должны удовлетворять условию $x_i^2 + y_i^2 = 1$. В тепловом приближении ХФ или в тепловом приближении случайной фазы (ТПСФ) y_i совпадают с тепловыми числами заполнения Ферми – Дирака одноквазичастичных ХФ-состояний. В настоящий же момент мы не будем делать никаких дополнительных предположений относительно x_i, y_i помимо указанной выше нормировки.

В терминах операторов рождения и уничтожения тепловых квазичастиц и их тильда-партнеров гамильтониан (1) выглядит следующим образом:

$$H = \varepsilon \hat{S}_0 \cos 2\theta - V \hat{S}_0^2 \sin^2 2\theta - \frac{V(1 + \cos^2 2\theta)}{4} (\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2) - \frac{V \sin^2 2\theta}{4} (\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+),$$

где генераторы \hat{S}_0, \hat{S}_\pm имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{S}_0 &= \frac{1}{2} \left[x_2^2 B_2 - y_2^2 \tilde{B}_2 + y_1^2 \tilde{B}_1 - x_1^2 B_1 + N(y_2^2 - y_1^2) \right] + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{\Omega} \left[x_2 y_2 (\beta_{2p}^+ \tilde{\beta}_{2p}^+ + \beta_{2p} \tilde{\beta}_{2p}) - x_1 y_1 (\beta_{1p}^+ \tilde{\beta}_{1p}^+ + \beta_{1p} \tilde{\beta}_{1p}) \right], \\ \hat{S}_+ &= x_2 y_1 A_+ + y_2 x_1 \tilde{A}_- + \sum_{p=1}^{\Omega} \left[x_1 x_2 \beta_{2p}^+ \beta_{1p} - y_1 y_2 \tilde{\beta}_{1p}^+ \tilde{\beta}_{2p} \right], \end{aligned}$$

а $\hat{S}_- = (\hat{S}_+)^+$. Здесь мы ввели следующие обозначения:

$$B_k = \sum_{p=1}^{\Omega} \beta_{kp}^+ \beta_{kp}, \quad A_+ = \sum_{p=1}^{\Omega} \beta_{2p}^+ \tilde{\beta}_{1p}^+, \quad A_- = (A_+)^+, \quad \tilde{A}_+ = \sum_{p=1}^{\Omega} \beta_{1p}^+ \tilde{\beta}_{2p}^+,$$

Теперь напишем выражение для теплового гамильтониана модели \mathcal{H}_{LMG} :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{LMG} &\equiv H_{LMG} - \tilde{H}_{LMG} = \\ &= \frac{1}{2} (B_2 - B_1 - \tilde{B}_2 + \tilde{B}_1) [\varepsilon \cos 2\theta + 2V_1 N] - \frac{V_2}{2} [A_+^2 + A_-^2 - \tilde{A}_+^2 - \tilde{A}_-^2] - \\ &\quad - \frac{V_1}{2} [A_+ A_- + A_- A_+ - \tilde{A}_+ \tilde{A}_- - \tilde{A}_- \tilde{A}_+] - \frac{V_1}{2} [(B_2 - B_1)^2 - (\tilde{B}_2 - \tilde{B}_1)^2], \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$V_1 = \frac{1}{2} V (y_1^2 - y_2^2) \sin^2 2\theta, \quad V_2 = \frac{1}{2} V (y_1^2 - y_2^2) (1 + \cos^2 2\theta).$$

Следует указать, что в выражении (4) опущены слагаемые, содержащие нечетное число операторов рождения и уничтожения тепловых квазичастиц, т.к. в рассматриваемом приближении они не дают вклада в уравнения движения. Отметим также, что слагаемые (4), квадратичные по операторам B_k , ранее в расчетах не учитывались.

Чтобы найти спектр возбуждений нагретой системы, следует диагонализировать гамильтониан (4). Для этого мы воспользуемся методом уравнений движения [10] и сначала определим основное и возбужденные состояния системы посредством соотношений:

$$|\Psi_\nu(T)\rangle = Q_\nu^+ |\Psi_0(T)\rangle, \quad Q_\nu |\Psi_0(T)\rangle = 0, \quad (5)$$

а класс пробных функций ограничим тем, что обыкновенно используется в ТПСФ [1, 5, 6]

$$\begin{aligned} Q_1^+ &= \psi_1 A_+ - \phi_1 A_-, \\ Q_2^+ &= \psi_2 \tilde{A}_+ - \phi_2 \tilde{A}_-. \end{aligned} \quad (6)$$

Фононные волновые функции должны быть ортонормированы. Это условие накладывает ограничения на амплитуды ψ, ϕ . Именно,

$$N(1-2q)(\psi_k^2 - \phi_k^2) = 1, \quad k = 1, 2, \quad (7)$$

где q - с-число, определенное с помощью соотношения

$$q \equiv q_k = \frac{\langle \Psi_0(T) | B_k | \Psi_0(T) \rangle}{N} = \frac{\langle \Psi_0(T) | \tilde{B}_k | \Psi_0(T) \rangle}{N}.$$

Величина q появляется в условии нормировки для амплитуд ψ, ϕ как результат следующего предположения. Точный коммутатор операторов A_- и A_+ имеет вид

$$[A_-, A_+] = N - \sum_{p=1}^{\Omega} \tilde{\beta}_{1p}^+ \tilde{\beta}_{1p} - \sum_{p=1}^{\Omega} \beta_{2p}^+ \beta_{2p} = N - \tilde{B}_1 - B_2. \quad (8)$$

В обобщенном ТПСФ [1], как и в перенормированном ТПСФ [3-6], предполагается, что среднее значение $\langle \Psi_0(T) | B_k | \Psi_0(T) \rangle$ может быть заменено с-числом и тогда

$$[A_-, A_+] = N(1-2q). \quad (9)$$

Такое приближение было впервые предложено в работе [11] для холодных ядер. Его физический смысл состоит в отказе от предположения о ничтожно малом числе квазичастиц (в нашем случае - тепловых квазичастиц) в фононном вакууме. Введение отличной от нуля величины q позволяет более точно учесть принцип Паули в структуре фононного вакуума.

Уравнения движения для векторов $|\Psi_1(T)\rangle$ и $|\Psi_2(T)\rangle$ разделяются. Они выглядят следующим образом:

$$\begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & -M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \phi_1 \end{pmatrix} = \omega_1 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \phi_1 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ -M_2 & -M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = -\omega_2 \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \phi_2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Решения этих уравнений, удовлетворяющие условиям нормировки (7), имеют вид

$$\omega = \omega_1 = -\omega_2 = \sqrt{M_1^2 - M_2^2}, \quad (11)$$

$$\psi_1^2 = \psi_2^2 = \frac{M_1 + \omega}{2\omega N(1-2q)} \equiv \psi^2, \quad \phi_1^2 = \phi_2^2 = \frac{M_1 - \omega}{2\omega N(1-2q)} \equiv \phi^2. \quad (12)$$

При вычислении коэффициентов M_1 и M_2 мы сталкиваемся с матричными элементами четырех типов: $\langle \Psi_0(T) | A_+ A_- | \Psi_0(T) \rangle$, $\langle \Psi_0(T) | A_- A_+ | \Psi_0(T) \rangle$, $\langle \Psi_0(T) | A_+^2 | \Psi_0(T) \rangle$ и $\langle \Psi_0(T) | B_i B_k | \Psi_0(T) \rangle$. Три первых легко вычисляются [1] с помощью преобразования, обратного (6), и выражающего бифермионные операторы A_+ и A_- через операторы фононов

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0(T) | A_+ A_- | \Psi_0(T) \rangle &= \langle \Psi_0(T) | \tilde{A}_+ \tilde{A}_- | \Psi_0(T) \rangle = [N\phi(1-2q)]^2, \\ \langle \Psi_0(T) | A_- A_+ | \Psi_0(T) \rangle &= \langle \Psi_0(T) | \tilde{A}_- \tilde{A}_+ | \Psi_0(T) \rangle = [N\psi(1-2q)]^2; \\ \langle \Psi_0(T) | A_+^2 | \Psi_0(T) \rangle &= \langle \Psi_0(T) | A_-^2 | \Psi_0(T) \rangle = \\ &= \langle \Psi_0(T) | \tilde{A}_+^2 | \Psi_0(T) \rangle = \langle \Psi_0(T) | \tilde{A}_-^2 | \Psi_0(T) \rangle = [N(1-2q)]^2 \psi\phi. \end{aligned}$$

Четвертый матричный элемент вычисляется с помощью разложения по полному базису фононов [1, 12]. Ограничившись в таком разложении первыми двумя слагаемыми (фононным вакуумом и двухфононными состояниями), получим

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0(T) | B_1 B_2 | \Psi_0(T) \rangle &= \langle \Psi_0(T) | \tilde{B}_1 \tilde{B}_2 | \Psi_0(T) \rangle = \\ &= \langle \Psi_0(T) | \tilde{B}_1 B_1 | \Psi_0(T) \rangle = \langle \Psi_0(T) | \tilde{B}_2 B_2 | \Psi_0(T) \rangle = N^2 q^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0(T) | B_1^2 | \Psi_0(T) \rangle &= \langle \Psi_0(T) | B_2^2 | \Psi_0(T) \rangle = \\ &= \langle \Psi_0(T) | B_1 \tilde{B}_2 | \Psi_0(T) \rangle = \langle \Psi_0(T) | \tilde{B}_1 B_2 | \Psi_0(T) \rangle = N^2 q^2 + \frac{4\psi^2 \phi^2 N^2 (1-2q)^2}{R}. \end{aligned}$$

Величина R в последней формуле - норма двухфононного состояния

$$R = \langle \Psi_0(T) | Q_1 Q_1 Q_1^+ Q_1^+ | \Psi_0(T) \rangle = \langle \Psi_0(T) | Q_2 Q_2 Q_2^+ Q_2^+ | \Psi_0(T) \rangle,$$

которая в рамках принятой нами точности вычислений матричных элементов определяется соотношением

$$R = 2 \left(1 - \psi^2 - \phi^2 + \frac{4\psi^2 \phi^2}{R} \right).$$

С учетом вышеизложенного получаем для M_1 и M_2

$$M_1 = \varepsilon \cos 2\theta + 3V_1 [N(1-2q) - 1] - 6V_1 t_1 + 2V_2 t_2, \quad (13)$$

$$M_2 = -V_2 [N(1-2q) - 1] - 6V_1 t_2 + 2V_2 t_1, \quad (14)$$

где

$$t_1 = N(1-2q)\phi^2 \left[1 - \frac{8\psi^2}{R} \right], \quad t_2 = N(1-2q)\psi\phi.$$

Уравнение для q получается с помощью метода "оператора числа частиц" [10] с той лишь особенностью, что вместо оператора числа ХФ-квазичастиц \hat{N} следует использовать оператор $\hat{N} - \hat{N}$ (см. [1]). Тогда имеем

$$q = [\phi(1-2q)]^2 - \frac{q}{N} + \frac{\langle \Psi_0(T) | B_k^2 | \Psi_0(T) \rangle}{N^2}. \quad (15)$$

Итак, мы получили уравнения движения для модели Липкина при ненулевой температуре в обобщенном ТПСФ: (11), (12), (13), (15). Если в этих уравнениях отбросить члены, пропорциональные t_1 и t_2 , мы получим уравнения теплового перенормированного ПСФ [4, 5], а в приближении $q = 0$ мы получаем уравнения ТПСФ в модели Липкина [13]. С другой стороны, в пределе нулевой температуры $T \rightarrow 0$ наши уравнения переходят в уравнения самосогласованного ПСФ [12].

Но мы пока не определили параметры преобразования Хартри - Фока θ и теплового преобразования Боголюбова x_i, y_i . Для этого мы должны найти минимум модельного большого термодинамического потенциала [15], который в нашем случае определяется следующим образом:

$$\Omega_{LMG} = \langle \Psi_0(T) | H_{LMG} | \Psi_0(T) \rangle - TS - \lambda N, \quad (16)$$

где в отличие от стандартного теплового метода Хартри - Фока или ТПСФ внутренняя энергия, энтропия S и число частиц N вычисляются усреднением не по тепловому вакууму приближения Хартри - Фока (т.е. вакууму тепловых квазичастиц), а по вакууму тепловых фононов (6).

Энтропию следует вычислять с помощью общего термодинамического соотношения [1]

$$S = \int_0^T \frac{1}{t} \frac{\partial \langle \Psi_0(t) | H_{LMG} | \Psi_0(t) \rangle}{\partial t} dt.$$

Относительно параметров x_i, y_i будем предполагать, что они зависят от хартри-фоковских энергий E_k стандартным образом:

$$y_k^2 = \left[1 + \exp\left(-\frac{E_k}{T}\right) \right], \quad x_k^2 = 1 - y_k^2, \quad k = 1, 2.$$

В то же время сами ХФ-энергии зависят не только от θ , но и от фоновых амплитуд, величины q и т.д. Тогда для Ω_{LMG} получаем

$$\Omega_{LMG} = -\frac{N(1-2q)}{2} \left\{ \varepsilon (y_1^2 - y_2^2) \cos 2\theta + V_1 (y_1^2 - y_2^2) [N(1-2q) - 1] + \frac{1 + (y_1^2 - y_2^2)^2}{y_1^2 - y_2^2} (V_2 t_2 - V_1 t_1) \right\} + NT(1-2q) \sum_{k=1,2} (x_k^2 \ln x_k^2 + y_k^2 \ln y_k^2). \quad (17)$$

В результате варьирования большого термодинамического потенциала (17) по параметру θ , получаем уравнение

$$-N(1-2q) \sin 2\theta \left\{ -\varepsilon (y_1^2 - y_2^2) + V (y_1^2 - y_2^2)^2 [N(1-2q) - 1] \cos 2\theta - V [1 + (y_1^2 - y_2^2)^2] (t_1 + t_2) \cos 2\theta \right\} = 0,$$

которое имеет два решения. Первое решение, $\theta = 0$, соответствует так называемой "сферической" фазе. Второе

$$\theta = \frac{1}{2} \arccos \left\{ \frac{\varepsilon (y_1^2 - y_2^2)}{V (y_1^2 - y_2^2)^2 [N(1-2q) - 1] - V [1 + (y_1^2 - y_2^2)^2] (t_1 + t_2)} \right\} \quad (18)$$

соответствует "деформированной" фазе.

Варьирование Ω_{LMG} по x_i, y_i с учетом условия нормировки дает уравнения для одночастичных энергий

$$E_{1,2} = \mp \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon \cos 2\theta + V (y_1^2 - y_2^2) [N(1-2q) - 1 - t_1] \sin^2 2\theta + V (y_1^2 - y_2^2) t_2 (1 + \cos^2 2\theta) \right\}. \quad (19)$$

Уравнения (18) и (19) показывают, что параметры преобразования Хартри - Фока и теплового преобразования Боголюбова нетривиальным образом зависят от амплитуд коллективного движения ψ, ϕ . В то же время из них следуют уравнения стандартного ТПСФ для модели Липкина. Для этого положим в (18), (19) $q = 0, \psi = N^{-1}, \phi = 0$ и получим для "деформированной" фазы

$$\theta_{HF} = \frac{1}{2} \arccos \left[\frac{\varepsilon}{V (y_1^2 - y_2^2) (N - 1)} \right],$$

$$E_{1,2} = \mp \frac{1}{2} \left[\varepsilon \cos 2\theta + V (y_1^2 - y_2^2) (N - 1) \sin^2 2\theta \right] = \mp \frac{V (y_1^2 - y_2^2) (N - 1)}{2},$$

что и совпадает с известными результатами ТПСФ (см., например, [5]).

Уравнения (11), (12), (15) (вместе с выражениями (13)) и уравнения (18), (19) составляют полную систему уравнений обобщенного ТПСФ для модели Липкина. Они позволяют определить согласованным образом семь независимых величин: параметр обобщенного преобразования Хартри - Фока θ ; энергии квазичастиц в обобщенном потенциале Хартри - Фока $E_{1,2}$; энергию фононного возбуждения ω ; амплитуды фононной волновой функции ψ, ϕ ; число тепловых квазичастиц в зависящем от температуры основном состоянии системы (вакууме тепловых фононов) q .

3. Результаты расчетов

В качестве примера мы исследовали температурную зависимость внутренней энергии системы. С точным расчетом сравнивались результаты четырех приближений: теплового приближения Хартри - Фока, теплового приближения случайной фазы, теплового перенормированного приближения случайной фазы и теплового обобщенного приближения случайной фазы. Напишем выражения для $\langle \Psi_0(T) | H_{LMG} | \Psi_0(T) \rangle$ в перечисленных приближениях.

ТПХФ:

$$\langle H \rangle_{THFA} = -\frac{N}{2} \left\{ \varepsilon (y_1^2 - y_2^2) \cos 2\theta + V_1 (y_1^2 - y_2^2) (N-1) \right\};$$

ТПСФ:

$$\langle H \rangle_{TRPA} = -\frac{N}{2} \left\{ \varepsilon (y_1^2 - y_2^2) \cos 2\theta + V_1 (y_1^2 - y_2^2) (N-1) + \frac{N \left[1 + (y_1^2 - y_2^2)^2 \right]}{y_1^2 - y_2^2} [V_2 \psi \phi - V_1 \phi^2] \right\};$$

ТППСФ:

$$\langle H \rangle_{TRRPA} = -\frac{N(1-2q)}{2} \left\{ \varepsilon (y_1^2 - y_2^2) \cos 2\theta + V_1 (y_1^2 - y_2^2) (N-1)(1-2q) + \frac{N \left[1 + (y_1^2 - y_2^2)^2 \right] (1-2q)}{y_1^2 - y_2^2} [V_2 \psi \phi - V_1 \phi^2] \right\};$$

ТОПСФ:

$$\langle H \rangle_{TGRPA} = -\frac{N(1-2q)}{2} \left\{ \varepsilon (y_1^2 - y_2^2) \cos 2\theta + V_1 (y_1^2 - y_2^2) [N(1-2q) - 1] + \frac{1 + (y_1^2 - y_2^2)^2}{y_1^2 - y_2^2} (V_2 t_2 - V_1 t_1) \right\}.$$

Описание процедуры точного расчета среднего значения $\langle H_{LMG} \rangle$ по большому каноническому ансамблю можно найти в работах [4, 14].

Численные расчеты проведены для $N = 20$ и $\varepsilon = 1$ (т.е. расстояние между уровнями служит единицей энергии). Рассмотрены два значения константы взаимодействия V :

1. $V = 0,05$ (рис.1). При $T = 0$ это значение V отвечает ситуации, когда система находится в "сферической" фазе, но очень близка к точке фазового перехода в "деформированную" фазу, который в приближении ХФ имеет место при $V_{cr} = 0,052$;

2. $V = 0,1$ (рис.2). При $T = 0$ это значение V соответствует сильному взаимодействию и "деформированной" фазе.

Повышение температуры для модели Липкина в целом означает эффективное ослабление взаимодействия. Поэтому, когда $V = 0,05$ (рис.1), с ростом T результаты разных приближений становятся ближе друг к другу и к точному значению $\langle H_{LMG} \rangle$. Наибольшие различия видны при $T < 0,2$. При этом результат ТОПСФ

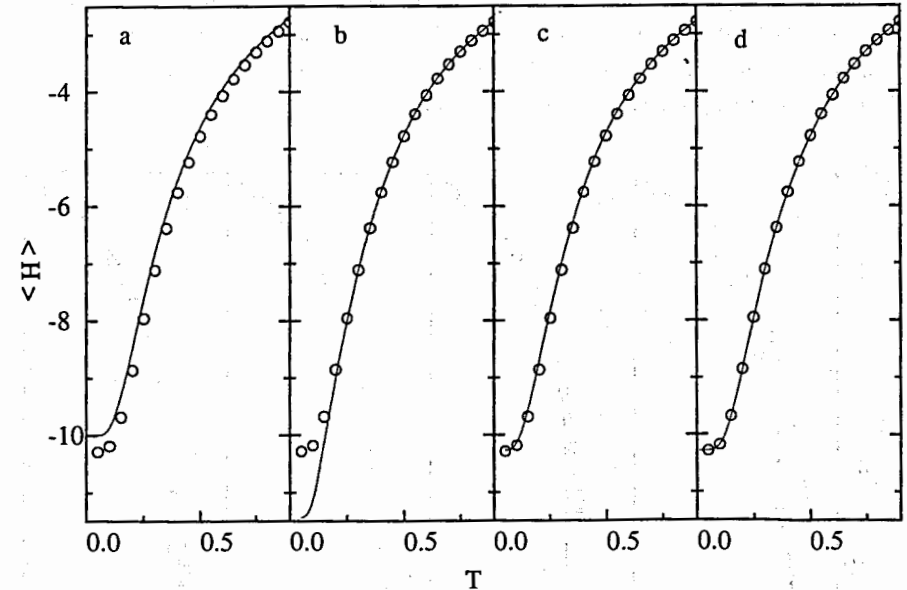


Рис. 1 Зависимость внутренней энергии системы от температуры T , рассчитанная в разных приближениях с параметром взаимодействия $V = 0,05$.

- а) точный результат и результат ТПХФ;
- б) точный результат и результат ТПСФ;
- в) точный результат и результат ТППСФ;
- г) точный результат и результат ТОПСФ.

Обозначения: пустые кружки - точный расчет; сплошная линия - приближенный расчет

практически совпадает с точным, а ТППСФ работает лишь немногим хуже. Два других приближения (ТПХФ и ТПСФ) заметно уступают ТОПСФ. Заметим также, что ТПХФ, как это и должно быть для вариационного метода, предсказывает значение внутренней энергии по абсолютной величине меньшее, чем точное. А вот ТПСФ ее переоценивает, что связано с использованием дополнительного предположения о бозонном характере фононного возбуждения [9]. Поэтому и ТППСФ и ТОПСФ, кото-

рые более последовательно учитывают принцип Паули и его влияние на корреляции в тепловом вакууме, исправляют этот недостаток.

Когда взаимодействие между частицами достаточно сильно, в ТПХФ при $T = 0$ система находится в "деформированной" фазе, а по мере роста T и эффективного ослабления взаимодействия в некоторый момент переходит в "сферическую" фазу. В рамках ТПХФ и ТПСФ это происходит при температуре $T_{cr} = 0,5$ (рис.2). Исследуя перенормированное ТПСФ на примере модели Липкина [5], мы обнаружили, что в этом приближении фазовый переход происходит несколько раньше, при $T_{cr} \sim 0,42$. Расчеты в ТОПСФ (рис.2г) показывают, что T_{cr} уменьшается еще сильнее и фазовый переход наступает уже при $T_{cr} \sim 0,35$, т.е. интервал температур, в котором "сферическая" фаза отвечает минимуму Ω_{LMG} , заметно увеличивается.

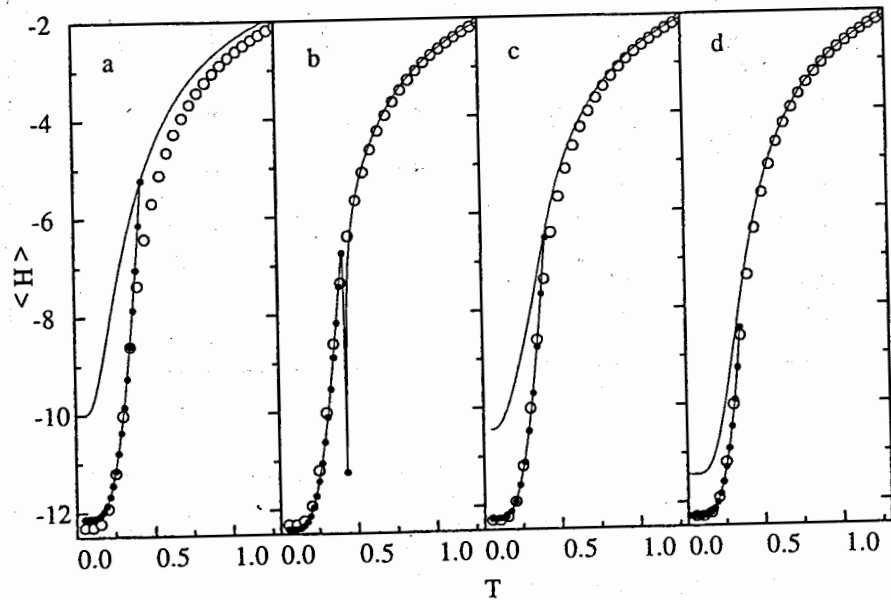


Рис. 2 Зависимость внутренней энергии системы от температуры T , рассчитанная в разных приближениях с параметром взаимодействия $V = 0,1$.

- а) точный результат и результат ТПХФ;
- б) точный результат и результат ТПСФ;
- в) точный результат и результат ТППСФ;
- г) точный результат и результат ТОПСФ.

Обозначения: пустые кружки - точный расчет; сплошная линия - приближенный расчет в "сферической" фазе; черные кружки - приближенный расчет в "деформированной" фазе.

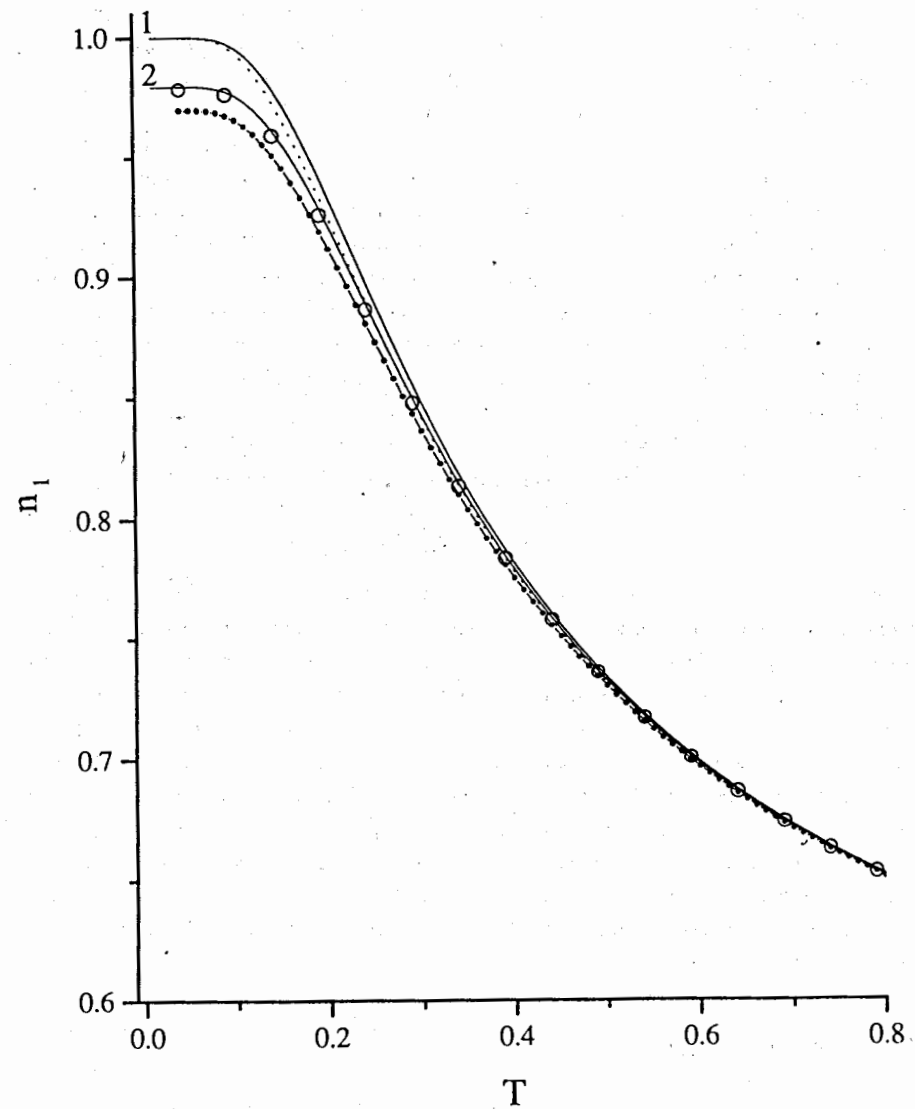


Рис. 3 Числа заполнения нижнего уровня n_1 при разных температурах T .

Обозначения: пустые кружки - точный расчет; точечная линия - ТПХФ; черные кружки - расчет в ТППСФ; сплошная линия 1 - тепловая составляющая чисел заполнения в ТОПСФ; сплошная линия 2 - полная величина n_1 , рассчитанная в ТОПСФ

Еще одно обстоятельство представляется нам важным. Именно, в трех приближениях (ТПХФ, ТППСФ и ТОПСФ) величину $\langle N \rangle$ формально можно рассчитать во всем исследуемом интервале температур, оставаясь в "сферической" фазе¹. Результаты такого расчета приведены на рис.2а,б,г. Конечно, при $T < T_c$ значения $\langle N \rangle$, рассчитанные для $\theta = 0$, выше тех, что отвечают "деформированной" фазе, но по мере усложнения используемого приближения, т.е. при переходах ТПХФ → ТППСФ → ТОПСФ, значения $\langle N \rangle$, рассчитанные в той и другой фазах, сближаются. В ТОПСФ разница между ними не превышает 10%. Таким образом, можно говорить, что в рамках ТОПСФ статистические свойства модели Липкина удовлетворительно описываются и без перехода в "деформированную" фазу. Это означает, что более последовательный учет корреляций в движении частиц в заметной степени компенсирует влияние флуктуаций, связанных с использованием большого канонического ансамбля.

Преимущества ТОПСФ видны также из расчетов чисел заполнения уровней $n_{1,2}$ и их зависимости от T . Выражение для нормированной на единицу величины n_1 таково:

$$n_1 = \frac{1}{2} + \frac{\ll J_z \gg}{N}.$$

Результаты расчетов, приведенные на рис.3, показывают, что ТПХФ (и ТПСФ) переоценивает заполнение нижнего уровня системы (хотя численно эффект невелик – порядка 2-3%). Особенно это заметно при небольших температурах ($T < 0,2$). Учет квантовых эффектов (ненулевого числа тепловых квазичастиц в тепловом вакууме) в рамках перенормированного ТПСФ улучшает согласие с точным расчетом, но теперь приближенные значения n_1 оказываются несколько меньше точных, т.е. ТППСФ переоценивает эффект остаточного взаимодействия. ТОПСФ же обеспечивает практически полное совпадение точных и приближенных значений чисел заполнения. Кроме того, мы отдельно изобразили на рис.3 тепловую составляющую y_1 чисел заполнения, рассчитанных в ТОПСФ. Видны различия с хартри-фоковскими значениями y_1 , которые возникают из-за "подстройки" одночастичных энергий к изменениям амплитуд коллективного движения.

4. Заключение

В настоящей работе на примере модели Липкина исследованы возможности ранее предложенного нами [1] теплового обобщенного приближения случайной фазы. Получена система шести нелинейных уравнений модели (11), (12), (15) (18), (19), связывающих между собой параметр преобразования ХФ, энергии ХФ-квазичастиц, энергию фононного возбуждения, амплитуды коллективного возбуждения и среднее число тепловых квазичастиц в вакууме тепловых фононов (основном тепловом состоянии

¹Это невозможно в ТПСФ, потому что в точке T_c ω обращается в нуль, а при $T < T_c$, если не перейти в "деформированную" фазу, оказывается мнимой величиной.

системы). Эти уравнения учитывают следующие эффекты: взаимное влияние коллективных и хартри-фоковских переменных и изменение из-за этого взаимодействия тепловых чисел заполнения; наличие в тепловом вакууме нагретой системы некоторого количества тепловых квазичастиц; влияние двухчастичных корреляций из-за слагаемых типа $B_1 B_2$ теплового гамильтониана (4). В качестве частных случаев обобщенное ТПСФ включает ранее рассмотренные ТППСФ [3-5] и тепловое самосогласованное ПСФ [6, 7]. Мы рассчитали зависимость от температуры внутренней энергии системы и чисел заполнения одночастичных уровней. С формальной точки зрения ТОПСФ работает лучше других приближений при всех температурах и любой силе взаимодействия V . Однако наиболее заметны его преимущества в той области температур, где происходит перестройка среднего поля (фазовый переход). В ТОПСФ температура фазового перехода оказывается ниже, чем в других приближениях, а значения $\langle N \rangle$ ближе всего к точным. Интересно, что ТОПСФ с хорошей точностью описывает поведение $\langle N \rangle$ как функции T и без перехода в "деформированную" фазу (рис.2г). Очевидно, что причина этого в согласованном изменении коллективных и хартри-фоковских переменных, так как в ТОПСФ среднее поле не "заморожено", как в других приближениях. Преимущества ТОПСФ демонстрируют и расчеты чисел заполнения. В то время как ТПХФ и ТПСФ переоценивают величину n_1 , а ТППСФ ее недооценивает, предсказания ТОПСФ практически совпадают с точными значениями.

Работа выполнена при частичной поддержке Совета по грантам Президента РФ и государственной поддержке ведущих научных школ, а также РФФИ (грант РФФИ 96-15-96729).

Литература

- [1] A.N. Storozhenko, A.I. Vdovin, Preprint JINR, E4-99-91, 1999
- [2] Y. Takahashi, H. Umezawa, Collective Phenomen, 2 (1975) 55;
X. Умедзава, X. Мацумото, M. Татики, "Термополевая динамика и конденсированные состояния", М.: Мир, 1985
- [3] A.V. Avdeenkov, D.S. Kosov, A.I. Vdovin, Mod. Phys. Lett. A11 (1996) 853
- [4] А.Н. Стороженко, Д.С. Косов, А.И. Вдовин, ЯФ 62 (1999) 63
- [5] А.Н. Стороженко, А.И. Вдовин, Д.С. Косов, Изв. РАН, сер. физ., 63 (1999) 114;
A.I. Vdovin, A.N. Storozhenko, Eur. Phys. J 5 (1999) 263
- [6] А.И. Вдовин, Д.С. Косов, В. Навроцка, ТМФ 111 (1997) 279
- [7] D.S. Kosov, A.I. Vdovin, J. Wambach, Proceedings of the Intern. Conference "Nuclear Structure and Related Topics" (Dubna, Russia, September 9-13, 1997), S.N. Ershov, R.V. Jolos, V.V. Voronov (eds.), E4-97-327, Dubna, 1997, p.254

- [8] H.J. Lipkin, N. Meshkov, A.J. Glick, Nucl. Phys. **62** (1965) 188
- [9] P. Ring, P. Schuck, "The Nuclear Many-Body Problem", New York: Springer-Verlag, 1980
- [10] D.J. Rowe, Phys. Rev. **175** (1968) 1283
- [11] Ken-ji Hara, Prog. Theor. Phys. **32** (1964) 88
- [12] J. Dukelsky, P. Schuck, Nucl. Phys. **A512** (1990) 466
- [13] N.R. Walet, A. Klein, Nucl. Phys. **A510** (1990) 261
- [14] A. Kuriyama et al., Prog. Theor. Phys. **95** (1996) 339
- [15] С.В. Тябликов, "Методы квантовой теории магнетизма", М: Наука, 1975

Рукопись поступила в издательский отдел
3 сентября 1999 года.