

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZETÉNEK  
KÖZLEMÉNYEI

---

10. KÖTET

1. SZÁM

---

Györgyi Géza

PÁRKÖLCSÖNHATÁS AZ ATOMMAGBAN

Szemináriumi jegyzet

Készült

Györgyi Géza – Marx György – Németh Judit  
szemináriumi előadásai alapján

Menyhárd Nóra  
közreműködésével.

M E L L É K L E T

1962

---

BUDAPEST

7.323





MTA KFKI Könyvtár



27.323

Párkölcönhatás az atommagban

Szemináriumi jegyzet

Györgyi Géza

Marx György

Németh Judit

szemináriumi előadásai alapján

Menyhárd Nóra

közreműködésével

írta

GYÖRGYI GÉZA

OLVASÓTERMI PELDANY

1988

1977

2015

KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET ..... SZ. KÖNYVTÁRA

leltárba véve 27.323 sz. alatt.

Budapest, 1964 év dec hó 28. én

Pappue



### Irodalom

A jegyzet kidolgozása során főképpen a következő két munkára támaszkodtunk:  
B.R.Mottelson, Notes from Cours de l'École d'Été de Physique Théorique des  
Houches, 283, 1958

A.K.Kerman, R.D.Lawson, M.H.Macfarlane, Phys.Rev. 124, 162, /1961/.

A tárgykörben való tájékozódás és továbbtanulás megkönnyítése érdekében közöljük az alábbi - korántsem teljes - irodalomjegyzéket:

Bardeen, Cooper, Schrieffer, Phys.Rev. 108, 1175 /1957/

N.Bogoljubov, JETP 34, 58; 73 /1958/

Nuovo Cim. 7, 794 /1958/

J.G.Valatin, Nuovo Cim. 7, 843, /1958/

A.Bohr, B.R.Mottelson, D.Pines, Phys.Rev. 110, 936 /1958/

A.Bohr, Proc. of Intern. Conf.Nucl.Phys. Paris 1958, 203

S.T.Beliaev, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 31, no 11 /1959/

L.S.Kisslinger, R.A.Sorensen, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.

32, no 9 /1960/

V.G.Soloviev, Doktori disszertáció, Dubna, 1961.

V.G.Soloviev, Nucl.Phys. 18, 161, /1960/

A.K.Kerman, Ann.Phys. 12, 300 /1961/

M.Baranger, Phys.Rev. 120, 957 /1960/

B.F.Bayman, Nucl.Phys. 15, 33, /1960/

G.Racah, Phys.Rev. 62, 438 /1942/ 63, 367 /1943/

Table

Faint, illegible text, likely a list or index of names and titles, possibly related to a historical or scientific study.



## B e v e z e t é s

Jól ismeretes, hogy a nukleonok kölcsönhatása az atommagban egy közös potenciáalteret alakít ki. A független részecske héjmodellben feltételezik, hogy ez a potenciáltér sztatikus és hogy a nukleonok nulladik közeli-tésben egymástól függetlenül végzik benne mozgásukat. A közös potenciáltér természetesen nem írja le kimerítően, maradék nélkül a nukleonok kölcsönhatását, inkább a kölcsönhatás átlagos leírását adja. Ahhoz, hogy pl. a mag-spektrumok értelmezését megkísérelhessük, a független részecske héjmodellben fellépő elfajulások feloldására be kell vezetnünk az ún. maradék-kölcsönhatást. Ez a nukleonok kölcsönhatásának az a része, amely nem foglaltatik benne a közös potenciálban. A maradék-kölcsönhatás korrelációt eredményez: figyelembe vételével megszűnik a nukleonok mozgásának független jellege. A maradék-kölcsönhatást régebbi munkákban általában valamilyen egyszerű alakú /pl. Gauss vagy Yukawa/ kétnukleon-potenciál bevezetésével vették figyelembe, s a számításokat perturbációs módszerek felhasználásával végezték el.

Amikor 1957-ben Bardeen, Cooper és Schrieffer amerikai fizikusoknak a szupravezetés fizikai elmélete kidolgozására törekedve sikerült megadniok egy közelítő módszert, mely nem perturbációs sorfejtésen alapult és amely lehetővé tette az általuk feltételezett párkölcsönhatási operátor spektrumának meghatározását, ez felkeltette az elméleti magfizikusok érdeklődését is.

A feltételezett párkölcsönhatási operátor a legerősebb kölcsönhatást zérus eredő impulzusmomentumu részecskepárok között létesíti, a kötési energia részecskeszámfüggésében páros-páratlan-effektust eredményez, páros részecskeszám esetén pedig hézag felleptére vezet az energiaspektrumban, az első gerjesztett állapot gerjesztési energiáját jóval a független részecskék esetében érvényes érték fölé emelve. A párkölcsönhatás ezen vonásai nagyfokú hasonlóságot mutatnak a rövid hatótávolságu magerők tulajdonságaival. Miután a párkölcsönhatás Bardeen, Cooper és Schrieffer nyomán perturbációs sorfejtés alkalmazása nélkül tárgyalható, érthető, hogy számos szerző próbálta meg a nukleonok maradék-kölcsönhatását a Bardeen és társai által használt párkölcsönhatás operátora segítségével figyelembe venni. Meg kell említenünk Beljajev dolgozatát a magok tehetetlenségi nyomatékáról, továbbá Szolovjev,

Kisslinger és Sorensen és mások dolgozatait az atommagok energiaszintjeiről, matrix-elemeiről, stb. Említésre érdemes ezen kívül Kerman és társainak munkája, akik tulmenve a Bardeen-Cooper-Schrieffer-féle közelítő módszer pontosságán, egzaktul diagonalizálták a párkölcsönhatás operátorát különböző magokra. E törekvések igen szép eredményekre vezettek.

Ennek megfelelően indokoltnak látszott a párkölcsönhatással foglalkozó dolgozatok közös alapjainak, a használt formalizmusnak és közelítő módszereknek, az alapvető fogalmaknak és egyes tanulságos, illusztratív alkalmazásoknak szemináriumszerű feldolgozása. Ennek a szemináriumnak az anyagát találja meg a következőkben az olvasó.



### 1. Formalizmus. Párállapotok

Legyen  $|0\rangle$  a zérus részecskeszámhoz tartozó állapot, a vákuum. Az egyrészecske-állapotokat jellemezzük a  $j$  impulzusmomentum és az  $m$  momentumvetület értékeivel; a többi kvantumszámot  $/n, l /$  a rövideg kedvéért nem írjuk ki. Az egyrészecske-állapotok jele ennek megfelelően  $|jm\rangle$ . Az egyrészecske-állapotok a vákuumból az  $a_{jm}^+$  részecske-keltő operátorok segítségével állíthatók elő:

$$|jm\rangle = a_{jm}^+ |0\rangle \quad /1/$$

Az  $a_{jm}^+$  keltő operátorok az  $a_{jm}$  eltüntető operátorokkal együtt az

$$\left. \begin{aligned} \{ a_{jm}, a_{j'm'}^+ \} &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} , \\ \{ a_{jm}^+, a_{j'm'}^+ \} &= \{ a_{jm}, a_{j'm'} \} = 0 \end{aligned} \right\} \quad /2/$$

Jordan-Wigner-fele felcserélési törvényeknek tesznek eleget. Ezek biztosítják a több részecske-állapotok Pauli-elv megkövetelte antiszimetriáját. A részecske-operátorok, ill. az egyrészecske-állapotok fázisai felől oly módon rendelkezünk, hogy

$$|j-m\rangle = \hat{T} |jm\rangle \quad /3/$$

legyen, ahol  $\hat{T}$  az időtükrözés operátora.<sup>x</sup> - A kétrészecske-állapotok jellemezhetők pl. az egyes részecskék  $j_1, j_2$  impulzusmomentumaival és az  $m_1, m_2$  momentumvetületekkel. Az ily módon definiált  $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$  kétrészecske-állapot a vákuumból a megfelelő két-részecskekeltő operátor segítségével állítható elő:

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = a_{j_1 m_1}^+ a_{j_2 m_2}^+ |0\rangle \quad /4/$$

---

<sup>x/</sup> E választással, Mottelisont követve, eltértünk pl. Condon-Shortley és Edmonds gyakorlatától, akik a  $|jm\rangle$  állapotok relativ fázisait  $/5/$  helyett a

$$|j-m\rangle = (-1)^{j-m} \hat{T} |jm\rangle \quad /I/$$

követelmény segítségével rögzítik.

A  $j_1 = j_2 = j$ ,  $m_1 = -m_2 = m$  esetben adódó

$$|j m j - m\rangle = a_{jm}^+ a_{j-m}^+ |0\rangle \quad /5/$$

állapotokat röviden párállapotoknak nevezzük. A kétrészecske-állapotokat  $j_1 m_1; j_2 m_2$  helyett gyakran /kölsönhatás jelenléte esetén/ célszerűbben a  $j_1 j_2 JM$  kvantumszámokkal jellemezhetjük, ahol  $J$  a két részecske eredő impulzusmomentuma,  $M$  pedig az eredő momentum vetülete. A /3/ megállapodás előnyös következménye, hogy a  $j_1 = j_2 = j$ ,  $J = M = 0$  kvantumszámokkal jellemzett  $|j^2, J = M = 0\rangle$  állapot az  $\Omega = (2j+1) |2 = j + \frac{1}{2}$  számú  $|j m j - m\rangle$  párállapotból csupa pozitív együtthatóju lineáris kombináció alakjában nyerhető:

$$\begin{aligned} |j^2, J = M = 0\rangle &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m>0} |j m j - m\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m>0} a_{jm}^+ a_{j-m}^+ |0\rangle \end{aligned} \quad /6/$$

Az /5/ párállapotok /6/ lineáris kombinációját, mely a  $J$  eredő impulzusmomentum zérus értékéhez tartozik, röviden zérus-párállapotnak fogjuk nevezni.

Tekintettel arra, hogy a zérus eredő impulzusmomentumu állapotban kitüntetett térirány nincs, érthető, hogy a /6/ szuperpozícióban az  $m$  különböző értékeihez tartozó párállapotok azonos amplitudókkal /azonos abszolútértékű együtthatókkal/ szerepelnek.

Ami a fázisokat illeti, röviden néhány megjegyzést teszünk a fenti tárgyalás és a szokásos koordinátaábrázolásbeli leírás, ill. a fázisokra vonatkozó /I/ és /3/ megállapodás kapcsolatáról.

Két részecske zérus eredő momentumu állapotfüggvényének ismert alakja /a Condon-Shortley-féle fázisokkal/:

$$\Psi_{j^2, 00}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_m (-1)^{j-m} \psi_{jm}(1) \psi_{j-m}(2).$$

Átalakítással kapjuk, figyelembevételével, hogy  $2m$  páratlan szám:

$$\Psi_{j^2, 00}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{j+\frac{1}{2}}} \sum_{m>0} (-1)^{j-m} \Psi_{jmj-m}(1, 2) \quad /7/$$



ahol

$$\Psi_{jmj-m}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \Psi_{jm}(1) \Psi_{j-m}(2) - \Psi_{j-m}(1) \Psi_{jm}(2) \right]$$

a  $jm$   $j-m$  kvantumszámokkal jellemzett állapotot /párállapotot/ leíró antiszimmetrikus függvény. Koordináta-ábrázolásról részecskeszám-ábrázolásra /második kvantálásra/ áttérve a

$$\Psi_{jmj-m} \sim a_{jm}^{\dagger} a_{j-m} |0\rangle \quad /8/$$

megfeleltetést kell alkalmaznunk. Ez a képlet a Condon-Shortley-féle fázisokkal értendő. Mint /1/, /3/ és /1/ mutatja, a Mottelson-féle fázisokra való áttérést  $a_{j-m}^{\dagger} \sim (-1)^{j-m} a_{j-m}^{\dagger}$  fejezi ki. A Mottelson-féle fázisok használata esetén /8/ helyett eszerint

$$\Psi_{jmj-m} \sim (-1)^{j-m} a_{jm}^{\dagger} a_{j-m} |0\rangle$$

irandó. Ezt a megfeleltetést /7/-ben végrehajtva, megkapjuk a /6/ alakú állapotot.

## 2. A Hamilton-operátor

Az elektrongáz szupravezetésének értelmezése céljából Bardeen, Cooper és Schrieffer /BCS/ olyan Hamilton-operátort feltételezett, melynek kölcsönhatási tagja időtükrözött állapotpárokat elfoglaló részecskék szóródását eredményezi, ugyancsak időtükrözött állapotpárokba. Ha az egyrészecske-állapotok jellemzésére /más, ki nem írt kvantumszámok mellett/ a  $j$  impulzuszórántumot és az  $m$  momentum-vetületet használjuk, a BCS Hamilton-operátor a következő alakban írható fel:

$$H = \sum_{jm} E_j a_{jm}^\dagger a_{jm} - \sum_{j,m>0} \sum_{j',m'>0} G_{jm,j'm'} a_{jm}^\dagger a_{j-m}^\dagger a_{j'-m'} a_{j'm'} \quad /9/$$

Itt  $E_j$  magában foglalja a kinetikus energiát, továbbá - ha ilyen van - a külső erőtérbeli potenciális energiát. Igen figyelemreméltó, hogy Bardeen, Cooper és Schrieffer erős kölcsönhatás esetére, perturbációs sorfejtés alkalmazása nélkül meg tudta határozni bizonyos közelítésben a /9/ Hamilton-operátor spektrumát. A magfizika szempontjából figyelemreméltó továbbá, amint arra Bohr, Mottelson és Pines rámutatott, hogy a BCS Hamilton-operátor által leírt párkölcsönhatás eltérést eredményez a páros és páratlan részecskeszámhoz tartozó kötési energia között, továbbá páros részecskeszám esetén az energiaspektrumban /az alapállapot és a gerjesztett állapotok között/ hézag fellépését eredményezi. Mindezen körülmények azt sugallják, hogy a /9/ Hamilton-operátor feltételezésével tullephetünk a /független-részecske-modellben/ szokásos közelítésen, melyben a nukleonoknak a kölcsönhatás okozta korrelációját nem veszik tekintetbe. A /9/ alatt szereplő kölcsönhatás az időtükrözött állapotpárokat /vagyis az /5/ párállapotokat/ elfoglaló nukleonok között létesít korrelációt. Az ilyen párkorreláció rövid hatótávolságú erőkre jellemző, s így a BCS Hamilton-operátor - mint a következőkben látni fogjuk, - egyszerű módszert ad a kezünkbe, hogy a nukleonok között ható erők rövid távolságra ható részével összefüggő jelenségeket tanulmányozzuk.



### 3. Egzakt megoldás a $j^n$ konfiguráció esetére.

#### A szenioritás

Vegyük szemügyre a következő egyszerű esetet. Feltesszük, hogy a /9/ alatti kölcsönhatási operátornak a különböző  $j$  értékekkel jellemzett szintek között átmeneteket létesítő matrixelemei elhanyagolhatók, s elegendő, ha csak azokat a matrixelemeket vesszük tekintetbe, melyek ugyanazon szinthez tartozó két párállapotot kötnek össze. Ebben az esetben fel lehet tenni, hogy egy adott  $j$  impulzusmomentummal jellemzett szinten meghatározott  $n$  számú részecske foglal helyet. Ilyenkor beszélünk  $j^n$  konfigurációról. A  $j^n$  konfiguráció állapotai által kifeszített alterében a /9/ Hamilton-operátor spektruma elemi módszerekkel egzaktul meghatározható. Célszerű ezt az egyszerű esetet felhasználni arra, hogy megismerkedjünk a /9/ alatti párkölcsönhatás egyes tulajdonságaival. Ellenőrizhetjük itt továbbá azon közelítő módszerek pontosságát, amelyek a bonyolultabb esetekben - egzakt megoldás hiányában - egyedül állnak rendelkezésre a spektrum meghatározásához, fizikai következtetéseink levonásához.

Ha a /9/ Hamilton-operátort a  $j^n$  konfiguráció állapotainak alterében írjuk fel, a  $j$ -re,  $j'$ -re való összegezés elmarad, s elhagyható a /rögzített/  $j=j'$  index is; a  $G$  matrixelemről feltesszük, hogy állandó:

$$H = E \sum_m a_m^\dagger a_m - G \sum_{m>0} \sum_{m'>0} a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_{-m'} a_{m'}$$

Az első tag egyszerűen  $E x$  /részecskeszám/ alakú, figyelmünket tehát a második tagra, a párkölcsönhatás

$$H_k = -G \sum_{m>0} \sum_{m'>0} a_m^\dagger a_{-m}^\dagger a_{-m'} a_{m'} \quad /10/$$

operátorára összpontosítjuk.

Két részecske rendszere, a  $j^2$  konfiguráció alterét a /4/ két részecske-állapotok feszítik ki. A  $H_k$  kölcsönhatás ezen alterhez tartozó matrixában azonban csak az /5/ párállapotokat összekötő matrixelemek különböznek zérustól. A  $H_k$  operátort ezen  $\Omega = j + 1/2$  számú párállapot alterében a következő  $\Omega$  számú sort és oszlopot tartalmazó matrix ábrázolja:

$$(H_k) = -G \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad /11/$$

E matrix sajátvektorainak komponensei a  $H_k$  operátor  $| \rangle = \sum_{m>0} \omega_m a_m^+ a_{-m}^+ | 0 \rangle$  sajátállapotait meghatározó  $\omega_m$  együtthatókat szolgáltatják. Tekintettel a /11/ matrix egyszerű alakjára, a sajátvektorok intuitive közvetlenül megadhatók. Az

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \quad /12/$$

vektor nyilván sajátvektora /11/-nek az  $E_0 = -G\Omega$  sajátérték mellett. Miután a /11/ hermitikus matrix többi

$$\begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \\ \dots \\ \omega_j \end{pmatrix} \quad /13/$$

sajátvektora /12/-re ortogonálisnak választható, /12/ és /13/ skaláris szorzata el kell, hogy tűnjék:

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}} (\omega_1 + \omega_2 + \dots + \omega_j) = 0$$

vagyis: a /13/ sajátvektorok komponenseinek összege zérus. Mint a /11/ matrix alakjából látható, ez azt jelenti, hogy ezen sajátvektorok mindegyikéhez zérus sajátérték tartozik.

Erről /11/ átlósösszegének kiszámítása útján is meg lehet győződni. Az átlósösszeg  $-G\Omega$ ; minthogy az átlósösszeg invariáns, ezen értéknek meg kell egyeznie a sajátértékek összegével. A /12/ sajátvektorhoz tartozó  $E_0 = -G\Omega$

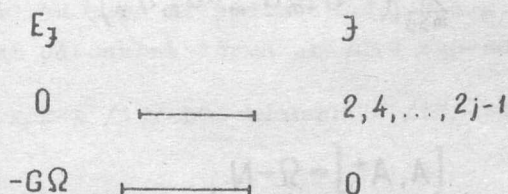


sajátérték egymagában "kimeríti" az átlósösszeget. A többi sajátérték összege eszerint zérus, amiből a /11/ matrix szemidefinit volta folytán következik, hogy ezek a sajátértékek maguk is eltűnnek.

A /13/ sajátvektor a  $j^2$  konfiguráció /6/ alatt felírt  $|j^2, J=M=0\rangle$  állapotának a párállapotok szerinti kifejtésében szereplő együtthatókat egyesíti magában. A /12/-re ortogonális, zérus sajátértékhez tartozó sajátvektorok esetében  $M$  szintén zérus, minthogy ezek is mind párállapotok lineáris kombinációit ábrázolják;  $J$  azonban zérustól különböző, tekintettel arra, hogy a  $j^2$  konfigurációnak csupán egyetlen  $J=0$  eredő momentumu állapota van. A /12/-re ortogonális,  $\Omega-1=j-1/2$  lineárisan független sajátvektor oly módon választható, hogy azokat rendre a  $j^2$  konfiguráció megengedett, zérustól különböző  $J=2,4,\dots,2j-1$  impulzusmomentumértékei jellemezzék.

Megjegyzésre érdemes, hogy a  $J \neq 0, M=0$  állapotokhoz tartozó sajátértékek zérusvolta nyomban következik egy, a forgásinvariancián alapuló egyszerű megfontolásból. A /10/ alatti  $H_k$  operátor az  $M=m_1+m_2 \neq 0$ -hoz tartozó /4/ két-részecske-állapotokat nyilvánvalóan zérusba viszi át, más szóval: ezek az állapotok  $H_k$  zérus sajátértékéhez tartoznak.  $H_k$  forgásinvarianciája folytán a zérustól különböző  $J$  impulzusmomentumu s a vetület  $M \neq 0$  és  $M=0$  értékeihez tartozó állapotoknak azonos /s a fentiek szerint: zérus/ sajátértékhez kell tartozniuk.

A párkölcsönhatás  $H_k$  operátorának spektruma a  $j^2$  konfiguráció alterében eszerint a következő



1. ábra

Térjünk át ezek után a  $j^n$  konfiguráció általános vizsgálatára. A  $j^2$  konfiguráció esetében láttuk, hogy a legerősebb kötés zérus eredő impulzusmomentumu nukleonpár esetében létesül. A következőkben célszerűnek fog bizonyulni az

$$A^{\dagger} = \sum_{m>0} a_m^{\dagger} a_m^{\dagger} \quad /14/$$

operátor bevezetése, mely a vákuumra alkalmazva, állandó szorzótól eltekintve, éppen a /6/ zérus-párállapotot hozza létre. Az  $A^+$  operátor és annak adjungáltja segítségével a /10/ kölcsönhatási operátornak egyszerű alak adható:

$$H_k = -GA^+A \quad /15/$$

A kölcsönhatási operátor, valamint az 1. ábrán látható spektrum szerkezete között azonnal látható a kapcsolat:  $H_k$  a zérus párállapot keltő és eltüntető operátorának szorzatával arányos, ennek folyománya, hogy a két-részecske-állapotok közül egyedül a zérus-párállapothoz tartozik zérustól különböző kölcsönhatási energia.

Szükségünk lesz a zérus-párállapot keltő és eltüntető operátorának felcserélési törvényére. A /2/ összefüggések, továbbá a kommutátorok átalakítására vonatkozó ismert  $[\alpha, \beta\gamma] = [\alpha, \beta]\gamma - \beta[\gamma, \alpha] = \{\alpha, \beta\}\gamma - \beta\{\gamma, \alpha\}$  szabályok felhasználásával kapjuk:

$$\begin{aligned} [A, A^+] &= \sum_{m>0} \sum_{m'>0} [a_{-m} a_m, a_{m'}^+ a_{-m'}^+] = \\ &= \sum_{m>0} \sum_{m'>0} \left( [a_{-m} a_m, a_{m'}^+] a_{-m'}^+ - a_{m'}^+ [a_{-m} a_m, a_{-m'}^+] \right) = \\ &= \sum_{m>0} \sum_{m'>0} \left( a_{-m} [a_m, a_{m'}^+] a_{-m'}^+ - a_{m'}^+ \{a_{-m}, a_{-m'}\} a_m \right) = \\ &= \sum_{m>0} (1 - a_{-m}^+ a_{-m} - a_m^+ a_m). \end{aligned}$$

Eszerint

$$[A, A^+] = \Omega - N, \quad /16/$$

ahol

$$N = \sum_{m>0} (a_m^+ a_m + a_{-m}^+ a_{-m}) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m^+ a_m \quad /17/$$

a részecskeszám operátora,  $\sum_{m>0} 1 = \Omega$  pedig a párállapotok száma. A /16/ eredmény birtokában a /15/ kölcsönhatási operátor és a zérus-párállapot /14/ keltő operátorának felcserélési törvénye könnyen megállapítható:



$$\begin{aligned} [H_k, A^+] &= -G[A^+A, A^+] = \\ &= -GA^+[A, A^+] = -GA^+(\Omega - N); \end{aligned}$$

eredményünk tehát

$$[H_k, A^+] = -GA^+(\Omega - N). \quad /18/$$

Ha ezen összefüggés mindkét oldalát alkalmazzuk a vákuumra, melyben az energia s a részecskeszám eltűnik ( $H_k |0\rangle = N|0\rangle = 0$ )

a

$$H_k A^+ |0\rangle = -G\Omega A^+ |0\rangle \quad /19/$$

sajátértékegyenletre jutunk. A korábban már megismert eredményt kaptuk, mely szerint a /6/ zérus-párállapotban a kölcsönhatási operátor sajátértéke

$$E_0^{(2)} = -G\Omega. \quad /20/$$

A vákuumból az  $A^+$  operátor többszöri alkalmazásával a  $j^4, j^6, \dots, j^n$  /n = páros/ konfigurációk azon állapotait kapjuk meg, melyekben a részecskék impulzuszórántumai páronként zérus eredővé kapcsolódnak.

A megfelelő sajátértékeket /19/-ből kiindulva /18/ szukcessziv alkalmazásával kapjuk meg.

Részecskeszám:

④

$$\begin{aligned} H_k A^{+2} |0\rangle &= [H_k, A^+] A^+ |0\rangle + A^+ H_k A^+ |0\rangle = \\ &= -G(\Omega - 2 + \Omega) A^{+2} |0\rangle = \\ &= -G2(\Omega - 1) A^{+2} |0\rangle; \end{aligned}$$

⑥

$$\begin{aligned} H_k A^{+3} |0\rangle &= [H_k, A^+] A^{+2} |0\rangle + A^+ H_k A^{+2} |0\rangle = \\ &= -G(\Omega - 4 + \Omega - 2 + \Omega) A^{+3} |0\rangle = \\ &= -G3(\Omega - 2) A^{+3} |0\rangle; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_k A^{+n/2} |0\rangle &= -G [\Omega - m + 2 + \dots + \Omega - 2 + \Omega] A^{+n/2} |0\rangle = \\ &= -G \frac{n}{2} (\Omega - \frac{n}{2} + 1) A^{+n/2} |0\rangle \end{aligned}$$

$n = \text{páros}$

Az  $n$  számú, páronként zérus eredő impulzusmomentumu részecskét tartalmazó  $A^{+n/2} |0\rangle$  állapothoz tartozó sajátérték eszerint

$$E_0^{(n)} = -G \frac{n}{2} (\Omega - \frac{n}{2} + 1) \quad /21/$$

A  $j^2$  konfiguráció zérus-párállapotának /20/ kölcsönhatási energiájában az  $\Omega$  szorzó fellépte annak következménye, hogy a /10/ kölcsönhatási operátor minden párállapotot az  $\Omega$  számú párállapot mindegyikébe átvihet, s az ezen átmenetekhez tartozó járulékok koherensen adódnak össze. A /21/ képletből látható, hogy míg  $\Omega \gg n/2$ , a kölcsönhatási energiához minden pár közelítőleg ugyanakkora,  $-G\Omega$  nagyságú járulékot szolgáltat. Ha azonban a párok száma nem hanyagolható el az állapotok  $\Omega$  száma mellett, úgy - amint azt a fenti szukcessziv eljárás során láttuk - valamely  $k/2 - 1$  számú párhoz /az  $A^+$  operátor újabb alkalmazásával/ hozzáadva a  $k/2 - 1$  párt, a kölcsönhatási energia nem  $-G\Omega$  -val, hanem csak

$$-G(\Omega - k + 2) \quad /22/$$

-vel lesz nagyobb. Ennek a Pauli-féle kizárási elv az oka: a  $k/2 - 1$  részecskepárhoz rendelt párállapotokat  $H_k$  csak a többi  $k/2 - 1$  pár által szabadon hagyott  $\Omega - k/2 + 1$  párállapotba viheti át, ami

$$-G(\Omega - k/2 + 1) \quad /22/a/$$

járlékot ad az energiához. Ezen kívül az új pár megjelenésével betöltésre kerül egy olyan párállapot, amelybe az új pár megjelenése előtt a többi



$k/2-1$  párt beleszórhatta a kölcsönhatás. Ezen átmenetek kizárása a  $k/2-1$  régi pár energiáját a

$$-[-G(k/2-1)] \quad /22/b/$$

értékkel változtatja meg. Látható, hogy /22/a/ és /22/b/ összege /22/-t adja eredményül.

A /21/ képlet a kölcsönhatási energia sajátértékét a zérus-párokból felépített  $A^{+n}|0\rangle$  állapot esetére adja meg. A következőkben meg fogjuk szerkeszteni  $H_k$  többi sajátállapotát is és meghatározzuk a megfelelő sajátértékeket.

A  $j^2$  konfiguráció esetében, amelyet korábban részletesen tárgyaltunk, azt találtuk /1. ábra/, hogy a /6/ alatti zérus-párállapot kivételével az összes többi /számszerint  $\Omega-1$  / állapot elfajult, a zérus sajátérték mellett. Jelöljük ezen állapotokat  $|2\lambda\rangle$ -val. (Itt a  $\lambda$  kvantumszám az  $\Omega-1$  számú elfajult állapot megkülönböztetésére szolgál; jelentheti pl.  $\lambda$  a két részecske eredő impulzusmomentumát:  $\lambda = J = 2, 4, \dots, 2j-1$ .)

A  $|2\lambda\rangle$  állapotokra teljesülnek a

$$H_k |2\lambda\rangle = 0 \quad /23/$$

sajátértékegyenletek. Ezen állapotokból kiindulva az  $A^+$  operátor ismételt alkalmazásával  $4-, 6-, \dots, n$  -részecske-állapotok kaphatók:

$$A^+ |2\lambda\rangle, A^{+2} |2\lambda\rangle, A^{+3} |2\lambda\rangle, \dots, A^{+n/2-1} |2\lambda\rangle. \quad /24/$$

A megfelelő sajátértékekre /18/ és /22/ felhasználásával a következő sorozat adódik:

$$-G(\Omega-2), -G2(\Omega-3), -G3(\Omega-4), \dots, -G\frac{(m-2)}{2}\left(\Omega-\frac{m+2}{2}+1\right) /25/$$

A  $j^4$  konfiguráció alterében az eddigiek során két sajátértéket ismertünk meg. Ezek: a /21/-ből  $n=4$  esetén adódó

$$E_0^{(4)} = -G2(\Omega-1), \quad /26/$$

mely a zérus-párokából felépített  $A^{+2} |0\rangle$  -hoz tartozik, valamint a /25/ sorozat első tagja:

$$E_2^{(4)} = -G(\Omega - 2) \quad /27/$$

Ez utóbbi  $\Omega - 1$ -szeresen elfajult, minthogy a megfelelő  $A^+ |2\lambda\rangle$  állapot  $\lambda$  indexe  $\Omega - 1$  különböző értéket vehet fel. Most megmutatjuk, hogy a /26/ alatti egyszeres és a /27/ alatti  $\Omega - 1$  -szeres sajátértéken kívül a  $j^4$  konfiguráció összes többi állapota elfajult, a zérus sajátérték mellett. Ha a  $\binom{\Omega}{2}$  számú  $a_{m_1}^+, a_{-m_1}^+, a_{m_2}^+, a_{-m_2}^+ |0\rangle$  kétpár-állapot kifeszítette altérben képezzük a /10/ kölcsönhatási operátor matrixát, azt találjuk, hogy mindegyik átlós matrixelem értéke  $-2G$ . Az átlósösszeg eszerint

$$-2G\binom{\Omega}{2} = -G\Omega(\Omega - 1).$$

A /26/ és /27/ sajátértékeket az elfajulás fokával megszorozva és összeadva:

$$-G2(\Omega - 1) + (\Omega - 1)[-G(\Omega - 2)] = -G\Omega(\Omega - 1)$$

láthatóan megkapjuk a teljes átlósösszeget. Ebből pedig /figyelembevétel  $H_k$  szemidefinit voltát/ következik az összes többi sajátérték eltűnése.

Jelöljük a zérus sajátértékhez tartozó négyrészesecske-állapotokat /számszerint  $\frac{\Omega(\Omega - 1)}{2} - \Omega$  állapot/ a  $|4\lambda\rangle$  szimbólummal. Ezekből kiindulva is megszerkeszthetjük  $A^+$  ismételt alkalmazásával az állapotok egy sorozatát, és  $H_k |4\lambda\rangle = 0$ , valamint /18/ felhasználásával meghatározhatjuk a megfelelő sajátértékeket:

$$A^+ |4\lambda\rangle, A^{+2} |4\lambda\rangle, A^{+3} |4\lambda\rangle, \dots, A^{+\frac{n}{2}-2} |4\lambda\rangle; \quad /28/$$

$$-G(\Omega - 4), -G2(\Omega - 5), -G3(\Omega - 6), \dots, -G\frac{(n-4)}{2}(\Omega - \frac{n+4}{2} + 1) /29/$$

Most kimutatjuk, hogy a  $j^6$  konfiguráció /21/, /25/ és /29/ alatt megadott

$$-G3(\Omega - 2), -G2(\Omega - 3), -G(\Omega - 4) \quad /30/$$



sajátértékein kívül az összes többi sajátérték zérus. A /30/ sajátértékek ugyanis rendre megszorozva az elfajulás fokát megadó

$$\left(\frac{\Omega}{0}\right) = 1, \quad \left(\frac{\Omega}{1}\right) - \left(\frac{\Omega}{0}\right) = \Omega - 1, \quad \left(\frac{\Omega}{2}\right) - \left(\frac{\Omega}{1}\right) = \frac{\Omega(\Omega-3)}{2} \quad \text{számokkal,}$$

teljesen kimerítik a  $H_k$  operátornak a  $j^6$  konfiguráció alteréhez tartozó átlósösszegét, mely a  $-3G$  átlós matrixelem, valamint a hárompár-állapotok  $\left(\frac{\Omega}{3}\right)$  számának szorzatával egyenlő:

$$-G3(\Omega-2) + (\Omega-1)[-G2(\Omega-3)] + \frac{\Omega(\Omega-3)}{2} [-G(\Omega-4)] = -G \frac{\Omega(\Omega-1)(\Omega-2)}{2}$$

Az eljárást kézenfekvő módon folytatható. A részecskeszám minden /páros/ értéke mellett azt találjuk, hogy zérustól különböző sajátérték csak az

$$A^{+\frac{n-\lambda}{2}} | \lambda \lambda \rangle \quad (m > \lambda) \quad /31/$$

alakú állapotokhoz tartozik. A sajátérték az  $| \lambda \lambda \rangle$ -ra érvényes  $H_k | \lambda \lambda \rangle = 0$  egyenlet felhasználásával, a /18/ összefüggés ismételt alkalmazásával határozható meg. Az eredmény:

$$E_{\lambda}^{(m)} = -G \frac{(m-\lambda)}{2} (\Omega - \frac{m+\lambda}{2} + 1) \quad (\lambda = 0, 2, 4, \dots, m). \quad /32/$$

Könnyű leolvasni, hogy a /31/ állapotban  $n-\lambda$  számú részecske páronként zérus eredő impulzuszórántumot adva /vagyis zérus-pár alakjában/ helyezkedik el,  $\lambda$  pedig a zérus-párokön kívül elhelyezkedő részecskék száma. Az  $\lambda$  kvantumszámot Racah nyomán szenioritásnak nevezük. A sajátérték /32/ képletét is Racah vezette le elsőízben. A /15/-ben szereplő  $A^+A$  operátor a Racah által bevezetett  $Q$  szenioritás-operátor kétszerese. A sajátérték /32/ képletéből látható, hogy míg  $\Omega \gg m/2, \lambda/2$ , a kölcsönhatási energia jó közelítésben a zérus-párok  $(m-\lambda)/2$  számának, valamint egy zérus-pár  $-G\Omega$  energiájának szorzata. A pontos /32/ képlet második zárójelében  $\Omega$  mellett álló további tagok a Pauli-elv hatását tükrözik. Egy kiszemelt zérus-pár kölcsönhatási energiáját csökkenti a  $-G\Omega$  értékhez képest az a körülmény, hogy a kölcsönhatás csak a többi  $m/2-1$  pár által szabadon hagyott  $\Omega - m/2 + 1$  állapotba létesíthet átmenetet. Ugyanakkor a kiszemelt zérus-pár korlátozza a nem zérus-párban elhelyezkedő részecskék átmeneteit.

Ha ilyen korlátozás nem állna fenn, ezen részecskék kölcsönhatási operátor létesítette különböző átmenetekhez tartozó járulékok ilyen állapotú részecskék esetében megsemmisítik egymást. Esetünkben azonban a Pauli-féle kizárási elv nem engedi meg, hogy ez a zérus kölcsönhatási energiát eredményező, kioltó hatású interferencia teljes mértékben érvényesüljön. Ez a körülmény a /32/ energiaképlet második tagjában /az eddigiekben már megindokolt

$\Omega - n/2 + 1$  kifejezés mellett/ egy további  $-n/2$  tag megjelenését eredményezi.

A korábbiakban az  $n = 2, 4, 6$  speciális esetekben megmutattuk, hogy a /32/ általános képlettel megadott, rögzített  $n$ -hez, valamint  $\lambda = 0, 2, 4, \dots, n$ -hez tartozó energiaértékek a megfelelő elfajulási fokokkal megszorozva és összeadva kiadják a /10/ kölcsönhatási operátor teljes átlósösszegét. A teljesség kedvéért ismertetjük a bizonyítást az általános esetre.

Az  $a_{m_1}^+ a_{-m_1}^+ a_{m_2}^+ a_{-m_2}^+ \dots a_{m_{n/2}}^+ a_{-m_{n/2}}^+ |0\rangle$  alakú " $n/2$ -párállapotok" száma nyilván  $\binom{\Omega}{n/2}$ . Könnyű meggyőződni arról, hogy ezen állapotok rendszerében a /10/ kölcsönhatási operátor összes átlós matrixeleme  $-G n/2$ -vel egyenlő, s így az átlósösszeg értéke

$$-G \binom{\Omega}{n/2} \frac{n}{2} \quad /33/$$

Másrésről, rögzített  $n$  mellett az  $\lambda$  szenioritású állapotok száma /elfajulásuk foka/

$$\nu_\lambda = \binom{\Omega}{\lambda/2} - \binom{\Omega}{\lambda/2 - 1} \quad /34/$$

Az  $\lambda$  szenioritású /31/ állapotok megszerkesztéséhez kiindulásul szolgáló  $|\lambda \lambda\rangle$  állapotok ugyanis a  $j^\lambda$  konfiguráció  $\binom{\Omega}{\lambda/2}$  számú állapota közül azokat jelölik, amelyeket nem lehet előállítani a  $j^{\lambda-2}$  konfiguráció  $\binom{\Omega}{\lambda/2-1}$  számú állapotának valamelyikéből az  $A^+$  operátor alkalmazásával. A bebizonyítandó állítás: a /32/ sajátértékek a /34/ elfajulási fokokkal megszorozva és  $\lambda = 0, 2, 4, \dots, n$ -re összegezve az átlósösszeg /33/ alatt megadott értéket szolgáltatják. A bizonyítás így történhet:



$$\begin{aligned}
 & \sum_{\lambda/2=0}^{n/2} \gamma_{\lambda} E_{\lambda}^{(n)} = \\
 & = -G \sum_{\kappa=0}^{n/2} \left[ \binom{\Omega}{\kappa} - \binom{\Omega}{\kappa-1} \right] \left( \frac{n}{2} - \kappa \right) (\Omega - \frac{n}{2} - \kappa + 1) = \\
 & = -G \sum_{\kappa=0}^{n/2-1} \binom{\Omega}{\kappa} (\Omega - 2\kappa) = \\
 & = -G \sum_{\kappa=0}^{n/2-1} \left[ \binom{\Omega}{\kappa+1} (\kappa+1) - \binom{\Omega}{\kappa} \kappa \right] = \\
 & = -G \binom{\Omega}{n/2} \frac{n}{2}
 \end{aligned}$$

/35/

A második sorból a harmadik a második sorbeli szögletes zárójel második tagjában végrehajtott  $\kappa-1 \rightarrow \kappa$  átjelöléssel adódott, a harmadikból a negyedik pedig az  $\binom{\Omega}{\kappa} (\Omega - \kappa) = \binom{\Omega}{\kappa+1} (\kappa+1)$  azonosság felhasználásával. A /32/ alatt kapott, adott  $n$ -hez tartozó sajátértékek - amint ezt /35/ és /33/ összevetése mutatja, - valóban kimerítik  $H_k$ -nak a  $j^n$  konfiguráció alteréhez tartozó átlósösszegét.

Az eddigiekben az  $n =$  páros esettel foglalkoztunk. A használt módszerekkel az  $n =$  páratlan eset is tárgyalható. A sajátértékekre most is  $E_{\lambda}^{(n)}$  /32/ alatt felírt képlete adódik. Az  $\lambda$  szenioritás lehetséges értékei most 1, 3, 5, ...,  $n$ , miután páratlanszámú részecske közül mindig páratlanszámúnak kell zérus-páron kívül elhelyezkednie. Az alapállapot energiája eszerint

$$E_{\lambda}^{(n)} = -G \binom{n-1}{2} \left( \Omega - \frac{n}{2} + \frac{1}{2} \right)$$

/36/

A /36/ és a /21/ képletet egybevetve megállapíthatjuk, hogy  $\Omega \gg n/2$  mellett az energia mindkét esetben közelítőleg a zérus-párok számával arányos. Páratlan részecskeszám esetén az utolsó, páratlan részecske nem járul hozzá az energiához. A /10/ párkölcsönhatás spektrumának ez a vonása kvalitatív összhangban van a kötési energia részecskeszám-függésében mutatkozó, régóta jólismert páros-páratlan effektussal.



#### 4. A kvázispin-formalizmus

Az előző szakasz eredményei rövid úton leszarmaztathatók az elegáns kvázispin-formalizmus segítségével. Ehhez a kiindulópontot az az észrevétel szolgáltatja, hogy a /14/ alatt bevezetett  $A^\dagger$  -ből és annak adjungáltjából képezhető

$$S_1 = \frac{1}{2} (A^\dagger + A), \quad /37a/$$

$$S_2 = \frac{1}{2i} (A^\dagger - A) \quad /37b/$$

operátorok a /17/ alatti  $N$  részecskeszám-operátorral összefüggő

$$S_3 = \frac{1}{2} (N - \Omega) \quad /37c/$$

operátorral együtt az impulzusmomentum

$$S_i S_j - S_j S_i = i \epsilon_{ijk} S_k \quad /38/$$

felcserélési törvényeinek tesznek eleget. Ez könnyen igazolható, ha figyelembe vesszük /16/-ot, továbbá azt, hogy az  $A^\dagger$ ,  $A$  operátorok a részecskeszámot  $\pm 2$  -vel változtatják meg.

A /37/ képletekkel definiált  $\underline{S} (S_1, S_2, S_3)$  "vektor"-t nevezik a kvázispin operátorának. Kitűzhetjük az impulzusmomentum kvantumelméletében jólismert feladatot:  $\underline{S}^2$  és  $S_3$  közös sajátállapotai rendszerének meghatározását. A megfelelő sajátértékeket  $S(S+1)$ -gyel, ill.  $S_0$  -lal jelölve,  $S$  adott értéke mellett az  $|SS_0\rangle$  állapotok  $S_0 = S, S-1, \dots, -S$  -hez tartozó sorozatát kapjuk. A  $S$  kvantumszám nemnegatív félegész értékeket vehet fel. A /37c/ képletből látható, hogy az  $S_3$  operátor  $S_0$  sajátértékét a részecskeszám meghatározza:  $S_0 = (n - \Omega)/2$ , ahol  $n$  a részecskeszám operátorának sajátértéke az  $|SS_0\rangle$  állapotban. A  $S_0$  kvantumszám abszolútértéke, s vele együtt az  $S$  kvázispin, akkor veszi fel maximális értékét, ha a szemügyre vett szint teljesen üres ( $S_0 = -\Omega/2$ ) vagy teljesen be van töltve ( $S_0 = \Omega/2$ ). Mindkét esetben  $S = \Omega/2$ .



Egy "kvázispin-multipllett" /adott  $S$  -sel, valamint az  $S_0$  "vetület"  
 $S, S-1, \dots, -S$  értékeivel jellemzett/ komponensei az impulzusmomentum  
kvantumelméletéből ismert módon az

$$S_+ = S_1 + iS_2 = A^+$$

/39/

$$S_- = S_1 - iS_2 = A$$

operátorok segítségével állíthatók elő egymásból az

$$S_{\pm} |SS_0\rangle = \sqrt{S(S+1) - S_0(S_0 \pm 1)} |SS_0 \pm 1\rangle$$

képlet szerint. Tekintettel arra, hogy az  $S_+ = A^+$  és az  $S_- = A$  operátor a zérus-pár keltő, ill. eltüntető operátora, a kvázispin-multipllett egyes komponensei úgy kaphatók az  $S_0$  vetület legkisebb értékéhez tartozó  $|S-S\rangle$  állapotból kiindulva, hogy ezen állapothoz az  $S_+ = A^+$  operátor ismételt alkalmazásával rendre zérus-párokat adunk. Minthogy így a kvázispin-multipllett komponensei csak a zérus-párok számában különböznek egymástól, mindahányan az  $\lambda$  szenioritás azonos értékével jellemezhetők. Várható, hogy az  $S$  kvázispin és az  $\lambda$  szenioritás között egyértelmű kapcsolat áll fenn. Az impulzusmomentum kvantumelmélete szerint a momentum-vetületet csökkentő  $S_-$  operátor az  $S_0$  vetület legkisebb értékéhez tartozó  $|S-S\rangle$  állapotot zérusba viszi át:

$$S_- |S-S\rangle = 0$$

Minthogy  $S_- = A$  a zérus-pár eltüntető operátora, megállapíthatjuk, hogy az  $|S-S\rangle$  állapotban az összes részecske zérus-páron kívül helyezkedik el s így a szenioritás értelmezése szerint itt  $n = \lambda$ . Figyelembevéve, hogy az  $S_0$  vetület és az  $n$  részecskeszám között /37c/ értelmében

$$S_0 = \frac{1}{2} (n - \Omega)$$

/40/

a kapcsolat,  $S_0 = -S$ ,  $n = \lambda$  behelyettesítésével a kvázispin és a szenioritás között az

$$S = \frac{1}{2} (\Omega - \lambda)$$

/41/

összefüggést kapjuk.

Ezek után a /10/ kölcsönhatási operátor sajátértékei nehézség nélkül adódnak. A /39/, /38/ képletek felhasználásával írható:

$$\begin{aligned} H_k &= -GA^+A = \\ &= -G[S_1^2 + S_2^2 + S_3^2] = \\ &= -G[S^2 - S_3(S_3 - 1)]. \end{aligned}$$

Alkalmazzuk ezt az

$$\begin{aligned} S^2 |SS_0\rangle &= S(S+1) |SS_0\rangle, \\ S_3 |SS_0\rangle &= S_0 |SS_0\rangle \end{aligned}$$

sajátértékegyenleteket kielégítő  $|SS_0\rangle$  állapotra. Figyelembevéve /40/-et és /41/-et, a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} H_k |SS_0\rangle &= -G[S(S+1) - S_0(S_0 - 1)] |SS_0\rangle = \\ &= -G\left(\frac{n-\lambda}{2}\right)\left(\Omega - \frac{n+\lambda}{2} + 1\right) |SS_0\rangle. \quad /42/ \end{aligned}$$

Megkaptuk a /32/ sajátérték-képletet.

\*

Mint érdekességet megemlítjük, hogy a tárgyalt probléma lényegében véve meg-  
egyezik Walter Thirring vákuumelfajulást mutató modelljével, mely a térelmé-  
let új lehetőségeinek kutatásával kapcsolatban bír jelentőséggel.

A /32/ képletből megállapítható, hogy az adott szenioritású állapotok közül  
a félig betöltött szinthez  $(n \approx (2j+1)/2 \equiv \Omega, S_0 \approx 0)$  tartozó álla-  
pot esetében legerősebb a párkölcsönhatás okozta kötés. Irjuk be a saját-  
érték /42/ alatt szereplő  $E_{SS_0} = -G[S(S+1) - S_0(S_0 - 1)]$  képletébe a kvázi-  
spin /41/ kifejezését és alkalmazzuk a  $\sigma = n - \Omega = 2S_0$  jelölést:

$$\begin{aligned} E_{SS_0} &= -G\left[\frac{\Omega-\lambda}{2}\left(\frac{\Omega-\lambda}{2} + 1\right) - \frac{\sigma}{2}\left(\frac{\sigma}{2} - 1\right)\right] = \\ &= -G\left[\frac{\Omega}{2}\left(\frac{\Omega}{2} + 1\right) - \frac{\Omega-\lambda}{2} + \frac{\lambda}{2}\left(\frac{\lambda}{2} - 1\right) - \frac{\sigma}{2}\left(\frac{\sigma}{2} - 1\right)\right] \end{aligned}$$



Legyen most  $G = g/\Omega$  ahol feltesszük, hogy  $g$  független  $\Omega$ -tól, vezessük be továbbá az  $\epsilon_{\lambda\sigma} = \epsilon_{SS_0} + \frac{1}{2} g \left( \frac{\Omega}{2} + 1 \right)$  jelölést. Az energia zéruspontjának az utóbbi választása mellett  $\epsilon_{00} = 0$

Ekkor írható:

$$\epsilon_{\lambda\sigma} = g \left\{ \frac{\lambda}{2} - \frac{1}{\Omega} \left[ \frac{\lambda}{2} \left( \frac{\lambda}{2} - 1 \right) - \frac{\sigma}{2} \left( \frac{\sigma}{2} - 1 \right) \right] \right\}$$

Míg  $\Omega$  véges, a  $\sigma$  különböző rögzített értékei mellett legerősebb kötést biztosító rérus szenioritású állapotok energiája különböző lesz, az

$$\epsilon_{0\sigma} = \frac{g}{\Omega} \frac{\sigma}{2} \left( \frac{\sigma}{2} - 1 \right)$$

képletnek megfelelően. Ha azonban  $\Omega$  minden határon túl nő,  $\epsilon_{0\sigma}$  a  $\sigma$  kvantumszám minden véges értékére zérussá válik; bekövetkezik a vákuumelfajulás. Mint /41/-ből látható, zérus szenioritás mellett  $S = \Omega/2$ ; ha  $\Omega$  minden határon túl növekszik, a kvázispin is végtelenhez tart. Pongyolán szólva, a végtelen sok elfajult vákuumállapot a végtelen nagy kvázispin végtelen sok különböző beállításához tartozó vetületek értékeivel jellemezhető. A gerjesztés a szenioritás megnövekedését eredményezi; ilyenkor /41/ szerint a kvázispin értéke "csökken" /természetesen a "végtelen nagy" értékhez képest/.

Befejezésül megjegyezzük, hogy a röviden leírt modellben fellépő vákuumelfajulás azt a tényt tükrözi, hogy egy nagyon sok állapotot /kvantumcellát/ tartalmazó energiaszinten elhelyezkedő részecskék párkölcsönhatásból eredő energiája nem függ érzékenyen az  $n$  részecskeszám pontos értékétől, ha közelítőleg a kvantumcellák számának felével egyenlő.

Ennek oka a következő: Egy szint betöltésének kezdetén /míg a részecskeszám sokkal kisebb, mint a cellaszám/ a párkölcsönhatás energiája közelítőleg a párok számával arányosan nő. Ez a növekedés azonban később lassabbá válik, mert a részecskeszám növekedésével a Pauli-elv átmeneteket korlátozó hatása egyre nagyobb szerephez jut. A szint lezáródásához közel /amikor a részecskék száma megközelíti az állapotok számát/ a héj párkölcsönhatásból eredő energiája viszont csökken a párok számának növekedtével, mert ebben a tartományban már a Pauli-elv kölcsönhatást korlátozó hatása szabja meg a kölcsönhatási energia részecskeszám-függésének tendenciáját. A növekedés akkor fordul át csökkenésbe, amikor a részecskeszám a cellaszám felével egyenlő.

Ekkor ugyanis egy ujonnan a szintre helyezett pár energiája éppen akkora növekedést eredményez, mint amekkora energiacsökkenést okoz az a körülmény, hogy az ujonnan behelyezett pár a Pauli-féle kizárási elv révén korlátozza a többi pár kölcsönhatását.



### 5. A BCS-közelítés

Az elektrongáz szupravezetésének elméleti értelmezését megadó munkájukban Bardeen, Cooper és Schieffer az általuk feltételezett

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k - \sum_{k>0} \sum_{k'>0} G_{kk'} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger a_{-k'} a_{k'} \quad /43/$$

Hamilton-operátor sajátértékproblémáját nagyobb általánosságban vizsgálták, mint ahogy az az előző szakaszban történt: a részecskék számára rendelkezésre álló energiaszintek számát nem korlátozták egyre. / A /43/ képletben  $K$  pontosan meg nem határozott kvantumszám-csoportot jelöl;  $-K$  a  $K$ -val jellemzett egyrészecske-állapot időtükrözöttjéhez van rendelve. / Realisztikusabb magfizikai számításoknál is szükséges, hogy több energiaszintet vegyünk figyelembe.

Ha a részecskék számára több nemelfajult szint áll rendelkezésre, a kétrészecske-rendszer alapállapota az  $a_k^\dagger a_{-k}^\dagger |0\rangle$  párállapotoknak többé nem egyenlő amplitudókkal képezett lineáris kombinációja lesz, mint ahogy az  $j^2$  konfiguráció esetében volt. /Lásd /6/-ot./ Várható, hogy a magasabban fekvő szintekhez kisebb valószínűségi amplitudó tartozik. Arra gondolhatnánk, hogy a kétrészecske-alapállapot  $A^\dagger$  keltő operátorát általánosítsuk s /14/ helyett bevezessük az

$$A^\dagger = \sum_{k>0} A_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger \quad /44/$$

operátort alkalmas, a párkölcsönhatásnak legjobban kedvező  $A_k$  együtthatókkal. Az  $n$ -részecske-rendszer alapállapotát pedig az  $A^{n/2}$  operátornak a vákuumra való alkalmazása útján kísérelhetnénk meg előállítani. Az így kapott állapotokkal azonban nehéz dolgozni; a könnyebb kezelhetőség érdekében valamilyen áldozatot kell hozni.

Bardeen, Cooper és Schieffer a részecskeszám meghatározott voltát áldozta fel s a /43/ Hamilton-operátor legmélyebb sajátértékének közelítő meghatározására variációszámítást végzett. A

$$\prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) |0\rangle \quad (\mu_k^2 + v_k^2 = 1) \quad /45/$$

alaku állapotok<sup>x</sup> között keresték  $u_k, v_k$  alkalmas választásával azt az állapotot, amelyben várható értéke minimális. Minthogy /45/ a részecske-szám

$$N = \sum_k a_k^+ a_k \quad /46/$$

operátorának nem sajátállapota és az  $\langle N \rangle$  várható érték  $u_k, v_k$  variálása esetén a zérus és a kvantumcellák teljes száma között minden értéket felvehet, ahhoz, hogy a variációs számítással kapott alapállapot lehetőleg hűen írjon le egy valóságos  $n$ -részecske-rendszert,  $\langle H \rangle$  minimalizálását az

$$\langle N \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2 = n \quad /47/$$

mellékfeltétel mellett kell elvégeznünk. Ha Lagrange multiplikátor-módszert alkalmazzuk, a minimalizálandó kifejezés a

$$H' = H - \lambda N = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k - \sum_{k>0} \sum_{k'>0} G_{kk'} a_k^+ a_{-k} a_{-k'} a_{k'} \quad /48/$$

operátor /45/-tel képezett  $\langle H' \rangle$  várható értéke, ahol

$$\epsilon_k = E_k - \lambda.$$

A  $\lambda$  multiplikátor a /47/ mellékfeltétel segítségével határozandó meg.

A /45/ és /48/ kifejezések felhasználásával kapjuk:

$$\langle H' \rangle = 2 \sum_{k>0} \epsilon_k v_k^2 - \sum_{k>0} \sum_{k'>0} G_{kk'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} - \sum_{k>0} G_{kk'} v_k^4. \quad /49/$$

Az utolsó tagként álló egyszeres összeg elhanyagolása a gyakorlatban a legtöbbször megengedett az azt megelőző kétszeres összeghez képest. Ezt az elhanyagolást alkalmazva és /49/-et  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  figyelembe vételével  $v_k$  szerint differenciálva a szélsőérték feltételeként

$$2\epsilon_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'>0} G_{kk'} u_{k'} v_{k'} = 0 \quad /50/$$

<sup>x/</sup> A /45/ kifejezést természetes általánosításnak kell tekintenünk. Ezen állapot  $n$  részecskét tartalmazó része pontosan olyan alaku, mint a vákuumból  $A^+ n/2$  alkalmazásával nyert állapot. Itt  $A^+$  a /44/ alatt bevezetett operátor és  $A_k = \text{const.} v_k / u_k$ .



adódik. Itt feltettük, hogy a párkölcsönhatás  $G_{kk'}$  matrixa valós s így szimmetrikus. Ha  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  segítségével /50/-ből  $u_k$  -t kiküszöböljük,  $v_k^2$ -re másodfoku egyenletet nyerünk. Ezt megoldva kapjuk:

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}} \right), \quad /51/$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}} \right),$$

ahol

$$\Delta_k = \sum_{k' > 0} G_{kk'} u_{k'} v_{k'}. \quad /52/$$

Ha az  $u_k v_k$  szorzat /51/-ből kapható kifejezését /52/-be helyettesítjük, a  $\Delta_k$  mennyiségre a

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k' > 0} \frac{G_{kk'} \Delta_{k'}}{\sqrt{\epsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}}. \quad /53/$$

egyenletet kapjuk.

Az /53/ és /51/ összefüggések meghatározzák a /45/ állapotban szereplő  $u_k, v_k$  amplitudókat, ezek ismeretében pedig /49/-ből számítható az energia.

A rendszer gerjesztett állapotainak a /45/ alapállapotra ortogonálisnak kell lenniök. Ilyen állapotokat úgy szerkeszthetünk, hogy a /45/ szorzat egy vagy több

$$(u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle_k \quad /54/$$

tényezőjét reá ortogonális kifejezéssel helyettesítjük. Itt  $|0\rangle_k$  a  $(K, -K)$  kvantumszám-csoportokkal jellemzett egyrészezske-állapotokból álló állapot-pár vákuumát jelöli.

Egy ilyen állapotpár négy független /és ortogonális/ módon tölthető be:

$$|0\rangle_k, \quad /55a/$$

$$a_k^+ |0\rangle_k, \quad /55b/$$

$$a_{-k}^+ |0\rangle_k, \quad /55c/$$

$$a_k^+ a_{-k}^+ |0\rangle_k. \quad /55d/$$

Az /54/ állapot az /55a/ vákuum és az /55d/ párállapot, tehát egy zérus részecskét és egy kétrészecskét tartalmazó állapot szuperpozíciója. - A (K,-K) állapotpárhoz tartozó /55/ rendszer helyett a tárgyalt probléma esetében célszerűbb egy másik teljes ortonormált rendszer használata. Ez oly módon áll elő, hogy az /55b-c/ egyrészecske-állapotok, továbbá az /54/ kombináció mellé megszerkesztjük azt a negyedik állapotot, mely az előbbi hárommal együtt teljes ortonormált rendszert alkot.

$$a_k^+ |0\rangle_k, \quad /56a/$$

$$a_{-k}^+ |0\rangle_k, \quad /56b/$$

$$(u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle_k, \quad /56c/$$

$$(-v_k + u_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle_k \quad /56d/$$

Megjegyezzük, hogy az /56/ rendszer a  $v_k=0, u_k=1$  speciális esetben átmeny /55/-be.

A gerjesztett állapotok most már közvetlenül megszerkeszthetők. A /45/ alapállapot meghatározott számú /56c/ tényezőjét az /56/ ortonormált rendszer valamely más állapotával kell helyettesítenünk. A gerjesztett állapotok tehát ilyen alakúak:

$$\prod a_{\pm k}^+ \prod (-v_k + u_k a_k^+ a_{-k}^+) \prod (u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle \quad /57/$$

Képezzük most ebben az állapotban a /48/ alatti operátor várható értékét. Célszerű ehhez bevezetni az /56/ állapotok "karakterisztikus függvényeit". Legyen



$$\left. \begin{array}{l} \lambda_k = 1, \\ \rho_k = 1, \\ \rho_k = 1, \end{array} \right\} \text{ ha az /57/ szorzatban } (K, -K) \text{ -hoz egy } \left\{ \begin{array}{l} \text{/56a/ vagy /56b/} \\ \text{/56c/} \\ \text{/56d/} \end{array} \right.$$

alakú tényező tartozik, ellenkező esetben pedig  $\lambda_k, \rho_k,$  ill.  $\rho_k$  legyen zérus. A definícióból következik, hogy  $\lambda_k + \rho_k + \rho_k = 1$  minden  $K$  -ra, s így egyikük, pl.  $\rho_k$  a másik kettővel kifejezhető:  $\rho_k = 1 - \lambda_k - \rho_k$ . Az /57/ és /48/ képletek felhasználásával kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle &= 2 \sum_{k>0} \epsilon_k \left[ \frac{\lambda_k}{2} + \rho_k + (1 - \lambda_k - 2\rho_k) \nu_k^2 \right] - \\ &- \sum_{k>0} \sum_{k'>0} G_{kk'} (1 - \lambda_k - 2\rho_k) (1 - \lambda_{k'} - 2\rho_{k'}) u_k \nu_k u_{k'} \nu_{k'} - \\ &- \sum_{k>0} G_{kk} \left[ \rho_k + (1 - \lambda_k - 2\rho_k) \nu_k^2 + (1 - \lambda_k - 2\rho_k)^2 u_k^2 \nu_k^2 \right]. \end{aligned} \quad \text{/58/}$$

Most is előírjuk a részecskeszám várható értékét;  $\langle N \rangle$ -et most /57/-tel kell képeznünk:

$$\langle N \rangle = 2 \sum_{k>0} \left[ \frac{\lambda_k}{2} + \rho_k + (1 - \lambda_k - 2\rho_k) \nu_k^2 \right] = n \quad \text{/59/}$$

A  $\langle H' \rangle$  várható érték minimalizálásánál most is elhanyagoljuk a  $\langle H' \rangle$  /58/ kifejezésében utolsó tagként álló egyszeres összeget az azt megelőző kétszeres összeghez képest. Az /58/ kifejezést rögzített  $\lambda_k, \rho_k$  mellett,  $u_k^2 + \nu_k^2 = 1$  figyelembe vételével  $\nu_k$  szerint differenciálva kapjuk:

$$2 \epsilon_k u_k \nu_k - (u_k^2 - \nu_k^2) \sum_{k'>0} G_{kk'} (1 - 2f_{k'}) u_{k'} \nu_{k'} = 0 \quad \text{/50a/}$$

Itt az

$$f_k = \frac{\lambda_k}{2} + \rho_k$$

jelölést alkalmaztuk. Innen  $u_k$  -ra és  $v_k$  -ra most is az /51/ alakú kifejezések adódnak, ahol most

$$\Delta_k = \sum_{k' > 0} G_{kk'} (1 - 2f_{k'}) u_{k'} v_{k'}. \quad /52a/$$

A  $\Delta_k$  mennyiséget meghatározó egyenlet most /53/ helyett

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k' > 0} \frac{G_{kk'} \Delta_{k'}}{\sqrt{\epsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}} (1 - 2f_{k'}). \quad /53a/$$

Megjegyezzük, hogy a kapott kifejezések nemcsak az /57/ alakú "tisztá" állapot esetében érvényesek, hanem ilyen állapotok "inkoherens szuperpozíciója", vagyis vegyes sokaság esetében is. A vegyes sokaságot jellemző sűrűségmatrix ilyenkor a  $(K, -K)$  állapotpárokhoz rendelt  $4 \times 4$ -es matrixok direkt szorzata alakjában állítható elő. A direkt szorzat ezen  $\rho^{(K)}$  tényezői azt /56/ állapotok rendszerében átlós alakúak; az átlós matrixelemekre a  $\rho_{11}^{(K)} + \rho_{22}^{(K)} = \rho_k$ ,  $\rho_{33}^{(K)} = 1 - \rho_k - \rho_k$ ,  $\rho_{44}^{(K)} = \rho_k$  összefüggések érvényesek.



6. Megoldás BCS-közelítésben a  $j^m$  konfiguráció esetére

A /43/ alatt felírt BCS Hamilton-operátor sajátértékproblémáját a 3. szakaszban egzaktul megoldottuk arra a speciális esetre, ha az összes jelenlevő részecske egy adott impulzuszórával rendelkező szinten helyezkedik el. Eközben feltételeztük, hogy a kölcsönhatás matrixeleme

$$G_{kk'} = G_{jm, j'm'} = \delta_{jj'} G \quad /60/$$

alaku, ahol  $G$  állandó. Érdeklődésre tarthat számot a BCS-féle közelítő módszert erre a problémára alkalmazni. Így módunk lesz egy példán összehasonlítani a BCS-közelítésben kapott eredményeket az egzakt megoldással.

Először foglalkozunk az alapállapottal. Minthogy  $j$  adott, az egyrészecske-állapotokat jellemző  $K$  helyére egyszerűen az  $m$  momentum-vetület írható. A /43/-ban szereplő  $E_k$  egyrészecske-energiáról feltesszük, hogy független  $m$ -től; így ennek, valamint az ebből származtatott  $\epsilon_k = E_k - \lambda$  mennyiségnek teljesen elhagyható a  $k$  indexe. Ugyancsak független  $m$ -től - a  $G_{mm'}$  matrixelem feltételezett állandósága folytán - az /53/ egyenlet által meghatározott  $\Delta$  mennyiség is. Az /53/ egyenletből  $\Delta$ -ra a

$$\frac{2}{G \Omega} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \quad /61/$$

összefüggés adódik, ahol  $\Omega$  - mint korábban is - a szemügyre vett szinthez tartozó  $(m, -m)$  állapotok száma:  $\Omega = j + 1/2$ . Az alapállapot /45/ kifejezését meghatározó  $u_k, v_k$  együtthatók is állandónak bizonyulnak; ezekre /51/ és /61/ alapján az

$$u^2 = \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{G \Omega}, \quad v^2 = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{G \Omega} \quad /62/$$

kifejezéseket kapjuk. Az  $\epsilon = E - \lambda$  mennyiségben szereplő  $\lambda$  multiplikatort a /47/ mellékfeltételből határozhatók meg. Eszerint

$$2\Omega v^2 = \Omega + \frac{2\epsilon}{G} = n \quad /63/$$

A /62/ kifejezésekből  $\xi$  -t kiküszöbölve kapjuk:

$$u^2 = 1 - \frac{\eta}{2\Omega}, \quad v^2 = \frac{\eta}{2\Omega} \quad /64/$$

Az  $u$  és  $v$  amplitudók ismeretében /49/-ből meghatározható az alapállapot energiának minimalizálással kapott közelítő értéke. Az első tag egyszerűen

$\xi X$ /részecskeszám/ alakú. A /49/ kifejezés második és harmadik tagjában foglalt kölcsönhatási energiára /64/ és /60/ felhasználásával az

$$\xi_0^{(n)} = -G \frac{\eta}{2} \left[ \Omega - \frac{\eta}{2} + \frac{\eta}{2\Omega} \right] \quad /65/$$

képlet adódik.

Az összehasonlítás mutatja, hogy a BCS-közelítésben kapott /65/ sajátérték és a /21/ egzakt sajátérték között eltérés  $1/\Omega$  relativ nagyságrendű tagban van; a BCS-módszer tehát  $\Omega \gg 1$  esetén ad jó közelítést.

Érdekes rámutatni arra, hogy a BCS-közelítésben kapott alapállapotbeli sajátértéknek az egzakt eredménytől való eltérése egyedül annak következménye, hogy a /45/ BCS-féle próbakifejezés nem részecskeszám-sajátállapot.

Fejtsük ki /45/-öt részecskeszám-sajátállapotok szerint, figyelembevéve, hogy esetünkben  $u_k$  és  $v_k$  állandó. Kapjuk:

$$\begin{aligned} & \prod_{m>0} (u + v a_m^+ a_{-m}^+) |0\rangle = \\ & = \sum_{\lambda=0}^{\Omega} u^{\Omega-\lambda} v^{\lambda} \sum_{m_1 < m_2 < \dots < m_{\lambda}} a_{m_1}^+ a_{-m_1}^+ a_{m_2}^+ a_{-m_2}^+ \dots a_{m_{\lambda}}^+ a_{-m_{\lambda}}^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad /66/$$

A /14/ alatt bevezetett  $A^+$  operátor felhasználásával a /66/ kifejezésnek a következő alakot adhatjuk:

$$\sum_{\lambda=0}^{\Omega} C_{\lambda} \frac{1}{\lambda! \sqrt{\binom{\Omega}{\lambda}}} A^{+\lambda} |0\rangle, \quad /67/$$



ahol

$$C_{\mathcal{X}} = \sqrt{\binom{\Omega}{\mathcal{X}}} u^{\Omega-\mathcal{X}} v^{\mathcal{X}}, \quad /68/$$

$$\frac{1}{\mathcal{X}! \sqrt{\binom{\Omega}{\mathcal{X}}}} A^{+\mathcal{X}} |0\rangle \quad /69/$$

pedig  $\mathcal{X}$  számú zéruspárt tartalmazó normált állapot. A 3.szakaszban, a /21/ képletet megelőző megfontolás során láttuk, hogy /69/ a BCS-kölcsönhatás operátorának egzakt  $2\mathcal{X}$  -részeske-alapállapota az

$$E_0^{(2\mathcal{X})} = -G_{\mathcal{X}}(\Omega - \mathcal{X} + 1) \quad /70/$$

sajátérték mellett.

A kölcsönhatási energia várható értékét a /67/ állapotban megkaphatjuk oly módon, hogy /70/-et közepeljük a  $|C_{\mathcal{X}}|^2$  valószínűségekkel:

$$\langle H_k \rangle = \sum_{\mathcal{X}=0}^{\Omega} |C_{\mathcal{X}}|^2 E_0^{(2\mathcal{X})} = -G \sum_{\mathcal{X}=0}^{\Omega} |C_{\mathcal{X}}|^2 \mathcal{X}(\Omega - \mathcal{X} + 1). \quad /71/$$

Ezen összeg kiértékeléséhez ismernünk kell a /69/ állapotokban jelenlevő párok  $\mathcal{X}$  számának, valamint  $\mathcal{X}$  négyzetének  $|C_{\mathcal{X}}|^2$  -tel súlyozott középértékét. E középértékek a részecskeszám várható értékével és szórásnégyzetével állnak kapcsolatban:

$$\langle N \rangle = 2 \sum_{\mathcal{X}=0}^{\Omega} |C_{\mathcal{X}}|^2 \mathcal{X} = n, \quad /72/$$

$$\langle \Delta N^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = 4 \sum_{\mathcal{X}=0}^{\Omega} |C_{\mathcal{X}}|^2 \mathcal{X}^2 - n^2 = 2n \left(1 - \frac{n}{2\Omega}\right). \quad /73/$$

E várható értékek kiszámításához felhasználtuk /68/-at és /64/-et, továbbá a binomiális eloszlás várható értékének és szórásnégyzetének ismert képletét.

A várható értékre /72/-nek kellett adódnia, a /47/ mellékfeltételből következően. A /73/ eredményből pedig kiolvasható, hogy a relatív szórásnégyzet

közelítőleg a részecskeszám reciprokával arányos.

A /72/, /73/ képletek figyelembe vételével /71/-re a

$$\langle H_k \rangle = -G \left[ \frac{n}{2} \left( \Omega - \frac{n}{2} + 1 \right) - \frac{n}{2} \left( 1 - \frac{n}{2\Omega} \right) \right] \quad /74/$$

kifejezés adódik. Az eredmény megegyezik /65/-tel, amint annak lennie is kell. A most bemutatott gondolatmenet érdeme, hogy rávilágít:

A kölcsönhatási energiának a /66-67/ BCS-állapotban képezett várható értéke és a /21/ egzakt sajátérték között fellépő eltérést a  $G/4$  arányossági tényezőtől eltekintve a /73/ szórásnégyzet adja. Ez az eltérés tehát valóban a részecskeszámnak a /66-67/ BCS-állapotban mutatkozó határozatlanságából következik.

Gerjesztett állapot esetén  $\Delta$ -ra /53a/-ból a

$$\frac{2}{G(\Omega - 2f)} = \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \quad /75/$$

összefüggés adódik. Itt az

$$f = \sum_{k>0} f_k = \frac{1}{2} \sum_{k>0} (\lambda_k + 2\rho_k) \quad /76/$$

jelölést alkalmaztuk. A /75/ eredményt /51/-be helyettesítve, majd  $\lambda$  -t, illetve  $\xi$  -t az /59/-mellékfeltétel segítségével kiküszöbölve, kapjuk:

$$u^2 = 1 - \frac{1}{2} \frac{n-2f}{\Omega-2f}, \quad v^2 = \frac{1}{2} \frac{n-2f}{\Omega-2f} \quad /77/$$

A gerjesztett állapot energiája /58/-ból számítható. Az első tag most is  $\xi x$  /részecskeszám/ alakú. A második és harmadik tag adja a kölcsönhatási energiát. A korábban is már alkalmazott elhanyagolással élve, a harmadik tagként álló egyszeres összeget elhagyjuk a második tag mellett, mely kétszeres összeg. Ily módon /77/ felhasználásával a kölcsönhatási energiára a következő kifejezést kapjuk:

$$\xi_{2f}^{(n)} = -G \frac{(n-2f)}{2} \left( \Omega - \frac{n+2f}{2} \right) \quad /78/$$



Ezt az eredményt a /32/ egzakt sajátérték-képlettel összehasonlítva a következőket állapíthatjuk meg:

Ha  $\Omega \gg 1$ , /32/ második zárójelében az egyes elhagyható. Ekkor a BCS-féle közelítő módszerrel kapott /78/ eredmény a /32/ egzakt eredménnyel jó közelítésben egyező alakú; az összehasonlítás azt mutatja, hogy a gerjesztés fokát jellemző /76/-tal definiált  $f$  paraméter kétszerese az szenioritást adja:

$$\lambda = 2f.$$

/79/

Mint /66/ és /67/ mutatja, a BCS-alapállapotban az összes részecske zérus-párokba csoportosulva foglal helyet. Amint /76/-ból, valamint a  $\lambda_k, \eta_k, \rho_k$  "karakterisztikus függvények"-nek az /57/ képletét követően megadott definíciójából látható, a  $2f = \sum_{k>0} (\lambda_k + 2\rho_k)$  mennyiség az /57/ szorzatban szereplő azon részecske-keltő operátorok számát adja meg, amelyek nem az  $u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+$  alapállapotú kombináció alakjában szerepelnek.

Eszerint, figyelembe véve a /79/ képletet, a tárgyalt egy-szint-probléma /j<sup>n</sup> konfiguráció/ speciális esetében a gerjesztés folyamata, vagyis a /45/-ről /57/-re való áttérés szemléletesen így értelmezhető:

Valahányszor a /45/ alapállapot egy-egy /56c/ alakú tényezőjét /56a-b/ vagy /56c/ alakú tényezőjével helyettesítjük, ez annak felel meg, hogy a /45/-beli zérus-párok közül egyet-egyét eltávolítunk s helyükre egy vagy két zérus-páron kívül elhelyezkedő részecskét helyezünk. /E szemléletes értelmezés alkalmazásánál elővigyázatra van szükség, tekintettel arra, hogy a /45/, /57/ állapotokban a részecskeszám határozatlan./

Érdekes rámutatni arra, hogy a gerjesztett állapotokat jellemző  $\lambda_k, \rho_k$  "karakterisztikus függvények" a /78/ energiában csak a  $2f = \sum_{k>0} (\lambda_k + 2\rho_k)$  alakban szerepelnek. Ez azt jelenti, hogy a gerjesztett állapot energiáját az /57/ szorzatban nem az  $u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+$  alakban szereplő részecske-keltő operátorok száma egyértelműen meghatározza. Attól nem függ a gerjesztés energiája hogy a  $2f$  /56b/ alakban /"gerjesztett részecske"/ és hány az /56d/ kombináció alakjában /"gerjesztett pár"/.

7. A Bogoljubov-Valatin-transzformáció.

Kvázirészek és szenioritás

N.N. Bogoljubov és Valatin János mutatott rá arra, hogy a BCS Hamilton-operátor sajátértékeinek közeli meghatározása érdekében célszerű az  $a_k^+, a_k$  részecske-keltő és eltüntető operátorok helyett unitér /kanonikus/ transzformáció segítségével új operátorokat bevezetni. Ezen új  $\alpha_k^+, \alpha_k$  operátorokat az

$$\left. \begin{aligned} \alpha_k &= u_k a_k - v_k a_{-k}^+ , \\ \alpha_{-k} &= u_k a_{-k} + v_k a_k^+ \end{aligned} \right\} \quad K > 0 \quad /80/$$

Bogoljubov-Valatin-féle transzformáció definiálja. Az  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  összefüggésből és /2/-ből következik, hogy az  $\alpha_{\pm k}$  operátorokra is az

$$\begin{aligned} \{ \alpha_k, \alpha_{k'}^+ \} &= \delta_{kk'} , \\ \{ \alpha_k, \alpha_{k'} \} &= \{ \alpha_k^+, \alpha_{k'}^+ \} = 0 \end{aligned}$$

Jordan-Wigner-féle felcserélési törvények érvényesek.

A  $\alpha_{\pm k}^+, \alpha_{\pm k}$  operátorokat kvázirészecske-keltő és eltüntető operátoroknak nevezik. Amint /80/-ből látható, az  $u_k=1, v_k=0$  speciális esetben a kvázirészecske-operátorok megegyeznek a részecske-operátorokkal, míg  $u_k=0, v_k=1$  esetén egy kvázirészecske eltüntetése egy részecske keltését jelenti; ekkor tehát a kvázirészecskék a részecskék hiányának, a lyukaknak felelnek meg. Általában azonban meghatározott számú kvázirészt tartalmazó állapotban a részecskék száma határozatlan.

Könnyű belátni, hogy az  $\alpha_k, \alpha_{-k}$  kvázirész-eltüntető operátorok az /56c/ állapotokat zérusba viszik át:

$$\alpha_{\pm k} (u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle_k = 0.$$



Ebből következik, hogy a /45/ alatti BCS-állapotban kvázirészek nincsenek jelen: ez az állapot a kvázirészek vákuuma. Ennek jelölésére lekerekített **ket** szimbolumot használunk:

$$|0\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle. \quad /81/$$

Miképpen hatnak a kvázirész-keltő operátorok a kvázirészek vákuumára? A feltett kérdésre a következő képletek adnak választ:

$$a_{\pm k}^+ (u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle_k = a_{\pm k}^+ |0\rangle_k, \quad /82/$$

$$a_k^+ a_{-k}^+ (u_k + v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle_k = (-v_k + u_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle_k.$$

A kvázirész-vákuumot alkotó /56c/ állapotokat a kvázirész-keltő operátorok egyszeri alkalmazása /56a/ vagy /56b/ alakú egyrészecske-állapotba viszi át. A két kvázirészt keltő  $a_k^+ a_{-k}^+$  operátor pedig az /56c/ "alapállapotu párt" az /56d/ "gerjesztett párba", pontosabban: a 0 és 2 részecskeszámú állapotokból szuperponált /56c/ állapotot az ugyanezen állapotokból szuperponált, de az előzőre ortogonális állapotba viszi át, a valószínűségi amplitudókat az  $\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -v_k \\ u_k \end{pmatrix}$  módon transzformálva.

Ha /81/-et, /57/-et és /82/-t egybevetjük, megállapíthatjuk, hogy az /57/ gerjesztett állapot a /81/ kvázirészecske-vákuumból kvázirészecske-keltő operátorokkal egyszerűen származtatható és ilyen alakba írható:

$$\prod a_{\pm k}^+ \prod a_k^+ a_{-k}^+ |0\rangle. \quad /83/$$

Itt az első szorzat  $a_{\pm k}^+$  tényezőinek száma ugyanannyi, mint az /57/-beli első szorzat tényezőié; az  $\Delta_k$  mennyiséggel kifejezve:  $\sum_{k>0} \Delta_k$ . A második szorzat  $a_k^+ a_{-k}^+$  tényezőinek száma pedig az /57/-beli második szorzat  $(-v_k + u_k a_k^+ a_{-k}^+)$  tényezőinek számával egyezik meg;  $\rho_k$ -val kifejezve:  $\sum_{k>0} \rho_k$ . A /83/ alatt felírt gerjesztett állapotban a kvázirészek száma

$$\sum_{k>0} (\Delta_k + 2\rho_k),$$

ami /76/ és /79/ szerint éppen az  $\Delta$  szenioritást adja. A kvázirészek száma és a szenioritás között talált kapcsolat gazdagabb szemléletes tartalmat ad e két fontos fogalomnak.

A kvázirészek bevezetésével nyert új ábrázolásban előnyösen elvégezhető a BCS Hamilton-operátor saját-értékeinek közelítő meghatározása. A Hamilton-operátor várható értékének minimumát most a /80/ unitér transzformáció

$u_k, v_k$  paramétereinek függvényében keressük. Nulladik közelítésben szokásos feltevés, hogy a kvázirészek kölcsönhatása elhanyagolható.



8. Megoldás kvázirészecskeszám-ábrázolásban Fermi-gáz esetére.

Az energia-hézag

A kvázirészek bevezetésével nyert új ábrázolás alkalmazásának bemutatására nagyszámu fermionból /nukleonból/ álló gázt veszünk szemügyre, a mag statisztikus modelljének szellemében. A részecskék számára nagyszámu, az  $E_k$  egyrészecske-energia különböző értékeivel jellemzett szint áll rendelkezésre. Feltesszük, hogy a részecskék kölcsönhatását a /43/-ban szereplő kölcsönhatási operátor írja le. Az  $E_k$  egyrészecske-energia jelentheti a részecske mozgási energiáját, de magában foglalhatja /ha van ilyen/ a részecske külső erőterbeli potenciális energiáját is.

Ha a /43/ Hamilton-operátort, ill. az abból származtatott, /48/ alatt definiált  $H' = H - \lambda N$  operátort a /80/ Bogoljubov-Valatin-féle transzformáció alapján a kvázirészecske-operátorokkal fejezzük ki, s ezután a kvázirész-operátorok szereplő szorzatait normálszorzattá rendezzük át, a  $H'$  operátor a következő alakot ölti:

$$H' = H_{00} + H_{11} + H_{20} + H_i \quad /84/$$

Itt  $H_{00}$  nem tartalmaz kvázirész-operátort; ez szolgáltatja az energia vákuum várható értékét:

$$H_{00} = 2 \sum_{k>0} \epsilon_k v_k^2 - \sum_{k>0} \sum_{k'>0} G_{kk'} u_k v_k u_{k'} v_{k'}. \quad /85/$$

A  $H_{11}$  tag a normálszorzatok összege alakjára hozott  $H'$ -nek a kvázirész-operátorokban bilineáris, ugyanakkor a kvázirészek számában diagonális része:

$$H_{11} = \sum_{k>0} \left[ \epsilon_k (u_k^2 - v_k^2) + u_k v_k 2 \sum_{k'>0} G_{kk'} u_{k'} v_{k'} \right] (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}). \quad /86/$$

A  $H_{20}$  tag ugyancsak bilineáris a kvázirész-operátorokban, ugyanakkor a kvázirészecskék számában nem diagonális:

$$H_{20} = \sum_{k>0} \left[ 2\varepsilon_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k>0} G_{kk'} u_{k'} v_{k'} \right] (\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ + \alpha_{-k} \alpha_k). \quad /87/$$

A  $H_i$  tag a kvázirész-operátorokban kvadrilineáris, ez írja le a kvázirészek kölcsönhatását. Ennek részletes alakját nem írjuk ki, számításainkban pedig feltesszük róla, hogy elhanyagolható. - A fentiekben a kölcsönhatási operátor matrixelemeire vonatkozó egyszeres összegeket következetesen elhanyagoltuk a kétszeres összegek mellett.

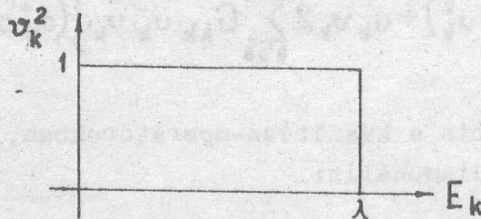
Az alapállapot, vagyis a kvázirész-vákuum energiáját közelítőleg úgy határozhatjuk meg, hogy a /84/ operátornak a /81/ kvázirész-vákuummal képezett várható értékét minimalizáljuk a /80/ Bogoljubov-Valatin-transzformáció

$u_k, v_k$  paramétereit szerint. A  $(0|H|0)$  vákuum-várható értéket a /85/ alatti  $H_{00}$  kifejezés adja, ez pedig - az elhanyagolásra szánt egyszeres összegtől eltekintve, - /49/-cel egyezik meg. Eszerint  $H_{00}$  szélsőértékének feltételét /50/ adja s a minimalizáló  $u_k, v_k$  együtthatók értékét az /51/, /53/ összefüggések határozzák meg. - A szélsőérték /50/ feltételéből a /87/ alatti  $H_{20}$  operátor eltűnése következik. Megállapíthatjuk tehát, hogy ha elhanyagoljuk a  $H_i$  kvázirész-kölcsönhatást, a kvázirész-vákuum sajátállapota a Hamilton-operátornak.

Az /51/ képletekből leolvashatjuk:

Ha nem volna kölcsönhatás ( $G_{kk'}=0$ ), úgy  $\varepsilon_k = \varepsilon_k - \lambda < 0$  esetén  $v_k=1, u_k=0$ ,  $\varepsilon_k - \lambda > 0$  esetén pedig  $v_k=0, u_k=1$  adódnék.

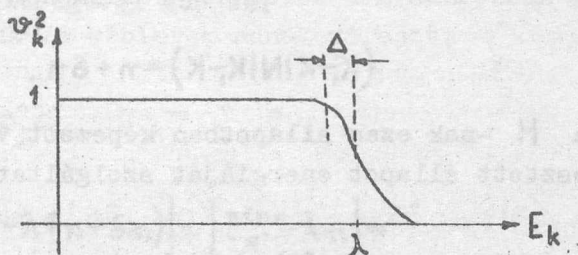
Ilyenkor a  $\lambda$ -nál kisebb  $\varepsilon_k$  energiájú állapotok mind be vannak töltve, a  $\lambda$ -nál nagyobb energiájúak pedig mind üresek. Az elfajult szabad Fermigázra jellemző négyszögletes eloszlást kaptuk; a Fermi-féle határenergia /Fermi-szint/ egyenlő a  $\lambda$  multiplikatórral.



2. ábra



A párkölcsönhatás jelenlétében  $|\epsilon_k| = |\epsilon_k - \lambda| \gg \Delta_k$  esetén közelítőleg továbbra is a szabad elfajult Fermi-gázra jellemző viszonyok állnak fenn, az  $|\epsilon_k - \lambda| \approx \Delta_k$  tartományban viszont a 2. ábra éles levágása helyett lankásabb átmenetet kapunk. A  $v_k^2$  valószínűség az  $E_k$  energia növekedtével a  $\lambda$  helyen csökken eredeti értéke felére.



3. ábra

Gerjesztett állapotokat, mint az előző szakaszban láttuk, kvázirészecske-keltő operátorok segítségével nyerhetünk a  $|0\rangle$  alapállapotból. Az alapállapot minden komponenséhez páros részecskeszám tartozik. Ahhoz, hogy a gerjesztett állapot is ilyen legyen,  $|0\rangle$ -ra legkevesebb két kvázirészecske operátort kell alkalmaznunk. Határozzuk meg pl. a

$$\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ |0\rangle \quad /88/$$

kvázirész párállapot gerjesztési energiáját. Mivel az alapállapotban a  $H'$  operátor /84/ kifejezéséből csak  $H_{00}$  ad el nem tűnő járulékot, a /88/ gerjesztett állapotban  $H_{11}$  várható értéke is zérustól különböző.

A /88/ gerjesztett állapot energiájának meghatározásánál szem előtt kell tartanunk, hogy a kvázirész-operátorok nem felcserélhetők a részecskeszám operátorával. Ennek folytán, ha a  $|0\rangle$  alapállapotban a részecskeszám várható értéke  $n$  s így az  $u_k, v_k$  együtthetők a /47/ mellékfeltételnek tesznek eleget, a /változatlan  $u_k, v_k$  mellett felírt/ /88/ gerjesztett állapotban a részecskeszám várható értéke  $n$ -től valamilyen  $\delta n$  értékkel különbözni fog.

Az alapállapot  $\xi_0^{(n)}$  energiáját  $H$ -nak a

$$\langle 0|n|0\rangle = n \quad /89/$$

mellékfeltételt kielégítő  $|0\rangle$  állapottal képezett várható értéke szolgáltatja:

$$\xi_0^{(n)} = \langle 0 | H | 0 \rangle. \quad /90/$$

A két kvázirészt tartalmazó  $|K_1 - K\rangle = \alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ |0\rangle$  gerjesztett állapotban, mint láttuk, a részecskeszám várható értéke eltér  $n$ -től:

$$\langle K_1 - K | N | K_1 - K \rangle = n + \delta n. \quad /91/$$

Ennek megfelelően  $H$ -nak ezen állapotban képezett várható értéke az  $n + \delta n$ -hez tartozó gerjesztett állapot energiáját szolgáltatja:

$$\xi_2^{(n+\delta n)} = \langle K_1 - K | H | K_1 - K \rangle. \quad /92/$$

Mi nem ezt, hanem az előirt  $n$  részecskeszámhoz tartozó  $\xi_2^{(n)}$  energiaértéket kívánjuk ismerni. Az

$$\xi^{(n+\delta n)} = \xi^{(n)} + \frac{\partial \xi^{(n)}}{\partial n} \delta n \quad (+ \dots) \quad /93/$$

sorfejtés adta közelítő összefüggés szerint ehhez a  $\frac{\partial \xi^{(n)}}{\partial n}$  deriváltat kell meghatározni. Vegyük ehhez figyelembe, hogy az előirt mellékfeltétel mellett meghatározandó szélsőérték feltételeként a

$$\frac{\partial}{\partial v_k} \langle H - \lambda N \rangle = 0 \quad /94/$$

összefüggéseket kaptuk. A /88/ kvázirész-párállapot gerjesztésekor egy

$u_k + v_k \alpha_k^+ \alpha_{-k}^+$  kombináció  $v_k$  együtthatója változik meg, s  $n$  megváltozását ennek megváltozása határozza meg:  $n = n(v_k)$ ,  $v_k = v_k(n)$ . Figyelembevéve, hogy  $\xi^{(n)} = \langle H \rangle$ ,  $\langle N \rangle = n$  /94/-ből kapjuk:

$$\frac{\partial \xi^{(n)}}{\partial n} = \frac{\partial \xi^{(n)}}{\partial v_k} \frac{dv_k}{dn} = \lambda \frac{dn}{dv_k} \frac{dv_k}{dn} = \lambda \quad /95/$$

Eredményül a  $\lambda$  Lagrange-multiplikátor adódott. Megjegyezzük, hogy a fázisátalakulások termodinamikájában az energiának adott fázishoz tartozó részecs



keszám szerint /állandó térfogat és entrópia mellett/ képezett deriváltját kémiai potenciálnak nevezik. Ezt az elnevezést használják /95/-re is.

Mi az

$$\xi_g = \xi_2^{(n)} - \xi_0^{(n)}$$

gerjesztési energiát kívánjuk ismerni. A /93/, /95/, /92/, /91/, /90/, /89/ és /48/ összefüggések segítségével kapjuk:

$$\begin{aligned} \xi_g &= \xi_2^{(n)} - \xi_0^{(n)} = \\ &= [\xi_2^{(n+\delta n)} - \lambda(n+\delta n)] - [\xi_0^{(n)} - \lambda n] = \\ &= (K_1 - K_1 H - \lambda N | K_1 - K) - (0 | H - \lambda N | 0) = \\ &= (K_1 - K | H' | K_1 - K) - (0 | H' | 0). \end{aligned}$$

/96/

A gerjesztési energia eszerint a /84/ alatti operátornak /88/-al és /81/-el képezett várható értéke különbségeként adódik. A /96/ alatt szereplő várható értékeket /84/, /85/, /86/, /51/ és /53/ felhasználásával kiértékelve kapjuk

$$\xi_g = 2\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2} \quad /97/$$

Ha a /88/ kvázirész-párállapot helyett az  $\alpha_{k_1}^+ \alpha_{k_2}^+ | 0 \rangle$  két kvázirész tartalmazó gerjesztett állapotot vesszük, /97/ helyett az

$$\xi_g = \sqrt{\xi_{k_1}^2 + \Delta_{k_1}^2} + \sqrt{\xi_{k_2}^2 + \Delta_{k_2}^2} \quad /98/$$

eredmény adódik.

Míg egy szabad elfajult Fermi-gáz gerjesztésekor a gerjesztési energia /elég nagy térfogat esetén/ tetszésszerűen kicsiny értékeket felvehet, a párkölcsönhatás jelenlétében /97/, ill. /98/ szerint minimálisan  $\xi_g = 2\Delta_k$  ill.  $\Delta_{k_1} + \Delta_{k_2}$  energiára van szükség, hogy a rendszert gerjeszthessük.

A Bardeen-Cooper-Schrieffer-féle párkölsönhatásnak ez a következménye összhangban van a páros-páros magok spektrumában megfigyelt energia-hézag létezésével.

Az eddigiekben páros részecskeszámhoz tartozó állapotokat vizsgáltunk. Egy páratlan tömegszámú mag leírására a /81/-ből páratlanszámú kvázirészecskeoperátor alkalmazásával adódó állapotokat használhatjuk. Vegyük szemügyre a

$$|K\rangle = \alpha_k^+ |0\rangle \quad /99/$$

alakú, egy kvázirészecst tartalmazó állapotokat. Az alapállapotban a páratlan /kvázi/ részecskének éppen a Fermi-szinten kell elhelyezkednie:  $\epsilon_{k_0} = \lambda$

$\epsilon_{k_0} = 0$  Ha a részecskét magasabb szintre helyezzük, energialeadással visszatérhet a Fermi-szintre, ha viszont a Fermi-gömb belsejébe kényszerítjük, a Pauli-elv révén korlátozza a többi részecskék párkölsönhatását s így helyzete energetikailag ugyancsak kedvezőtlen. Eszerint, ha a /99/ állapotban a kvázirészecske nem a Fermi-szinten foglal helyet, gerjesztett állapottal állunk szemben, melynek gerjesztési energiája

$$\xi_g = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2} - \Delta_{k_0}. \quad /100/$$

Ezen eredménynek a szabad Fermi-gáz esetében érvényes  $\xi_g = \epsilon_k$  ( $\epsilon_k > 0$ ) képlettől való eltérése a probléma korrelált többrészecske-jellegének folyománya. Akárhova kerül is a részecske, a kizárási elv révén más és más mértékben megváltoztatja társainak kölcsönhatását. Ez a hatás csak akkor elenyésző, ha a gerjesztés eredményeképpen a részecske messze a Fermi-gömbön kívülre kerül:  $\epsilon_k \gg \Delta_{k_0}, \Delta_k$ ; ekkor /100/ valóban átmege a szabad Fermi-gázra vonatkozó  $\xi_g = \epsilon_k$  képletbe. A /100/ képletből következik, hogy az alacsonyan fekvő ( $\epsilon_k \lesssim \Delta_k$ ) szintek sűrűsége nagyobb, mint amekkora a szintsűrűség eltűnő párkölsönhatás mellett volna. Bakke megmutatta, hogy ez a következtetés összhangban van a megfigyelt adatokkal.



9. Egzakt megoldás két nemelfajult szint  
 $j_1^{\nu} j_2^{n-\nu}$  konfiguráció/ esetére

Az eddigiekben a BCS Hamilton-operátor spektrumának egzakt meghatározását csupán egy szint /a  $j^n$  konfiguráció/ esetére mutattuk be /3.szakasz/. A több nemelfajult szint alapul vételével végzett magspektroszkópiái számításokban korábban általánosan a BCS-féle közelítő módszert használták /Szolovjev, Bro-Jorgensen, Haatuft, Nilsson, Kisslinger és Sorensen/. Tekintettel arra azonban, hogy az alacsony energiájú magspektrumok kialakításában résztvevő nukleonok, ill. a szerepet játszó kvantumállapotok száma nem nagy, a BCS-féle közelítő módszer pontossága ilyen esetben számottevően korlátozott. Indokoltak tehát az erőfeszítések, melyek az ilyen problémák egzakt megoldásának meghatározására irányulnak.

A közelmúltban mutatott rá arra Kerman, hogy több nemelfajult szint esetén is meg lehet egzaktul határozni a BCS-Hamilton-operátor spektrumát, ha feltételezzük, hogy az alapul vett szintek állapotait összekötő  $G_{KK'}$  matrixelemek egy állandó  $G$  értékkel egyenlők. A javasolt módszer a kvázispin-formalizmuson alapszik. Az egyes szintekhez tartozó kvázispin-sajátállapotokból az impulzusmomentum összeadásának kvantummechanikai szabályai szerint megszerkesztjük a rendszer teljes kvázispinjének sajátállapotait. Ezen állapotok rendszerében a BCS Hamilton-operátor matrixa az impulzusmomentum kvantumelméletének algebrai technikája segítségével közvetlenül felírható. A különböző atommagok esetében kapott energiamatrixokat Kerman és munkatársai elektronikus számítógép segítségével hozták átlós alakra.

A következőkben megmutatjuk, hogy miképpen írható fel energiamatrix két nemelfajult szint /a  $j_1^{\nu} j_2^{n-\nu}$  konfiguráció/ esetében. Az egyrészesce impulzusmomentum-sajátállapotok fázisaira e szakaszban a /3/ Mottelson-féle megállapodás helyett az /I/ Condon-Shortley-féle követelményt fogadjuk el. Ily módon számításainkban felhasználhatjuk a Clebsh-Gordan- és Racah-együtthetőkra vonatkozóan rendelkezésre álló táblázatokat, melyek /I/ alapulvétellel készültek.

A  $j_1^{\nu} j_2^{n-\nu}$  konfiguráció állapotainak terében, állandó kölcsönhatási matrixelemmel, a Condon-Shortley-féle fázisokkal a BCS Hamilton-operátor a következő alakú:

$$H = E_{j_1} N_{j_1} + E_{j_2} N_{j_2} - G \sum_{\substack{m>0 \\ j, j' = j_1, j_2}} \sum_{m'>0} (-1)^{j-m} (-1)^{j'-m'} a_{jm}^\dagger a_{j'-m}^\dagger a_{j'-m} a_{jm} \quad /101/$$

Itt

$$N_{j_1} = \sum_m a_{j_1 m}^\dagger a_{j_1 m},$$

$$N_{j_2} = \sum_m a_{j_2 m}^\dagger a_{j_2 m}$$

az egyes szintekhez tartozó részecskeszám-operátorok. Vezessük be most a  $j_1$  és  $j_2$  impulzuszórájú szintekhez tartozó  $\underline{P}$ ,  $\underline{R}$  kvázispin-operátorokat, a következő definícióval:

$$P_+ = \sum_{m>0} (-1)^{j_1-m} a_{j_1 m}^\dagger a_{j_1 -m}^\dagger,$$

$$R_+ = \sum_{m>0} (-1)^{j_2-m} a_{j_2 m}^\dagger a_{j_2 -m}^\dagger,$$

$$P_- = \sum_{m>0} (-1)^{j_1-m} a_{j_1 -m} a_{j_1 m},$$

$$R_- = \sum_{m>0} (-1)^{j_2-m} a_{j_2 -m} a_{j_2 m},$$

$$P_3 = \frac{1}{2} (N_{j_1} - \Omega_{j_1}),$$

$$R_3 = \frac{1}{2} (N_{j_2} - \Omega_{j_2}).$$

Itt  $\Omega_{j_1} = \frac{1}{2} (2j_1 + 1)$ ,  $\Omega_{j_2} = \frac{1}{2} (2j_2 + 1)$  az egyes szintekhez tartozó párállapotok számát jelölik. A rendszer teljes kvázispinjének operátorát jelölje

$$\underline{S} = \underline{P} + \underline{R}$$

A kvázispin-operátor segítségével a /101/ Hamilton-operátor a következő alakban írható fel:

$$H = E_{j_1} \Omega_{j_1} + E_{j_2} \Omega_{j_2} + 2E_{j_1} P_3 + 2E_{j_2} R_3 - GS_+ S_- \quad /102/$$



Vegyük most figyelembe, hogy  $S_+ S_- = (S_1 + i S_2)(S_1 - i S_2) = S_1^2 + S_2^2 - i[S_1, S_2] = S_1^2 + S_2^2 - S_3(S_3 - 1)$ , vezessük be továbbá a

$$\underline{Q} = \underline{P} - \underline{R}$$

jelölést. Ekkor /102/ helyett írható:

$$H' \equiv H - E_{j_1} \Omega_{j_1} - E_{j_2} \Omega_{j_2} = (E_{j_1} + E_{j_2} - G) S_3 - G(S_1^2 - S_3^2) + (E_{j_1} - E_{j_2}) Q_3. \quad /103/$$

Jelöljük az aláhuzott tagokat együttesen  $H'_\alpha$ -val. A  $H'_\alpha$  operátor a  $\underline{P}^2, \underline{R}^2, \underline{S}^2, S_3$  operátorok  $P(P+1), R(R+1), S(S+1), \sigma$  sajátértékeihez tartozó  $|PR\sigma\rangle$  sajátállapotok rendszerében átlós alakú. Az átlós matrixelemek értéke:

$$\langle PR\sigma | H'_\alpha | PR\sigma \rangle = (E_{j_1} + E_{j_2} - G)\sigma - G[S(S+1) - \sigma^2]. \quad /104/$$

A  $H'$  operátor kifejezéseiben egyedül a  $H'_n = (E_{j_1} - E_{j_2}) Q_3$  tag nem átlós alakú a  $|PR\sigma\rangle$  állapotok rendszerében. Az itt szereplő  $Q_3$  operátor matrixa meghatározható azon észrevétel alapján, hogy  $Q_3$  a  $\underline{P}^2, \underline{R}^2, P_3, R_3$  operátorok  $P(P+1), R(R+1), \pi, \varrho$  sajátértékeihez tartozó  $|\pi R \varrho\rangle$  sajátállapotok rendszerében átlós alakú a  $\pi - \varrho$  sajátérték mellett; figyelembe véve azt, hogy  $Q_3$   $\underline{P}^2, \underline{R}^2, S_3$  operátorokkal felcserélhető, csak  $\underline{S}^2$ -tel nem, az el nem tűnő matrixelemekre írható:

$$\langle PR\sigma | H'_n | PR\sigma \rangle = (E_{j_1} - E_{j_2}) \sum_{\pi + \varrho = \sigma} \langle PR\sigma | \pi R \varrho \rangle (\pi - \varrho) \langle \pi R \varrho | PR\sigma \rangle \quad /105/$$

A /104/ és /105/ képletek alapján a  $H = H'_\alpha + H'_n + E_{j_1} \Omega_{j_1} + E_{j_2} \Omega_{j_2}$  Hamilton-operátor matrixa közvetlenül felírható, felhasználva a  $\langle PR\sigma | \pi R \varrho \rangle$  Clebsch-Gordan-együtthatók ismert táblázatokban megadott értékeit.

Vegyük példaként szemügyre az atommagok  $p$  héját alkotó  $p^{3/2}, p^{1/2}$  szinteket. Az egyes szintekhez tartozó kvázispinek lehetséges értékei /41/ szerint a következők:

$$p^{3/2} \quad P = 0, \frac{1}{2}, 1; \quad p^{1/2} \quad R = 0, \frac{1}{2}$$

Az energiamatrix az adott  $P, R$  értékekhez tartozó  $(2P+1)(2R+1)$  sorból és oszlopból álló almatrixokból épül fel. Eszerint

$P=R=0$	-hoz	1x1-es matrix,
$P=0, R=\frac{1}{2}$	-hez	2x2-es matrix,
$P=\frac{1}{2}, R=0$	-hoz	2x2-es matrix,
$P=R=\frac{1}{2}$	-hez	4x4-es matrix,
$P=1, R=0$	-hoz	3x3-as matrix,
$P=1, R=\frac{1}{2}$	-hez	6x6-os matrix

tartozik.

Figyelembevétel a kvázispin és a szenioritás, továbbá a kvázispin-vetület és a részecskeszám /40-41/ alatt megadott kapcsolatát, megállapíthatjuk, hogy a különböző  $P, R$  értékekhez a következő állapotok tartoznak:

$P=R=0$	-hoz	$(\rho^{3/2})_2^2 (\rho^{1/2})_{1/2}^1$
$P=0, R=\frac{1}{2}$	-hez	$(\rho^{3/2})_2^2, (\rho^{3/2})_2^2 (\rho^{1/2})_0^2$
$P=\frac{1}{2}, R=0$	-hoz	$(\rho^{3/2})_{3/2}^1 (\rho^{1/2})_{1/2}^1, (\rho^{3/2})_{3/2}^3 (\rho^{1/2})_{1/2}^1$
$P=R=\frac{1}{2}$	-hez	$(\rho^{3/2})_{3/2}^1, (\rho^{3/2})_{3/2}^3, (\rho^{3/2})_{3/2}^1 (\rho^{1/2})_0^2, (\rho^{3/2})_{3/2}^3 (\rho^{1/2})_0^2$
$P=1, R=0$	-hoz	$(\rho^{1/2})_{1/2}^1, (\rho^{3/2})_0^2 (\rho^{1/2})_{1/2}^1, (\rho^{3/2})_0^4 (\rho^{1/2})_{1/2}^1$
$P=1, R=\frac{1}{2}$	-hez	$(\rho^{3/2})_0^2, (\rho^{1/2})_0^2, (\rho^{3/2})_0^2 (\rho^{1/2})_0^2, (\rho^{3/2})_0^4$ $(\rho^{3/2})_0^4 (\rho^{1/2})_0^2, \text{ valamint a vákuum.}$

Mint ahogy /104/ és /105/ szerint a Hamilton-operátor matrixa a  $\sigma$  kvázispin-vetületben, vagyis a részecskeszámában átlós alakú, keveredésre csak a  $P=R=\frac{1}{2}$  és  $P=1, R=\frac{1}{2}$  esetben kerül sor, a  $(\rho^{3/2})_{3/2}^3$  és  $(\rho^{3/2})_{3/2}^1 (\rho^{1/2})_0^2$  ill. a  $(\rho^{3/2})_0^2, (\rho^{1/2})_0^2$  valamint  $(\rho^{3/2})_0^2 (\rho^{1/2})_0^2$  és  $(\rho^{3/2})_0^4$  állapotok között. A helyes lineáris kombinációk meghatározására a Hamilton-operátor

$$\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} S_0 | H | \frac{1}{2} \frac{1}{2} S' 0 \rangle$$

és

$$\langle 1 \frac{1}{2} S \pm \frac{1}{2} | H | 1 \frac{1}{2} S' \pm \frac{1}{2} \rangle$$

2x2-es almatrixait kell átlós alakra hoznunk és a megfelelő sajátvektorokat meghatározni.



Végezetül megmutatjuk, hogy a /103/ alatti  $H'$  operátor  $H'_n$  nemdiagonális részében szereplő  $Q_3$  operátor matrixa egyszerű alakban kifejezhető Clebsch Gordan és Racah-együtthetők segítségével. A /105/ képletben  $Q_3$  matrixa a következő összeg alakjában szerepel:

$$\langle PRS\sigma | Q_3 | PRS'\sigma \rangle = \sum_{\pi, s} \langle P\pi R s | PRS\sigma \rangle \langle P\pi R s | PRS'\sigma \rangle (\pi - s) \quad /106/$$

Itt felhasználtuk a  $\langle P\pi R s | PRS\sigma \rangle$  Clebsch-Gordan-együtthetők valós voltát. Vegyük most tekintetbe, hogy  $m = \sqrt{j(j+1)} \langle jm10 | j1jm \rangle$ , ekkor /106/ így írható:

$$\begin{aligned} \langle PRS\sigma | Q_3 | PRS'\sigma \rangle &= \sqrt{P(P+1)} \sum_{\pi, s} \langle P\pi R s | PRS\sigma \rangle \langle P\pi R s | PRS'\sigma \rangle \langle P\pi 10 | P1P\pi \rangle \\ &- \sqrt{R(R+1)} \sum_{\pi, s} \langle P\pi R s | PRS\sigma \rangle \langle P\pi R s | PRS'\sigma \rangle \langle R s 10 | R1R s \rangle \end{aligned} \quad /107/$$

Vezessük be az

$$A(PRSS'\sigma) = \sqrt{P(P+1)} \sum_{\pi, s} \langle P\pi R s | PRS\sigma \rangle \langle P\pi R s | PRS'\sigma \rangle \langle P\pi 10 | P1P\pi \rangle \quad /108/$$

jelölést. Ekkor, figyelembevéve a Clebsch-Gordan-együtthetők  $\langle R s P\pi | RPS\sigma \rangle = (-1)^{R+P-S} \langle P\pi R s | PRS\sigma \rangle$  szimmetriatulajdonságát, írhatjuk

$$\langle PRS\sigma | Q_3 | PRS'\sigma \rangle = A(PRSS'\sigma) - (-1)^{S-S'} A(RPSS'\sigma). \quad /109/$$

Itt figyelembe vettük, hogy  $2(R+P-S)$  mindig páros szám. A /108/ összeg célszerűen az ismert

$$\begin{aligned} \sum_{A S E} \langle a\alpha b\beta | e\epsilon \rangle \langle e\epsilon d\delta | c\gamma \rangle \langle b\beta d\delta | f\psi \rangle &= \\ &= \hat{e} \hat{f} W(abcd; ef) \langle a\alpha f\psi | c\gamma \rangle \end{aligned} \quad /110/$$

összefüggés segítségével számítható ki, mely szerint három Clebsch-Gordan-együtthető szorzatának meghatározott momentumvetületekre vonatkozó összege lényegében egy W Racah-együtthető és egy Clebsch-Gordan-együtthető szorzata alakjában állítható elő. Itt a Clebsch-Gordan-együtthetőkra a szokásos rövidebb jelölést használtuk:  $\langle a\alpha b\beta | e\epsilon \rangle \equiv \langle a\alpha b\beta | a b e \epsilon \rangle$ , továbbá az  $\hat{e} = \sqrt{2e+1}$  jelölést alkalmaztuk. A /110/ összefüggést felhasználva

/108/-ből az

$$A(PRSS') = (-1)^{s'-s} \sqrt{P(P+1)} \hat{P} \hat{S}' \langle S' \sigma_1 0 | S \sigma \rangle W(1PSR; PS')$$

eredményre jutunk. Ezt /109/-be helyettesítve kapjuk:

$$\langle PRS \sigma | Q_3 | PRS' \sigma \rangle = \langle S' \sigma_1 0 | S \sigma \rangle \hat{S}' \left[ (-1)^{s'-s} \hat{P} \sqrt{P(P+1)} W(1PSR; PS') - \right. \\ \left. - \hat{R} \sqrt{R(R+1)} W(1RSP; RS') \right]$$

Az, hogy  $Q_3$  matrixeleme a  $\sigma$  kvázispin-vetülettől csak az  $\langle S' \sigma_1 0 | S \sigma \rangle$  Clebsch-Gordan-együtthatón keresztül függ, a Wigner-Eckart-tétel folyománya;  $Q_3$  ugyanis elsőrendű irreducibilis tenzor komponense.







