

原子核的配对壳模型及数值计算(I)*

赵玉民

陈金全

(东南大学物理系 南京 210018) (南京大学物理系 南京 210008)

陈冰青

(*W. K. Kellogg Radiation Lab, California Institute of Technology, Pasadena, CA91125 U. S. A.*)

1996-01-30 收稿

摘 要

原子核配对壳模型用“真实”的价质子对和价中子对构造组态空间的波函数,包含了单粒子能量项的贡献.在配对壳模型内,费米子动力学对称模型(FDSM)和相互作用玻色子模型(IBM)可以作为它的特殊情况.本文报道这一模型的思想、框架及其数值计算程序.

关键词 配对壳模型, 数值计算程序, “真实”集体对.

1 引 言

壳模型理论(SM)是描写低能原子核结构的基本出发点.由于当价核子数较多时壳模型的组态空间太大,所以具体分析原子核的低能集体态时要对SM的组态空间截断,其中一个重要的途径是考虑核子的配对效应,低能集体态是由同类核子配成的SD对相互作用的结果,这方面的工作很多,如破对近似(BPA)^[1]、Favored Pair模型(FPA)^[2]、费米子动力学对称模型(FDSM)^[3]和相互作用玻色子模型(IBM)^[4]等. IBM和FDSM的巨大成功使人们相信这一空间截断途径的合理性,然而从微观的角度来看,上述模型都有明显的欠缺,比如,这些模型中没有考虑单粒子能量项 H_0 对低能集体态性质的影响.众所周知, H_0 来源于平均场部分,是哈密顿量的主要成份,不能很好地考虑 H_0 的模型,原则上不能称之为“微观”理论.所以,尽管这些模型及其研究取得了很大进展,但如何从壳模型出发描写原子核的低能集体态的上述近似方法仍然停滞在唯象的水平上.又如,在上面的FPA计算中,非S对的数目小于3对,超出这个限制,耦合算子的对易式计算将变得太繁杂而不可行.

朝着微观地描写低能集体态方向迈出的重要一步是完全地考虑单粒子能量项的影

* 国家自然科学基金资助.

响. 最近 Otsuka 等用 OAI 映射研究 IBM 微观基础时开始探讨 H_0 的贡献^[5], 但是他们仅仅计算了几个核素且其详细结果至今未见报道. 此外, 冯达旋、吴成礼等讨论了在 FDSM 的特殊情况下 H_0 的影响, 而其一般情况并不清楚^[6].

文献[7, 8]研究了耦合算子的对易式问题并建立了广义维克定理, 为上述问题的解决开辟了新的途径. Pipenbring 等使用这一技术对单 j 壳情形给出了 4 对以内的重迭, 计算单体和两体矩阵元的显式, 他们还初步地进行了数值计算的尝试^[9], 其结果还远远不能与具体实验结果相比较. 本文利用广义维克定理, 从一个崭新的立足点上讨论原子核的集体态, 这就是原子核的配对壳模型理论^[10].

2 配对壳模型的框架

维克定理技术在物理学中得到了广泛的应用, 然而在算子出现耦合时计算很繁, 即先打开算符的耦合, 然后收缩对应的算子, 再把它们重新耦合起来. 最近陈首先给出了一个简单的可以递推的算法, 在这种算法中, 只需作一次收缩, 然后按确定的方式耦合起来^[7], 并由此推导了一对算子与 N 对算子间的对易关系^[8], 下文将看到, 有了这样的对易关系, 就可以求出多对基下哈密顿量和电磁跃迁算子等的矩阵元, 从而为配对壳模型建立了数学基础.

设某一大壳的粒子产生算符为 C_a^\dagger 和 C_b^\dagger (a 和 b 是某单粒子轨道的角动量), 定义非集体费米子对(角动量为 r)产生算符为 $(C_a^\dagger \times C_b^\dagger)^r$, 集体对产生算符为

$$A^r = \sum_{ab} y(abr) (C_a^\dagger \times C_b^\dagger)^r,$$

其中 $y(abr)$ 称为集体对的结构系数, 它有如下的置换对称性

$$y(abr) = -\theta(abr) y(abr) \equiv (-)^{a+b+r+1} y(abr). \quad (1)$$

N 个集体对产生算子定义为

$$\begin{aligned} A^\dagger(\tau J_N) &= \{ \dots [(A^{r_1} \times A^{r_2})^{J_2} \times A^{r_3}]^{J_3} \times \dots \times A^{r_N} \}^{J_N} \\ &= A^\dagger(r_1 r_2 \dots r_N, J_1 J_2 \dots J_N) \equiv A^{J_N \dagger}. \end{aligned} \quad (2)$$

其时间反演为

$$\begin{aligned} \tilde{A}^{J_N}(\tau J_N) &= \{ \dots [(\tilde{A}^{r_1} \times \tilde{A}^{r_2})^{J_2} \times \tilde{A}^{r_3}]^{J_3} \times \dots \times \tilde{A}^{r_N} \}^{J_N} \\ &= \tilde{A}(r_1 r_2 \dots r_N, J_1 J_2 \dots J_N) \equiv \tilde{A}^{J_N}. \end{aligned} \quad (3)$$

定义多对基 $|\tau J_N\rangle = A^\dagger(\tau J_N)|0\rangle$. 如果区分中子自由度(ν)和质子自由度(π), 那么原子核的截断子空间(多对基)为

$$\begin{aligned} |\tau J\rangle &= |\tau_\nu J_{N_\nu}, \tau_\pi J_{N_\pi}; J\rangle \\ &= |r_1^\nu r_2^\nu \dots r_{N_\nu}^\nu, J_1^\nu J_2^\nu \dots J_{N_\nu}^\nu; r_1^\pi r_2^\pi \dots r_{N_\pi}^\pi, J_1^\pi J_2^\pi \dots J_{N_\pi}^\pi; J\rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

上式中 N_ν 和 N_π 分别为价中子对数和价质子对数. 设系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_\nu + \hat{V}_\pi + \kappa \hat{Q}_\nu \cdot \hat{Q}_\pi, \quad (5)$$

其中 \hat{V}_ν 和 \hat{V}_π 分别为中子质子的同类价核子对间的相互作用; \hat{H}_0 为单粒子能量项

$$\hat{H}_0 = \sum_{j\nu} \epsilon_j \hat{n}_{j\nu} + \sum_{j\pi} \epsilon_j \hat{n}_{j\pi}. \quad (5.1)$$

其中 ε_{j_p} 、 ε_{j_n} 分别为质子和中子单粒子轨道的能量, n_{j_p} 、 n_{j_n} 为相应轨道粒子算符. \hat{Q}_v 和 \hat{Q}_π 为四极算符, 定义为

$$Q_\mu^2 = \sum_i \sqrt{4\pi} r_i^2 Y_{2\mu}(\theta_i, \phi_i),$$

对应的二次量子化的形式为

$$Q^2 = \sum_{cd} q(cd2) (C_c^\dagger \times \tilde{C}_d)^2,$$

这里

$$q(cd2) = C_{d\frac{-1}{2}}^{c\frac{-1}{2}} \frac{1 + (-)^{l_c+l_d}}{2} \langle Nl_c | r^2 | Nl_d \rangle, \quad (5.2)$$

l_c 和 l_d 为 c, d 单粒子态的轨道角动量,

$$\langle Nl_c | r^2 | Nl_d \rangle = r_0^2 \left\{ \begin{array}{ll} \left(N + \frac{3}{2} \right) & l_c = l_d \\ (N + l_d + 3)(N - l_d) & l_c = l_d + 2 \\ (N + l_d + 1)(N - l_d + 2) & l_c = l_d - 2 \\ 0 & \text{其它情况} \end{array} \right\}. \quad (5.3)$$

3 哈密顿量矩阵元的求解及对角化

首先单体和两体作用的矩阵元, 可以表达为多对基的重叠, 以 $\hat{Q}_v \cdot \hat{Q}_\pi$ 为例, 容易得到

$$\begin{aligned} & \langle \tau'_v J'_v, \tau'_\pi J'_\pi : J | \hat{Q}_v \cdot \hat{Q}_\pi | \tau_v J_v, \tau_\pi J_\pi : J \rangle \\ &= (-)^{J_v+J_\pi+J} \left\{ \begin{array}{ccc} J'_v & J'_\pi & J \\ J_\pi & J_v & 2 \end{array} \right\} \hat{J}_v \langle \tau'_v J'_v \| \hat{Q}_v \| \tau_v J_v \rangle \hat{J}_\pi \langle \tau'_\pi J'_\pi \| \hat{Q}_\pi \| \tau_\pi J_\pi \rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

本文的约化矩阵元的定义取 Bose 约定, 上式中的 $\langle \tau'_v J'_v \| \hat{Q}_v \| \tau_v J_v \rangle$ 可化为

$$(-)^{J'_v-J_v} \langle \tau'_v J'_v | [\hat{Q}_v, A^\dagger(\tau_v J_v)]^{J'_v} | 0 \rangle,$$

$[\hat{Q}_v, A^\dagger(\tau_v J_v)]^{J'_v}$ 的对易关系可以利用广义维克定理技术通过递归运算给出^[8], 并由此归结为多对基的重迭计算. 同样, 其它矩阵元的计算也可化为重迭的计算.

其次, N 对的多对基的重叠可以归结为 $N-1$ 对的多对基的重叠.

$$\begin{aligned} & \langle r'_1 \cdots r'_N, J'_1 \cdots J'_N | r_1 \cdots r_N, J_1 \cdots J_N \rangle \\ &= \delta_{J'_N, J_N} \frac{\hat{J}_{N-1}}{\hat{J}_N} \langle r'_1 \cdots r'_{N-1}, J'_1 \cdots J'_{N-1} | [\tilde{A}^{r'_N}, A^\dagger(r_1 \cdots r_N, J_1 \cdots J_N)]^{J'_N-1} | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

上式中的对易式是一对与 N 对的对易式, 其解析表达式已经给出^[8]. 这表明, N 对的重叠计算是可以递归的, 而一对和两对间的重叠是很简单而且是已知的, 因此 N 对多对基的重叠计算可以通过递归运算在计算机上实现. 这里需要说明, $[\tilde{A}^{r'_N}, A^\dagger(r_1 \cdots r_N, J_1 \cdots J_N)]^{J'_N-1}$

是另外的 $N-1$ 个集体对的复杂组合, 其中有些集体对不属于原来的 SD 子空间, 完全是“新”的集体对, 也就是说, 这样的集体对空间不是封闭的. 这是配对壳模型的特点之一, 也正因此, 配对壳模型的计算时间一般耗时较长.

4 计算程序及其检验

如上所述, 通过一系列复杂的递归方法, 在 UNIX 系统下实现多对基空间哈密顿量和电磁跃迁矩阵元的计算. 这一过程目前已被程序化^[11]. 关于给定集体对结构系数的多对基线性无关性的检验和非正交非归一基(如多对基)下哈密顿量矩阵的对角化问题见附录中的讨论. 该程序的检验过程如下:

首先, 如果截断上面的配对壳模型空间, 取集体的 SD 对(即要求上面的 $r_i=0$ 或 2), 就得到了 SD 配对壳模型(SDPM). 显然, 费米子动力学对称性模型(FDSM)是特殊情况下的 SDPM, 即 SDPM 自然地包含了 FDSM(只要把 FDSM 从 $k-i$ 基变换到通常的 $j-j$ 基就可看到这一点). 为了验算 N 对重叠和某些矩阵元的数值计算程序, 可以解析地求出 FDSM 在某些特殊情况下的重叠和矩阵元的数值, 计算程序再现了这些结果. 我们还把在 FDSM 极限下的 SDPM 程序输出的能谱和电磁跃迁结果与吴华等^[12]的 FDSM 程序结果作了比较, 两者在 10^{-5} 精度内一致. 我们还用下面的思想检验了程序:

选取哈密顿量形式为

$$H=H_0+g_\pi S_\pi^\dagger S_\pi+S_\nu^\dagger S_\nu+\kappa Q_\pi \cdot Q_\nu,$$

任意输入一组 SD 对的集体对结构系数计算, 然后把 D 对的结构系数扩大任意倍, 这样物理问题本身没有变化, 但多对基却发生了非常复杂的变化, 这是因为 SD 对的混合复杂所致. 最后发现两种情况下的输出完全一致.

5 配对壳模型与其它

从上面可以看到, 配对壳模型对于对结构系数未作任何限制, 对于相互作用的形式也未作具体规定, 这使得它非常灵活, 所以, 它可用于研究核结构理论多个重要的问题. 例如 IBM 的微观基础、以往研究中被忽略的单粒子能量项对低能集体态的贡献大小、FDSM 中的反常宇称态对集体态的贡献大小等, 再如 SD 子空间是否可以说明低能集体态、非集体的价核子对对于低能集体态的贡献等, 特别是在配对壳模型中, 哈密顿量自然地包含了单粒子能量项, 这在以往是很难做到的. 总之, 配对壳模型对于研究上述问题开辟了新的途径, 我们期待这些问题不久将有一些定量的结果.

感谢 F. Iachello 教授和徐躬耦教授的有益讨论以及吴式枢院士的多次鼓励和支持.

参 考 文 献

- [1] Y. K. Gambhir *et al.*, *Ann. Phys.*, **133**(1981)154.
 [2] K. T. Hecht *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A197**(1972)369.
 [3] C. L. Wu *et al.*, *Phys. Rev.*, **C36**(1987)1157.
 [4] F. Iachello, A. Arima, the Interacting Boson Model, Cambridge Univ. Press (1987).
 [5] T. Otsuka, *Nucl. Phys.*, **A557**(1993)531C; **A570**(1994)265C.
 [6] C. L. Wu, D. H. Feng *et al.*, *Phys. Rev.*, **C51**(1995)R1086.
 [7] J. Q. Chen *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A554**(1993)61.
 [8] J. Q. Chen, *Nucl. Phys.*, **A562**(1993)218.
 [9] Piepenbring *et al.*, *Nucl. Phys.*, **A586**(1995)396; **A586**(1995)413.
 [10] J. Q. Chen *et al.*, the Nuclear Pair Shell Model: even system, 预印本.
 [11] 赵玉民, A User Guide for the SDPM code, 东南大学学报, 待发表.
 [12] H. Wu *et al.*, *Phys. Rev.*, **C39**(1989)1066.

附录 正交归一与非正交非归一基

在应用量子力学处理低能束缚态问题时, 往往要先截断 Hilbert 空间, 然后在这个子空间中求哈密顿量的矩阵元, 再对角化求本征值与本征态. 根据具体问题的不同需要, 可以选择不同的基, 它可以是正交归一的, 也可以是非正交非归一的. 当然, 既然是基, 它的维数必须与 Hilbert 空间的维数一致, 并且是线性独立的. 显然, 正交归一基满足这种要求, 但当采用非正交非归一基时, 必须对此做一个检验.

设 n 维空间的 n 个矢量 $|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_n\rangle$, 将其组合为一个新的矢量 $|x\rangle = \alpha_1|\phi_1\rangle + \alpha_2|\phi_2\rangle + \dots + \alpha_n|\phi_n\rangle$, 这里 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 为 n 个常数. 显然, $|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_n\rangle$ 线性相关, 当且仅当 $|x\rangle = 0$ 而 $\alpha_i (i=1, 2, \dots, n)$ 不全为零时.

作内积 $\langle y|x\rangle = 0$, 其中 $|y\rangle = \alpha'_1|\phi_1\rangle + \alpha'_2|\phi_2\rangle + \dots + \alpha'_n|\phi_n\rangle$. 定义 $A_{ij} = \langle \phi_i|\phi_j\rangle$, $A = \{A_{ij}\}$ (矩阵), $\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}$. 很容易由 $\langle y|x\rangle = 0$ 构造 n 个方程, 在方程 i 中, 令 $\alpha'_i = 1$, 其它 $\alpha'_j = 0 (j \neq i)$, 即

$$\begin{aligned} \alpha'_1 A_{11} + \alpha'_2 A_{12} + \dots + \alpha'_n A_{1n} &= 0, \\ \alpha'_1 A_{21} + \alpha'_2 A_{22} + \dots + \alpha'_n A_{2n} &= 0, \\ &\dots \\ \alpha'_1 A_{n1} + \alpha'_2 A_{n2} + \dots + \alpha'_n A_{nn} &= 0, \end{aligned}$$

或 $A\alpha = \lambda\alpha = 0$, 而 $\lambda = 0$.

从而有

$$\begin{aligned} &|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle \text{ 线性相关.} \\ \Leftrightarrow &\alpha_i (i=1, 2, \dots, n) \text{ 不全为 } 0, \text{ 而 } |x\rangle = \sum_i \alpha_i |\phi_i\rangle = 0. \\ \Leftrightarrow &\lambda = 0 \text{ 是 } A = \{A_{ij}\} \text{ 的本征值.} \end{aligned}$$

即只要 $\lambda = 0$ 是 A_{ij} 构成的矩阵 A 的本征值, 就可以说 $|\phi_i\rangle (i=1, 2, \dots, n)$ 是线性相关的, 反之就是线性无关的.

下面是有一组基以及在该基下哈密顿量矩阵元后矩阵的对角化问题. 一般而言, 非正交非归一基(例如本文的多对基)下哈密顿量矩阵的对角化是比较复杂的. 目前还没有一个特别令人满意的数值方法. 而在正交归一基下哈密顿量矩阵是对称的, 可以用 Jacobi 方法很快对角化, 由此可以设计一个简便方法解决上述问题. 注意到 $\{A_{ij}\} = \{\langle \phi_i | \phi_j \rangle\}$ 矩阵是对称的, 可以用 Jacobi 方法把它对角化, 设其第 j 个本征值为 $\lambda_j (\neq 0)$, 对应本征矢量为 $B_{ij} (i=1, 2, \dots, n)$. 令 $B'_{ij} = \frac{B_{ij}}{\sqrt{|\lambda_j|}}$, 可以证明 $|l_j\rangle = \sum_i B'_{ij} |\phi_i\rangle$ 是一个新的正交归一基. 这样用两次 Jacobi 方法既判断了一组非正交非归一矢量是否线性无关, 又解决了多对基下哈密顿量矩阵的对角化问题.

Nuclear Pair Shell Model and Its Numerical Calculation (I)

Zhao Yumin

(Department of Physics, Southeast University, Nanjing 210018)

Chen Jinquan

(Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210008)

Chen Bingqing

(W. K. Kellogg Radiation Lab, California Institute of Technology, Pasadena, CA91125 U. S. A.)

Received 30 January 1996

Abstract

In the nuclear pair shell model (NPSM), it is found that the "realistic" pairs of the valence proton and valence neutron can be used as the building blocks for many-body wavefunction, and the contribution from particle energy term H_0 can be taken into account naturally. It is also found that the NPSM is reduced to the fermion dynamical symmetry model and the interacting boson model in some special cases.

Key words nuclear pair shell model, numerical code, "realistic" collective pair.