

Международная школа по структуре ядра

АЛУШТА 13-28 АПРЕЛЯ 1972 Г.

Д - 6465

СТРУКТУРА ЯДРА

ЛЕКЦИИ

ПОД РЕДАКЦИЕЙ:

В.Г.СОЛОВЬЕВА (ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР),

Р.В.ДЖОЛОСА, В.Р.САРАНЦЕВОЙ, С.И.ФЕДОТОВА

International School on Nuclear Structure

ALUSHTA APRIL 13-28, 1972

NUCLEAR STRUCTURE

LECTURES

EDITORIAL BOARD:

V.G.SOLOVIEV (EDITOR-IN-CHIEF),

R.V.JOLOS, V.R.SARANTSEVA, S.I.FEDOTOV

Объединенный институт ядерных исследований

Joint Institute for Nuclear Research

С.Т. БЕЛЯЕВ

Институт ядерной физики, Новосибирск, СССР

І. ВВЕДЕНИЕ

Следует сразу отметить, что эти лекции отнюдь не являются обзором успехов микроскопического описания коллективных возбуждений. В них главным образом излагаются идейные и методические основы нового подхода к описанию коллективных движений в ядрах и на конкретных примерах демонстрируются его возможности.

Всякая микроскопическая модель имеет в своей основе представление о ядре как о совокупности нуклонов (квазичастиц), движущихся в некоторой (самосогласованной) потенциальной яме и взаимодействующих посредством некоторых эффективных сил V_{I2} . Независимое (некоррелированное) возбуждение n нуклонов - простейший тип (" n - квазичастичных") возбуждений в такой системе. При другом типе возбуждений корреляция (и, следовательно, взаимодействие) между нуклонами играет определяющую роль. Именно такой тип возбуждений является предметом рассмотрения "коллективных микроскопических моделей".

Каждая конкретная реализация микроскопической модели имеет по крайней мере два открытых для критики пункта:

- 1) выбор эффективного взаимодействия и
- 2) справедливость сделанных приближений.

Поэтому в принципе есть два пути улучшения модели: варьирование и уточнение эффективного взаимодействия V_{I2} и улучшение рас-

четной схемы. К сожалению, и то и другое зачастую производится путем простого увеличения числа свободных параметров, что вряд ли можно воспринимать как реальное улучшение модели.

Несколько слов о выборе эффективного взаимодействия V_{I2} . Если иметь в виду широкую совокупность экспериментальных данных, то структура V_{I2} в основных чертах (хотя далеко не в деталях) известна. Прежде всего, мы убеждены в реальности некоторого вида квадруполь-квадрупольных сил, на что указывают в числе других фактов существование деформированных ядер и низколежащие 2^+ -уровни коллективной природы. Затем есть явные указания о силах спаривания, которые проявляются в разности масс четных и нечетных ядер, щели в спектрах одночастичных возбуждений и др.

Но спаривание и $Q \cdot Q$ - силы не исчерпывают эффективного взаимодействия и не могут объяснить даже качественно все разнообразие коллективных возбуждений в реальных ядрах. Поэтому мы стоим перед проблемой идентификации дополнительных членов эффективного взаимодействия, не имея на этот раз столь однозначных подсказок эксперимента.

Следует иметь в виду, что простое включение дополнительных членов во взаимодействие (обычно в форме сепарабельных членов со свободными параметрами) и подгонка результатов под ограниченное число экспериментальных данных является хотя и простым, но очень рискованным путем решения задачи. Необходимо контролировать выбор взаимодействия его соответствием с более фундаментальными фактами и принципами. Еще лучше, если фундаментальные законы играют эвристическую роль при поиске новых членов взаимодействия. Два примера для иллюстрации:

А. В обычно используемой модели спаривания учитываются лишь матричные элементы вида $\langle \psi \tilde{\psi} | V_{12} | \psi' \tilde{\psi}' \rangle$, где ψ и $\tilde{\psi}$ - состояния, сопряженные по времени. Такое урезанное взаимодействие не является калибровочно инвариантным^{х)}. Но оказывается возможным, рассматривая эти матричные элементы как заданные, дополнить их другими элементами, используя только требование калибровочной инвариантности и не вводя при этом никаких новых параметров^(I).

Б. Эффективные силы^{II} самосогласованный потенциал имеют общее происхождение от "реалистического" нуклон-нуклонного взаимодействия. Поэтому, зная некоторые характеристики потенциала из наблюдаемого одночастичного спектра, мы можем сделать определенные заключения и об эффективных силах. Так, известно спин-орбитальное расщепление уровней, которое описывается как

$$\Delta \varepsilon \propto (\vec{l} \cdot \vec{s}) \frac{1}{r} \frac{dU}{dr}. \quad (I.I)$$

Естественно предположить, что (I.I) является отражением соответствующего члена в нуклон-нуклонном эффективном взаимодействии, скажем, вида

$$V_{es} = -\frac{1}{2} k (\vec{s}_1 + \vec{s}_2) \cdot (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \times \nabla_1 \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2), \quad (I.2)$$

где \vec{x} , \vec{p} , \vec{s} - координата, импульс и спин нуклонов.

Легко проверить, что двухчастичные силы (I.2) действительно приводят к самосогласованному потенциалу (I.I), причем константа фиксируется наблюдаемой величиной спин-орбитального расщепления (I.I).

х) В неограниченной среде аналогом является учет только матричных элементов $\langle \vec{p}, -\vec{p} | V_{12} | \vec{p}', -\vec{p}' \rangle$. Это означает, что пара нуклонов взаимодействует лишь в том случае, когда их суммарный импульс равен нулю. Когда пара начинает двигаться как целое, взаимодействие выключается.

Анализ показывает, что взаимодействие (I.2) может генерировать новый тип "спин-орбитальных" колебаний (2).

Перейдем теперь к анализу второго "слабого места" микроскопических моделей - приближениям. Любая микроскопическая модель имеет дело с задачей многих тел и не может обойтись без определенных приближений. Многочисленные методы, развитые для рассмотрения коллективных возбуждений (двухчастичные функции Грина, приближенное вторичное квантование и др.), по существу эквивалентны приближению хаотических фаз (RPA). Оно в какой-то степени может быть оправдано для колебаний, достаточно близких к гармоническим, но более сложные случаи требуют специального исследования. Очень полезны при этом простые модели, допускающие точные решения.

Рассмотрим две простые модели спаривания нуклонов, заселяющих два уровня с энергетическим расстоянием ϵ между ними и с одинаковым 2Ω - кратным вырождением каждого.

В первой модели рассматриваются один сорт нуклонов и взаимодействие имеет вид:

$$H_p = -GP^*P; \quad P = \sum (\alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2).$$

Ограничимся наиболее интересным случаем, когда число нуклонов $N = 2\Omega$. Тогда в отсутствие взаимодействия ($G = 0$) нижний уровень полностью заполнен, а верхний - свободен. Двухчастичные возбуждения, происходящие путем перемещения пары нуклонов с нижнего уровня на верхний, имеют энергию 2ϵ . Когда константа спаривания G возрастает, двухчастичные возбуждения коллективизируются ("парные вибрации"), а начиная со значения $G = G_c = \epsilon/2\Omega$ становится выгодным спаривание уже в основном состоянии ("спари-

вательная деформация"). Очень поучительно сравнить описание этого "фазового перехода" в точном и приближенном решении. Результаты для двух первых возбужденных уровней приведены на рис.1 (взятом из (3)). Видно, что РРА дает удовлетворительные результаты как в области $G/G_c \ll 1$, так и $G/G_c \gg 1$, но совершенно не применимо вблизи точки перехода $G/G_c = 1$.

Вторая модель⁽⁴⁾ рассматривает изотопически инвариантное ($T=1$) спаривание нуклонов на тех же уровнях. Гамильтониан имеет теперь вид

$$H_p = -G \sum_{t=0 \pm 1} P_t^+ P_t,$$

где P_t описывает пару нуклонов с проекцией изотопического спина t . Спектр возбужденных состояний в этой модели богаче (рис.2). Будучи чисто вибрационным вблизи $G = 0$, он переходит в пределе $G/G_c \gg 1$ в систему изотопических "ротационных полос" ($W \sim T(T+1)$). В этой модели можно проверить применимость РРА не только к возбуждениям вибрационного, но и ротационного типа. На рис.3 точный результат для энергии первого возбужденного состояния ($T=2$) сравнивается с вычислениями в рамках РРА (на основе как "сферического", так и "деформированного" базиса). Видно, что РРА оправдывается только для области $G/G_c \ll 1$ и оказывается совершенно непригодным для описания "вращательной" области. На том же рисунке показаны результаты, полученные в рамках кренкинг-модели, которые удовлетворительно описывают "вращательную" область, но теряют применимость при приближении к точке перехода.

От рассмотренных простых моделей трудно ждать каких-либо конструктивных указаний, однако два заключения бесспорны:

1) приближение хаотических фаз (RPA) не применимо для описания вращательных состояний;

2) ни RPA, ни кренкинг-модель не могут описать переходную область.

На первый взгляд кажется, что метод, пригодный для описания переходной области, можно создать путем гибридизации RPA и кренкинг-модели. Эта идея (в какой-то мере осуществляемая в виде проекционных методов) вряд ли является плодотворной, т.к. кренкинг-модель слишком непоследовательна чтобы служить исходным материалом для создания новых микроскопических методов. К этому вопросу мы еще вернемся после введения минимально необходимого формализма.

2. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ ОПЕРАТОРОВ МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

Рассмотрим гамильтониан для нуклонов ядра в представлении вторичного квантования

$$H = \sum_{i1} a_i^+ \langle i1 | \epsilon | i1 \rangle a_i + \frac{1}{2} \sum_{i2 i'2'} a_i^+ a_2^+ \langle i2 | V' | i'2' \rangle a_2 a_{i'} \quad (2.1)$$

Здесь a_i (a_i^+) - оператор уничтожения (рождения) нуклона в состоянии $|i\rangle$, ϵ - кинетическая энергия, а $V' = V'_{i2}$ - парное взаимодействие нуклонов.

Для более компактной записи введем квантованные вектора состояний

$$\alpha = \sum_i |i\rangle a_i \quad ; \quad a^+ = \sum_i a_i^+ \langle i| \quad , \quad (2.2)$$

после чего (2.1) запишется в виде

$$H = a^+ \epsilon \alpha + \frac{1}{2} (a^+ (a^+ V' a)_2 \alpha)_1 \quad (2.3)$$

Коммутируя (2.2) с (2.3), найдём^{x)}

^{x)} Ниже V представляет сумму прямого и обменного взаимодействия

$$V_{i2} = V'_{i2} (1 - P_{i2}).$$

$$[a, H] = \varepsilon a + (a^\dagger V a) a,$$

$$[a^\dagger, H] = -a^\dagger \varepsilon - a^\dagger (a^\dagger V a),$$

откуда следует для пары операторов

$$[aa^\dagger, H] = \varepsilon aa^\dagger - aa^\dagger \varepsilon + (a^\dagger V a) aa^\dagger - aa^\dagger (a^\dagger V a). \quad (2.4)$$

Если мы теперь напишем уравнение движения для четверки операторов, входящей в правую часть (2.4), то появятся шестерки операторов

a, a^\dagger и т.д. Усредняя эти уравнения по некоторому стационарному состоянию системы $|0\rangle$, получим цепочку связанных уравнений для

$$\rho(vv') = \langle 0|a, a^\dagger|0\rangle, \quad \langle 0|a, a_2, a_3^\dagger, a_4|0\rangle, \quad \dots \quad (2.5)$$

Величина ρ называется матрицей плотности^{х)}, остальные величины - корреляционными функциями.

Для замыкания уравнений следует применить какой-либо приближенный способ редукции высших корреляционных функций к низшим.

В методе Хартри-Фока (HF) ограничиваются рассмотрением лишь матрицы плотности ρ , для которой из (2.4) следует

$$[\varepsilon(\rho), \rho] = 0. \quad (2.6)$$

Здесь $\varepsilon(\rho)$ играет роль самосопряженного одночастичного гамильтониана^{хх)}

$$\varepsilon_1(\rho) = \varepsilon_1 + \langle 0|a^\dagger V_{12} a|0\rangle = \varepsilon_1 + \text{tr}_2 \{V_{12} (1-\rho_2)\}. \quad (2.7)$$

х) Обычно матрицей плотности называют величину $1-\rho$, но для дальнейшего удобно определение (2.5).

хх) Шпур в (2.7) берется по одночастичным состояниям 2-й частицы:

$$\text{tr}_2 (V_{12} \rho_2) = \sum_{22'} \langle 2'|V_{12}|2\rangle \langle 2|\rho|2'\rangle.$$

Для учета спаривания следует включить в рассмотрение наряду с ρ средние вида

$$(0/a, a_2/0) \quad , \quad (0/a_1^+ a_2^+/0) .$$

Удобно объединить средние от любой пары операторов, введя матричное обозначение

$$R(\nu\nu') = \begin{pmatrix} (a, a_{\nu'}^+) & (a, a_{\bar{\nu}'}) \\ (a_{\bar{\nu}}^+ a_{\nu'}^+) & (a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}'}) \end{pmatrix} . \quad (2.8)$$

Здесь и в дальнейшем $\bar{\nu}$ означает состояние, получающееся из ν обращением времени. Величину R мы также будем называть матрицей плотности. Заметим, что R формально можно представить в виде, аналогичном (2.5)

$$R(\nu\nu') = (0/\Psi(\nu)\Psi^+(\nu')/0) \quad , \quad (2.8')$$

где Ψ и Ψ^+ имеют вид спиноров

$$\Psi(\nu) = \begin{pmatrix} a_{\nu} \\ a_{\bar{\nu}}^+ \end{pmatrix} ; \quad \Psi^+(\nu) = (a_{\nu}^+ , a_{\bar{\nu}}) . \quad (2.8'')$$

Метод, учитывающий только средние вида (2.8), принято называть приближением Хартри-Фока-Боголюбова (НФВ). Уравнение для R формально аналогично (2.6):

$$[S(R), R] = 0 \quad , \quad (2.9)$$

где самосогласованный гамильтониан $S(R)$ имеет структуру

$$S = \begin{pmatrix} \epsilon & -\Delta \\ -\Delta^+ & -\epsilon \end{pmatrix} \quad , \quad (2.10)$$

т.е. включает не только обычное согласованное поле (входящее в ϵ), но и потенциал спаривания (Δ и Δ^+). Явная зависимость $S(R)$ может быть представлена в виде (ср. (2.7))

$$S_1(R) = \hat{\epsilon}_1 - \frac{1}{2} T_{12} (\hat{V}_{12} R_2) \quad , \quad (2.11)$$

где шпур берется не только по одночастичным состояниям, но и по спинорным индексам. Кинетическая энергия $\hat{\epsilon}$ и взаимодействие

\hat{V}_{12} здесь также рассматриваются как матрицы, в частности, $\hat{\epsilon} = \epsilon \tau^3$ ($\tau^{1,2,3}$ - матрицы Паули в пространстве (2.8), (2.10)).

Небольшое формальное отступление. Любой одночастичный оператор X (точнее: любая билинейная комбинация операторов α, α^\dagger) может быть представлен через спиноры (2.8''):

$$X = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{x} \Psi \Psi^\dagger) + \text{const},$$

а среднее значение этого оператора определяется соответственно через матрицу плотности R

$$\langle 0|X|0\rangle = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{x} R) = -\frac{1}{2} \sum_{\nu\nu', \alpha\alpha'} \langle \nu\alpha' | \hat{x} | \nu\alpha \rangle \langle \nu\alpha | R | \nu'\alpha' \rangle. \quad (2.12)$$

Здесь \hat{x} - некоторая комбинация матричного элемента и матриц Паули $\tau_{\alpha\alpha'}$. Ниже приводятся примеры такой записи для ряда физических операторов.

Число частиц

$$N = \text{Tr} \left(\frac{1 - \tau^3}{2} R \right) = \text{const} - \frac{1}{2} \text{Tr}(\tau^3 R). \quad (2.13)$$

Квадрупольный момент

$$Q = -\frac{1}{2} \text{Tr}(q \tau^3 R). \quad (2.14)$$

Импульс и момент

$$\vec{P} = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\vec{p} R) \quad ; \quad \vec{J} = -\frac{1}{2} \text{Tr}(\vec{j} R). \quad (2.15)$$

Оператор спаренных нуклонов

$$P = \frac{\Delta}{G} = -\text{Tr} \left(\frac{\tau^1 - i\tau^2}{2} R \right). \quad (2.16)$$

Заметим, что матричные элементы T-четных величин (ϵ, Q) в спинорном представлении $\sim \tau^3$, а для T-нечетных (\vec{P}, \vec{J}) - пропорциональны единичной матрице $\tau^0 \equiv 1$.

Матричные элементы двухчастичного взаимодействия \hat{V}_{12} содержат матрицы τ , относящиеся к каждой из частиц. В общем случае \hat{V}_{12} имеет вид

$$\hat{V}_{12} = \tau_1^3 \tau_2^3 V_{12}^{(e)} + V_{12}^{(c)} + \frac{1}{2} (\tau_1^1 \tau_2^1 + \tau_1^2 \tau_2^2) \bar{V}_{12}$$

где $V_{12}^{(e)}, V_{12}^{(c)}$ - Т-четное и Т - нечетное взаимодействие в канале частица-дырка (например, квадруполь-квадрупольное и спин-спиновое соответственно), а \bar{V} описывает взаимодействие в канале частица-частица (спаривание).

3. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРИБЛИЖЕННЫХ МЕТОДОВ

Выше мы видели, что операторные уравнения движения дают возможность получить цепочку уравнений для средних вида $\langle \psi | \Psi \Psi \dots \Psi^\dagger | \psi \rangle$, а для практического решения требуется задать некоторый приближенный способ расщепления этих величин (корреляционных функций).

В приближении Хартри-Фока (HF) все сводится к простейшей величине - матрице плотности, удовлетворяющей уравнению (2.9). Схему решения этого уравнения можно представить следующим образом.

Пусть найдены собственные векторы и собственные значения одночастичного гамильтониана S

$$S|a\rangle = |a\rangle E_a, \quad (3.1)$$

тогда R , коммутирующая с S , будет также диагональна в α -представлении, т.е.

$$R = \sum_a |a\rangle n_a \langle a|. \quad (3.2)$$

С другой стороны, по определению матрицы плотности R , ее собственные значения имеют смысл средних чисел заполнения и должны удовлетворять неравенству $0 \leq n_a \leq 1$. Наиболее выгодными (стабильными) решениями HF являются "чистые конфигурации", для которых все числа заполнения квазичастиц $n_a = 0$ или 1. Это условие можно записать в виде дополнительного уравнения для матрицы плотности

$$R^2 = R. \quad (3.3)$$

Конкретный выбор чисел заполнения n_α (т.е. размещение квазичастиц по уровням в самосогласованном потенциале) определяет состояние ядра $|0\rangle$. Для основного состояния заполняются наиболее низкие уровни.

(Подчеркнем, что гамильтониан \mathcal{S} в свою очередь зависит от R , так что последовательное решение уравнений HF - метода представляет значительные трудности. Чаще заранее выбирают вид \mathcal{S} , оставляя свободными лишь некоторые числовые параметры, значения которых затем определяются из приближенных условий согласования).

В методе Хартри-Фока взаимодействие между нуклонами учитывается лишь при формировании самосогласованного поля. Движение нуклонов внутри потенциальной ямы считается совершенно независимым (некоррелированным).

Так, если A_1 и A_2 одночастичные операторы (билинейные по Ψ и Ψ^\dagger) и относящиеся соответственно к частицам 1 и 2, то в приближении Хартри-Фока

$$(0|A_1 A_2|0) \approx (0|A_1|0)(0|A_2|0) \quad , \quad (3.4)$$

что означает полное отсутствие корреляции.

Для описания межнуклонных динамических корреляций матрицы плотности R уже недостаточно, и следует рассматривать корреляционные функции, прежде всего двухчастичную. В этом случае вместо (3.4) мы должны написать

$$(0|A_1 A_2|0) = \sum_{\nu} (0|A_1|\nu)(\nu|A_2|0) \quad , \quad (3.5)$$

где сумма берется по всем возможным состояниям ядра. Среди этих состояний можно выделить коллективные $(\nu_{coll}) \equiv |\omega\rangle$, где особенно сильна корреляция в движении нуклонов. Если оператор A имеет

симметрию, родственную этой корреляции, то основной вклад в сумму (3.5) дают именно $|\omega\rangle$. Вклад остальных промежуточных состояний ("двухквазичастичных") можно считать малым. Таким образом, двухчастичные корреляции определяются по существу недиагональными матричными элементами

$$\langle \omega | \Psi \Psi^\dagger | 0 \rangle. \quad (3.6)$$

В приближении хаотических фаз (RPA) предполагается, что величина недиагональных элементов (3.6) много меньше диагональных, так что правило расщепления формулируется в виде

$$\langle \omega | A_1 A_2 | 0 \rangle \approx \langle \omega | A_1 | 0 \rangle \langle 0 | A_2 | 0 \rangle + \langle \omega | A_1 | \omega \rangle \langle \omega | A_2 | 0 \rangle, \quad (3.7)$$

и кроме того, принимается

$$\langle \omega | A | \omega \rangle \approx \langle 0 | A | 0 \rangle.$$

Замечание: на самом деле критерий применимости RPA не столь прост. Пренебрежение другими промежуточными состояниями в (3.7) (число которых может быть очень велико) оправдывается некогерентностью их вклада ("хаотические фазы"). Проще сформулировать обратное утверждение: если недиагональные матричные элементы $\langle \omega | \dots | 0 \rangle$ не малы по сравнению с диагональными $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$, то RPA заведомо неприменимо.

В этом случае задача сильно усложняется, т.к. необходимо как диагональные, так и недиагональные матричные элементы рассматривать одновременно. Однако для некоторых важных случаев задачу удается решить путем простого обобщения метода Хартри-Фока.

Известно, что эффект спаривания нуклонов связан с большими недиагональными элементами операторов Δ, Δ^\dagger между основными состояниями соседних ядер той же четности (скажем, чётно-чётных), т.е.

$$\langle N | \Delta | N+2 \rangle, \quad \langle N+2 | \Delta^\dagger | N \rangle. \quad (3.8)$$

Если состояния ядра $|0\rangle$, которые рассматриваются в методе Хартри-Фока, имеют строго определенное число нуклонов (как и должно быть), то величины (3.8) в рамках этого метода ("диагональное приближение") учитываться не должны. Однако можно, нарушив строгий закон сохранения N , считать состояние $|0\rangle$ суперпозицией состояний с различным числом частиц. В этом случае допустимо предположение о существовании диагональных элементов от Δ, Δ^\dagger . Отказавшись от строгого сохранения N , мы можем тем не менее контролировать его среднее значение, добавив в гамильтониан член $-\lambda N$ с множителем Лагранжа λ (имеющим смысл химического потенциала). Описанное обобщение получило название метода Хартри-Фока-Боголюбова.

Формально аналогичным образом можно рассматривать вращения ядер. В этом случае оператор квадрупольного момента Q (входящий в гамильтониан) имеет большие недиагональные элементы (порядка диагональных) между состояниями одной вращательной полосы

$$(J|Q|J').$$

Мы можем включить их в рассмотрение, если согласимся нарушить закон сохранения момента и будем считать состояние $|0\rangle$ суперпозицией с различными значениями J . Среднее значение J ограничивается дополнительным членом $-\Omega J$ в гамильтониане, где Лагранжев множитель Ω имеет теперь смысл угловой скорости вращения. Такой подход получил название модели принудительного вращения или кренкинг-модели.

Следует напомнить также, что все расчеты в рамках традиционной оболочечной модели проводятся с функциями, в которых уже нарушена трансляционная инвариантность, т.к. в них фиксируется положение центра масс ядра, а не полный импульс \vec{P} .

Таким образом, во всех перечисленных случаях возможность одновременного учета диагональных и недиагональных переходов достигается ценой отказа от строгих законов сохранения. Точность приближений при этом довольно трудно оценить, а многочисленные предложения по улучшению этих методов (главным образом, путем проецирования) приводят к значительным усложнениям, не являясь к тому же достаточно последовательными.

На этом мы закончим несколько затянувшуюся аналитическую часть лекций и перейдем к конструктивной части.

4. МЕТОД МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ В РАСШИРЕННОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Матрица плотности в коллективном пространстве

Чтобы описывать спаривание и вращение более строго (без нарушения законов сохранения), необходимо одновременно рассматривать всю совокупность состояний системы с различными N или J , т.к. все они сильно связаны большими недиагональными матричными элементами.

Обобщая подобную ситуацию, будем считать, что из всей совокупности возбужденных состояний ядра выделена группа коллективных состояний $|\Lambda\rangle$, связанных сильными переходами между собой, но имеющих лишь слабые переходы в состояния другой природы. Назовем такую совокупность состояний коллективной полосой, а пространство квантовых чисел (или переменных), характеризующих все состояния полосы, будем называть коллективным пространством.

Для пояснения выпишем явно состояния коллективной полосы для трех рассмотренных выше частных задач:

Спаривание	- $ N\rangle$.
Движение центра масс в модели оболочек	- $ \bar{P}\rangle$.
Вращение ^{x)} .	- $ KJM\rangle$.

Назовем совокупность матричных элементов

$$\langle \Lambda | \Psi_{\nu\alpha}(\nu) \Psi_{\nu'\alpha'}^{\dagger}(\nu') | \Lambda' \rangle \equiv \langle \Lambda \nu \alpha | R | \Lambda' \nu' \alpha' \rangle \quad (4.1)$$

расширенной матрицей плотности. По сравнению с определением (2.8') обобщение состоит в том, что R является теперь матрицей не только во "внутреннем" (одночастичном, $\nu\alpha$) пространстве, но и во "внешнем" (коллективном, Λ). Определение (4.1) подчеркивает формальную равноправность этих пространств.

Чтобы получить замкнутые уравнения для R , следует воспользоваться операторными уравнениями движения (для $\Psi\Psi^{\dagger}$), взять от них матричный элемент

$$\langle \Lambda | [\Psi\Psi^{\dagger}, H] | \Lambda' \rangle = \langle \Lambda | \dots | \Lambda' \rangle,$$

а затем произвести в правой части расщепление, оставляя в качестве промежуточных только состояния выделенной полосы $|\Lambda\rangle$. В результате получим

$$[R, H] = [S(R), R], \quad (4.2)$$

где все величины в (4.2) являются матрицами в объединенном пространстве, произведение которых понимается как

$$SR \Rightarrow \sum_{\Lambda_1, \nu_1, \alpha_1} \langle \Lambda \nu \alpha | S | \Lambda_1 \nu_1 \alpha_1 \rangle \langle \Lambda_1 \nu_1 \alpha_1 | R | \Lambda' \nu' \alpha' \rangle.$$

x) Для вращения K не всегда является точным квантовым числом. Тем не менее и в этом случае удобно использовать состояния $|KJM\rangle$ в качестве базисных, выражая стационарные состояния суперпозициями базисных функций с различными K .

Матричные элементы от гамильтониана H зависят, естественно, только от коллективных квантовых чисел, поэтому H в (4.2) имеет следующий явный вид:

$$\langle \Lambda \nu \alpha | H | \Lambda' \nu' \alpha' \rangle = \delta_{\nu \nu'} \delta_{\alpha \alpha'} \langle \Lambda | H | \Lambda' \rangle, \quad (4.3)$$

причем, если $|\Lambda\rangle$ являются собственными функциями H , то $\langle \Lambda | H | \Lambda' \rangle \sim \delta_{\Lambda \Lambda'}$. Таким образом, величина H в (4.2) играет роль коллективного гамильтониана, который описывает возбуждения коллективной полосы обычным образом, т.е. состояния ядра $|\Lambda\rangle$ являются собственными функциями H (или находятся после диагонализации матрицы $\langle \Lambda | H | \Lambda' \rangle$), а соответствующие собственные значения дают энергии этих состояний.

Уравнение (4.2) можно переписать в виде

$$[S + H, R] = 0, \quad (4.2)$$

из которого видно, что $S + H$ имеет смысл полного гамильтониана, содержащего "одночастичную" часть S и коллективную часть H . Связь между одночастичными и коллективными "степенями свободы" проявляется в зависимости одночастичной части S не только от одночастичных, но и коллективных переменных.

В дополнение к уравнению (4.2) мы сохраним также уравнение (3.3) $R^2 = R$, но рассматриваем его теперь в объединенном пространстве:

$$\sum_{\Lambda, \nu, \alpha} \langle \Lambda \nu \alpha | R | \Lambda, \nu, \alpha \rangle \langle \Lambda, \nu, \alpha | R | \Lambda' \nu' \alpha' \rangle = \langle \Lambda \nu \alpha | R | \Lambda' \nu' \alpha' \rangle. \quad (4.4)$$

В обоснование (4.4) можно привести следующие аргументы. Как мы видели выше, условие $R^2 = R$ для обычной матрицы плотности ограничивает тип рассматриваемых состояний ядра только чистыми одночастичными конфигурациями (детерминантами Слэтера). Теперь мы допускаем одночастично-коллективные суперпозиции, но пренебрегаем примесями

других состояний. Уравнение (4.4) и является условием чистоты (полноты) всех рассматриваемых состояний в обобщенном одночастично-коллективном пространстве.

Уравнения (4.2) и (4.4) по форме совпадают с уравнениями для обычной матрицы плотности. Обобщение состоит лишь в расширении пространства. Однако это "лишь" ведет к существенному усложнению процедуры решения. Ниже мы обсудим один из возможных путей существенного упрощения задачи.

Операторы в коллективном пространстве

Логично считать, что коллективное пространство - последовательность сильно связанных состояний ядра - соответствует малому числу степеней свободы, и можно явно ввести адекватный набор координат и операторов для его описания. Здесь мы ограничимся частным (но важным) случаем, когда состояния полосы характеризуются аддитивными квантовыми числами. Для определенности будем параллельно рассматривать три уже упоминавшиеся конкретные задачи: спаривание (сп), движение центра масс (ц.м.) и вращение (вр), для которых рассматриваемая полоса состояний как раз характеризуется аддитивными величинами: числом частиц N (сп), импульсом \vec{P} (ц.м.), моментом \vec{J} (вр).

До сих пор все величины, входящие в уравнение (4.2), рассматривались как матрицы по состояниям полосы. Мы можем перейти от матричного представления к операторному, введя для этого соответствующие наборы обобщенных импульсов и координат.

(сп) Число частиц и сопряженная ему фаза Φ :

$$\Phi; \quad N = -i \frac{\partial}{\partial \Phi} \quad (4.5)$$

(ц.м.) Координата \vec{X} и импульс \vec{P} :

$$\vec{X}; \quad \vec{P} = -i \frac{\partial}{\partial \vec{X}} \quad (4.6)$$

(вр) Углы Эйлера θ_i и операторы момента в "лабораторной"

(J_μ) и "внутренней" (I_λ) системе:

$$\theta_i; J_\mu = D_{\mu\lambda}^i(\theta_i)^* I_\lambda; I_\lambda = D_{\mu\lambda}^i(\theta_i) J_\mu \quad (4.7)$$

с известными свойствами коммутации

$$[J_i, J_k] = i\epsilon_{ijk} J_j; [I_i, I_k] = -i\epsilon_{ijk} I_j; [J_i, I_k] = 0. \quad (4.8)$$

Важное замечание. Все эти величины введены формально и имеют смысл лишь как матричные элементы по соответствующим состояниям ядра $| \Lambda \rangle \rightarrow | N \rangle, | \bar{P} \rangle, | KJM \rangle$. Не следует смешивать их с одночастичными операторами.

Перейдем к анализу одночастичного гамильтониана S . Легко видеть, что он не коммутирует с коллективными импульсами

$$(сп) [S, N] \neq 0; (ц.м.) [S, \bar{P}] \neq 0; (вр) [S, \bar{J}] = 0,$$

т.к. содержит недиагональные величины Δ (сп), средний оболочечный потенциал $U(\bar{X})$ (ц.м.) или квадрупольный момент Q (деформированный потенциал) (вр). С другой стороны, существуют операторы в комбинированном пространстве (коллективном + одночастичном), которые коммутируют с S^x :

$$(сп) [S, N + \tau^3] = 0; (ц.м.) [S, \bar{P} + \bar{p}] = 0; \quad (4.9)$$

$$(вр) [S, \bar{J} + \bar{j}] = 0.$$

Для двух последних случаев этот результат очевиден: одновременный сдвиг или вращение как "внутреннего" (одночастичного), так и "внешнего" (коллективного) пространства не может изменить S^x . Для спаривания соответствующий "сдвиг фазы" не столь нагляден, но (4.9) легко проверить прямым вычислением, используя структурный вид S (2.10). Величинами, не коммутирующими с N , являются Δ и Δ^+ , для которых, очевидно,

х) Это утверждение строго справедливо для аддитивных величин, которые здесь и рассматриваются.

хх) Формальные соображения: в любом матричном элементе, например, $(\bar{P} | \alpha_{\bar{p}}^+ | \bar{P}^+)$, очевидно, имеет место равенство $\bar{P} + \bar{p} = \bar{P} + \bar{p}'$.

$$[\Delta, N] = 2\Delta \quad ; \quad [\Delta^\dagger, N] = -2\Delta^\dagger,$$

и, следовательно,

$$[S, N] = 2 \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ \Delta^\dagger & 0 \end{pmatrix}.$$

С другой стороны, коммутируя (2.10) с матрицей Паули τ^3 , находим

$$[S, \tau^3] = -2 \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ \Delta^\dagger & 0 \end{pmatrix},$$

что и доказывает (4.9).

Унитарное преобразование в одночастичном пространстве

Поставим задачу: найти такое унитарное преобразование D , действующее в одночастичном пространстве, чтобы удовлетворялись равенства

$$\begin{aligned} \text{(сп)} \quad & D(N + \tau^3) D^{-1} = N; \\ \text{(ц.м.)} \quad & D(\vec{P} + \vec{p}) D^{-1} = \vec{P}; \\ \text{(вр)} \quad & D(\vec{J} + \vec{j}) D^{-1} = \vec{J}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Если такое преобразование найдено, то вводя обозначения для преобразованных величин

$$r = DRD^{-1}; \quad s = DSD^{-1}; \quad h = DHD^{-1}, \quad (4.11)$$

получим, преобразуя уравнения (4.2) и (4.4),

$$[s + h, r] = 0; \quad r^2 = r. \quad (4.12)$$

С другой стороны, из (4.9) и (4.10) находим

$$\text{(сп)} \quad [s, N] = 0; \quad \text{(ц.м.)} \quad [s, \vec{P}] = 0; \quad \text{(вр)} \quad [s, \vec{J}] = 0. \quad (4.13)$$

Это означает, что преобразованный одночастичный гамильтониан в первых двух случаях не зависит от коллективных координат (Φ или \vec{X}), а в случае вращений может зависеть только от "внутреннего" момента \vec{I} (единственной комбинации \vec{q} и \vec{J} , коммутирующей с \vec{J}). Этот результат делает понятным значение преобразования D .

Для нахождения D заметим, что (4.10) могут выполняться лишь в том случае, когда D зависит (как от параметров) от коллективных переменных, причем действует на N , \vec{P} или \vec{J} как оператор

сдвига. Легко проверить, что такими операторами являются

$$(сп) \quad D = \exp(i\Phi\tau^3) \quad ; \quad (ц.м.) \quad D = \exp(i\vec{X}\cdot\vec{p}); \quad (4.14)$$

$$(вр) \quad D = \exp(+i\varphi j_z) \exp(i\theta j_y) \exp(i\psi j_x).$$

В последней формуле $\theta_i = (\varphi, \theta, \psi)$ - углы Эйлера. Заметим, что матричный элемент от D в $вр$ по сферическому одночастичному базису $|jm\rangle$ равен D - функции Вигнера.

D - преобразование существенно упростило одночастичный гамильтониан \mathcal{H} . Однако коллективный гамильтониан теперь усложнился. Раньше H коммутировал с коллективными импульсами (N, \vec{P}, \vec{J}) , т.е. был функцией только N , \vec{P} или \vec{J} . После D - преобразования^{х)}

$$(сп) \quad DND^{-1} = N - \tau^3 \quad ; \quad (ц.м.) \quad D\vec{P}D^{-1} = \vec{P} - \vec{p}; \quad (4.15)$$

$$(вр) \quad D\vec{J}D^{-1} = \vec{J} - \vec{j} \quad ,$$

поэтому h зависит теперь и от одночастичных величин

$$(сп) \quad h = H(N - \tau^3) \quad ; \quad (ц.м.) \quad h = H(\vec{P} - \vec{p}); \quad (4.16)$$

$$(вр) \quad h = H(\vec{J} - \vec{j}).$$

Прежде чем переходить к решению конкретных проблем, полезно резюмировать основные этапы решения задач в рамках предложенного метода.

I. Выделение коллективной полосы состояний.

Результат: уравнения для матрицы плотности

$$[S + H, R] = 0 \quad ; \quad R^2 = R. \quad (4.17)$$

П. Если полоса характеризуется аддитивными квантовыми числами ("импульсами"), можно найти унитарное преобразование D .

Результат: уравнения для преобразованных величин

$$[s + h, r] = 0 \quad ; \quad r^2 = r \quad , \quad (4.12)$$

х) Последнее равенство в (4.15) есть следствие (4.10), (4.7) и (7.1):

$$D(J_\mu + j_\mu)D^{-1} = D_{\mu\lambda}^* (D I_\lambda D^{-1} + j_\lambda) = J_\mu = D_{\mu\lambda}^* I_\lambda.$$

где теперь r , s коммутируют с "импульсами".

III. Решить уравнения, найти r , а затем матрицу плотности

$$R = D^{-1} r D.$$

IV. Определить h (а затем H) из условия согласования:

"суммарный одночастичный импульс должен равняться коллективному импульсу".

Пример для пояснения: полный импульс ядра $\sum \vec{p}_i$ является оператором как в одночастичном, так и коллективном пространстве и, естественно, не может совпадать с \vec{P} , определенным лишь матричными элементами в коллективном пространстве. Но все матричные элементы $\langle \lambda | \sum \vec{p}_i | \lambda' \rangle$ должны совпадать с $\langle \lambda | \vec{P} | \lambda' \rangle$.

5. ЗАДАЧА О СПАРИВАНИИ

В этом случае преобразованный коллективный гамильтониан (4.16) имеет фактически очень простой вид. Для любой функции $H(N)$ имеем: в силу свойств матриц Паули

$$h = H(N - \tau^3) = h_0(N) - \tau^3 \lambda(N), \quad (5.1)$$

где

$$\begin{aligned} h_0(N) &= \frac{1}{2} \{ H(N+1) + H(N-1) \}, \\ \lambda(N) &= \frac{1}{2} \{ H(N+1) - H(N-1) \}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Член $h_0(N)$ не зависит от одночастичных переменных и вообще выпадает из уравнений (4.12). Величина $\lambda(N)$, как видно из определения (5.2), имеет смысл химического потенциала.

Чтобы представить себе структуру одночастичного гамильтониана \mathcal{J} , произведем явное D -преобразование над (2.10). В результате получим

$$\mathcal{J} = e^{i\phi\tau^3} \begin{pmatrix} \epsilon - \Delta & \\ & -\Delta^+ - \epsilon \end{pmatrix} e^{-i\phi\tau^3} = \begin{pmatrix} \epsilon - \bar{\Delta} & \\ & -\bar{\Delta}^+ - \epsilon \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

где мы ввели величины

$$\bar{\Delta} = e^{i\phi} \Delta e^{-i\phi}; \quad \bar{\Delta}^+ = e^{-i\phi} \Delta^+ e^{i\phi}, \quad (5.4)$$

которые на самом деле не зависят от фазы ϕ и, следовательно, диагональны в N -представлении (как и должно быть согласно (4.13)). В дальнейшем мы будем считать $\bar{\Delta}$ и $\bar{\Delta}^+$ вещественными и, следовательно, равными: $\bar{\Delta} = \bar{\Delta}^+$. Тогда из (5.3) получаем

$$s = \epsilon \tau^3 - \bar{\Delta} \tau^1. \quad (5.5)$$

Как видно из (5.5) и (5.1), уравнения (4.12) сводятся к

$$[s', r] = 0 \quad ; \quad r^2 = r, \quad (5.6)$$

где в s' (в отличие от s) одночастичные энергии отсчитываются от химического потенциала λ :

$$s' = s - \lambda \tau^3 = \begin{pmatrix} \epsilon - \lambda & -\bar{\Delta} \\ -\bar{\Delta} & -\epsilon + \lambda \end{pmatrix} = (\epsilon - \lambda) \tau^3 - \bar{\Delta} \tau^1. \quad (5.7)$$

Уравнения (5.6) формально совпадают с аналогичными уравнениями метода Хартри-Фока-Боголюбова, однако все входящие в них величины теперь зависят (как от параметра) от "коллективного импульса" N . Получим их решение методом, намеченным в (3.1), (3.2).

Прежде всего находим собственные векторы $|a\rangle$ и собственные значения E_a гамильтониана s'

$$s'|a\rangle = |a\rangle E_a. \quad (5.8)$$

Как видно из (5.7), s' обладает симметрией $\tau^2 s' \tau^2 = -s'$. Поэтому если $|a\rangle$ и E_a - собственный вектор и собственное значение s' , то $|\bar{a}\rangle = -i\tau^2 |a\rangle$ также будет его собственным вектором с собственным значением $E_{\bar{a}} = -E_a$. Легко найти явный вид $|a\rangle$ и $|\bar{a}\rangle$ (для обычного случая постоянного спаривания $\bar{\Delta} = \text{const}$):

$$\begin{aligned} |a\rangle &= |v\alpha\rangle = |v\rangle \begin{pmatrix} u_v \\ -v_v \end{pmatrix}; & E_a &= E_v = \sqrt{(\epsilon_v - \lambda)^2 + \bar{\Delta}^2}; \\ |\bar{a}\rangle &= |v\bar{\alpha}\rangle = |v\rangle \begin{pmatrix} v_v \\ u_v \end{pmatrix}; & E_{\bar{a}} &= -E_a, \end{aligned} \quad (5.9)$$

где $|v\rangle$ - собственные векторы ϵ , а u_v и v_v - коэффициенты преобразования Боголюбова, определяемые равенствами

$$u_v^2 + v_v^2 = 1; \quad u_v^2 - v_v^2 = \frac{\epsilon_v - \lambda}{E_v}; \quad 2u_v v_v = \frac{\bar{\Delta}}{E_v}. \quad (5.10)$$

В силу коммутативности с s' , r также диагонально в α -представлении, т.е.

$$r|\alpha\rangle = |\alpha\rangle(1-n_\alpha); \quad n_\alpha = 0, 1, \quad (5.11)$$

причем для основного состояния четно-четного ядра все $n_\alpha = 0$ (квазичастичные состояния), а $n_{\bar{\alpha}} = 1$ (квазидырочные состояния). В матричном представлении

$$\langle v\alpha|r|v'\alpha'\rangle = \delta_{vv'} \begin{pmatrix} u_v^2 & -u_v v_v \\ -u_v v_v & v_v^2 \end{pmatrix}_{\alpha\alpha'} \equiv \delta_{vv'} (r_v)_{\alpha\alpha'}. \quad (5.12)$$

Матрица плотности R получается из (5.12) обратным D -преобразованием (4.14)

$$R_v = D^{-1} r_v D = \begin{pmatrix} u_v^2(N+1) & -e^{-i\phi} u_v(N)v_v(N)e^{-i\phi} \\ -e^{i\phi} u_v(N)v_v(N)e^{i\phi} & v_v^2(N-1) \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Здесь мы воспользовались свойством оператора фазы ($\phi = i \frac{\partial}{\partial N}$), что привело к сдвигу аргумента в v^2, u^2 . До сих пор величина $\bar{\Delta}$ рассматривалась как свободный параметр. Условие согласования (2.16) дает

$$\Delta = e^{-i\phi} \bar{\Delta} e^{-i\phi} = -G \mathcal{T} \left(\frac{\tau - i\tau^2}{2} R \right) = e^{-i\phi} \sum_v u_v v_v e^{-i\phi}, \quad (5.14)$$

откуда, используя (5.10), получаем для $\bar{\Delta}$ обычное уравнение

$$\bar{\Delta} = G \sum_v \frac{\bar{\Delta}}{2E_v}. \quad (5.15)$$

Наконец, нам остается найти коллективный гамильтониан (5.1), т.е. по существу - химический потенциал $\lambda(N)$. Для этого воспользуемся условием согласования (см. пункт IV в конце предыдущего раздела): микроскопический оператор числа частиц должен иметь на состояниях $|N\rangle$ те же матричные элементы, что и коллективный оператор N в обобщенном пространстве. Это можно записать в виде (ср.

(2.13))

$$N = \mathcal{T} \left(\frac{1-\tau^2}{2} R \right), \quad (5.16)$$

откуда с учетом (5.13) имеем уравнение для определения $\lambda(N)$

$$N = \sum_v v_v^2(N-1). \quad (5.17)$$

"Спектр коллективной полосы" - в данном случае энергии основных состояний четно-четных ядер $H(N)$ - можно найти затем из рекуррентного соотношения (5.2). По существу только этот последний пункт отличается от традиционного приближения HFB .

6. Задача о движении центра масс

Вид коллективного гамильтониана в этой задаче заранее известен. Именно поэтому она является методическим пробным камнем для различных приближенных процедур. Известно, например, что простейший проекционный метод⁽⁵⁾ не дает правильного значения массы системы, и требуются существенные усложнения для исправления этого недостатка⁽⁶⁾.

Для простоты мы ограничимся решением по теории возмущений, считая импульс центра масс \vec{P} малым^{x)}.

В нулевом приближении, пренебрегая величиной \hbar , имеем уравнения

$$[\dot{s}, \dot{r}^2] = 0 \quad ; \quad \dot{r}^2 = \dot{r}^2 \quad , \quad (6.1)$$

решение которых не зависит от \vec{P} . В следующем приближении считаем, что r и s содержат линейные по \vec{P} члены. Удобно записать их в виде

$$r^{(1)} = \vec{r} \cdot (\vec{P} - \vec{p}) + \dots \quad ; \quad s^{(1)} = \vec{s} \cdot (\vec{P} - \vec{p}) \quad , \quad (6.2)$$

где опущены члены, не содержащие \vec{P} .

Коллективный гамильтониан ищем в виде

$$h = H(\vec{P} - \vec{p}) = \frac{1}{2M} (\vec{P} - \vec{p})^2 \quad (6.3)$$

Заметим, что член $P^2/2M$ коммутирует с \dot{r}^2 , поэтому $[h, \dot{r}^2]$ содержит лишь линейный по \vec{P} член. Введенная в (6.3) в качестве параметра полная масса M подлежит определению.

x) Это ограничение не принципиально; задача может быть решена точно.

Выделим в уравнении $[s+h, r]=0$ члены I-го порядка. Используя (6.3) и (6.2) и приравнявая коэффициенты при \vec{P} , находим^{x)}

$$[\dot{s}, \vec{r}] + [\vec{s}, \dot{r}] - \frac{1}{M} [\vec{p}, \dot{r}] = 0. \quad (6.4)$$

Если \vec{r} найдено, то зависящая от \vec{P} часть $R^{(1)}$ получается посредством обратного D -преобразования (4.14):

$$R^{(1)} = D^{-1} \vec{r} \cdot (\vec{P} - \vec{p}) D = D^{-1} \vec{r} \cdot D \cdot D^{-1} (\vec{P} - \vec{p}) D = D^{-1} \vec{r} \cdot \vec{P} \quad , \quad (6.5)$$

где в последнем равенстве использовано (4.10).

Заключительный этап (IV в конце раздела 4) - согласование суммарного нуклонного импульса (2.15), вычисленного с $R^{(1)}(\vec{P})$, с коллективным импульсом \vec{P} . Подставляя (6.5) в (2.15), находим^{xx)}

$$P_i = \text{Tr} \left(\frac{\tau^3 - 1}{2} p_i D^{-1} r_k D \right) P_k. \quad (6.6)$$

Оператор D (4.14) коммутирует с \vec{P} и τ^3 и после циклической перестановки под знаком шпура компенсируется D^{-1} . Таким образом, (6.6) удовлетворяется тождественно, при условии

$$\text{Tr} \left(\frac{\tau^3 - 1}{2} p_i r_k \right) = \delta_{ik}. \quad (6.7)$$

Нам остается решить уравнение (6.4) и найти \vec{r} . Явный вид членов \dot{s} и \vec{s} самосогласованного гамильтониана получим из общего выражения (2.11) после D -преобразования (4.14). В результате (с учетом (6.2)), находим

$$\dot{s}_1 = - \text{Tr}_2 (\hat{V}_{12} \dot{r}_2) \quad ; \quad \hat{\varepsilon}^0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} \tau^3 ; \quad (6.8)$$

$$\vec{s}_1 = - \text{Tr}_2 (\hat{V}_{12} \vec{r}_2). \quad (6.9)$$

x) Аналогичное уравнение получается и для скалярной (не зависящей от \vec{P}) части $r^{(1)}$, но оно не дает ничего нового.

xx) В отличие от (2.15), в (6.6) добавлен под шпуром член с τ^3 . Сам по себе он тождественно равен нулю, но помогает корректно исключить бесконечности типа $\text{Tr}(r^2) = \sum 1$, которые могли бы появиться при преобразованиях, приводящих к (6.16).

При получении (6.8) и (6.9) явный вид парного взаимодействия не используется. Предполагается лишь трансляционная инвариантность

$$[\hat{V}_{12}, \vec{p}_1 + \vec{p}_2] = 0, \text{ обеспечивающая в силу (4.14) равенство} \\ D_1 D_2 \hat{V}_{12} D_2^{-1} D_1^{-1} = \hat{V}_{12}. \quad (6.10)$$

Ищем решение (6.4) в виде

$$\vec{r} = C [\vec{x} \tau^3, \dot{r}] \quad (6.11)$$

где \vec{x} - координата нуклона, а C - константа. Преобразуем сначала 1-й член в (6.4). В силу свойств двойного коммутатора

$$[\dot{s}, \vec{r}] \rightarrow C [\dot{s}, [\vec{x} \tau^3, \dot{r}]] = C [[\dot{s}, \vec{x} \tau^3], \dot{r}] + C [\vec{x} \tau^3, [\dot{s}, \dot{r}]].$$

Последний член исчезает в силу (6.1), а первый с учетом (6.8) дает

$$C \left[\left[\frac{\vec{p}^2}{2m}, \vec{x} \right], \dot{r} \right] - C \left[\mathcal{T}_2 \left\{ [\hat{V}_{12}, \vec{x}_1 \tau_1^3] \dot{r}_2^0 \right\}, \dot{r}_1^0 \right]. \quad (6.12)$$

Для 2-го члена в (6.4) с учетом (6.9) имеем

$$[\dot{s}, \dot{r}] \rightarrow -C \left[\mathcal{T}_2 \left\{ \hat{V}_{12} [\vec{x}_2 \tau_2^3, \dot{r}_2^0] \right\}, \dot{r}_1^0 \right]$$

или после циклической перестановки под знаком шпура

$$= -C \left[\mathcal{T}_2 \left\{ [\hat{V}_{12}, \vec{x}_2 \tau_2^3] \dot{r}_2^0 \right\}, \dot{r}_1^0 \right]. \quad (6.13)$$

Заметим теперь, что в сумме выражений (6.12) и (6.13) члены, содержащие \hat{V}_{12} , исчезают, если выполняется условие

$$[\hat{V}_{12}, \vec{x}_1 \tau_1^3 + \vec{x}_2 \tau_2^3] = 0, \quad (6.14)$$

т.е. если межнуклонное взаимодействие обладает галилеевской инвариантностью^{х)}. Собирая остальные члены в (6.4), имеем

$$C \left[\left[\frac{\vec{p}^2}{2m}, \vec{x} \right], \dot{r} \right] - \frac{1}{M} [\vec{p}, \dot{r}] = 0.$$

Вычисляя внутренний коммутатор в первом члене, убеждаемся, что уравнение удовлетворяется, если $C = \frac{im}{M}$. Таким образом, решение уравнения (6.4) имеет вид

$$\vec{r} = i \frac{m}{M} [\vec{x} \tau^3, \dot{r}]. \quad (6.15)$$

х) Напомним, что в спинорном представлении $\vec{x} \tau^3$ - оператор координаты и, след., (6.14) означает, что \hat{V}_{12} не зависит от $\vec{p}_1 + \vec{p}_2$.

Подставим (6.15) в условие согласования (6.7). После циклической перестановки под знаком шпура получаем

$$i \frac{m}{M} \text{Tr} \left\{ \left[\frac{\tau^2 - 1}{2} p_i, x_k \tau^2 \right] \dot{r}^0 \right\} = \delta_{ik},$$

или учитывая значение коммутатора $[p_i, x_k] = -i\delta_{ik}$,

$$\frac{m}{M} \text{Tr} \left(\frac{1 - \tau^2}{2} \dot{r}^0 \right) = 1. \quad (6.16)$$

Сравнивая это выражение с (2.13), убеждаемся, что шпур в (6.16) равняется числу частиц N , что и доказывает равенство $M = Nm$.

7. Задача о вращении. Адиабатическое приближение

Полезно начать с выяснения физического смысла D -преобразования (4.14). Производя формальные вычисления (в представлении $|jm\rangle$), в котором D совпадает с функциями Вигнера D_{mm}^j , получим в частности

$$D_{jm} D^{-1} = D_{m\lambda}^{j*} q_\lambda \quad ; \quad D q_\mu^+ D^{-1} = D_{\mu\lambda}^{2*} q_\lambda^+ \quad (7.1)$$

(по повторяющимся индексам суммирование).

Из (7.1) видно (ср. с (4.7)), что D -преобразование соответствует повороту из лабораторной во "внутреннюю" систему координат. Рассмотрим, например, выражение для квадрупольного момента, используемое в обобщенной модели

$$Q_\mu(\theta_i) = D_{\mu\lambda}^2(\theta_i) \alpha_\lambda,$$

где $\alpha_0 = \beta \cos \gamma$; $\alpha_2 = \alpha_{-2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma$; $\alpha_1 = \alpha_{-1} = 0$.

Тогда одночастичное квадрупольное взаимодействие преобразуется следующим образом

$$\begin{aligned} D q_\mu^+ Q_\mu(\theta_i) D^{-1} &= D q_\mu^+ D^{-1} Q_\mu(\theta_i) \\ &= q_\lambda^+ \alpha_\lambda D_{\mu\lambda}^{2*}(\theta_i) D_{\mu\lambda}^2(\theta_i) = q_\lambda^+ \alpha_\lambda, \end{aligned}$$

т.е. переходит в квадрупольное взаимодействие во внутренней системе, которое (как и должно быть в силу (4.13)) не зависит от углов θ_i .

Переходим к решению уравнения $[J+H, r] = 0$, предполагая малость вращательной энергии по сравнению с энергиями одночастичных возбуждений. До некоторого этапа задача имеет формальную ана-

логию с разобранной в предыдущем разделе. Напомним, поэтому, лишь основные этапы.

(а) В нулевом приближении пренебрегаем вращательной энергией h и решаем уравнения

$$[\dot{\mathcal{J}}, \dot{r}] = 0 \quad ; \quad \dot{r}^2 = \dot{r}_0^2$$

(б) В следующем приближении ищем для r и \mathcal{J} поправки, линейные по I :

$$r^{(1)} = r_{\lambda} \cdot (I_{\lambda} - j_{\lambda}) + \dots \quad ; \quad \mathcal{J}^{(1)} = \mathcal{J}_{\lambda} \cdot (I_{\lambda} - j_{\lambda}) + \dots \quad , \quad (7.2)$$

а коллективный гамильтониан выбираем (ограничиваясь случаем $K = 0$) в виде

$$h = H(\vec{I} - \vec{j}) = \frac{1}{2\mathcal{F}} (\vec{I} - \vec{j})^2 \quad (7.3)$$

(в) Подставляя (7.2) и (7.3) в уравнение и приравнявая коэффициенты при I_{λ} , находим

$$[\dot{\mathcal{J}}, r_{\lambda}] + [\mathcal{J}_{\lambda}, \dot{r}] - \frac{1}{\mathcal{F}} [j_{\lambda}, \dot{r}] = 0 \quad (7.4)$$

(г) Если r_{λ} найдено, то линейный по I член в $R^{(1)}$ получаем обратным D -преобразованием

$$R^{(1)} = D^{-1} r_{\lambda} (I_{\lambda} - j_{\lambda}) D = D^{-1} r_{\lambda} D D^{-1} (I_{\lambda} - j_{\lambda}) D = D^{-1} r_{\lambda} D I_{\lambda} \quad (7.5)$$

(д) Введенный в (7.3) параметр - момент инерции \mathcal{F} - определяется из условия согласования (см. (2.15) и (7.1))

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\mu} &= -\frac{1}{2} \text{Tr} (j_{\mu} D^{-1} r_{\lambda} D) I_{\lambda} = -\frac{1}{2} \text{Tr} (D j_{\mu} D^{-1} r_{\lambda}) I_{\lambda} \\ &= -D_{\mu\lambda}^* \frac{1}{2} \text{Tr} (j_{\lambda} r_{\lambda}) I_{\lambda} \quad , \end{aligned}$$

что с учетом (4.7) превращается в тождество, если

$$-\frac{1}{2} \text{Tr} (j_{\lambda} r_{\lambda}) = \mathcal{F}_{\lambda\lambda} \quad (7.6)$$

На этом аналогия с задачей о поступательном движении центра инерции заканчивается. Момент инерции существенно зависит от внутреннего движения и взаимодействия нуклонов и не может быть получен (аналогично массе M) только из законов сохранения. Необходимо явно решать уравнение (7.4).

Для величин \dot{r} , $\dot{\mathcal{J}}$ нулевого приближения мы используем результаты, полученные в (5.8)-(5.12). В представлении собственных

функций \hat{j} и \hat{r} уравнение (7.4) преобразуется к виду

$$\langle a | \hat{r}_\lambda | a' \rangle = \frac{1}{\mathcal{F}} \frac{n_a - n_{a'}}{E_a - E_{a'}} \left(\langle a | \hat{j}_\lambda^+ | a' \rangle - \mathcal{F} \langle a | \hat{s}_\lambda | a' \rangle \right). \quad (7.7)$$

Вычисляя в том же представлении шпур в (7.6) и используя (7.7), находим

$$\mathcal{F} d_{\lambda\lambda'} = -\frac{1}{2} \sum_{a a'} \frac{n_a - n_{a'}}{E_a - E_{a'}} \langle a' | \hat{j}_\lambda | a \rangle \left(\langle a | \hat{j}_\lambda^+ | a' \rangle - \mathcal{F} \langle a | \hat{s}_\lambda | a' \rangle \right). \quad (7.8)$$

Это выражение в точности совпадает с результатом кренкинг-модели при последовательном учете взаимодействия нуклонов (см. например, (7)). Для перехода в обычное представление заметим, что в правую часть (7.8) дают вклады лишь переходы из частичных состояний ($n_a = 0$, $E_a > 0$) в дырочные ($n_a = 1$; $E_a = -E_a < 0$). Переход от $|a\rangle$, $|\bar{a}\rangle$ к обычным квазичастичным состояниям $|v\rangle$ и u , v - коэффициентам Боголюбова дается (5.9). Замечая, в частности, что

$$\langle a | \hat{j}_\lambda | \bar{a}' \rangle = (u_v u_{v'} - u_v u_{v'}) \langle v | \hat{j}_\lambda | v' \rangle,$$

находим из (7.8) обычное выражение

$$\mathcal{F} = \sum_{v v'} \frac{(u_v u_{v'} - u_v u_{v'})^2}{E_v + E_{v'}} |\langle v | \hat{j}_\lambda | v' \rangle|^2 + \mathcal{F}', \quad (7.9)$$

где \mathcal{F}' - член, содержащий в (7.8) \hat{s}_λ и определяющий "интерференцию" вращения и самосогласованного поля^{x)}. Исчезновение в (7.9) членов с $\lambda \neq \lambda'$ обеспечивается правилами отбора при правильно выбранных внутренних осях.

Поправки следующего приближения по параметру адиабатичности находятся путем последовательного разложения r , s , h по возрастающим степеням ($I_{\lambda'} - j_\lambda$) и приравнивания в каждом порядке членов уравнения (7.4), имеющих одинаковую зависимость от I_λ . (Реальным параметром разложения служит отношение вращательного расщепления к средней одночастичной энергии).

x) Количественно этот член мал. Для его вычисления требуется явно решить "интегральное" уравнение (7.7).

8. Задача о вращении. Асимптотическое приближение

Для рассмотрения высоких вращательных возбуждений адиабатическое приближение становится неприменимым. Большой интерес поэтому представляют приближения, справедливые при больших моментах.

После исключения угловых переменных D - преобразованием уравнение (4.12)

$$[h, r] + [s, r] = 0 \quad (8.1)$$

имеет формально одночастичный вид, т.к. коллективный импульс \vec{I} играет лишь роль параметра (внешнего поля). Принципиальная трудность вращательной задачи (в отличие от двух других, разобранных выше) состоит в некоммутативности коллективных параметров I_A . Но при больших значениях момента некоммутативность относительно мала (каждый коммутатор компонент момента убирает одну степень I). Можно использовать эту малость и производить распутывание членов уравнения (8.1), учитывая лишь минимально необходимое (в каждом приближении) число коммутаторов.

Будем считать (ср. (7.2)), что s и r в (8.1) являются, как и $h = H(\vec{I} - \vec{j})$, функциями величины $\vec{M} = \vec{I} - \vec{j}$. (Компоненты \vec{M} имеют те же правила коммутации (4.8), что и \vec{I}). В первом приближении в члене $[s, r]$ можно полностью пренебречь некоммутативностью компонент M_i и считать \vec{M} классической величиной. В члене $[h, r]$ следует при этом учесть один коммутатор (первый исчезающий член):

$$[H(\vec{M}), r] = \frac{\partial H}{\partial M_i} [M_i, r] \left(1 + O\left(\frac{1}{M}\right)\right). \quad (8.2)$$

При вычислении $[M_i, r]$ следует прокоммутировать не только компоненты \vec{M} , но и момент j_i (входящий в M_i) с одночастичными операторами в r . В результате

$$[M_i, r] \approx [M_i, M_k] \frac{\partial r}{\partial M_k} - [j_i, r(M_c)] \quad , \quad (8.3)$$

где индекс у M_c означает, что эту величину следует рассматривать как постоянную. Из (8.2) и (8.3) получаем

$$[H(\vec{M}), r] \approx -i \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{M}} \times \frac{\partial r}{\partial \vec{M}} \right) \cdot \vec{M} - \left[\frac{\partial H}{\partial \vec{M}} \cdot \vec{j}, r(\vec{M}_c) \right]. \quad (8.4)$$

Введем обозначение для "угловой скорости"

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{M}} \equiv \vec{\Omega} = \vec{\Omega}(\vec{M}), \quad (8.5)$$

тогда уравнение (8.1) преобразуется к виду

$$-i \left(\vec{\Omega} \times \vec{M} \right) \frac{\partial r}{\partial \vec{M}} = [s - \vec{\Omega} \cdot \vec{j}, r], \quad (8.6)$$

где всюду момент \vec{M} следует уже считать классической величиной.

Если функция $r(\vec{M}) = r(\vec{I} - \vec{j})$ найдена, то матрицу плотности R получаем D -преобразованием:

$$R = D^{-1} r(\vec{I} - \vec{j}) D = D^{-1} r(\vec{I}_c) D \quad (8.7)$$

(D преобразуют, во-первых, аргумент $\vec{I} - \vec{j}$ в \vec{I} , а, во-вторых, действуют на одночастичные переменные. Индекс у \vec{I}_c означает, что D эту величину не затрагивают).

Рассмотрим теперь условие согласования для момента J_μ . Используя (8.7), находим

$$\begin{aligned} J_\mu &= -\frac{i}{2} \text{Tr}(j_\mu R) = -\frac{i}{2} \text{Tr}(j_\mu D^{-1} r(\vec{I}_c) D) \\ &= -\frac{i}{2} \text{Tr}(D j_\mu D^{-1} r(\vec{I})) \end{aligned}$$

(после циклического переноса D знак у \vec{I}_c можно снять). Учитывая теперь (7.1) и (4.7), находим

$$J_\lambda = -\frac{i}{2} \text{Tr}(j_\lambda r(\vec{I})). \quad (8.8)$$

Итак, в рассмотренном приближении задача свелась к уравнению (8.6), в которое входит в качестве параметра векторная функция

$\vec{\Omega}(\vec{M})$ (не оператор!). Для определения этой функции (а в силу (8.5) также и $H(\vec{M})$) служит уравнение (8.8).

Заметим, что левая часть уравнения (8.6) исчезает при аксиальной симметрии (когда $\vec{\Omega} \propto \vec{M}$). В этом случае (8.6) по форме совпадает с уравнением кренкинг-модели. С другой стороны, левая часть

(8.6) может быть существенной не только при статической γ -деформации, но и вызывать динамическую неаксиальность, растущую вместе с моментом I .

9. З а к л ю ч е н и е

Идея обобщить приближение Хартри-Фока и одновременно рассмотреть всю вращательную полосу использовалась Керманом и Клейном⁽⁸⁾. Они рассматривали уравнения движения для матричных элементов от Ферми-операторов

$$\Psi_i (\nu JM) \equiv \langle i | \alpha_\nu | JM \rangle; \quad \Phi_i (\nu JM) \equiv \langle JM | \alpha_\nu | i \rangle .$$

Эти величины рассматривались как волновые функции двух (с неизбежностью различных) гамильтонианов в расширенном пространстве $|\nu JM\rangle$. Два неортогональных набора функций Ψ_i и Φ_i перепутывались перестановочными соотношениями, которые использовались в⁽⁸⁾ для нормировки Ψ_i и Φ_i . К сожалению, вся схема оказалась слишком сложной, чтобы быть использованной вне рамок простейших приближений (адиабатического или RPA).

Относительная простота нашего метода^{x)} связана с использованием условия нормировки $R^2 - R = 0$, которое позволяет замкнуть уравнения для матрицы плотности R . Конечно, условие $R^2 = R$ есть приближение. Но сами уравнения движения в ограниченном пространстве уже приближенны. Эти два приближения, во-первых, совместны (т.к. из уравнения $[S+H, R] = 0$ следует и $[S+H, R^2 - R] = 0$), а, во-вторых, имеют ясную физическую интерпретацию (о чем говорилось выше).

Следует подчеркнуть, что расширение пространства матрицы плотности, несмотря на внешнюю аналогию, не следует смешивать с многочисленными приемами введения "лишних переменных" с их проблемами

x) Если следовать популярной в последнее время тенденции, то этот метод следовало бы назвать DEMUS (Density Matrix in Unified Space).

"дополнительных условий". В нашем случае соотношения между одночастичными и коллективными переменными однозначно определяются правилами отбора.

ДРА является простым частным случаем рассмотренного метода, поэтому основное внимание здесь было обращено на полосы вращательного типа, представляющие основную трудность для последовательного микроскопического описания.

В первом адиабатическом приближении результаты не отличаются от кренкинг-модельных. Однако в высших порядках появляются существенные отличия^х). Это связано в основном не с различием исходных уравнений, а с отсутствием четкой связи между понятиями кренкинг-модели и физическими величинами.

Относительная простота предлагаемого метода позволяет рассмотреть связь вращений с другими возбуждениями. В этом случае уровни коллективной полосы имеют дополнительные (к вращательным) квантовые числа. Легко убедиться, что большинство изложенных выше общих результатов остается справедливым и в этом случае, но после D -преобразования эффективный гамильтониан $s + \hbar$, кроме одночастичных переменных, будет содержать и дополнительные квантовые числа. (Например, число фононов или орбитали нечетного нуклона).

Идеи, изложенные в этих лекциях, в течение длительного времени созревали при постоянной совместной работе автора с В.Зелевинским. Полученные к настоящему времени результаты убеждают нас в перспективности метода и позволяют надеяться на успех при решении ряда конкретных задач.

х) Поправки к моментам инерции и коэффициентам B отличаются от вычисленных в кренкинг-модели на 30-40 % и значительно ближе к экспериментальным значениям⁽⁹⁾.

Л и т е р а т у р а

1. С.Т.Беляев . Phys.Lett., 28B, 365 (1969).
2. С.Т.Беляев, Б.А.Румянцев. Phys.Lett. 30B, 444 (1969).
3. R.A.Brogia, B.Sørensen. Nucl.Phys. A110, 241 (1968).
4. G.G.Dussel, E.Maqueda, R.P.J.Perazzo. Nucl.Phys. A153, 469 (1970).
5. R.E.Peierls, I.Yoccoz. Proc.Phys.Soc. A70, 381 (1957).
6. R.E.Peierls, D.I.Thouless. Nucl.Phys. 38, 154 (1962).
7. С.Т.Беляев. ЖЭТФ, 40, 672 (1960);
Nucl.Phys.,
8. A.Kerman, A.Klein. Phys.Lett. I, 185 (1962);
Phys.Rev., I32, 1326 (1963).
9. В.Зелевинский, М.Штокман. Программа и тезисы XXII Совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Изд -во "Наука, М.-Л., 1972 г.

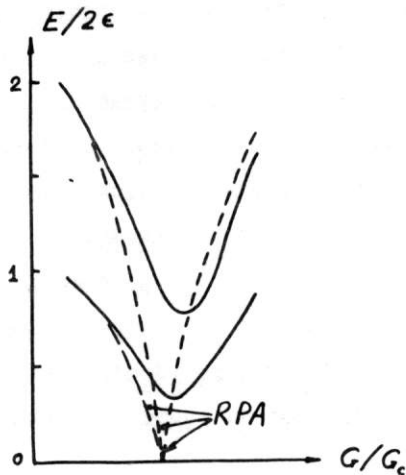


Рис.1. Энергии двух первых возбужденных состояний в двух-уровневой модели спаривания⁽²⁾ в зависимости от константы взаимодействия. Сплошные линии - точный расчет, пунктирные - RPA на "сферическом" (слева) и "деформированном" (справа) базисе.

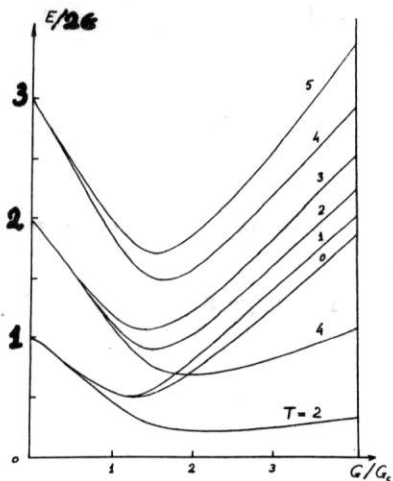


Рис.2. Спектр возбуждений в двухуровневой модели изотопически инвариантного ($T=1$) спаривания⁽³⁾ в зависимости от константы взаимодействия (точный расчет).

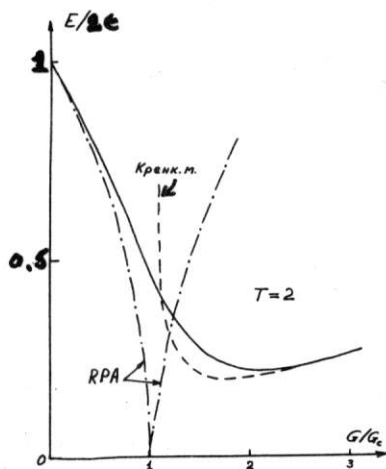


Рис.3. Нижний из уровней рис.2 ($T=2$). Сравнение точного расчета с результатами РРА (на "сферическом" и "деформированном" базисе) и кренкинг-модели (из⁽³⁾).