

21/1-88



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
JOINT INSTITUTE
FOR NUCLEAR
RESEARCH

N 3 [29] -88

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ ОИЯИ

**JINR
RAPID COMMUNICATIONS**

Дубна

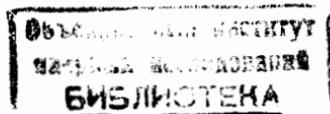
1988

Объединенный институт ядерных исследований
JOINT INSTITUTE FOR NUCLEAR RESEARCH

№ 3 [29]-88

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ ОИЯИ
JINR RAPID COMMUNICATIONS

СБОРНИК
COLLECTION



Дубна 1988

О Г Л А В Л Е Н И Е
C O N T E N T S

Ю.Ф.Киселев, В.Л.Любошиц, М.И.Подгорецкий, А.Н.Черников Новые возможности исследования коллективных спин-спиновых взаимодействий с использованием динамического охлаждения радиоактивных ядер Yu.F.Kiselyov, V.L.Lyuboshitz, M.I.Podgoretsky, A.N.Chernikov New Possibilities for Investigation of Collective Spin-Spin Interactions Using Dynamic Cooling of Radioactive Nuclei.	5
D.V.Shirkov, O.V.Tarasov Gauge Dependence of Ultraviolet Behaviour of QCD Д.В.Ширков, О.В.Тарасов Калибровочная зависимость ультрафиолетового поведения в КХД	18
А.И.Иванов, Ц.Вылов, В.М.Горожанкин, В.Н.Покровский, И.Ф.Учеваткин О расходимости значений энергий связи дейтрона, измеренных с помощью ППД и КДФС A.I.Ivanov, Ts.Vylov, V.M.Gorozhankin, V.N.Pokrovsky, I.F.Uchevatkin About Discrepancy in Values of Deuteron Binding Energy Measured with Semiconductor Detectors and Crystal-Diffraction Gamma-Spectrometer.	27
А.Н.Андреев, Д.Д.Богданов, В.А.Горшков, А.В.Еремин, А.П.Кабаченко, О.А.Орлова, Г.М.Тер-Акопьян, В.И.Чепигин Исследование характеристик кинематического сепаратора ВАСИЛИСА A.N.Andreev, D.D.Bogdanov, V.A.Gorshkov, A.V.Yeremin, A.P.Kabachenko, O.A.Orlova, G.M. Ter-Akopian, V.I.Chepigin Investigation of VASSILISSA Kinematic Separator Characteristics	33
И.Н.Зряков, В.К.Федянин Уравнение состояния системы твердых дисков в окрестности фазового перехода жидкость — твердое тело I.N.Zryakov, V.K.Fedyanin State Equation for the System of Hard Discs near the Liquid-Solid Phase Transition	41

Nguyen Van Hieu, Ha Vinh Tan, Nguyen Toan Thang
Dynamical Equations in a RVB Model of High- T_c
Superconductivity

Нгуен Ван Хьеу, Ха Вин Тан, Нгуен Тоан Тханг

Динамические уравнения в одной модели
высокотемпературной сверхпроводимости
с резонирующей валентной связью 47

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ СПИН-СПИНОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИНАМИЧЕСКОГО ОХЛАЖДЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ ЯДЕР

Ю.Ф.Киселев, В.Л.Любошиц, М.И.Подгорецкий, А.Н.Черников

Предложен новый метод исследований коллективных электронных и электрон-ядерных спин-спиновых взаимодействий в твердых диэлектриках при сверхнизких температурах, основанный на использовании анизотропии β - γ -излучения в однократных и каскадных распадах поляризованных ядер. Показано, что по анизотропии излучения радиоактивных ядер можно измерять спиновую температуру нерадиоактивных ядер исследуемого образца, поляризуемых с помощью динамического охлаждения. Для этого, ввиду очень высокой чувствительности метода, достаточно ввести внутрь образца $\sim 10^{14}$ радиоактивных ядер. Получены аналитические выражения для углового распределения γ -квантов, образующихся в цепочке последовательных β - и γ -распадов поляризованных β -активных ядер. Подробно рассмотрен каскадный переход $^{22}\text{Na}(3^+) \xrightarrow{\beta} ^{22}\text{Ne}(2^+) \xrightarrow{\gamma} ^{22}\text{Ne}(0^+)$.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем и Лаборатории высоких энергий ОИЯИ.

New Possibilities for Investigation of Collective Spin-Spin Interactions Using Dynamic Cooling of Radioactive Nuclei

Kiselyov Yu.F. et al.

A new method is proposed for investigation of collective electron and electron-nuclear spin-spin interactions in hard dielectrics at very low temperatures. The method uses anisotropy of β - γ radiation in single and cascade decays of polarized nuclei. It is shown that anisotropy of radioactive nuclei radiation allows one to measure the spin temperature of nonradioactive nuclei polarized by means of dynamic cooling. Since the method is highly sensitive, it is enough to introduce $\sim 10^{14}$ radioactive nuclei in the sample to be investigated. Analytical expressions are obtained for the angular distribution of γ -quanta produced in the series of consequent β - and γ -decays of polarized β -active nuclei. The cascade transition $^{22}\text{Na}(3^+) \xrightarrow{\beta} ^{22}\text{Ne}(2^+) \xrightarrow{\gamma} ^{22}\text{Ne}(0^+)$ is considered in detail.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems and Laboratory of High Energies, JINR.

1. ВВЕДЕНИЕ

Измерение анизотропии углового распределения β - или γ -излучений является наиболее чувствительным методом исследования сверхтонких взаимодействий спинов ориентированных ядер. В зависимости от типа взаимодействия по анизотропии излучения определяют магнитные и квадрупольные моменты ядер, внутренние локальные магнитные поля и т.п.^{1/}

В связи с развитием в последнее время нового метода поляризации ядер, известного под названием "динамическое охлаждение"^{2,3/}, представляет интерес проанализировать новые, до сих пор не использованные возможности исследования коллективных спин-спиновых взаимодействий в конденсированных средах по анизотропии β - и γ -излучений. В соответствии с идеей метода динамического охлаждения любые ядра в составе диамагнитной матрицы с примесью парамагнитных ионов могут быть при температуре решетки $\sim 0,5$ К в поле $H_0 \approx 20$ кГс поляризованы путем облучения СВЧ-полем вблизи центра линии ЭПР. Известно^{4/}, что именно с помощью динамического охлаждения в диолах $C_3H_6(OH)_2$, $C_2D_4(OH)$ и им подобных достигается в настоящее время рекордная поляризация 1H , 2D , ^{13}C . В отличие от солид-эффекта или метода Джеффриса^{3/} в методе динамического охлаждения все ядра в составе диамагнитных атомов в отсутствие паразитной утечки приобретают поляризацию, соответствующую единой спиновой температуре^{5,6/}. Отсюда следует интересная возможность измерения поляризации нерадиоактивных ядер (например, дейтронов) по анизотропии углового распределения продуктов радиоактивного распада. Ниже будет показано, что по необходимой для проведения эксперимента концентрации ядер данный метод примерно в 10^7 раз чувствительнее метода ЯМР и не требует калибровки аппаратуры по так называемому неусиленному сигналу от спинов, находящихся в тепловом равновесии с решеткой^{7/}. Другим следствием повышения чувствительности является возможность проведения более тонких по сравнению с известными методами исследований электронных, электрон-ядерных и ядерно-ядерных коллективных спин-спиновых взаимодействий, а также кинетики спиновой релаксации ядер.

2. МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ СПИНОВОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ПО АНИЗОТРОПИИ ИЗЛУЧЕНИЯ

Обсуждаемый способ осуществляется следующим образом. В диамагнитную матрицу, содержащую исследуемые ядра со спином I (например, протоны, дейтроны и т.д.), вводится парамагнитная примесь с концентрацией $C_S \ll C_I$ ($C_S = 2 \cdot 10^{20}$ сп./см³),

необходимая для поляризации ядер по методу динамического охлаждения. Кроме того, с целью измерения спиновой температуры (поляризации нерадиоактивных ядер в мишени) вводится примесь радиоактивных долгоживущих ядер J в составе непарамагнитных молекул с концентрацией $C_J \ll C_S$. После охлаждения образца до низких температур и включения подмагничивающего поля H_0 его облучают СВЧ-полем на частоте, соответствующей глубокому охлаждению резервуара диполь-дипольных взаимодействий электронных спинов^{/3/}. При этом все ядерные спиновые системы, включая и радиоактивную примесь, приходят в контакт с охлажденным диполь-дипольным резервуаром, вследствие чего происходит поляризация радиоактивных ядер, которая может быть зарегистрирована по анизотропии β - или γ -излучения. Если при этом спиновые температуры всех ядер оказываются одинаковыми, то по анизотропии излучения можно в конечном итоге измерить спиновую температуру нерадиоактивных ядер. Заметим в этой связи, что равенство спиновых температур разных ядер доказано экспериментально^{/5/} и теоретически^{/6/} только при достаточно высоких концентрациях C_I и C_J . Ниже предполагается, что это справедливо и для очень малых концентраций C_J , когда можно пренебречь спиновой диффузией. Существенно, что обсуждаемый способ позволяет как экспериментально проверить справедливость этого предположения, так и выяснить характер процесса установления равновесного спинового состояния.

Если радиоактивное ядро имеет спин J , а его магнитный момент в ядерных магнетонах равен μ , то в поле H_0 при спиновой температуре T заселенности состояний с различными проекциями спина m на направление магнитного поля описываются формулой Больцмана^{/8/}

$$\rho_{mm}^{(J)} = \frac{e^{m\chi/J}}{\sum_{m=-J}^J e^{m\chi/J}} = \frac{e^{m\chi/J}}{\text{sh}[\chi(1 + \frac{1}{J})]} \text{sh}(\frac{\chi}{2J}), \quad (1)$$

где

$$\chi = \mu \frac{e\hbar}{2m_p c} \cdot \frac{H_0}{kT}, \quad (2)$$

e — заряд протона, m_p — масса протона, c — скорость света в вакууме, k — постоянная Больцмана. Степень поляризации ядер определяется функцией Бриллюэна:

$$P = \frac{1}{J} \sum_{m=-J}^J m \rho_{mm} = B(\chi, J). \quad (3)$$

Заселенности ρ_{mm} совпадают с элементами спиновой матрицы плотности ядра ^{99}Zr , которая в рассматриваемом случае является диагональной. Обсуждаемая анизотропия излучения непосредственно связана с тем, что при низких спиновых температурах величины ρ_{mm} существенно отличаются от значения $(2J+1)^{-1}$, соответствующего неполяризованным ядрам.

3. β -РАСПАД ПОЛЯРИЗОВАННОГО ЯДРА

Примером возможной конкретной реализации обсуждаемого метода является измерение спиновой температуры протонов (или дейтронов) в пропандиоле с примесью парамагнитного иона Cr^{+V} . В такой матрице практически достигнуты поляризации протонов $\pm 97\%$ и дейтронов $\pm 39\%$, что соответствует единой спиновой температуре $\pm 1,3$ мК в поле $H = 2,7$ Тл. При введении в матрицу радиоактивных ядер возникает анизотропия β -излучения, зависящая только от спиновой температуры этих ядер. В случае разрешения β -переходов анизотропия связана исключительно с несохранением четности в процессах, обусловленных слабым взаимодействием ^{10}Li . При этом угловое распределение β -электронов имеет структуру

$$\frac{dN}{d\Omega} = 1 + \alpha P \cos \theta, \quad (4)$$

где θ — угол между направлением вылета электрона (или позитрона) и направлением внешнего магнитного поля, P — степень поляризации радиоактивных ядер, которая определяется формулой (3).

В случае чистых гамов-теллеровских переходов параметр α легко вычисляется теоретически. Еще в классической работе Ли и Янга 10 было показано, что если спины начального J и конечного J' состояний связаны соотношением $J' = J - 1$, то

$$\alpha = - \frac{\langle v \rangle}{c}, \quad (5)$$

где $\langle v \rangle$ — скорость электронов, усредненная по β -спектру. Если же $J' = J + 1$, то

$$\alpha = \frac{\langle v \rangle}{c} \cdot \frac{J}{J+1}. \quad (6)$$

При $J' = J \neq 0$ возможны как гамов-теллеровские, так и фермиевские β -переходы, и параметр асимметрии α зависит от их относительного вклада. В этой ситуации величину α можно определить экспериментально, изучая β -распад ядра с известной поляризацией.

Рассмотрим пример, в котором в качестве радиоактивной примеси используется изотоп $^{32}\text{P}_{15}$, входящий в молекулу PH_3 и способный в микроколичествах растворяться в пропандиоле. Период полураспада ядра $^{32}\text{P}_{15}$ составляет 14,5 дней, его спин $J=1$, спин конечного ядра $^{32}\text{S}_{16}$ равен нулю, энергия разрешенного гамма-теллеровского β -перехода $1,7 \text{ МэВ} / 12'$. В этом случае $\langle v \rangle / c = 0,835$ и согласно (5) величина $\alpha = -0,835$. Если $T = 1,3 \text{ мК}$, $H_0 = 2,7 \text{ Т}$, то $x = -0,19$, и в соответствии с формулой (3) поляризация ядер фосфора $P = V(-0,19, 1) = -0,125$. Знак "минус" связан с отрицательным знаком магнитного момента ядер фосфора ($\mu = -0,252 / 12'$). Таким образом,

$$\frac{dN}{d\Omega} \approx 1 + 0,1 \cdot \cos \theta. \quad (7)$$

Следовательно, при реверсе знака поляризации разница в счете будет достигать 20%. При радиоактивности примеси 12 микрокюри мишень будет излучать $\sim 4 \cdot 10^5$ частиц в секунду. Кремниевый детектор диаметром 3 см, расположенный на расстоянии 15 см от образца, за одну секунду будет регистрировать $\sim 10^3$ событий. Легко далее сосчитать, что для измерения коэффициента 0,1 в формуле (7) с точностью 2% требуется $\sim 0,3 \cdot 10^6$ отсчетов и, следовательно, набор статистики завершится через 300 с, при этом в исследуемую мишень достаточно ввести всего лишь $5 \cdot 10^{11}$ радиоактивных молекул.

4. γ -РАСПАД ПОЛЯРИЗОВАННОГО ЯДРА

Аналогичный подход возможен и с γ -излучателями (долговечными изомерами), которые удобно применять в случае образцов большой толщины. Например, если возбужденное ядро имеет спин J , а у конечного ядра спин $J' = 0$, то нормированное угловое распределение γ -квантов относительно направления магнитного поля будет иметь вид $^{9, 13/}$

$$W(\theta) = \frac{2J+1}{8\pi} \sum_{m=-J}^J \rho_{mm}^{(J)} \left[(d_{m,1}^{(J)}(\theta))^2 + (d_{m,-1}^{(J)}(\theta))^2 \right], \quad (8)$$

где $d_{m,1}^{(J)}(\theta)$ — функции Вигнера (элементы матрицы конечных вращений), $\rho_{mm}^{(J)}$ — заселенности спиновых состояний, связанные со спиновой температурой соотношением (1). Аналогичная формула может быть написана и при $J' \neq 0$ для чистых электрических или магнитных γ -переходов определенной мультипольности l :

$$W(\theta) = \frac{2J+1}{8\pi} \sum_{m=-J}^J \sum_{\mu=-L}^L (C_{J' m - \mu L \mu}^{J m})^2 \rho_{mm}^{(J)} [(d_{\mu 1}^{(L)}(\theta))^2 + (d_{\mu-1}^{(L)}(\theta))^2]. \quad (9)$$

Здесь C -- коэффициент Клебша -- Гордона.

5. КАСКАДНЫЕ β - γ -ПЕРЕХОДЫ

Третий возможный путь измерения спиновой температуры заключается в исследовании угловой анизотропии γ -квантов в каскадных β - γ -переходах. В качестве радиоактивной примеси следует взять долгоживущие β -активные ядра с отличным от нуля магнитным моментом (спин $J \neq 0$). Эти ядра поляризуются в соответствии со спиновой температурой образца. Пусть в результате β -распада рассматриваемых ядер образуются промежуточные дочерние ядра с отличным от нуля спином J' , которые, в свою очередь, испытывают быстрый γ -распад. Как мы увидим ниже, если электрону и антинейтрину передается определенный суммарный угловой момент L , а их импульсы не регистрируются (т.е. производится соответствующее усреднение), поляризация дочернего ядра сразу же после β -распада однозначно связана с поляризацией начального долгоживущего ядра и тем самым с исходной спиновой температурой. Промежуточные ядра должны быть настолько короткоживущими, чтобы их спиновое состояние за время жизни не успевало заметно изменяться. Реально это означает, что время жизни промежуточного ядра должно быть очень мало по сравнению с обратной частотой сверхтонкого расщепления атомных уровней ($\tau \ll 10^{-8} \div 10^{-9}$ с).

В этих условиях угловое распределение γ -квантов относительно направления магнитного поля несет информацию о единой спиновой температуре начальных радиоактивных ядер примеси и исследуемых нерадиоактивных ядер.

Рассмотрим произвольный распад

$$a^{(J)} \rightarrow b^{(J')} + X^{(L)}$$

при условии, что совокупность частиц X , импульсы которых не фиксируются, уносит определенный суммарный момент количества движения L . Поскольку в рассматриваемом случае нет никаких выделенных направлений кроме тех, которые связаны с поляризацией частицы a , поляризационные параметры частицы b , образующейся в результате распада, определяются исключительно векторным сложением моментов. Иными словами, совокупность частиц X можно заменить фиктивной "частицей" со спином L , полагая, что орбитальный момент системы $(b + X)$ ра-

вен нулю. В такой ситуации элементы спиновой матрицы плотности частицы b связаны с элементами спиновой матрицы плотности частицы a простым соотношением

$$\rho_{m\bar{m}}^{(J')} = \sum_{m=-L}^L C_{J'mL\mu}^{Jm+\mu} \cdot C_{J'\bar{m}L\mu}^{J\bar{m}+\mu} \cdot \rho_{m+\mu, \bar{m}+\mu}^{(J)} \quad (10)$$

где C — коэффициенты Клебша — Гордона.

Легко видеть, что если спиновая матрица плотности начальной частицы a диагональна, то спиновая матрица плотности конечной частицы b будет также диагональной, причем

$$\rho_{mm}^{(J')} = \sum_{\mu=-L}^L (C_{J'mL\mu}^{Jm+\mu})^2 \cdot \rho_{m+\mu, m+\mu}^{(J)} \quad (11)$$

Из формулы (11) и известного в теории сложения моментов равенства $\sum_{\mu} (C_{J'mL\mu}^{Jm+\mu})^2 = \frac{2J+1}{2J'+1}$ вытекает, что если распадающаяся

частица не поляризована ($\rho_{m+\mu, m+\mu}^{(J)} = (2J+1)^{-1}$ при $|m+\mu| \leq J$), то частица b рождается также неполяризованной: $\rho_{m\bar{m}}^{(J')} = (2J'+1)^{-1} \delta_{m\bar{m}}$.

Формула (10) хорошо известна в теории γ -распада ориентированных ядер — она определяет усредненные по всем направлениям вылета γ -квантов поляризационные параметры конечной о ядра, образующегося в результате переходов определенной мультипольности L [13, 14]. В этом случае под X понимается γ -квант. Но в соответствии со сказанным выше, соотношения (10) и (11) относятся и к β -распаду ядра (а также и К-захвату) при условии, что лептонам передается определенный угловой момент L , а направление их вылета не регистрируется. В частности, при разрешенном β -переходе Гамова — Теллера угловой момент системы электрон — антинейтрино (или позитрон — нейтрино) равен единице [15]. В ситуации, когда $|J - J'| = 1$, разрешенный переход Гамова — Теллера является основным (остальные сильно подавлены) и поляризация ядра, образующегося в результате β -распада, с хорошей точностью описывается формулами (10), (11) с $L = 1$.

Возвращаясь к методу измерения спиновой температуры путем исследования каскадных β - γ -переходов, рассмотрим случай, когда спин промежуточного короткоживущего ядра, образующегося при β -распаде поляризованных ядер примеси, имеющих спин J , принимает значения $J' = J - 1$ или $J' = J + 1$. Предположим: далее, что промежуточное ядро в результате γ -распада переходит в состояние с нулевым спином. Тогда с учетом (8) и (11) нормированное на единицу угловое распределение γ -квантов относительно

направления магнитного поля (оси квантования) будет иметь вид

$$W(\theta) = \frac{2J' + 1}{3\pi} \left\{ \sum_{m=1}^{J'} (\rho_{mm}^{(J')} + \rho_{-m-m}^{(J')}) [(d_{m1}^{(J')}(\theta))^2 + (d_{m-1}^{(J')}(\theta))^2] + \right. \\ \left. + 2\rho_{00}^{(J')} (d_{01}^{(J')}(\theta))^2 \right\}, \quad (12)$$

где

$$\rho_{mm}^{(J')} = \sum_{\mu=0, \pm 1} (C_{J'm1\mu}^{Jm+\mu})^2 \rho_{m+\mu m+\mu}^{(J)},$$

а величины $\rho_{m+\mu m+\mu}^{(J)}$ связаны со спиновой температурой соотношением (1).

При $J = 3, J' = 2$ имеем

$$W(\theta) = \frac{5}{8\pi} \left\{ \frac{1}{2} (\rho_{22}^{(2)} + \rho_{-2,-2}^{(2)}) \sin^2 \theta (1 + \cos^2 \theta) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (\rho_{11}^{(2)} + \rho_{-1,-1}^{(2)}) (4 \cos^4 \theta - 3 \cos^2 \theta + 1) + \right. \\ \left. + 3\rho_{00}^{(2)} \cos^2 \theta \sin^2 \theta \right\}, \quad (13)$$

причем

$$\rho_{22}^{(2)} = \rho_{33}^{(3)} + \frac{1}{3} \rho_{22}^{(3)} + \frac{1}{15} \rho_{11}^{(3)}, \\ \rho_{11}^{(2)} = \frac{2}{3} \rho_{22}^{(3)} + \frac{8}{15} \rho_{11}^{(3)} + \frac{1}{5} \rho_{00}^{(3)}, \\ \rho_{00}^{(2)} = \frac{2}{5} \rho_{11}^{(3)} + \frac{3}{5} \rho_{00}^{(3)} + \frac{2}{5} \rho_{-1-1}^{(3)}, \\ \rho_{-1-1}^{(2)} = \frac{1}{5} \rho_{00}^{(3)} + \frac{8}{15} \rho_{-1-1}^{(3)} + \frac{2}{3} \rho_{-2-2}^{(3)}, \\ \rho_{-2-2}^{(2)} = \frac{1}{15} \rho_{-1-1}^{(3)} + \frac{1}{3} \rho_{-2-2}^{(3)} + \rho_{-3-3}^{(3)},$$

где

$$\rho_{mm}^{(3)} = \frac{e^{\frac{m}{3}x}}{\text{sh}\left(\frac{7}{6}x\right)}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3. \quad (15)$$

Если $J = 2$, $J' = 1$,

$$W(\theta) = \frac{3}{8\pi} \left\{ \frac{1}{2} (\rho_{11}^{(1)} + \rho_{-1-1}^{(1)}) (1 + \cos^2 \theta) + \rho_{00}^{(1)} \sin^2 \theta \right\}, \quad (16)$$

$$\rho_{11}^{(1)} = \rho_{22}^{(2)} + \frac{1}{2} \rho_{11}^{(2)} + \frac{1}{6} \rho_{00}^{(2)},$$

$$\rho_{30}^{(1)} = \frac{1}{2} \rho_{11}^{(2)} + \frac{2}{3} \rho_{00}^{(2)} + \frac{1}{2} \rho_{-1-1}^{(2)}, \quad (17)$$

$$\rho_{-1-1}^{(1)} = \frac{1}{6} \rho_{00}^{(2)} + \frac{1}{2} \rho_{-1-1}^{(2)} + \rho_{-1-1}^{(2)},$$

где

$$\rho_{mm}^{(2)} = \frac{e^{\frac{m}{2}x}}{\operatorname{sh}\left(\frac{5}{4}x\right)} \operatorname{sh}\left(\frac{x}{4}\right), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (18)$$

При $J = 1$, $J' = 2$ угловое распределение γ -квантов описывается формулой (13) со значениями

$$\rho_{22}^{(2)} = \frac{3}{5} \rho_{11}^{(1)},$$

$$\rho_{11}^{(2)} = \frac{3}{10} \rho_{11}^{(1)} + \frac{3}{10} \rho_{00}^{(1)},$$

$$\rho_{00}^{(2)} = \frac{1}{10} \rho_{11}^{(1)} + \frac{1}{10} \rho_{-1-1}^{(1)} + \frac{2}{5} \rho_{00}^{(1)}, \quad (19)$$

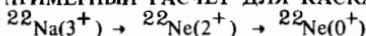
$$\rho_{-1-1}^{(2)} = \frac{3}{10} \rho_{-1-1}^{(1)} + \frac{3}{10} \rho_{00}^{(1)},$$

$$\rho_{-2-2}^{(2)} = \frac{3}{5} \rho_{-1-1}^{(1)},$$

где

$$\rho_{mm}^{(1)} = \frac{e^{mx}}{\operatorname{sh}\left(\frac{3}{2}x\right)} \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{x}{2}\right). \quad (20)$$

6. ПРИМЕРНЫЙ РАСЧЕТ ДЛЯ КАСКАДНОГО ПЕРЕХОДА



Радиоактивное ядро ${}^{22}\text{Na}$ имеет период полураспада 2,6 года, спин-четность 3^+ и магнитный момент в ядерных магнетонах $\mu = +1,15^{12/}$. В результате гамов-теллеровского β^+ -перехода с максимальной энергией позитронов 550 кэВ (или К-захвата) образуется промежуточное ядро ${}^{22}\text{Ne}$ со спином $J^+ = 2$. Его период полураспада составляет $3,7 \cdot 10^{-12}$ с, т.е. время жизни очень мало по сравнению с характерным периодом для сверхтонкого расщепления атомных уровней. Ядро ${}^{22}\text{Ne}(2^+)$ излучает γ -кванты с энергией 1280 кэВ и переходит в стабильный изотоп ${}^{22}\text{Ne}$ с нулевым спином 0^+ . Схема переходов представлена на рисунке.

В рассматриваемой ситуации угловое распределение γ -квантов с энергией 1280 кэВ относительно направления магнитного поля может быть вычислено по формулам (13) ÷ (15) независимо от того, какому каналу соответствует переход ${}^{22}\text{Na}(3^+) \rightarrow {}^{22}\text{Ne}(2^+) \rightarrow {}^{22}\text{Ne}(0^+)$, β^+ -распаду на позитрон и нейтрино или К-захвату. При этом, в соответствии с (2),

$$x = 0,64 \frac{H_0}{T}, \quad (21)$$

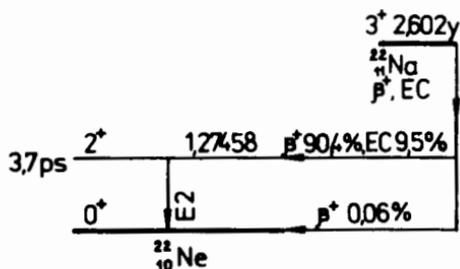
где напряженность магнитного поля задается в теслах, спиновая температура в милликельвинах. Простые вычисления дают

$$W(x, \theta) = \frac{1}{4\pi} [f_1(x) - f_2(x) \cos^4 \theta - f_3(x) \cos^2 \theta], \quad (22)$$

где

$$f_1(x) = \frac{5}{2} \frac{\text{sh}(\frac{x}{6})}{\text{sh}(\frac{7}{6}x)} [\text{ch} x + \text{ch}(\frac{2}{3}x) + \frac{3}{5} \text{ch}(\frac{x}{3}) + \frac{1}{5}], \quad (23)$$

$$f_2(x) = \frac{5}{2} \frac{\text{sh}(\frac{x}{6})}{\text{sh}(\frac{7}{6}x)} [\text{ch} x + \frac{1}{3} \text{ch}(\frac{x}{3}) - \frac{7}{3} \text{ch}(\frac{2}{3}x) + 1], \quad (24)$$



$$f_3(x) = \frac{5}{2} \frac{\text{sh}(\frac{x}{6})}{\text{sh}(\frac{7}{6}x)} [2\text{ch}(\frac{2}{3}x) - \frac{4}{5}\text{ch}(\frac{x}{3}) - \frac{6}{5}]. \quad (25)$$

Если $x \ll 1$ (слабое магнитное поле, высокая спиновая температура), то $f_1(x) \approx 1$, $f_2(x) = f_3(x) = 0$ и угловое распределение γ -квантов, как и следовало ожидать, изотропно. При $x \gg 1$ имеет место резкая анизотропия:

$$W(\theta) = \frac{5}{16\pi} (1 - \cos^4\theta). \quad (26)$$

Подчеркнем, что угловое распределение (22) с коэффициентами, определенными согласно (23)-(25), автоматически удовлетворяет условию нормировки

$$4\pi \int_0^1 W(x, \theta) d(\cos\theta) = 1. \quad (27)$$

Рассмотрим величину

$$f_4(x) = W(x, 0)/W(x=0) = f_1(x) - f_2(x) - f_3(x).$$

Легко видеть, что

$$f_4(x) = 5 \frac{\text{sh}(\frac{x}{6})}{\text{sh}(\frac{7}{6}x)} [\frac{2}{3}\text{ch}(\frac{2}{3}x) + \frac{8}{15}\text{ch}(\frac{x}{3}) + \frac{1}{5}]. \quad (28)$$

Согласно (22) имеем $W(x, \pi/2)/W(x=0) = f_1(x)$. Отношение интенсивностей излучения под углом $\theta = 0$ и $\theta = \pi/2$ принимает вид

$$\frac{W(x, 0)}{W(x, \pi/2)} = \frac{f_4(x)}{f_1(x)} = \frac{2}{3} \frac{10 \cdot \text{ch}(\frac{2}{3}x) + 8 \text{ch}(\frac{x}{3}) + 3}{5 \text{ch} x + 5 \text{ch}(\frac{2}{3}x) + 3 \text{ch}(\frac{x}{3}) + 1}. \quad (29)$$

Функции $f_1(x)$, $f_2(x)$, $f_3(x)$ и $f_4(x)$ протабулированы. В приведенной таблице величина x_{Na} определена в соответствии с формулой (21); в последних двух столбцах даны поляризации протонов и дейтронов при тех же значениях спиновой температуры и магнитного поля, вычисленные по формуле (3) с $x_p = \mu_p x_{Na} / \mu_{Na}$, $x_D = \mu_D x_{Na} / \mu_{Na}$. При $H = 27$ кГц, $T = 1,3$ МК

$x(^{22}\text{Na}_{11})$	$f_1(x)-1$	$f_2(x)$	$f_3(x)$	$f_4(x)$	P_P	P_D
$1,81 \cdot 10^{-3}$	$5,85 \cdot 10^{-8}$	$3,57 \cdot 10^{-12}$	$4,72 \cdot 10^{-7}$	1,000	$2,9 \cdot 10^{-3}$	$4,27 \cdot 10^{-4}$
$6,28 \cdot 10^{-2}$	$1,88 \cdot 10^{-4}$	$1,26 \cdot 10^{-7}$	$5,64 \cdot 10^{-4}$	0,9996	0,1	$2,05 \cdot 10^{-2}$
0,127	$7,66 \cdot 10^{-4}$	$2,09 \cdot 10^{-6}$	$2,29 \cdot 10^{-3}$	0,9985	0,2	$4,14 \cdot 10^{-2}$
0,194	$1,78 \cdot 10^{-3}$	$1,13 \cdot 10^{-5}$	$5,33 \cdot 10^{-3}$	0,9964	0,3	$6,32 \cdot 10^{-2}$
0,265	$3,32 \cdot 10^{-3}$	$3,96 \cdot 10^{-5}$	$9,94 \cdot 10^{-3}$	0,993	0,4	$8,64 \cdot 10^{-2}$
0,344	$5,54 \cdot 10^{-3}$	$1,11 \cdot 10^{-4}$	$1,65 \cdot 10^{-2}$	0,989	0,5	0,112
0,434	$8,74 \cdot 10^{-3}$	$2,78 \cdot 10^{-4}$	$2,60 \cdot 10^{-2}$	0,982	0,6	0,141
0,543	$1,35 \cdot 10^{-2}$	$6,70 \cdot 10^{-4}$	$4,00 \cdot 10^{-2}$	0,972	0,7	0,175
0,688	$2,11 \cdot 10^{-2}$	$1,67 \cdot 10^{-3}$	$6,22 \cdot 10^{-2}$	0,957	0,8	0,221
0,922	$3,59 \cdot 10^{-2}$	$5,08 \cdot 10^{-3}$	0,105	0,926	0,9	0,291
1,15	$5,24 \cdot 10^{-2}$	$1,13 \cdot 10^{-2}$	0,150	0,891	0,95	0,356
1,31	$6,50 \cdot 10^{-2}$	$1,81 \cdot 10^{-2}$	0,184	0,862	0,97	0,401
1,66	$9,25 \cdot 10^{-2}$	$4,04 \cdot 10^{-2}$	0,253	0,799	0,99	0,489
1,88	0,109	$5,99 \cdot 10^{-2}$	0,292	0,757	0,995	0,540
2,38	0,144	0,121	0,360	0,663	0,9990	0,641

($x = 1, \dots, 3$) нормированное угловое распределение γ -квантов имеет вид

$$W = \frac{5}{8\pi} \{0,426 - 0,0705 \cdot \cos^2\theta - 0,0125 \cdot \cos^4\theta\}. \quad (30)$$

В этих же условиях из (28) следует $f_4(1,33) \approx 0,86$, т.е. эффект составляет примерно 14%.

В заключение авторы выражают благодарность А.П.Чеплакову за помощь в составлении таблицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зибан К. Альфа-бета-гамма-спектроскопия. М.: Атомиздат, 1969, с.330.
2. Кожушнер М.А. — ЖЭТФ, 1969, 56, вып.1, с.246.
3. Ацаркин В.А. Динамическая поляризация ядер в твердых телах. М.: Наука, 1980, §§4,7.
4. De Boer W. Dynamic Orientation of Nuclei at Low Temperatures. CERN, 74-11, Geneva, May 13, 1974.
5. De Boer W. et al. — J. Low Temp. Phys., 1974, 15, p.249.
6. Goldman M., Cox S.F.J., Bouffard V. — J.Phys.C, 1974, v.7, p.2940.

7. Киселев Ю.Ф., Матафонов В.Н. — ПТЭ, 1977, 5, с.55.
8. Смарт Дж. Эффективное поле в теории магнетизма. М.: Мир, 1968, с.16.
9. Балдин А.М. и др. Кинематика ядерных реакций, ч.II. М.: Атомиздат, 1968, §§50,55.
10. Lee N.D., Yang C.N. — Phys.Rev., 1956, v.104, p.254.
11. Шмушкевич И.М. — ЖЭТФ, 1957, т.33, с.1477.
12. Lederer M.C. et al. Table of Isotopes, N.Y., 1978.
13. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика, М.: Наука, 1980, с.69.
14. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика, М.: Наука, 1969, с.25.
15. Давыдов А.С. Теория атомного ядра, М.: ГИФМЛ, 1958, гл.6.

Рукопись поступила 5 марта 1988 года.

GAUGE DEPENDENCE OF ULTRAVIOLET BEHAVIOUR OF QCD

D.V.Shirkov, O.V.Tarasov

As is well known, the two-loop contribution to the beta-function of the QCD running coupling $\bar{\alpha}_s$ can depend on the gauge parameter a . In this paper the results of renormalization-group (RG) analysis of several MOM schemes with this dependence are presented. It is shown that for some cases gauge dependence can essentially influence the ultraviolet behaviour of $\bar{\alpha}_s$ and, particularly, destroy the asymptotic freedom property. Possible "physical" implications of these phenomena are discussed.

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

Калибровочная зависимость ультрафиолетового поведения в КХД

Д.В. Ширков, О.В.Тарасов

Как известно, двухпетлевой коэффициент бета-функции эффективного заряда КХД $\bar{\alpha}_s$ может содержать зависимость от калибровочного параметра. В работе выполнен ренормгрупповой анализ нескольких MOM-схем, в которых такая зависимость имеет место. Показано, что в ряде случаев калибровочная зависимость существенно влияет на ультрафиолетовое поведение $\bar{\alpha}_s$ и, в частности, может приводить к нарушению асимптотической свободы. Обсуждены возможные следствия этого феномена для физических величин.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

1. INTRODUCTION

Experiments that will be accessible in the near future can provide a possibility of more accurate comparison of QCD predictions. We have in mind the check of multi-loop contributions as well as effects of heavy quark masses. This especially concerns the 2-loop corrections.

The results of 2-loop calculations depend on the renormalisation scheme as well as on the choice of gauge. The scheme and gauge dependence of 2-loop QCD approximation has been considered in papers^{1-5/}. It was found^{1/} that in MOM schemes 2-loop contribution to the beta-function of the QCD effective coupling $\bar{\alpha}_s$ (α_s being equal to $g^2/4\pi$) does depend on the gauge parameter a . Due to this, the ultra-

violet asymptotic (UVA) behaviour of \bar{a}_s must be defined by the RG analysis of the system of two differential equations

$$\frac{d\bar{a}(\ell)}{d\ell} = \beta(\bar{a}, \bar{a}), \quad \frac{d\bar{a}(\ell)}{d\ell} = \bar{a} b(\bar{a}, \bar{a}), \quad \ell = \ln \frac{Q^2}{\mu^2} \quad (1)$$

with boundary conditions: $\bar{a}(0) = a$, $\bar{a}(0) = a$ (where the subscript "s" in a_s is omitted). Here it is essential that the group generator β depends on the running gauge parameter \bar{a} .

In this paper we present the results of detailed analysis of the system (1) taken in 2-loop approximation for five different MOM schemes which are more often used in calculation of observed processes. It is shown that the UVA behaviour can essentially depend on the gauge parameter initial value $a(0) = a$. In three of our schemes for negative a , the \bar{a} UVA is governed by a fixed point in the phase plane (\bar{a}, \bar{a}) , see fig. 1. The coordinates of this point depend upon a renormalization scheme and flavour number f - see the Table. In all five schemes in some part of the phase plane for $a > a_*$ ($a > 0$) solutions for $\bar{a}(\ell)$ exist only in the finite interval of logarithmic argument $\ell < \ell^*$ as at $\ell = \ell^*$ the running \bar{a} has a pole (the trouble of "zero-change" type). For the cases when the asymptotic freedom (AF) for \bar{a} takes place we give relation between the scale parameter Λ for minimal subtraction scheme and its value for momentum subtraction schemes. This relation differs from the analogous one presented in paper ^{1/2}.

2. FORMALISM

We limit ourselves to the case when the gauge is fixed in a covariant way by the term $= -(\partial_\mu A^\mu)^2/2a$ in the Lagrangian. Hence $a = 0$ corresponds to transverse (Landau) gauge and $a = 1$ to the diagonal (Feynman) one. Here, the RG solutions for Green functions and matrix elements can be expressed through the effective (i.e. running) coupling \bar{a} and gauge \bar{a} , which can be found from system (1).

The generators β and b in perturbation theory can be expressed in the form

$$\beta(a, a) = -\beta_1 \frac{a^2}{4\pi} - \beta_2(a) \frac{a^3}{(4\pi)^2} - \dots, \quad (2)$$

$$b(a, a) = b_1(a) \frac{a}{4\pi} + b_2(a) \left(\frac{a}{4\pi}\right)^2 + \dots$$

To find 2-loop terms for MOM schemes it is possible to start with β_2 and b_2 for \overline{MS} and make recalculation using relations between renormalized α , a in a given MOM scheme and those in \overline{MS} scheme

$$\alpha = \alpha_{\overline{MS}} + Q \left(\frac{a}{\overline{MS}} \right) \frac{\alpha_{\overline{MS}}^2}{\overline{MS}} / 4\pi + \dots, \quad (3)$$

$$a = \frac{a}{\overline{MS}} (1 + K \left(\frac{a}{\overline{MS}} \right) \frac{a}{\overline{MS}} / 4\pi + \dots).$$

Then, wanted β_2 and b_2 are expressed through $\beta_2^{\overline{MS}}$ and $b_2^{\overline{MS}}$ with the help of Q and K which can be found from 1-loop calculations. The corresponding relations are

$$\beta_1 = \beta_1^{\overline{MS}} = 11 - \frac{2}{3} f, \quad b_1 = b_1^{\overline{MS}}(a) = \frac{13 - 3a}{2} - \frac{2}{3} f,$$

$$\beta_2(a) = \beta_2^{\overline{MS}} - b_1(a) a \frac{\partial Q(a)}{\partial a}, \quad (4)$$

$$b_2(a) = b_2^{\overline{MS}}(a) + b_1(a) [-Q(a) + a \frac{\partial K(a)}{\partial a}] - K(a) \left[\beta_1 + a \frac{\partial b_1(a)}{\partial a} \right].$$

Here^{/5/}

$$\beta_2^{\overline{MS}} = 102 - \frac{38}{3} f,$$

$$b_2^{\overline{MS}}(a) = \frac{541 - 99a - 18a^2}{8} - \frac{61}{6} f, \quad (5)$$

$$K = -\frac{97}{12} - \frac{3}{2} a - \frac{3}{4} a^2 + \frac{10}{9} f.$$

In contradistinction to K that is universal, as it is related only to 1-loop gluon propagator renormalization, the coefficient Q depends on the choice of a particular MOM scheme^{/2,4,6/}

$$\text{I) } Q = -\frac{169}{12} + \frac{9a}{2} + \frac{3a^2}{4} - \frac{10}{9} f \quad \text{for } a = \Gamma_{\overline{A\eta\eta}}(-\mu^2, -\mu^2, 0)$$

$$\text{II) } Q = -\frac{223}{12} + 3a + \frac{3a^2}{4} - \frac{10}{9} f \quad \text{for } a = \Gamma_{\overline{A\eta\eta}}(0, -\mu^2, -\mu^2)$$

$$\text{III) } Q = -\frac{205}{12} + \frac{9}{2} a + \frac{3}{4} a^2 + R \frac{5 - 8a - a^2}{8} - \frac{10}{9} f, \quad (6)$$

$$\text{for } a = \Gamma_{\overline{A\eta\eta}}(-\mu^2, -\mu^2, -\mu^2)$$

$$(IV) \quad Q = 22 + \frac{9}{4} a - \frac{3a^2}{2} + \frac{a^3}{4} + R \frac{23 - 27a + 6a^2}{12} - f \frac{12 + 8R}{9},$$

$$\text{for } \alpha = \Gamma_{\Delta\Delta\Delta}(-\mu^2, -\mu^2, -\mu^2)$$

$$(V) \quad Q = \frac{41}{2} - \frac{23}{6} a - R \frac{35 + a}{9} - \frac{10}{9} f, \text{ for } \alpha = \Gamma_{\Delta q q}(-\mu^2, -\mu^2, -\mu^2) \quad (6)$$

Here

$$R = - \int_0^1 \frac{2 \ln x dx}{1 - x + x^2} = 2.3439072 \dots$$

and subscripts A, η, q for vertices Γ correspond to the gluon, Faddeev-Popov ghost and quark fields.

3. RESULTS

We present a brief review of our numerical analysis demonstrating a wide scope of diverse type of UVA behaviour possible in different MOM schemes. First, three of our schemes obey the fixed point in the left quadrant, i.e. for some $\bar{a} = a_\alpha$, $a = a_\alpha < 0$, where both the generators β and b are equal to zero. The coordinates a_α and a_α in these schemes for several values of flavour number are given in the Table.

Table

Scheme	f	a_α	a_α
I	3	1.36760	-4.7632
	4	1.35767	-4.6838
	5	1.33731	-4.5961
	6	1.30338	-4.4983
II	3	0.51311	-5.0798
	4	0.51997	-4.9866
	5	0.52567	-4.8856
	6	0.52956	-4.7754
III	3	0.26327	-7.2283
	4	0.27860	-7.0077
	5	0.29556	-6.7757
	6	0.31413	-6.5296

The behaviour of integral curves for the scheme III are qualitatively shown in the left half of Fig.1. For scheme I the left singular point is a stable knot. In its vicinity $\bar{a}(\ell) = a_\infty + A \exp(-\rho\ell)$, $\rho > 0$. However, in the schemes II and III this point turns out to be a focus around which

$$\bar{a}(\ell) = a_\infty + A \exp(-\rho\ell) \cdot \sin[\sigma\ell + \tau].$$

It must be noted that from the analysis of the behaviour of the curves $\alpha_\beta(a)$, $\alpha_b(a)$ defined by the relations $\beta(\alpha_\beta, a) = 0$, $b(\alpha_b, a) = 0$ and our estimate of the magnitude of 3-loop correction to β it is possible to conclude that the effects of 3-loop contribution on the fixed point position (and, possibly, on existence) should be essential.

All five schemes have a stable singular point at $a = a^* = (39-4f)/9$, to which tend solutions from a part of the right quadrant. Solutions from the other part have a quite different UVA behaviour ($\bar{a} \rightarrow \infty$, $\bar{a} \rightarrow 0$ or, in scheme V, to finite value) of "ghost-trouble" type. The scheme IV has only these singularities. In the scheme V the type of the UVA behaviour of $\bar{a}(\ell)$ is essentially dependent on quark number f as well as on quadrant of phase plane: at $a < 0$ there exists a singular point for $f \geq 5$ and in $a > 0$ quadrant — second singular point for $f \geq 4$ values. At the same time for $f = 3$ there exists a region $a > a_0 > 0$ in which our system (1) obeys the solution only for finite values of logarithmic arguments $\ell < \ell_*$. At $\ell = \ell_*$ the effective coupling $\bar{a}(\ell)$ is finite but the effective gauge \bar{a} has a pole singularity (of "zero of the charge" type). The behaviour of the phase curve for this case is qualitatively presented by the dotted line in the upper right part of Fig.1.

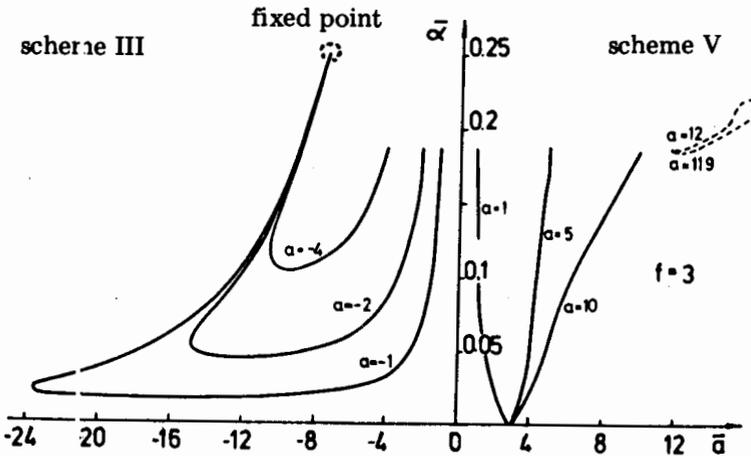


Fig.1

In Fig.2 we show the $\bar{a}(\ell)$ dependence for several cases with $\alpha \leq 0$ for scheme III. For all our calculations we started from the effective coupling boundary value $\bar{a}(0) = 0.19$.

In Fig.3 we give the $\bar{a}(\ell)$ dependence for scheme V for several positive α values.

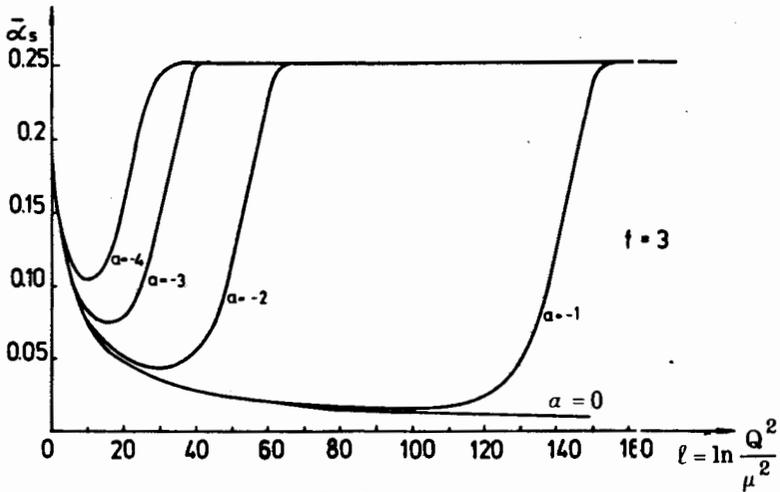


Fig.2

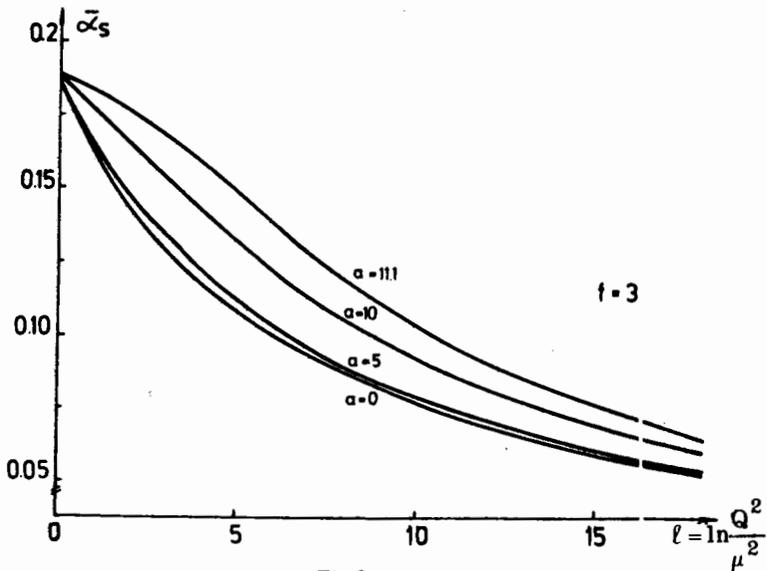


Fig.3

Note here that for the cases when the AF property is not destroyed, there exists a simple relation between the scale parameters Λ_{MOM} and $\Lambda_{\overline{\text{MS}}}$:

$$\Lambda_{\text{MOM}}(a) = \Lambda_{\overline{\text{MS}}} \exp \{ Q(a) / 2\beta_1 \} \quad (7)$$

which was obtained in paper^{/2/} where the gauge parameter a was considered as a fixed one. With due account that it "runs" it is necessary to modify this relation by substituting instead of a its limiting UVA value

$$\Lambda_{\text{MOM}}(a) \rightarrow \Lambda_{\text{MOM}}(a^*) \quad (8)$$

as it follows from the integral curve behaviour presented in the right quadrant of Fig.1. Here, from a practical point of view the equation (7) can be considered as acceptable for a rather large interval of variable ℓ . However, strictly speaking Λ varies with \bar{a} (i.e. with ℓ) and for the description of "real asymptotics", — e.g. in GUT region — it is necessary to use the limiting values as expressed by equation (8).

It is worth mentioning that more accurate analysis needs the inclusion of heavy quark masses that can be performed on the basis of the corresponding RG formalism^{/7/}. It is essential that in this generalization the gauge dependence can be important on the one-loop level.

Note added in proof: When our calculations have been completed we received paper^{/9/} in which part of results for the case I are obtained. In this connection we must mention that qualitatively the effect of existing stable point and destroying the AF property in left quadrant for the schemes I, II was discovered by V.V.Vladimirov and one of us (O.T.) in 1982.

4. PHYSICAL DISCUSSION

The results obtained can be considered as paradoxical, as "QCD practitioners" usually treat the effective coupling \bar{a} as an observable object: it is "measured" by experiment; the physical content of asymptotic freedom phenomena is expressed with the help of \bar{a} behaviour, the UV extrapolation of \bar{a} (as well as \bar{a}_1 and \bar{a}_2 of electroweak theory) forms the basis of numerical estimations in the GUT speculations (leptoquark masses and proton decay rate).

Our analysis reveals that, from the principal point of view, the question of gauge dependence merits as much attention as the problem of scheme

dependence. From general arguments it follows that the observed quantities (transition matrix elements) as a whole must be gauge independent. This property can be formulated for each given order of perturbation theory (as it is well known from the practice of QED calculations). However, theoretical results referred to the concrete renormalization scheme, include effects of the RG summation of infinite sequences of the leading and subleading logarithms in all orders of perturbation theory. Besides, in the RG calculations we start with approximate expression obtained by truncating the expansion in noncovariant object. Due to this, the property of gauge invariance, like the scheme independence, can be easily violated. Its restoration needs a special procedure.

From the practical point of view, it is safely enough to use more popular values $a = 0$ and $a = 1$ because, as follows from our analysis, in the strip $0 \leq a \leq a^*$ the effective coupling with sufficient accuracy can be considered as independent of a . Nevertheless, in some situations, for example, in infrared QCD analysis (confinement problem), it may happen to be more preferable to use gauge parameter value out of the safety region. Thus for the Arbutov gauge ($a = -3$)^{8/} it is necessary to be careful in conjunction of the results of infrared analysis with the UVA.

The authors are grateful to V.V. Vladimirov for the help in calculations, to Drs. A.A. Vladimirov, D.I. Kazakov and A.V. Racyushkin for the discussions of the results. We are also indebted to Prof. R. Raczka for stimulating conversation with one of us (D.Sh.) which gave impetus for completing this investigation.

REFERENCES

1. Espriu D., Tarrach R. — Phys.Rev., 1982, v.D25, p.1073.
2. Celmaster W., Gonsalves R.J. — Phys.Rev., 1979, v.D20, p.1420
3. Braaten E., Leveille J.P. — Phys.Rev., 1981, v.D24, p.1369.
4. Pascual P., Tarrach R. — Nucl.Phys., 1980, v.B174, p.128.
5. Egoryan E.Sh., Tarasov O.V. — Theor. and Math.Fys., 1978, v.41, p.863.
6. Dhar A., Gupta V. — Phys.Lett., 1981, v.101B, p.432.
7. Shirkov D.V. — Yad.Fiz., 1981, v.34, p.300;
Shirkov D.V. — Theor. and Math. Fiz., 1981, v.49, p.291;
Kazakov D.I., Shirkov D.V. In: Proc. XXIII Int.Conf.H.E.Phys., Leipzig, 1985, v.2, p.89.
8. Arbuzov B.A. et al. — Zeit.Phys.C, 1986, v.30, p.287;

Arbuzov B.A. IHEP, preprint No. 87-28, Serpukhov, 1987, see also
Particles and Nuclei, v.19, pp.5-50 (in Russian).

9. Rączka P.A., Rączka R. ISAS preprint, 27/88/EP, Trieste, 1988.

Received on April 6, 1988.

О РАСХОДИМОСТИ ЗНАЧЕНИЙ ЭНЕРГИЙ СВЯЗИ ДЕЙТРОНА, ИЗМЕРЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ ППД И КДГС

А.И.Иванов*, Ц.Вьлов, В.М.Горожанкин,
В.Н.Покровский, И.Ф.Учеваткин*

Поскольку энергетическая шкала полупроводниковых спектрометров основывается на кристалл-дифракционных данных, обнаруженная недавно заметная разница в значениях энергии связи дейтрона $\text{Sn}(^2\text{H})$, измеренной на ППД- и КДГС-спектрометрах, может оказаться весьма важной. Были повторены измерения γ -лучей из реакции $^1\text{H}(n, \gamma)$ и подтверждены прежние результаты, полученные с помощью ППД-спектрометров. В то же время наши данные по γ -лучам из реакции $^{35}\text{Cl}(n, \gamma)$, которые находятся также в области 2 МэВ, полностью согласуются с данными КДГС. Итак, отмеченное выше расхождение остается в силе и нуждается в дальнейшем исследовании.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

About Discrepancy in Values of Deuteron Binding Energy Measured with Semiconductor Detectors and Crystal-Diffraction Gamma-Spectrometer

A.I.Ivanov et al.

The recently discovered marked discrepancy in value of deuteron binding energy $\text{Sn}(^2\text{H})$, as measured with Ge(Li) and CD spectrometers, may be of primary importance as the energetic scale of spectrometers, is based on crystal-diffraction spectrometer data. The measurement of γ -rays in the $^1\text{H}(n, \gamma)$ reaction was repeated and earlier results on $\text{Sn}(^2\text{H})$ with Ge(Li) spectrometers were confirmed. At the same time the Ge(Li) data on γ -rays located in the same 2 MeV region from $^{35}\text{Cl}(n, \gamma)$ reaction obtained in this work are in complete agreement with CD data. So the above-mentioned discrepancy holds and needs further investigations.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время широко используются два набора^{1,2/} нормалей энергии для градуировки спектрометров с полупроводниковыми детекторами (ППД). Эти наборы распространяются

*ВНИИМ им. Менделеева, Ленинград

до энергии 3500 кэВ, и для их построения были использованы значения энергий гамма-переходов нескольких радионуклидов, измеренные с помощью кристалл-дифракционного гамма-спектрометра (КДГС). Несмотря на некоторые различия в методике построения этих наборов в работах ^{/1,2/}, между полученными данными наблюдается хорошее согласие (см. рис.3 в ^{/1/}).

С помощью методов прецизионной спектроскопии (см., например, ^{/3/}) удается достичь статистической точности определения энергии исследуемых переходов порядка нескольких эВ, что сравнимо с погрешностями, обусловленными неточностями в энергии нормалей. Наличие хорошо установленной энергетической шкалы позволяет использовать измерения с ППД для определения таких фундаментальных констант, как масса электрона (см. ^{/4/}) или разности масс покоя нейтрона и атома водорода.

В последнем случае измеряется энергия покоя гамма-лучей в реакции захвата тепловых нейтронов водорода $^1\text{H}(n,\gamma)$. Согласно наиболее точным измерениям, сделанным на ППД-спектрометрах, энергия связи дейтрона $\text{Sn}(^2\text{H})$ составляет (в эВ)

$$2224\,567\,(12)^{/5,8/} - 1978\text{ г.}$$

$$2224\,564\,(17)^{/6/} - 1980\text{ г.}$$

$$2224\,575\,(9)^{/7/} - 1982\text{ г.}$$

$$2224\,563\,(10)^{/8/} - 1982\text{ г.}$$

$$2224\,574\,(9)^{/9/} - 1983\text{ г.}$$

Все измерения выполнены в шкале, определяемой главной спектроскопической нормалью ^{/10/}

$$E(\gamma_{411,8}^{198}\text{Hg}) = 411,8044(11). \quad (1)$$

Значения в скобках — стандартные отклонения с учетом систематической погрешности в шкале энергий (1), которая в области 2 МэВ составляет около 6 эВ (2,63 ppm).

Как видно, приведенные данные об $\text{Sn}(^2\text{H})$ даже за вычетом систематической погрешности не противоречат друг другу. Однако недавно появилась работа ^{/11/}, в которой величина $\text{Sn}(^2\text{H})$ измерена на КДГС с большой точностью и приведено значение

$$\text{Sn}(^2\text{H}) = 2\,224\,589,0(2,2)\text{ эВ}, \quad (2)$$

которое заметно превышает результаты, полученные с помощью ППД. Кроме того, на КДГС измерены γ -лучи от реакции $^{35}\text{Cl}(n,\gamma)$, также расположенные в области 2 МэВ.

В этой связи мы попытались заново измерить γ -лучи в реакциях $^1\text{H}(n,\gamma)$ и $^{35}\text{Cl}(n,\gamma)$ с помощью ППД с тем, чтобы установить возможный источник расхождений.

ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА И РЕЗУЛЬТАТЫ

Схема эксперимента показана на рис.1. Источник нейтронов (^{252}Cf , $5 \cdot 10^6$ нейтрон/с) располагался в торце цилиндра, наполненного дважды дистиллированной водой, служившей замедлителем нейтронов. Детектор γ -лучей (Ge объемом 100 см^3 и разрешением 2,1 кэВ на γ -линии 1,3 МэВ ^{60}Co) помещался внутри свинцового коллиматора и защищался от прямого попадания излучений ^{252}Cf свинцовым фильтром толщиной 10 см.

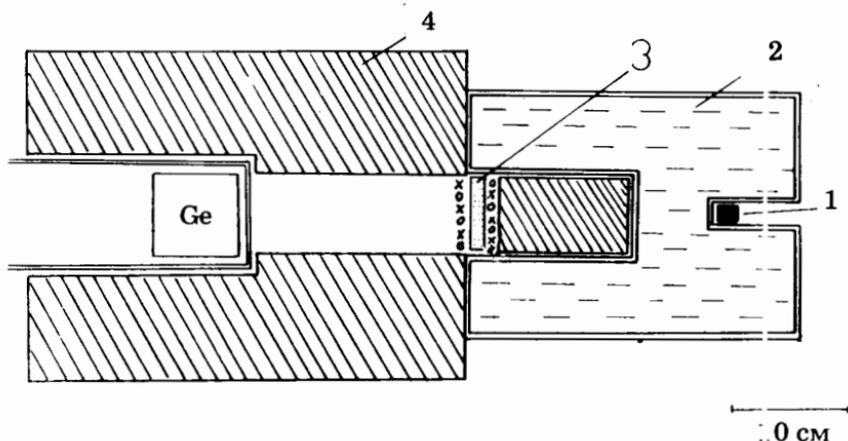


Рис.1. Геометрия экспериментов по измерению энергий γ -лучей при захвате нейтронов ^1H и ^{35}Cl . Ge - γ -детектор; x, o - калибровочные γ -источники; 1 - источник нейтронов, ^{252}Cf ; 2 - замедлитель нейтронов, H_2O ; 3 - образец-мишень; 4 - коллиматор, Pb.

В качестве мишеней использовались цилиндрический блок парафина, либо гранулированный NaCl природного изотопного состава (^{35}Cl - 75,5%), помещавшийся в тонкостенный полиэтиленовый цилиндр диаметром 60 мм и толщиной 30 мм. Поскольку для прецизионного определения энергии существенно, чтобы геометрические условия исследуемого излучения и калибровочных источников были близки, последние равномерно распределялись по торцам мишени.

Использованный в эксперименте спектрометрический тракт включал в себя усилитель ORTEC-572, 13-разрядный АЦП С-400 фирмы "Schlumberger" и анализатор в стандарте КАМАК^{12/}. Нелинейность спектрометра исследована с помощью набора радионуклидов ^{66}Co , ^{60}Co , ^{65}Zn , ^{88}Y , ^{144}Ce и ^{48}V согласно процедуре, описанной в^{13/}.

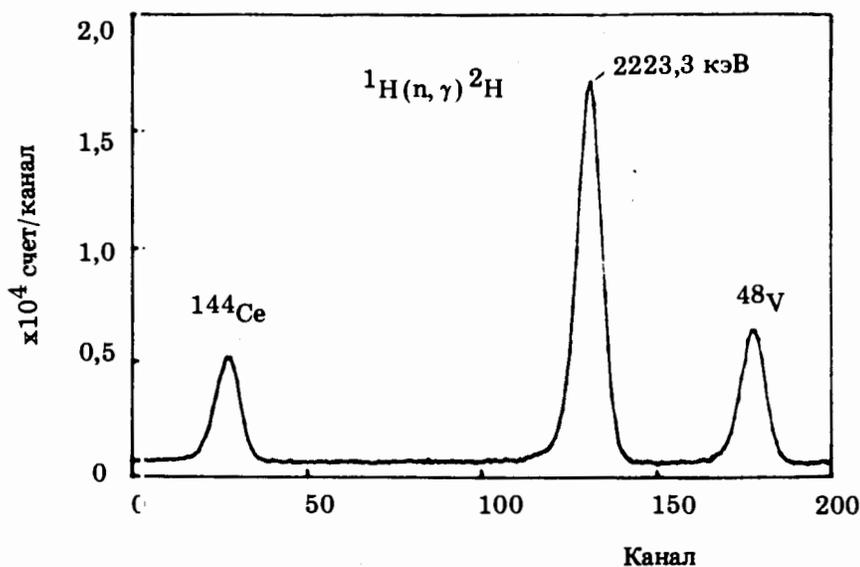


Рис.2. Участок аппаратного спектра, полученного при захвате теплых нейтронов ^1H ($T_{\text{изм.}} = 8 \text{ ч}$).

Для $^1\text{H}(n, \gamma)$ -реакции было проведено 8 измерений спектра γ -лучей с реперами ^{144}Ce и ^{48}V . Типичный аппаратный спектр показан на рис.2. В результате обработки получено значение (с учетом энергии отдачи ядра)

$$\text{Sn}(^2\text{H}) = 2\,224\,564(10) \text{ эВ}. \quad (3)$$

Это значение согласуется с предшествующими измерениями на ППД и по-прежнему не согласуется с величиной (2), измеренной на КДГС.

Заметим, что в исследуемом пике (2224 кэВ) содержится незначительная доля (около 5%), обусловленная излучением, возникающим в замедлителе и достигающим детектора. Искажения, вносимые этим фактором, слабо сказываются на определении энергии в силу малой интенсивности указанной компоненты. Кроме того, оценка значения этой компоненты приводит к величине, превышающей (3) примерно на 20 эВ, хотя точность определения здесь невелика из-за малой статистики. Таким образом, эта компонента сдвигала бы полученное значение в сторону больших энергий, т.е. к лучшему согласию с (2).

Для реакции $^{35}\text{Cl}(n, \gamma)$ проведено 10 измерений с внутренними реперами ^{88}Y и ^{144}Ce . Типичный участок аппаратного спек-

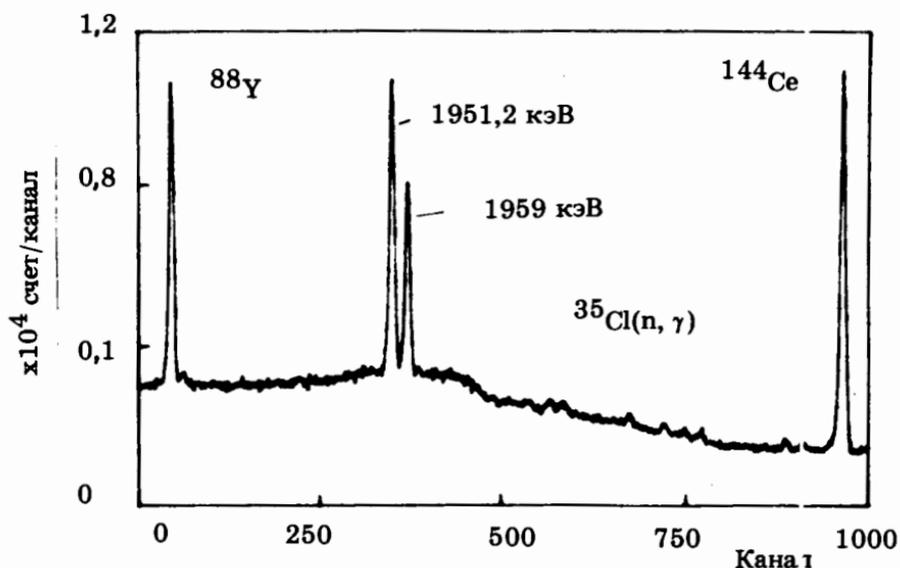


Рис.3. Участок аппаратного спектра, полученного при захвате тепловых нейтронов ^{35}Cl ($T_{\text{изм.}} = 8 \text{ ч}$).

Таблица

Работа ^{/13/}		Работа ^{/14/}		Наст. работы	
Е, эВ	ΔE , эВ	Е, эВ	ΔE , эВ	Е, эВ	ΔE , эВ
786 302,07	0,39	786 303	2	786 303	5
788 428,15	0,44	788 433	3	788 433	3
1164 865,46	0,15	1164 870	3	1164 865	4
1951 140,46	1,37	1951 146	3	1951 144	6
1959 356,16	8,45	1959 355	3	1959 352	7

тра приведен на рис.3. Результаты наших измерений, а также^{/13,14/} приведены в таблице. Отметим, что все данные не поправлены на энергию отдачи ядра, а приведенные ошибки не включают погрешностей γ 411,8 кэВ. Как видно из таблицы, наши результаты в пределах погрешностей согласуются с наиболее точными измерениями^{/13/}. Отметим также, что с учетом энергий отдачи ядра сумма энергий каскадных переходов 786 кэВ (≈ 9 эВ) и 1164 кэВ (~ 20 эВ) совпадает с энергией кроссовер-перехода 1951 кэВ (~ 57 эВ) в пределах погрешностей измерений.

НЕКОТОРЫЕ ВЫВОДЫ

Таким образом, результаты измерений γ -лучей из реакции $^{35}\text{Cl}(n, \gamma)$ на ППД и КДГС хорошо согласуются между собой, в то время как данные по энергии связи дейтрона заметно расходятся. Поскольку энергии измеряемых γ -лучей довольно близки друг к другу, невольно возникает вопрос о возможной систематической погрешности в работе^{/11/}, посвященной измерению $\text{Sn}(^2\text{H})$ с помощью КДГС.

Авторы выражают благодарность А.Ф.Новгородову за помощь в приготовлении радиоактивных источников, а также профессору К.Я.Грому за постоянный интерес к данной работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Горюжанкин В.М. и др. Сообщение ОИЯИ Р6-85-268, Дубна, 1985.
2. Hemer R.G. et al. — Nucl. Instr. and Meth., 1978, v.155, p.189.
Greenwood R.G. et al. — Nucl. Instr. and Meth., 1979, v.159, p.465.
3. Вылов Ц. и др. — ЭЧАЯ, 1978, т.9, вып.6, с.1350.
4. Иванов А.И. и др. — В сб.: Краткие сообщения ОИЯИ, №6 (26) -87, Дубна: ОИЯИ, 1987, с.4.
5. Вылов Ц. и др. — ЯФ, 1978, т.28, с.1137.
6. Greenwood R.C., Chrien R.E. — Phys.Rev.C, 1980, v.21, p.498.
7. Van der Leun C., Anderliesten C. — Nucl.Phys.A, 1982, v.380, p.261.
8. Вылов Ц. и др. — ЯФ, 1982, т.32, с.812.
9. Adam J. et al. — Czech.J.Phys.B, 1983, v.33, p.465.
10. Kessler E.G. et al. — Phys.Rev.Lett., 1978, v.140, p.171.
11. Greene G.L. et al. — Phys.Rev.Lett., v.56, p.819.
12. Артюхов В.А. и др. — Сообщение ОИЯИ Р10-87-688, Дубна, 1987.
13. Kessler E.G. et al. — Phys.Rev.C, 1985, v.32, p.374.
14. Kri. sche B et al. — Nucl.Phys.A, 1982, v.386, p.245.

Рукопись поступила 28 марта 1988 года.

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК КИНЕМАТИЧЕСКОГО СЕПАРАТОРА ВАСИЛИСА

А.Н.Андреев, Д.Д.Богданов, В.А.Горшков, А.В.Еремин,
А.П.Кабаченко, О.А.Орлова, Г.М.Тер-Акопян, В.И.Чепигин

Исследованы основные параметры электростатического сепаратора продуктов реакций полного слияния ВАСИЛИСА. Получена эффективность сепарации ядер отдачи для реакций с ионами Ne, P и Ar 4%, 14% и 20% соответственно. Коэффициенты очистки от рассеянных ионов Ar, P и Ne составляют 10^{10} , 10^{11} и 10^{12} . Коэффициент очистки от первичного пучка составляет $10^{15} \div 10^{17}$. С целью определения возможности синтеза новых элементов выполнены предварительные эксперименты.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Investigation of VASSILISSA Kinematic Separator Characteristics

Andreev A.N. et al.

The main parameters of the electrostatic separator for complete fusion reaction products VASSILISSA were investigated. An efficiency of 4%, 14% and 20% was obtained for reactions with Ne, P and Ar ions, respectively. The separation factors for scattered Ar, P and Ne ions were obtained to be equal to 10^{10} , 10^{11} and 10^{12} . The separation factor for primary beam ions is equal to $10^{15} \div 10^{17}$. Previous experiments are carried out in order to determine a possibility of the experiments to synthesize new elements.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.

1. ВВЕДЕНИЕ

Для синтеза и изучения свойств новых изотопов трансфермиевых элементов, удаленных от линии β -стабильности, исследования механизмов взаимодействия сложных ядер и др. в последнее время все шире применяются кинематические сепараторы. К их числу относятся экспериментальные установки, в которых разделение в пространстве траекторий движения искомым нуклидов и фоновых продуктов происходит под влиянием электрических

и магнитных полей. Среди устройств отметим фильтр скоростей SHIP^{1,2/}, который обеспечивает достаточно высокую эффективность регистрации продуктов реакций на пучках тяжелых ионов ($5 \div 20\%$), малое время транспорта продуктов реакций от мишени к детекторам (10^{-6} с), очистку от рассеянных ионов пучка и фоновых продуктов, приемлемую для постановки экспериментов.

В Лаборатории ядерных реакций была поставлена задача создания кинематического сепаратора на пучке тяжелых ионов с массой $A > 20^{3/}$. Из работы^{4/}, в которой описаны эксперименты по синтезу 110 элемента, видно, что сепаратор, предназначенный для синтеза новых нуклидов, должен быть рассчитан на регистрацию продуктов, которые образуются в реакциях с поперечным сечением слияния около 10^{-35} см². В установке ВАСИЛИСА сепарация продуктов реакции полного слияния (ядер отдачи) от пучка и продуктов реакций передач и деления производится ахроматической симметричной системой из трех электростатических диполей, имеющих плоскопараллельные пластины. Триплет квадрупольных линз, расположенный перед этой системой, собирает ядра отдачи, вылетевшие из мишени в направлении пучка в пределах телесного угла $1,2 \cdot 10^{-2}$ ср. Сфокусированные компаунд-ядра практически без потерь проходят через апертуру электростатических диполей. Второй триплет квадрупольных линз, расположенный после системы диполей, служит для фокусировки пучка ядер отдачи на систему регистрации.

В установке используется вращающаяся мишень, частота и фаза вращения которой синхронизируются с частотой и фазой пучка тяжелых ионов циклотрона У-400. Это позволяет проводить эксперименты, в которых мишень облучается пучком ионов аргона с интенсивностью до 10^{13} с⁻¹ в течение длительного времени.

Регистрирующая система^{5/} установки состоит из двух (старт и стоп) времяпролетных детекторов и полупроводникового поверхностно-барьерного детектора (ППД), в который имплантируются ядра отдачи.

Электронная система регистрации накапливает в памяти ЭВМ данные о времени пролета ядер отдачи, их энергии, энергии α -распада и осколков деления, времени поступления сигналов с детекторов, интервалах времени между сигналами от ядер отдачи и сигналов от их α -распада или спонтанного деления. Имеющиеся программы обработки позволяют формировать спектры скоростей и энергии ядер отдачи, α -спектры, двумерные спектры "время пролета — энергия". Эти программы позволяют также находить временные корреляции и выявлять цепочки распадов ядер, определяя периоды полураспада продуктов реакций, и идентифицировать нуклиды по генетической связи в цепочках α -распадов.

2. ЭФФЕКТИВНОСТЬ СЕПАРАЦИИ

Под эффективностью сепарации мы понимаем отношение числа ядер отдачи, попавших в фокальную плоскость установки, к полному числу ядер отдачи, образовавшихся в реакции с тяжелыми ионами и вылетевших из мишени. Установка ВАСИЛИСА способна отсепарировать ядра отдачи, вылетевшие из мишени в направлении пучка под углом не больше ± 52 мрад и имеющие разброс по энергии $\Delta E/E$ и по ионному заряду $\Delta q/q$ не больше $\pm 10\%$. В зависимости от массы бомбардирующего иона и типа реакции число ядер отдачи, имеющих угловые, энергетические и ионные зарядовые распределения, попадающие в соответствующие диапазоны пропускания установки, различны. В настоящей работе приведены данные об эффективности сепарации продуктов реакций типа (HI, xn) при использовании бомбардирующих ионов от Ne до Ag и мишеней с $A > 150$.

Экспериментально эффективность сепарации определялась следующим образом: в первом опыте α -активные ядра отдачи выбивались в Al сборник, расположенный за мишенью в непосредственной близости от нее, затем сборник передвигался к ППД, расположенному в мишенной камере, который регистрировал α -распад продуктов ядерных реакций. Во втором опыте α -активные ядра отдачи проходили через сепаратор на фокальную плоскость и вбивались в ППД, имеющий диаметр чувствительной поверхности 75 мм. В обоих случаях измерялись α -спектры и определялись периоды полураспада продуктов реакции. Для примера на рис.1 приведен спектр сепарированных продуктов реакции

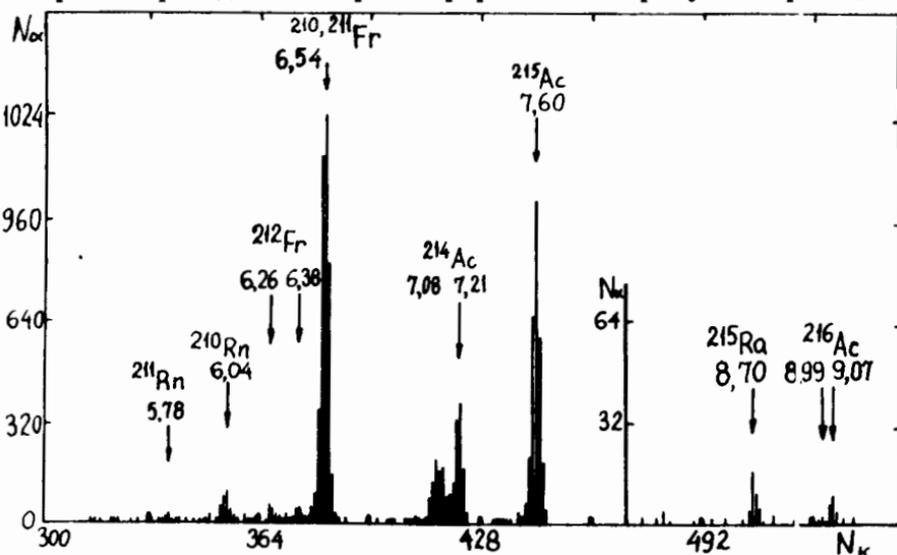


Рис.1. Спектр α -частиц, испускаемых ядрами отдачи, образующимися в реакции $^{22}\text{Ne} + ^{197}\text{Au}$.

$^{22}\text{Ne} + ^{197}\text{Au}$, имплантированных в ППД. Эффективность сепарации ядер отдачи получалась из отношения α -счета ядер, имплантированных в ППД, расположенном в фокальной плоскости сепаратора к α -счету ядер, вбитых в Al сборник, установленный за мишенью, после нормировки на число прошедших сквозь мишень тяжелых ионов и учета эффективности регистрации α -частиц. Результаты экспериментов приведены в таблице.

Таблица

Реакция	Толщина мишени	Эффективность регистрации	Коэффициент очистки
$^{182}\text{W}(^{22}\text{Ne}, 4-5n)^{199,200}\text{Po}$	0,20 мг/см ²	(4 ± 1)%	10 ¹²
$^{170}\text{Er}(^{31}\text{P}, 4n)^{197}\text{Bi}$	0,26 мг/см ²	(14 ± 3)%	10 ¹¹
$^{164}\text{Dy}(^{40}\text{Ar}, 4-5n)^{199,200}\text{Po}$	0,28 мг/см ²	(20 ± 3)%	10 ¹⁰

Полученные значения эффективности сепарации продуктов реакций полного слияния (см. таблицу) являются достаточно высокими. Прямое сравнение с данными для SHIP^{18/} свидетельствует о том, что при использовании ионов Ag эффективность сепаратора ВАСИЛИСА в 2,5 ÷ 3,0 раза выше. На более легких бомбардирующих ионах сепаратор SHIP не используется. С другой стороны, измеренные значения эффективности сепарации в 3-4 раза ниже расчетных оценок, полученных в предположении бесконечно тонкой мишени, параллельного пучка на входе в систему электростатических диполей и 20% ширины зарядового распределения продуктов реакций. Это позволяет надеяться, что при дальнейшей оптимизации режима работы сепаратора удастся несколько повысить значения эффективности, особенно для легких ионов.

3. ОЧИСТКА ОТ ИОНОВ ПУЧКА И ФОНОВЫХ ПРОДУКТОВ

Сепарация ядер отдачи от пучка бомбардирующих ионов проводится ахроматической системой, состоящей из трех электростатических диполей. Максимальная дисперсия по величине E/q достигается в плоскости симметрии системы, проходящей через второй диполь. Пространственное разделение продуктов реакций полного слияния и бомбардирующих ионов достигается уже на выходе из первого диполя, где угол отклонения ядер отдачи составляет $\theta = +8^\circ$. При прохождении ядер отдачи через второй ($\theta = -16^\circ$) и третий ($\theta = +8^\circ$) диполи достигается дополни-

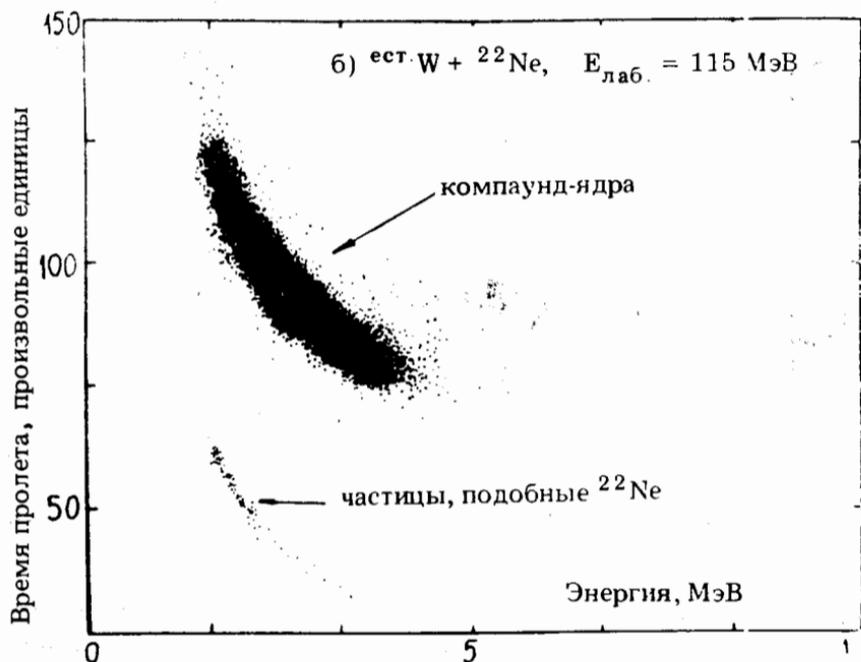
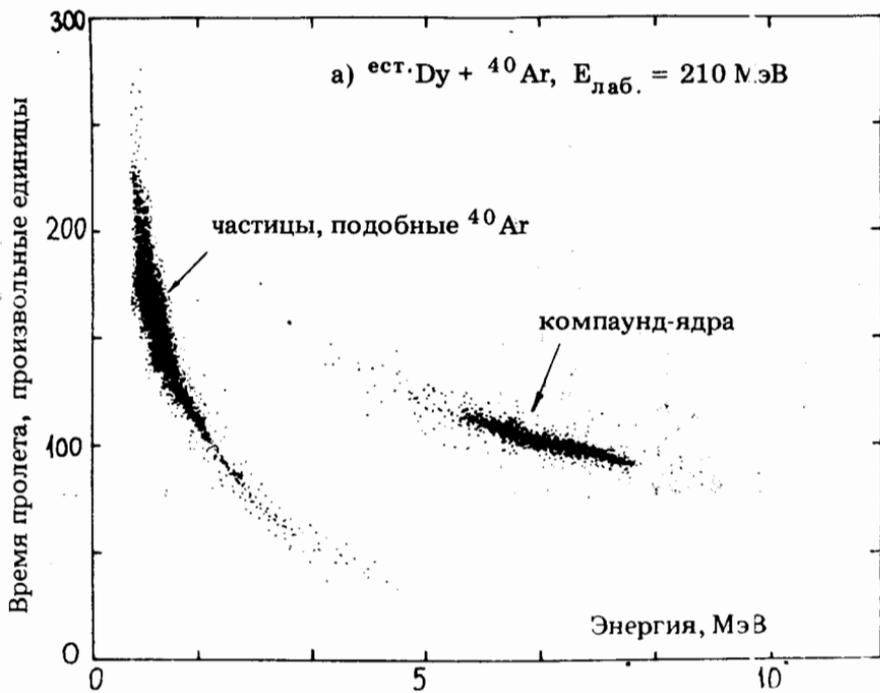


Рис.2. а - двумерный спектр "время пролета - энергия" ядер отдачи реакции ест. Dy + ^{40}Ar . б - то же для реакции ест. W + ^{22}Ne .

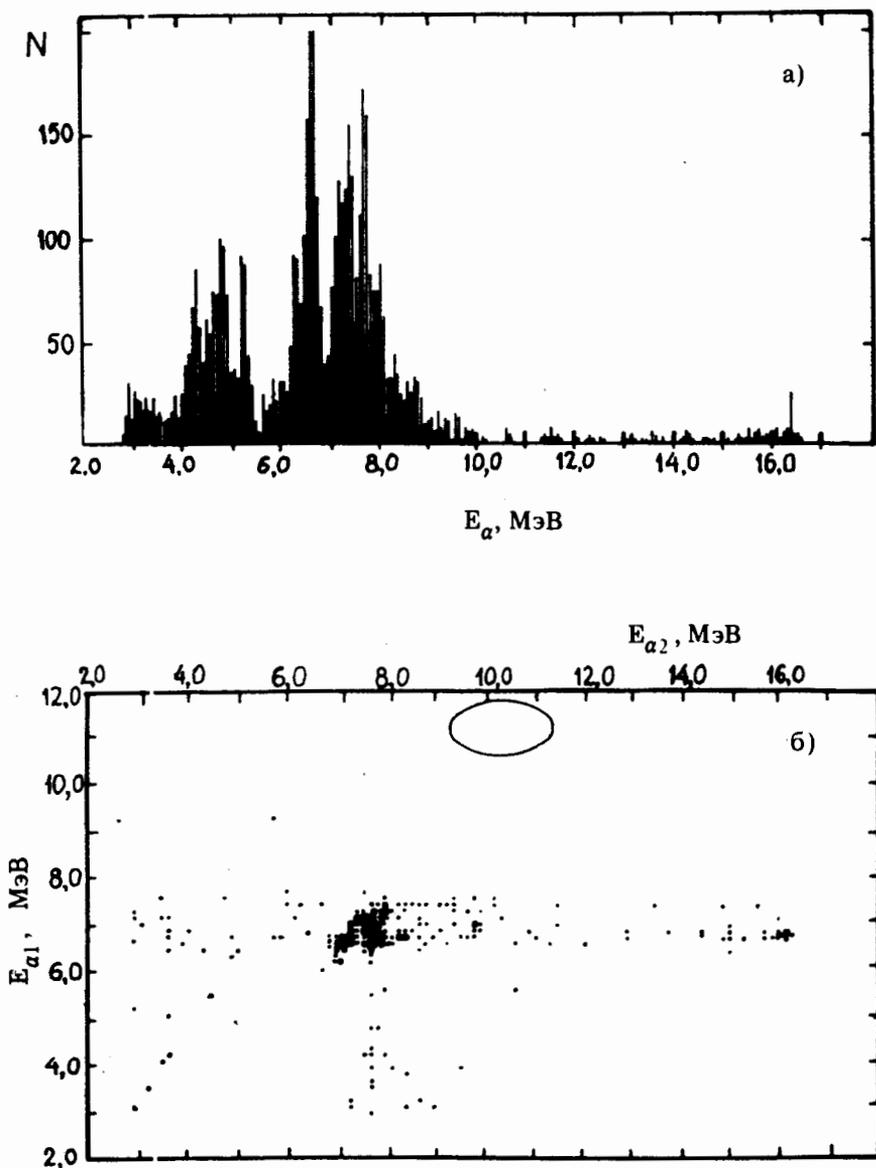


Рис.3. а – спектр α -частиц, зарегистрированных в реакции $^{238}\text{U} + ^{40}\text{Ar}$, б – спектр коррелированных импульсов от α -распадов. Эллипсом обведена область, в которой должна наблюдаться α - α -корреляция для цепочки α -распада материнского ядра 110 и дочернего ядра 108 элементы.

тельная двухступенчатая очистка от рассеянных частиц пучка и от продуктов реакций глубоконеупругих передач и деления, электрическая жесткость которых отличается от электрической жесткости продуктов реакций полного слияния.

Экспериментально коэффициенты очистки определялись из двумерных спектров "время пролета — энергия" (см. рис.2а,б), измеряемых в фокальной плоскости сепаратора и позволяющих грубо идентифицировать продукты реакций по массе. Из рисунков видно, что основным фактором, ограничивающим получение более высоких значений коэффициентов очистки, является присутствие низкоэнергетических частиц с массой, близкой к массе бомбардирующих ионов. Так как в наших экспериментах для создания контрастного пучка используется его предварительное диафрагмирование, то можно предполагать, что фоновые низкоэнергетичные ионы образуются при рассеянии первичного пучка на краях диафрагм. Полученные значения коэффициентов очистки от частиц, подобных пучку и имеющих энергию $E > 1$ МэВ приведены в таблице. Измеренный экспериментально коэффициент очистки от частиц, имеющих энергию более половины энергии первичного пучка, составляет $10^{15} \div 10^{17}$.

Анализ α -спектров, полученных в эксперименте при облучении мишени из свинца пучком ионов аргона ($E_{\text{п.б.}} = 225$ МэВ), дал значение коэффициента очистки $3 \cdot 10^3$ для продуктов реакций многоуклонной передачи Po, At, Rn.

С целью определения возможности проведения экспериментов по синтезу новых элементов были выполнены предварительные эксперименты, в которых пучком ионов ^{40}Ag с энергией 225 МэВ облучалась мишень ^{238}U толщиной $0,5$ мг/см². На рис.3 приведен спектр α -частиц, зарегистрированных в фокальной плоскости установки ВАСИЛИСА детектором, диаметр которого составлял 75 мм. На этом же рисунке показаны результаты анализа, выявляющего присутствие в спектре α - α -корреляций во временном окне $0,5 \div 30$ мс. Видно, что уже в такой простейшей постановке опыта можно рассчитывать на обнаружение редких событий: коррелированного α -распада ядер 110 элемента.

В процессе облучения урановой мишени потоком 10^{17} ионов ^{40}Ag не было зарегистрировано ни одного коррелированного события типа α - α или α - γ при энергии α -частиц в области $10 \div 12$ МэВ и было зарегистрировано всего одно событие в области энергий выше 50 МэВ при облучении этой мишени потоком $3,4 \cdot 10^{17}$ ионов ^{40}Ag . Это соответствует пределу образования изотопов 110 элемента в данном эксперименте $3 \cdot 10^{-34}$ см² и $2 \cdot 10^{-34}$ см² с детектированием по каналу спонтанного деления и α -распада соответственно.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные экспериментальные данные об эффективности сепарации ядер отдачи и коэффициентах очистки от бомбардирующих ионов и фоновых продуктов позволяют планировать проведение экспериментов по синтезу и изучению свойств α -распада новых нуклидов с поперечным сечением образования меньше 10^{-35} см². Простые расчеты показывают, что использование временных корреляций типа ядро отдачи — α - α позволит достичь чувствительности $\sigma < 2 \cdot 10^{-36}$ см² в экспериментах по синтезу α -радиоактивных ядер 110 элемента в реакции $^{238}\text{U} + ^{40}\text{Ar}$.

Авторы благодарны академику Г.Н.Флерову за постоянное внимание и помощь в работе, Е.Н.Воронкову, П.Г.Бондаренко, А.И.Иваненко, К.Д.Туманову за обеспечение бесперебойной работы узлов и агрегатов экспериментальной установки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Münzenberg G. et al. — Nucl. Instr. and Meth., 1987, B26, p.294.
2. Münzenberg G. et al. — Nucl. Instr. and Meth., 1979, 161, p.65.
3. Yerenin A.V. et al. JINR, E15-88-137, Dubna, 1988.
4. Оганесян Ю.Ц. и др. ОИЯИ, Д7-87-392, Дубна, 1987.
5. Андреев А.Н. и др. ОИЯИ, P13-87-914, Дубна, 1987.
6. Munzenberg G. et al. — In: Int. School-Seminar on Heavy Ion Physics, D7-87-68, Dubna: JINR, 1987, p.127.

Рукопись поступила 16 марта 1988 года.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ ТВЕРДЫХ ДИСКОВ В ОКРЕСТНОСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ — ТВЕРДОЕ ТЕЛО

И.Н.Зряков*, В.К.Федянин

Приводятся соотношения для расчета статистической суммы и уравнение состояния для систем твердых частиц, полученные с использованием функции распределения случайных плотноупакованных конфигураций. Проведено исследование этой функции методом Монте-Карло для системы твердых дисков. Определены координаты фазового перехода, который в данном подходе — переход 1-го рода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

State Equation for the System of Hard Discs near the Liquid-Solid Phase Transition

I.N.Zryakov, V.K.Fedyanin

Calculational formulae for the statistical sum and the state equation for the system of rigid particles obtained by using the distribution function of random dense packed configurations are presented. This function was investigated by the Monte-Carlo method for the system of hard discs. The coordinates of a phase transition, which is the first-order transition in our approach, are determined.

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

1. ОСНОВНЫЕ ИДЕИ И СООТНОШЕНИЯ

В работах /1,2/ при исследовании свойств модельных систем точный расчет статистической суммы проводился для специального ансамбля состояний. Такой подход дает возможность последовательного учета несвязанных областей фазового пространства и оценки числа состояний в каждой из этих областей в зависимости от объема V , занимаемого системой N -частиц. Существо метода наиболее наглядно проявляется в геометрической интерпретации.

На рис.1 схематически представлена структура фазового пространства системы твердых частиц. Состояния характеризуют-

*ВНИИПКнефтехим Киевского НПО "Масма", Киев

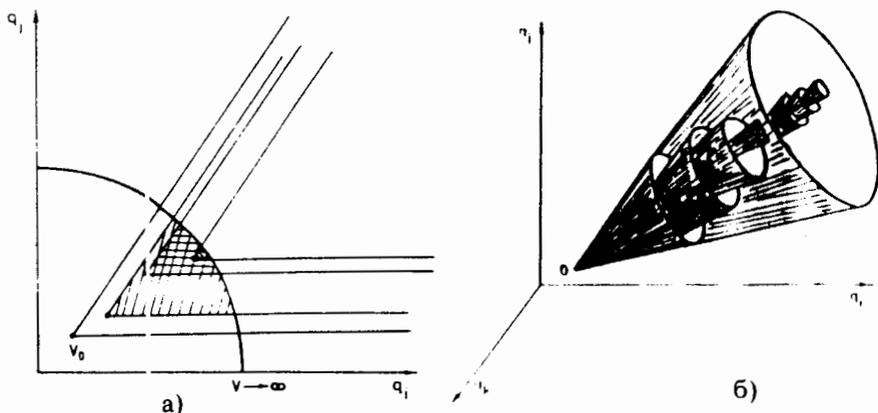


Рис.1. Структура фазового пространства системы твердых частиц. Вершины вложенных друг в друга треугольников (а), конусов (б) соответствуют плотноупакованным состояниям — конденсатам V_k , $k = 0, 1, \dots$.

ся только одним макроскопическим параметром — "объемом". Это состояния с равным объемом, равноудаленные от центра 0. Вершины многомерных конусов представляют такие конфигурации, которые не допускают смещения частиц в координатном пространстве без перестройки всей конфигурации. Такие состояния можно отнести к классу случайно плотноупакованных ^{3/}. Мы будем называть их конденсатом (объем V_k). Для твердых дисков с диаметром, равным 1, наименьшим объемом обладает конденсат с гексагональной плотной упаковкой, $V_k = V_0 = N \cdot \sqrt{3}/2$ (центры дисков размещаются в узлах параллелограммов, построенных из равносторонних треугольников с площадью $S_{\Delta} = \sqrt{3}/4$, и при $N \rightarrow \infty$ площади дисков мало отличаются от площади параллелограмма $\sqrt{3}/2^{4/}$).

Расчет статистической суммы сводится к определению вероятности образования конденсата (комбинированный фактор) и числа состояний, доступных системе в этих условиях при увеличении объема от V_k до V (геометрический фактор). На рис.1 это заштрихованные области. Важно отметить, что внутри области сохраняется относительное расположение частиц, характерное для ее вершины — конденсата, хотя существует возможность перехода из одного типа конфигураций в другой при достаточно больших V . Вклад в статистическую сумму в этом случае определяется произведением $p_k \cdot (V - V_k)^N$, где p_k — вероятность образования конденсата данного типа. Полагая распределение конденсата в фазовом пространстве непрерывной функцией $\Omega(V_k)$, получим

$$p_k = \Omega(V_k) / \int_{V_0}^V \Omega(V_k) dV_k. \quad (1)$$

При сжатии системы твердых частиц уменьшается доступная область фазового пространства для всех типов конфигураций, затем начинают выключаться отдельные типы конфигураций. При предельно больших плотностях основную роль играют конфигурации, близкие к плотной гексагональной решетке. Определяющим критерием типа конфигурации в данном рассмотрении является макроскопическая величина V_k — объем конденсата.

Для статистической суммы тогда получим

$$Q(V) = \frac{1}{N!} \int_{V_0}^V (V - V_k)^N \Omega(V_k) dV_k / \int_{V_0}^V \Omega(V_k) dV_k. \quad (2)$$

Расчет давления в системе проводится по следующему соотношению:

$$\beta p = N \int_{V_0}^V (V - V_k)^{N-1} \Omega(V_k) dV_k / \int_{V_0}^V (V - V_k)^N \Omega(V_k) dV_k - \quad (3)$$

$\Omega(V)$

$$\int_{V_0}^V \Omega(V_k) dV_k$$

Функция $\Omega(V_k)$ точно определена для модельных систем /1-3/. В случае твердых дисков такой расчет не представляется возможным, поэтому для оценки $\Omega(V_k)$ нами использован метод Монте-Карло.

2. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО, ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ПОСТРОЕНИЮ СЛУЧАЙНО ПЛОТНОУПАКОВАННОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Для построения конденсата твердых дисков предлагается процедура, сходная с методикой формирования случайно плотноупакованной конфигурации /5/. Частицы добавляются в группу так, чтобы каждая в итоге касалась одновременно минимум двух частиц на поверхности группы. Рост конденсата происходит последовательными слоями координационными сферами. Присоединение частицы к группе заканчивается, если сдвиг внутри соответствующего $(n+1)$ -слоя невозможен. Последующие слои, дополняя конденсат по такому принципу, занимают диски с наружной стороны.

Получающиеся конфигурации характеризуются тем свойством, что любая из частиц имеет 4-5 соседей, прилегающих вплотную

к ней. При добавлении слоя из n частиц образуется от n до $2n$ вакансий для частиц следующего слоя. Они заполнялись случайным образом. Естественно, что заполнение одной вакансии зачастую приводило к тому, что в соседнюю с ней уже нельзя было поместить частицу этого же слоя.

В^{1/5} при построении случайно плотноупакованной конфигурации твердых шаров предлагается, наращивая систему, помещать частицу в углубление на поверхности, ближайшее к центру системы, затем все более удаляясь от него. Поскольку в реальной системе многих частиц нет выделенного центра, нами этот прием не использовался.

Процесс формирования конденсата начинается с формирования первой координационной сферы вокруг частицы путем случайно задаваемых угловых координат ее соседей. Заполнение проводится до тех пор, пока есть вакансии на поверхности центральной частицы. Первая координационная сфера может состоять из 4 или 5 частиц. В точках пересечения окружностей, проведенных из центров частиц первой координационной сферы радиусом, равным диаметру частицы, помещаются частицы второй сферы и т.д.

Сделан подсчет числа частиц, заполнивших некоторую площадь на плоскости (основную ячейку). Количество частиц, поместившихся в основную ячейку, и определяло плотность конденсата.

Результаты определения функции $\Omega(V_k)$ представлены на рис.2. Легко видеть, что так же, как и в^{1, 2/}, она моделирует нормальное распределение объема конденсата и может быть представлена в виде

$$\Omega(V_k) = \exp\left[-\frac{\alpha}{N}(V_k - V_r)^2\right], \quad (4)$$

где V_r — "объем" наиболее вероятного конденсата. Задача наших исследований — определение α и V_r . Напомним, что для модели^{1/} $\alpha = 1$, $V_r = 1,5V_0$; в^{2/} $\alpha = 1$,

$V_r = 1,3V_0$. Численные эксперименты проводились для ячеек различного размера и формы. Для круга радиусом 5,171 было

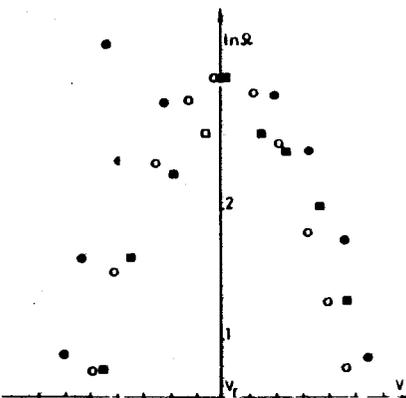


Рис.2. Функция распределения объема конденсата $\Omega(V_k)$ (цена деления $0,01V_0$). ■ — данные для 116 частиц в круглой основной ячейке, о — для 88 частиц в круглой основной ячейке, ● — для 73 частиц в шестиугольной основной ячейке.

сгенерировано 6000 конфигураций, для круга радиусом 5,917 — 5000. Время, затрачиваемое на генерацию 1000 конденсатов, составляет примерно 1 час на ЭВМ ЕС 1055. Наиболее вероятные числа частиц, заполнивших эти ячейки, — 88 и 116 соответственно. Кроме того, было проведено 3000 экспериментов по заполнению ячейки в форме правильного шестиугольника с наибольшей диагональю 10,015. В этом случае наиболее вероятен конденсат с $N = 73$. Очевидно, что во всех этих случаях "удельный объем" не может быть определен простым делением площади основной ячейки на число заполнивших ее частиц. Мы решили проблему "граничных условий", вводя коррекцию при расчете удельного объема, определяемую для правильной решетки. В случае гексагональной плотноупакованной решетки в ячейке в форме правильного шестиугольника с наибольшей диагональю 6,8, 10 и 12 помещаются соответственно 37, 61, 91 и 127 частиц. Легко рассчитать, что удельный объем в этих случаях должен определяться по формуле $v = S/N + \delta$, где S — площадь шестиугольника, а δ — поправка, равная 0,27, 0,213, 0,176 и 0,15 соответственно. Таким образом, для любого числа можно воспользоваться аппроксимацией этой зависимости. Описанные выше эксперименты дали следующие результаты для V_r : $V_r = 1,27V_0$; $1,24V_0$, $1,25V_0$. Оценки для α получены путем обработки всех данных, представленных на рис. 2, в предположении $N \approx 100$. Подводя итоги моделирования, получим

$$V_r = (1,25 \pm 0,02) V_0, \quad \alpha = 27 \pm 5. \quad (5)$$

3. УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Соотношения (3), (4) и (5) позволяют рассчитывать давление в системе при любых плотностях. Первый член в правой части (3) может быть представлен как $N \cdot (V - V_k^*)$, где V_k^* определяется из условия максимума по V_k произведения

$$(V - V_k)^N \exp\left[-\frac{\alpha}{N} (V_k - V_r)^2\right],$$

а второй член легко вычислить, используя асимптотику интеграла вероятностей. Переходя к приведенным величинам $[1, 2]_{..} = V/V_0$ и $\pi = \beta p V_0$, $\beta = (k_0 - T)^{-1}$, получим

$$\pi(r) = \begin{cases} (r - b(r))^{-1} + 2\alpha v_0^2 (r - r_r), & r \leq r_r; \\ (r - b(r))^{-1}, & r \geq r_r, \quad v_0^2 = 3/4, \end{cases} \quad (6)$$

где $b(r)$ определяется следующим образом:

$$b(r) = \begin{cases} 1, & r \leq 1 + [2\alpha v_0^2(r_T - 1)]^{-1}, \\ \frac{r + r_T}{2} - \left[\left(\frac{r - r_T}{2} \right)^2 + \frac{1}{2\alpha v_0^2} \right]^{1/2}, & r \geq 1 + [2\alpha v_0^2(r_T - 1)]^{-1}. \end{cases} \quad (7)$$

Легко видеть, что $\pi(r)$, будучи непрерывной в области $1 \leq r < \infty$, имеет излом при r_T : $(\partial \pi / \partial r)_\beta = -\alpha v_0^2$ при $r \rightarrow r_T + 0$, при $r \rightarrow r_T - 0$

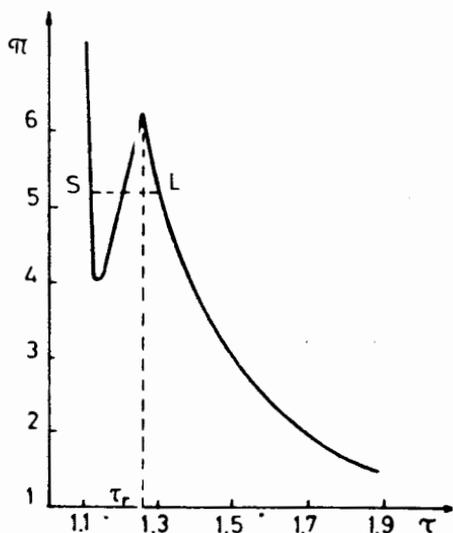


Рис.3. Уравнение состояния системы твердых дисков, $r_T = 1,25 + 0,02$.

$(\partial \pi / \partial r)_\beta = +\alpha v_0^2$; $\pi(r_T) = v_0 \sqrt{2\alpha} \beta$ (рис.3), и во многих чертах совпадает с результатами расчетов в рамках классического метода Монте-Карло [6]. Отметим характерную особенность — симметрию в точке формирования наиболее вероятной случайной плотноупакованной структуры $r = r_T$. Результаты нашего подхода, описанного выше, свидетельствуют о том, что в системе твердых дисков имеет место фазовый переход первого рода. (В модели [1,2] — второго).

Используя построение Максвелла, можно точно определить координаты перехода (см. рис.3).

ЛИТЕРАТУРА

1. Зряков И.Н., Федянин В.К. — Журн. физ. химии, 1985, т.59, №2, с.507.
2. Зряков И.Н., Федянин В.К. — Журн. физ. химии, 1986, т.60, №2, с.486.
3. Finney J.L. — Proc. Soc. Lond., 1970, A319, p.479.
4. Гильберт, Кон-Фоссен, Наглядная геометрия ОНТИ НКТП СССР, 1936.
5. Matheson A.J. — J.Phys.C.: Solid State Phys., 1974, 7, p.2569.
6. Alder E.J., Wainwright T.E. — J.Chem.Phys., 1967, v.46, p.686.

Рукопись поступила 11 марта 1988 года.

DYNAMICAL EQUATIONS IN A RVB MODEL OF HIGH- T_c SUPERCONDUCTIVITY

Nguyen Van Hieu, Ha Vinh Tan, Nguyen Toan Thang

A model is studied for the high- T_c superconductivity based on the generalized Hubbard Hamiltonian with a two-dimensional lattice containing two interpenetrative sublattices. The origin of the superconducting pairing of the mobile charge carriers is their strong on-site repulsion in the presence of the hopping between nearest-neighbouring sites. The dynamical equations for all order parameters of the model were derived in the self-consistent field approximation.

The investigation has been performed at the Institute of Theoretical Physics, Hanoi, SRV.

Динамические уравнения в одной модели
высокотемпературной сверхпроводимости
с резонирующей валентной связью

Нгуен Ван Хьеу, Ха Вин Тан, Нгуен Тоан Тханг

Изучается модель высокотемпературной сверхпроводимости, основанная на обобщенном гамильтониане Хаббарда с двумерной кристаллической решеткой, содержащей две проникающие друг в друга подрешетки. Источником сверхпроводящего спаривания подвижных носителей заряда является сильное отталкивание носителей, находящихся в одном и том же узле, в присутствии перепрыгивания между ближайшими соседними узлами. В приближении самосогласованного поля выводятся динамические уравнения для всех параметров порядка теории.

Работа выполнена в Институте теоретической физики, Халой, СРВ.

1. INTRODUCTION

In the RVB theory of high- T_c superconductivity proposed by Anderson^{1/} and developed in many subsequent works^{2-10/} the origin of the effective attractive interaction of the charge carriers is their strong on-site repulsion in the presence of the hopping between nearest-neighbouring sites of the lattice. The system of dynamical equations for the order parameter of the superconducting pairing of holes and other order parameters of the high- T_c superconductors with this RVB mechanism has been derived and studied in the case of the simplest

model with some two-dimensional lattice containing only one type of sites^{/2-10/}, the original Hamiltonian being that of the Hubbard model. However the experimental results have shown that the lattice of newly discovered high- T_c ceramic superconductors must contain two interpenetrative sublattices: sublattice of Cu ions with electrons in d-orbitals and that of O ions with electrons in p-orbitals. The corresponding theoretical model has been also proposed by Emery^{/11/} and was studied by many authors^{/12-16/}. In particular, some physical aspects of the model were discussed qualitatively in a recent paper by Imada^{/16/}. It is the purpose of the present work to give a more complete study of this realistic RVB model of high- T_c superconductivity. The starting point is some extended Hubbard Hamiltonian. The system of dynamical equations for the order parameter of the superconducting pairing and other order parameters of the model will be derived. On the basis of this system of dynamical equations it is possible to study analytically the physical aspects of the model. To the periodic Anderson model^{/17-20/} which is similar to that discussed in the present work the application of our reasonings is also straightforward. For the simplicity we neglect the effect of the antiferromagnetism of the half-filled Cu band. Its role will be studied separately in a subsequent work.

2. EFFECTIVE HAMILTONIAN

The structure of the two-dimensional square lattice of the superconductor is represented in Fig.1. Each Cu site has 4 nearest-neighbouring O sites, and each O site has 2 nearest-neighbouring Cu sites. If the lattice constant of the Cu sublattice equals a , then that of the O sublattice is $a\sqrt{2}$. Denote the destruction and creation operators for the holes at the Cu and O sites by $d_{i\sigma}, d_{i\sigma}^+$ and $p_{j\sigma}, p_{j\sigma}^+$, resp., i and j labeling the sites, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ being the spin projection. We start from the extended Hubbard Hamiltonian

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon_p \sum_j p_{j\sigma}^+ p_{j\sigma} + \epsilon_d \sum_i d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \\
 & + t \sum_{\langle ij \rangle} (d_{i\sigma}^+ p_{j\sigma} + p_{j\sigma}^+ d_{i\sigma}) + \\
 & + U_d \sum_i n_i^{\epsilon} n_{i\downarrow}^d + U_p \sum_j n_{j\uparrow}^p n_{j\downarrow}^p, \quad (1) \\
 n_{i\sigma}^d = & d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}, \quad n_{j\sigma}^p = p_{j\sigma}^+ p_{j\sigma}, \quad \epsilon_p > \epsilon_d.
 \end{aligned}$$

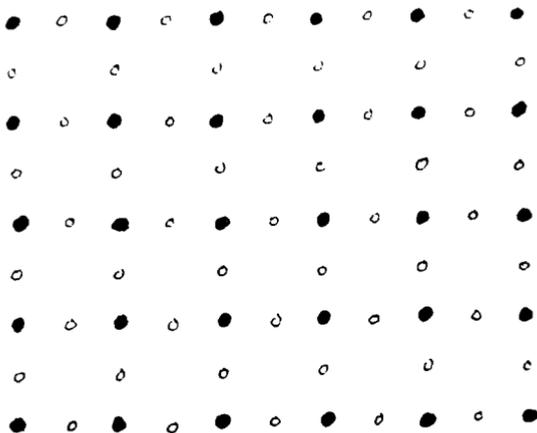


Fig 1. ● - Cu ion, ○ - O ion.

Here ϵ_d and ϵ_p denote the energies of the free holes at the sites of the Cu and O sublattices, resp., t is the hopping constant, U_d and U_p are the repulsion potential energies of two holes with opposite spin projections at the same site of the Cu and O lattices, resp., $\sum_{\langle ij \rangle}$ denotes the sum over all pairs of nearest-neighbouring sites.

We consider the limit of very strong on-site repulsions:

$$U_p, U_d \gg |t|, |\epsilon_p|, |\epsilon_d|.$$

In this case the holes at non-doubly occupied sites belong to narrow lower energy bands while those at doubly occupied sites have very high energies. By means of a suitable Schrieffer-Wolf transformation

$$\tilde{H} = e^{-iS} H e^{iS}$$

$$S = it \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ \frac{1}{U_d} n_{i-\sigma}^d d_{i\sigma}^+ p_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}^p) + \right. \quad (2)$$

$$\left. + \frac{1}{U_p} n_{j-\sigma}^p p_{j\sigma}^+ d_{i\sigma} (1 - n_{i-\sigma}^d) \right\} + \text{h.c.}$$

we rewrite Hamiltonian in such a convenient form that the terms corresponding to the real transitions of the holes from a lower energy band to a higher one and vice versa are those of the second order of the

small constants $|t|/U_p$, $|t|/U_d$ and may be neglected. By applying the projection operator

$$P = \prod_i \prod_j (1 - n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d) (1 - n_{j\uparrow}^p n_{j\downarrow}^p) \quad (3)$$

we can project out the high energy states containing doubly occupying holes and obtained the effective Hamiltonian for the system of interacting lower energy holes (non-doubly occupying):

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = P H P = P \{ & \epsilon_d \sum_i d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_j p_{j\sigma}^+ p_{j\sigma} + \\ & t \sum_{\langle ij \rangle} (d_{i\sigma}^+ p_{j\sigma} + p_{j\sigma}^+ d_{i\sigma}) - J_p \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\langle kj \rangle} B_{ji}^+ B_{jk} - \\ & - J_d \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\langle i'j' \rangle} B_{ji}^+ B_{i'j'} \} P, \end{aligned} \quad (4)$$

$$J_p = \frac{t^2}{U_p}, \quad J_d = \frac{t^2}{U_d}, \quad B_{jk} = p_{j\downarrow} d_{k\uparrow} - p_{j\uparrow} d_{k\downarrow}.$$

The four-hole interaction terms in above Hamiltonian (4) are the contributions of the virtual transitions to the intermediate states containing doubly occupying holes.

3. SELF-CONSISTENT FIELD METHOD

In this section we apply the well-known self-consistent field method of Bogolubov²¹ and substitute each four-fermion interaction term in the effective Hamiltonian (4) by a bilinear combination of the fermion operators in which the coefficient of each product of two operators is the vacuum expectation value of the product of two remaining ones. Because the vacuum is the ground state of the system of non-doubly occupying holes the expressions of the vacuum expectation value always contain explicitly the projection operator (3). In such a substitution procedure there arise six expectation values which are the order parameters of the model and may be chosen to be real:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} n_d &= \langle F (d_{i\uparrow}^+ d_{i\uparrow}) P \rangle = \langle P (d_{i\downarrow}^+ d_{i\downarrow}) P \rangle, \\ \frac{1}{2} n_p &= \langle P (p_{j\uparrow}^+ p_{j\uparrow}) P \rangle = \langle P (p_{j\downarrow}^+ p_{j\downarrow}) P \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \tilde{n}_d &= \sum_{i, k \in D_j} \langle P(d_{i\uparrow}^+ d_{k\uparrow}) P \rangle = \sum_{i, k \in D_j} \langle P(d_{i\downarrow}^+ d_{k\downarrow}) P \rangle \\
\frac{1}{2} \tilde{n}_p &= \sum_{j, \ell \in D_i} \langle P(p_{j\uparrow}^+ p_{\ell\uparrow}) P \rangle = \sum_{j, \ell \in D_i} \langle P(p_{j\downarrow}^+ p_{\ell\downarrow}) P \rangle, \\
h &= \sum_{i \in D_j} \langle P(d_{i\uparrow}^+ p_{j\uparrow}) P \rangle = \sum_{i \in D_j} \langle P(d_{i\downarrow}^+ p_{j\downarrow}) P \rangle = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j \in D_i} \langle P(p_{j\uparrow}^+ d_{i\uparrow}) P \rangle = \frac{1}{2} \sum_{j \in D_i} \langle P(p_{j\downarrow}^+ d_{i\downarrow}) P \rangle \quad (5) \\
\Delta &= \frac{1}{2} \sum_{i \in D_j} \langle P(d_{i\uparrow}^+ p_{j\downarrow}^+ - d_{i\downarrow}^+ p_{j\uparrow}^+) P \rangle = \\
&= \frac{1}{4} \sum_{j \in D_i} \langle P(p_{j\uparrow}^+ d_{i\downarrow}^+ - p_{j\downarrow}^+ d_{i\uparrow}^+) P \rangle.
\end{aligned}$$

Here D_i and D_j denote the set of all neighbouring sites of the sites i and j . We obtain following bilinear Hamiltonian in the self-consistent field approximation

$$\begin{aligned}
H_0 &= P \{ (\epsilon_d - \frac{1}{2} \tilde{n}_p J_d - \epsilon_F) \sum_i d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} - \\
&- \frac{1}{2} n_p J_p \sum_j \sum_{i, k \in D_j} d_{i\sigma}^+ d_{k\sigma} + \\
&+ (\epsilon_p - \frac{1}{2} \tilde{n}_d J_p - \epsilon_F) \sum_j p_{j\sigma}^+ p_{j\sigma} - \\
&- \frac{1}{2} n_d J_d \sum_i \sum_{j, \ell \in D_i} p_{j\sigma}^+ p_{\ell\sigma} + \\
&+ [t - h(J_p + 2J_d)] \sum_{\langle ij \rangle} (d_{i\sigma}^+ p_{j\sigma} + p_{j\sigma}^+ d_{i\sigma}) - \\
&- 2\Delta(J_p + 2J_d) \sum_{\langle ij \rangle} [(p_{j\uparrow}^+ d_{i\downarrow}^+ - p_{j\downarrow}^+ d_{i\uparrow}^+) + \\
&+ (d_{i\downarrow} p_{j\uparrow} - d_{i\uparrow} p_{j\downarrow})] \} P, \quad (6)
\end{aligned}$$

where ϵ_F is the Fermi energy.

Note that n_d and n_p are the mean values of the numbers of holes at each site of the sublattices Cu and O, resp., Δ is the order parameter of the superconducting pairing of holes. The fermion operators at the sites can be expanded in the form

$$d_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_d}} \sum_{\vec{\nu} \in B_d} e^{i\vec{\nu} \cdot \vec{R}_i} d_{\sigma}(\nu), \quad (7)$$

$$p_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_{\vec{\lambda} \in B_p} e^{i\vec{\lambda} \cdot \vec{R}_j} p_{\sigma}(\lambda),$$

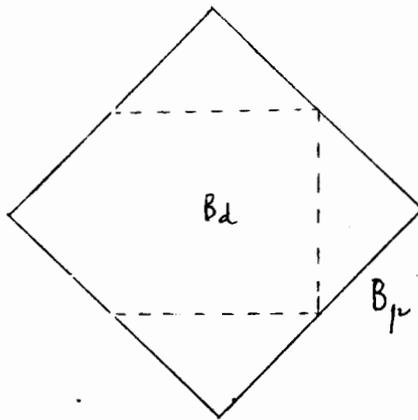


Fig.2. Brillouin zones B_p (large square) and B_d (small square).

where R_i and R_j are the coordinate vectors of the sites i and j , N_d and N_p are the numbers of the elementary cells in the sublattices of Cu and O, B_d and B_p denote their Brillouin zones and are represented in Fig.2. For some wave vector $\vec{\lambda}$ of B_p not belonging to B_d there always exists a unite vector \vec{K} of the reciprocal lattice B_d such that $\vec{\lambda} + \vec{K} \in B_d$. For such a pair $\vec{\lambda} \notin B_d$ and $\vec{\lambda} + \vec{K} \in B_d$ we set $p_{\sigma}(\vec{\lambda}) = q_{\sigma}(\vec{\lambda} + \vec{K})$. Inserting the expansion (7) into Eq.(6), we obtain

$$\begin{aligned} H_0 = & \sum_{\vec{\nu} \in B_d} \{ E_d(\vec{\nu}) d_{\sigma}(\vec{\nu}) d_{\sigma}(\vec{\nu}) + E_r(\vec{\nu}) r_{\sigma}^+(\vec{\nu}) r_{\sigma}(\vec{\nu}) + \\ & + E_s(\vec{\nu}) s_{\sigma}^+(\vec{\nu}) s_{\sigma}(\vec{\nu}) + g(\vec{\nu}) [d_{\sigma}^+(\vec{\nu}) r_{\sigma}(\vec{\nu}) + r_{\sigma}^+(\vec{\nu}) d_{\sigma}(\vec{\nu})] + \\ & + \delta(\vec{\nu}) [(d_{\uparrow}^+(\vec{\nu}) r_{\downarrow}^+(-\vec{\nu}) - d_{\downarrow}^+(-\vec{\nu}) r_{\uparrow}^+(\vec{\nu})) + (r_{\downarrow}(-\vec{\nu}) d_{\uparrow}(\vec{\nu}) - r_{\uparrow}(\vec{\nu}) d_{\downarrow}(-\vec{\nu}))] \} P, \end{aligned} \quad (8)$$

where

$$r_{\sigma}(\vec{\nu}) = \frac{p_{\sigma}(\vec{\nu}) + q_{\sigma}(\vec{\nu})}{\sqrt{2}}, \quad s_{\sigma}(\vec{\nu}) = \frac{p_{\sigma}(\vec{\nu}) - q_{\sigma}(\vec{\nu})}{\sqrt{2}} \quad (9)$$

$$E_d(\vec{\nu}) = \epsilon_d - \frac{1}{2} \tilde{n}_p J_d - \frac{1}{2} n_p J_p [\phi_d(\nu_x)^2 + \phi_d(\nu_y)^2] - \epsilon_F,$$

$$E_s(\vec{\nu}) = \epsilon_p - \frac{1}{2} \tilde{n}_d J_p - \epsilon_F, \quad (10)$$

$$E_r(\vec{\nu}) = \epsilon_p - \frac{1}{2} \tilde{n}_d J_p - \frac{1}{2} n_d J_d \phi_p(\vec{\nu})^2 - \epsilon_F,$$

$$g(\vec{\nu}) = [t - h(J_p + 2J_d)] \phi_p(\vec{\nu}),$$

$$\delta(\vec{\nu}) = -2\Delta(J_p + 2J_d) \phi_p(\vec{\nu}),$$

$$\phi_p(\vec{\nu}) = 2[\cos \nu_x a + \cos \nu_y a],$$

(11)

$$\phi_d(\nu_{x,y}) = 2 \cos \nu_{x,y} a.$$

BOGOLUBOV TRANSFORMATIONS

In order to establish the system of dynamical equations for six order parameters n_d , n_p , \tilde{n}_d , \tilde{n}_p , h and Δ from the bilinear Hamiltonian (8) now we diagonalize this Hamiltonian by means of the Bogolubov transformations. For abbreviating the formulae we introduce two four-element columns

$$C(\vec{\nu}) = \begin{pmatrix} r_{\uparrow}(\vec{\nu}) \\ d_{\uparrow}(\vec{\nu}) \\ r_{\downarrow}^{\dagger}(-\vec{\nu}) \\ d_{\downarrow}^{\dagger}(-\vec{\nu}) \end{pmatrix}, \quad \Gamma(\vec{\nu}) = \begin{pmatrix} a_{\uparrow}(\vec{\nu}) \\ \beta_{\uparrow}(\vec{\nu}) \\ a_{\downarrow}^{\dagger}(-\vec{\nu}) \\ \beta_{\downarrow}^{\dagger}(-\vec{\nu}) \end{pmatrix} \quad (12)$$

and write the Bogolubov transformations in the matrix form

$$C(\vec{\nu}) = X(\vec{\nu})\Gamma(\vec{\nu}). \quad (13)$$

We can choose the phases of the operators in such a way that all matrix elements $X_{ij}(\vec{\nu})$, $i,j = 1,2,3,4$ of $X(\vec{\nu})$ are real functions of $\vec{\nu}$. Since

the fermion operators $r_\sigma(\vec{\nu})$, $d_\sigma(\vec{\nu})$ as well as $a_\sigma(\vec{\nu})$, $\beta_\sigma(\vec{\nu})$ satisfy the canonical anticommutation relations, the matrix $X(\vec{\nu})$ must be orthogonal. Standard calculations give following results:

$$X(\vec{\nu}) = \begin{pmatrix} Y(\vec{\nu}) & Z(\vec{\nu}) \\ Z(\vec{\nu}) & -Y(\vec{\nu}) \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$Y(\vec{\nu}) = \begin{pmatrix} X_{11}(\vec{\nu}) & X_{12}(\vec{\nu}) \\ X_{21}(\vec{\nu}) & X_{22}(\vec{\nu}) \end{pmatrix}, \quad Z(\vec{\nu}) = \begin{pmatrix} X_{13}(\vec{\nu}) & X_{14}(\vec{\nu}) \\ X_{23}(\vec{\nu}) & X_{24}(\vec{\nu}) \end{pmatrix}$$

$$X_{ij}(\vec{\nu}) = \frac{M_{ij}(\vec{\nu})}{M_1(\vec{\nu})} \quad (15)$$

$$M_1(\vec{\nu}) = [M_{11}(\vec{\nu})^2 + M_{12}(\vec{\nu})^2 + M_{13}(\vec{\nu})^2 + M_{14}(\vec{\nu})^2]^{1/2} \quad (16)$$

$$M_{11} = \delta [(E_d - \xi_\alpha)(E_r + \xi_\alpha) + \delta^2 + g^2],$$

$$M_{12} = -2\delta g E_r,$$

$$M_{13} = g[(E_r - \xi_\alpha)(E_d - \xi_\alpha) - \delta^2 - g^2],$$

$$M_{14} = (E_r + \xi_\alpha)[g^2 - (E_r - \xi_\alpha)(E_d - \xi_\alpha)] - (E_r - \xi_\alpha)\delta^2, \quad (17)$$

$$M_{21} = -2\delta g E_d,$$

$$M_{22} = \delta[(E_r - \xi_\beta)(E_d + \xi_\beta) + \delta^2 + g^2],$$

$$M_{23} = (E_d + \xi_\beta)[g^2 - (E_r - \xi_\beta)(E_d - \xi_\beta)] - (E_d - \xi_\beta)\delta^2,$$

$$M_{24} = g[(E_d - \xi_\beta)(E_r - \xi_\beta) - \delta^2 - g^2],$$

where $\xi_\alpha(\vec{\nu})$ and $\xi_\beta(\vec{\nu})$ are the eigenvalues of the Hamiltonian (8) corresponding to the quasiparticles with the destruction operators $a_\sigma(\vec{\nu})$ and $\beta_\sigma(\vec{\nu})$,

$$\xi_\alpha^2 = \frac{(E_r^2 + E_d^2) + 2(\delta^2 + g^2) + (E_r^2 - E_d^2)\theta}{2} \quad (18)$$

$$\xi_\beta^2 = \frac{(E_r^2 + E_d^2) + 2(\delta^2 + g^2) + (E_r^2 - E_d^2)\theta}{2}$$

$$\theta = \left[1 + 4 \left(\frac{\delta^2}{(E_r + E_d)^2} + \frac{g^2}{(E_r - E_d)^2} \right) \right]^{1/2}. \quad (19)$$

The Hamiltonian (8) becomes

$$H_0 = P \sum_{\vec{\nu} \in B_d} \{ \xi_{\alpha}(\vec{\nu}) a_{\sigma}^{\dagger}(\vec{\nu}) a_{\sigma}(\vec{\nu}) + \xi_{\beta}(\vec{\nu}) \beta_{\sigma}^{\dagger}(\vec{\nu}) \beta_{\sigma}(\vec{\nu}) + E_s(\vec{\nu}) s_{\sigma}^{\dagger}(\vec{\nu}) s_{\sigma}(\vec{\nu}) \} P. \quad (20)$$

5. EQUATIONS FOR ORDER PARAMETERS

From the results of preceding sections it is straight-forward to derive the self-consistency conditions of the theory which form the system of six equations for six order parameters n_d , n_p , \bar{n}_d , i_p , h and Δ . Denote by $f_T(\xi)$ the Fermi distribution function at temperature T

$$f_T(\xi) = \frac{1}{1 + \exp \xi/T}. \quad (21)$$

The dynamical equations are:

$$\begin{aligned} n_p &= \frac{a^2}{8\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu \{ X_{12}^2 f_T(\xi_{\beta}) + X_{14}^2 [1 - f_T(\xi_{\beta})] + \\ &+ X_{11}^2 f_T(\xi_{\alpha}) + X_{13}^2 [1 - f_T(\xi_{\alpha})] + f_T(E_s) \} \\ n_d &= \frac{a^2}{4\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu \{ X_{22}^2 f_T(\xi_{\beta}) + X_{24}^2 [1 - f_T(\xi_{\beta})] + \\ &+ X_{21}^2 f_T(\xi_{\alpha}) + X_{23}^2 [1 - f_T(\xi_{\alpha})] \} \\ \bar{n}_p &= \frac{a^2}{8\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu \{ X_{12}^2 f_T(\xi_{\beta}) + X_{14}^2 [1 - f_T(\xi_{\beta})] + \\ &+ X_{11}^2 f_T(\xi_{\alpha}) + X_{13}^2 [1 - f_T(\xi_{\alpha})] + f_T(E_s) \} \phi_p(\vec{\nu})^2 \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned}
\bar{n}_d &= \frac{a^2}{4\pi^2} \int_{B_d} d^2\nu \{ X_{22}^2 f_T(\xi_\beta) + X_{24}^2 [1 - f_T(\xi_\beta)] + X_{21}^2 f_T(\xi_\alpha) + \\
&+ X_{23}^2 [1 - f_T(\xi_\alpha)] \} [\phi_d(\nu_x)^2 + \phi_d(\nu_y)^2] \\
h &= \frac{a^2}{16\pi^2} \int_{B_d} d^2\nu \{ X_{22} X_{12} f_T(\xi_\beta) + X_{24} X_{14} [1 - f_T(\xi_\beta)] + \\
&+ X_{21} X_{11} f_T(\xi_\alpha) + X_{23} X_{13} [1 - f_T(\xi_\alpha)] \} \phi_p(\vec{\nu}) \\
\Delta &= \frac{a^2}{16\pi^2} \int_{B_d} d^2\nu \{ X_{22} X_{14} f_T(\xi_\beta) - X_{24} X_{12} [1 - f_T(\xi_\beta)] + \\
&+ X_{21} X_{13} f_T(\xi_\alpha) - X_{23} X_{11} [1 - f_T(\xi_\alpha)] \} \phi_p(\vec{\nu})
\end{aligned} \tag{22}$$

6. DISCUSSION

On the basis of the system of dynamical equations (22) it is not easy to make obvious conclusions on the physical consequences of the model. The numerical solution of these lengthy equations must be studied in a separate work. Here we draw the attention to some immediate physical consequences which might be deduced easily from the equations (22) in some special case. For this purpose let us assume a simplifying approximation by setting $g(\vec{\nu})=0$. In this special case the expressions (18) and (19) for the energies of the quasiparticles become

$$\begin{aligned}
\xi_\alpha(\vec{\nu}) &= \frac{E_r(\vec{\nu}) - E_d(\vec{\nu})}{2} + [E(\vec{\nu})^2 + \delta(\vec{\nu})^2]^{1/2} \\
\xi_\beta(\vec{\nu}) &= -\frac{E_d(\vec{\nu}) - E_r(\vec{\nu})}{2} + [E(\vec{\nu})^2 + \delta(\vec{\nu})^2]^{1/2},
\end{aligned} \tag{23}$$

where

$$E(\vec{\nu}) = \frac{E_r(\vec{\nu}) + E_d(\vec{\nu})}{2}. \tag{24}$$

The dynamical equations are:

$$\begin{aligned}
 n_p &= \frac{a^2}{8\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu \{ u^2 f_T(\xi_\alpha) + v^2 [1 - f_T(\xi_\beta)] + f_T(E_s) \} \\
 n_d &= \frac{a^2}{4\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu \{ u^2 f_T(\xi_\beta) + v^2 [1 - f_T(\xi_\alpha)] \} \\
 \bar{n}_p &= \frac{a^2}{8\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu |\phi_p(\vec{\nu})|^2 \{ u^2 f_T(\xi_\alpha) + v^2 [1 - f_T(\xi_\beta)] + f_T(E_s) \} \\
 \bar{n}_d &= \frac{a^2}{4\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu \{ \phi_d(\nu_x)^2 + \phi_d(\nu_y)^2 \} \{ u^2 f_T(\xi_\beta) + v^2 [1 - f_T(\xi_\alpha)] \} \\
 \Delta &= \frac{a}{16\pi^2} \iint_{B_d} d^2\nu \phi_p(\vec{\nu}) 2uv [1 - f_T(\xi_\alpha) - f_T(\xi_\beta)], \quad h = 0,
 \end{aligned} \tag{25}$$

where

$$\begin{aligned}
 u(\vec{\nu}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{E(\vec{\nu})}{\sqrt{E(\vec{\nu})^2 + \delta(\vec{\nu})^2}} \right]^{1/2} \\
 v(\vec{\nu}) &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 - \frac{E(\vec{\nu})}{\sqrt{E(\vec{\nu})^2 + \delta(\vec{\nu})^2}} \right]^{1/2}.
 \end{aligned} \tag{26}$$

In particular, the critical temperature T_c is determined by equation

$$\frac{1}{J_p + 2J_d} = \frac{a^2}{16\pi^2} \iint_{B_d} \frac{d^2\nu \phi_p(\vec{\nu})^2}{|E(\vec{\nu})|} [1 - f_{T_c}(\xi_\alpha) - f_{T_c}(\xi_\beta)]. \tag{27}$$

Now we deduce some physical conclusions from above results. First we consider the expressions (23) of the energies of quasiparticles. In the limit $\delta(\vec{\nu}) \rightarrow 0$ we have

$$\begin{aligned}
 \xi_\alpha(\vec{\nu}) &\rightarrow E_r(\vec{\nu}), \quad \xi_\beta(\vec{\nu}) \rightarrow E_d(\vec{\nu}) \quad E_r(\vec{\nu}) + E_d(\vec{\nu}) > 0 \\
 \xi_\alpha(\vec{\nu}) &\rightarrow -E_d(\vec{\nu}), \quad \xi_\beta(\vec{\nu}) \rightarrow -E_r(\vec{\nu}) \quad E_r(\vec{\nu}) + E_d(\vec{\nu}) < 0.
 \end{aligned} \tag{28}$$

Thus in the limit $\delta(\vec{\nu}) \rightarrow 0$ $\xi_{\beta}(\vec{\nu})$ is always smaller than $\xi_{\alpha}(\vec{\nu})$

$$\xi_{\beta}(\vec{\nu}) < \xi_{\alpha}(\vec{\nu}). \quad (29)$$

Therefore in Eq.(27) we can neglect $f_T(\xi_{\alpha})$ in comparison with $f_T(\xi_{\beta})$. This means that the critical temperature T_c depends mainly on the distribution of the quasiparticles β . There are two alternatives:

a) If the Fermi energy is nearer to the energy band of the Cu holes than that of the O holes ($E_d + E_r > 0$), then T_c depends mainly on the distribution of the Cu holes.

b) If the Fermi energy is nearer to the energy band of the O holes ($E_d + E_r < 0$), then T_c is determined mainly by the distribution of the O holes.

From Eqs. (10) it is very easy to calculate the width of the energy bands of the Cu and O holes, in the approximation with $g(\vec{\nu}) = \delta(\vec{\nu})=0$,

$$W_d = \max E_d(\vec{\nu}) - \min E_d(\vec{\nu}) \quad (30)$$

$$W_r = \max E_r(\vec{\nu}) - \min E_r(\vec{\nu}).$$

We have

$$W_d = 4n_p J_p, \quad (31)$$

$$W_r = 8n_d J_r.$$

Since we have usually $n_p \ll 1$, $n_d \approx 1$, the energy band for the O holes is much larger than that of the Cu holes.

In conclusion we discuss a necessary condition for the existence of the solution of Eq.(27). We neglect $f_{T_c}(\xi_{\alpha})$ in comparison with $f_{T_c}(\xi_{\beta})$ and write

$$\frac{1}{J_p + 2J_d} = \frac{a^2}{16\pi^2} \iint_{B_d} \frac{d\nu \phi_p(\nu)^2}{|E(\vec{\nu})|} [1 - f_{T_c}(\xi_{\beta})]. \quad (32)$$

It follows that there exist some average values $\overline{|E|}$ and $\overline{\xi_{\beta}}$ of the energies $|E(\vec{\nu})|$ and $\xi_{\beta}(\vec{\nu})$ such that

$$\frac{\overline{|E|}}{J_p + 2J_d} = 1 - f_{T_c}(\overline{\xi_{\beta}}). \quad (33)$$

Since

$$0 < f_{T_c}(\bar{\xi}\beta) < 1$$

the solution of Eq. (33) exists only if the average value $\overline{|E|}$ satisfies the necessary condition

$$\overline{|E|} < J_p + 2J_d. \quad (34)$$

This relation means that the superconducting pairing takes place only in the case when the Fermi energy ϵ_F is not very far from the mean value of the renormalized energies of the Cu and O holes: either the energy band of the Cu holes is nearly half-filled or the concentration of the O holes is low enough. For the quantitative investigation of this problem it is necessary to find approximate solutions of Eq. (32). This will be done in a subsequent work.

REFERENCES

1. Anderson P.W. — Science, 1987, 235, p.1196.
2. Anderson P.W., Baskaran G., Zou Z., Hsu T. — Phys.Rev.Lett., 1987, 56, p.2790;
Baskaran G., Zou Z., Anderson P.W. — Solid State Comm., 1987, 63, p.973;
Zou Z., Anderson P.W. — Phys.Rev., 1987, B37, p.627.
3. Cyrot M. — Solid State Comm., 1987, 63, p.1015.
4. Kuramoto, Watanabe T. — Solid State Comm., 1987, 63, p.821.
5. Fukuyama H., Yosida K. — Jap. Journ.App.Phys., 1987, 26, p.L371.
6. Kivelson S.A., Rokhsar D.S., Sethna J.P. — Phys.Rev., 1987, B35, p.8865;
Kivelson S.A. — Phys.Rev., 1987, B36, p.7237.
7. Ruckenstein A.E., Hirschfeld P.J. — J.Appel.Phys.Rev., 1987, B36, p.857.
8. Gross C., Joynt R., Rice T.M. — Z.Phys.B. — Condensed Matter 1986, 65, p.161.
9. Nguyen Van Hieu, Nguyen Ai Viet . — In: JINR Rapid Comm., No.2(28)-88, Dubna, 1988, p.48.
10. Ukrainsky I.I. Preprint ITF, Kiev, 1987.
11. Emery V.J. — Phys.Rev.Lett., 1987, 58, p.2794.
12. Hirsch J.E. — Phys.Rev.Lett., 1987, 59, p.228.
13. Ohkawa F.J. — J.Phys.Soc.Japan, 1987, 56, p.2623.

14. Callaway J., Kanhere D.G., Misra P.K. — *Phys.Rev.*, 1987, B36, p.7141.
15. Parmenter R.H. — *Phys.Rev.Lett.*, 1987, p.59, p.923.
16. Imada M. — *J.Phys.Soc.Japan*, 1987, 56, p.3793.
17. Yamada K., Yosida K. — *Prog.Theor.Phys.*, 1986, 76, p.621.
18. Fujimori A., Takayama-Muromachi E., Uchida Y. — *Solid State Commun.*, 1987, 63, p.857.
19. Hanzawa K., Yosida K. — *J.Phys.Soc.Japan*, 1987, 56, p.3440.
20. Robaszewicz S., Micnas R., Ranninger J. — *Phys.Rev.*, 1987, B36, p.180.
21. Bogolubov N.N. *Selected Works*, Kiev, Naukova Dumka, 1969.

Received on April 4, 1988.