

文章编号: 1007-4627(2014)04-0438-06

基于关联基的壳模型截断计算

焦龙飞, 许甫荣

(北京大学物理学院核物理与核技术国家重点实验室, 北京 100871)

摘要: 提出了一种新的用于壳模型截断计算的基矢空间的构建方法, 即关联基的方法。关联基是利用壳模型中每个粒子数分布下哈密顿量的本征态作为基矢。在此基矢之上, 可以很自然地通过考虑能量相对较低的关联基矢进行相应的截断计算。当所有的关联基矢都被考虑时, 计算结果回到一般 jj 耦合给出的结果。最后, 对关联基下壳模型的计算与标准的壳模型计算进行了比较, 计算结果表明, 关联基下壳模型能量和波函数有着良好的收敛性, 同时表明关联基计算的有效性。

关键词: 关联基; 壳模型; 截断计算

中图分类号: O571.2 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.31.04.438

1 引言

相互作用的壳模型计算, 长期以来在描述核子多体系统的性质上取得了很大成功。壳模型组态相互作用的图像对于理解轻核区原子核低激发态提供了很大帮助。通常壳模型的模型空间包含了费米面附近的几条轨道, 在此基础上原子核的波函数最终可以写成所有可能的反对称 Slater 行列式的线性叠加。因此很多相关的研究也将相互作用壳模型称作全空间组态相互作用方法。同时这种方法在其他量子多体问题的描述上也有广泛的适用, 比如在量子化学和原子分子物理中, 也利用组态相互作用的图像描述能谱结构^[1]。

但是组态相互作用描述的体系在实际问题的计算中总是要面临处理大规模矩阵对角化的问题^[2-10]。现代一些处理大规模组态相互作用的算法已经能够达到 10^{10} 维矩阵的计算。然而在实际的应用中仍然会受到限制, 因为组态空间的维数随着粒子数和轨道数的增加而迅速地增长(呈二项式关系), 对于给定的模型空间, 当粒子数目增加时, 计算量很快就会超过预期的计算能力。因此人们发展了很多基于多体微扰理论计算的截断方法, 这些方法旨在相对小的计算量下得到可靠的结果。其中具有代表性的方法包括蒙特卡罗采样法^[11-15]、密度矩阵重整化^[16-19]以及一些其他

的用于截断计算方法^[20-23], 文献[1, 20-21]给出了这些方法的具体描述。

通常壳模型计算的基本假设是在一阶近似下, 每个核子可以相互独立地在一个由其他所有核子相互作用形成的平均场里面运动, 这个平均场可以看做是复杂的核子相互作用最简单的一种近似。在此基础上, 更为复杂的核结构可认为是由最外层的一些核子(即费米面附近的价核子)之间的相互作用所产生的。当然, 一般假设这种相互作用是相对微弱的并且通常只考虑两体相互作用的情况。随着核子数的增多这种组态之间的关联变得十分复杂, 由此就会带来巨大的计算量。在本文中, 我们提出一种新的用于壳模型截断计算的基矢生成方法。这种方法在生成基矢和截断计算时, 主要包括两部分的操作。首先, 我们通过对角化每个粒子数分布下哈密顿量矩阵得到关联基基矢。其次, 不同分布下非对角部分的相互作用可以通过在关联基下重建整个系统哈密顿量矩阵考虑进来。我们利用关联基的方法在 sd 空间计算 ^{28}Si 低位态能谱作为对该方法有效性的检验。同时与标准壳模型的计算结果进行比较和讨论。

2 关联基选取与截断计算

一般而言, 壳模型计算在构建相互作用组态空间

收稿日期: 2014-05-23; 修改日期: 2014-06-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11235001, 11320101004)

作者简介: 焦龙飞(1988-), 男, 甘肃岷县人, 硕士, 从事原子核壳模型研究; E-mail: l.f.jiao@pku.edu.cn

的时候, 第一步是将组态空间按照核子数目的“分布”进行区分。所谓分布是指给定核子数目和轨道时所有可能的组合, 因此整个组态空间可以划分成许多不同的分布。在每个分布下基矢波函数可以通过 jj 耦合的方式或者非耦合的 M-scheme 构建得到。最早的能够比较有效地处理对角化问题的壳模型计算是在 jj 耦合的表象下开展的^[24], 之后 Whitehead^[25] 组的计算首次引入了 M-scheme 表象。由于用 M-scheme 表示壳模型组态的数据结构与计算机存储原理一致, 同时利用简单的位操作就能实现很多重要的计算(如产生湮灭算符的操作), 从而避免了在 jj 耦合表象下计算多体波函数组分系数(coefficient of fractional), 从而很大程度上提升了计算的效率。因此现代多数壳模型计算程序都是在 M-scheme 表象下进行的。但是, 在 M-scheme 下仅有 J_z 和 T_z 是好的量子数, 同时 M-scheme 下得到的哈密顿量矩阵维数很大。因此, 由于 M-scheme 下没有的基矢 J 不是好的量子数, 从而在 M-scheme 下进行截断计算比较困难。著名的 Oxbash 壳模型程序^[26] 以及后来由 Oxbash 发展的程序^[3-6] 则是采用混合了 M-scheme 表象与 jj 耦合表象各自的优点发展而来, 即首先在 M-scheme 下建立基矢后通过一个投影的过程恢复 $J(T)$ 的对称性^[27]。由于对称性的恢复从而使哈密顿量矩阵的维数能够降低, 然而投影过程本身是非常消耗计算量的, 同时也存在数值精度的问题^[4-5]。

在本文中构建关联基基矢的过程事实上十分简洁。首先, 我们还是从通常的 M-scheme 表象出发, 然后关联基基矢可以通过对角化每个分布下的哈密顿量得到。即关联基基矢是通过选取每个分布下哈密顿量矩阵的本征矢得到的。这样, 由于壳模型哈密顿量本身的对称性使得关联基基矢有着好的角动量量子数。换句话说, 如果我们认为哈密顿量 H 本身作为一个“投影算符”, 那么上述方法得到的有确定量子数的态的过程和通常壳模型角动量投影的操作是一致的^[27]。但是需要强调的是, 在当前的关联基基矢下由于使用的哈密顿量本身的对称性, 这使得通过这种方法得到的基矢已经包含了相互作用。从而相较于一般投影的过程, 上述方法得到的基矢有更明确的物理含义。这是关联基基矢和一般投影方法^[27] 得到的有确定角动量的基矢之间一个根本的差异。因此在关联

基基矢上进行截断计算就显得更加合理。

在构建基矢的过程中, 如果随机选取一组 M-scheme 基矢作为初始基矢, 那么对于每个分布下对角化哈密顿量后将会得到一组本征态。这些本征态虽然有好的量子数 J , 但是不同的 J 量子数的态都会出现。而在壳模型计算中往往只针对某个特定的 J 去构建总的哈密顿量矩阵, 因此在实际的计算中, 我们可以在基矢中挑选出指定的 J 的态。但是更有效的做法是我们可以选择在投影时就选取一个有固定 J 量子数的态作为起始波函数, 这样当用 Lanczos 方法对角化后就会得到一有着相同 J 量子数的关联基矢。在基矢建立之后就可以在关联基下重新得到整个组态空间的哈密顿量矩阵。这里需说明的是, 由于关联基基矢的选取此时在每个分布下哈密顿量矩阵已经是对角矩阵, 而非对角元部分仅仅包含不同分布之间的相互作用, 而最终的波函数即可以通过对角化关联基下整体的哈密顿量矩阵得到。

在关联基基矢之上可以很自然地引入一种截断计算的方案。由于此时哈密顿量矩阵只有不同分布之间的相互作用, 而这些相互作用相比于对角元来说是非常弱的。因此我们认为那些有着最低的非微扰能量的组态对最终波函数的贡献将是显著的。这也符合一般多体微扰理论的精神。所以这也就意味着在关联基下进行截断计算时, 我们可以在组态空间中移除那些有着相对较高能量的组态。每个组态 ψ_i 对于最终波函数的贡献可以通过式(1)给出的判据进行评估:

$$\chi_{ic} = \frac{|\langle \psi_i | H | \psi_c \rangle|}{\epsilon_i - \epsilon_c} \quad (1)$$

此处 ψ_c 是选取的参考态; ϵ_i 是非微扰能量, 即关联基下的某个组态对应的哈密顿量矩阵对角元。一般可以选取有着最低的非微扰能量的组态(ϵ_c)。在 Important truncation^[20-21] 方法中也是用这种微扰判据去评估一个组态的重要性。不同之处在于 Important truncation 方法是对于 M-scheme 下的组态进行截断, 没有保证 J 是好的量子数。但在实际的计算情况下, 非对角元 $\langle \psi_i | H | \psi_c \rangle$ (不同分布之间的相互作用) 一般很少大于 1 MeV。因此式(1)中不同组态的差异主要来自分母的贡献。所以一种比较实用的办法是可以通过直接计算式(2)来选取特定的组态,

$$\Delta\epsilon_{ic} = \epsilon_i - \epsilon_c. \quad (2)$$

这样一个给定的关联强度 χ_{ic} 或者非微扰能量差异 $\Delta\epsilon_{ic}$ 就刻画了组态空间中关联最弱的态之间的差异, 所以 χ_{ic} 或者 $\Delta\epsilon_{ic}$ 就表征了一个截断的组态空间的大小。如果我们取一个足够小的 χ_{ic} 或者足够大的 $\Delta\epsilon_{ic}$, 这样组态空间中事实上就没有包含任何截断, 所有的组态都得以保留。这种情况将给出和一般 jj 耦合表象下相同的结果。

Lanczos 对角化方法是壳模型中常用的一种能高效地对角化矩阵, 并且得到最低(或最高)本征值和相应的本征态的方法。在实际的计算中, 事实上也可以通过预先给定一个合理的截断 χ_{ic} 或者 $\Delta\epsilon_{ic}$ 用来作为 Lanczos 计算迭代的判据。而在通常一般的壳模型计算中^[28], 通常是采用通过粒子-空穴激发的顺序来刻画组态空间, 基于此的截断计算会舍弃那些在占据较高的单粒子轨道的分布。这种截断仅仅是从单粒子能量的角度出发的, 而忽略的一个分布之内的相互作用的影响。但是往往这种单粒子能量较高的组态有可能会通过一个分布之内的相互作用使其对最终的基态或低激发态波函数产生贡献。比如在所谓“反转岛”(质量数 $A \sim 30$, 中子数 $N \sim 20$) 附近的区域, $f_{7/2}$ 轨道和 sd 区域相互作用非常强, 最终导致单粒子轨道能量的交叉。也就是说反转岛的一些核子基态

波函数中 $f_{7/2}$ 轨道所占的比重很大, 但是从粒子-空穴激发的角度看一些含有 $f_{7/2}$ 的组态可能会由于单粒子能相对较高从而在截断计算的一开始就被舍去了。而在关联基下的截断计算, 则是通过 χ_{ic} 或者 $\Delta\epsilon_{ic}$ 给出的组态能量来决定截断的, 组态能量本身就已经包含了一个分布之内的相互作用。因此关联基下尽可能地包含那些对基态和低激发态重要的组态, 从而使得此时的截断计算更为合理。

3 计算结果与讨论

为了检验关联基下壳模型截断计算的有效性和收敛性, 我们计算了 sd 核区的 ^{28}Si 并且和标准的 jj 耦合下的壳模型计算进行了比较。因为我们的重点是讨论微扰方法本身而非相互作用, 因此在计算汇总使用了 sd 区相对普适的相互作用 USDB。同时 ^{28}Si 是 sd 区域刚好占据一半轨道的核子, 它包含了最多的组态。图1给出了计算得到的 ^{28}Si 低位态能量随着模型空间截断的大小变化。需要注意的是, 为了便于查看截断计算的收敛性, 在图1中的横轴不是线性变化的。可以看到在关联基下的计算得到的最低几条能级都有很好的收敛性。事实上, 当截断空间取到总模型空间大小的一半时就已经能给出很好的结果, 这样大小的截断可以很大程度上减小壳模型的计算量。

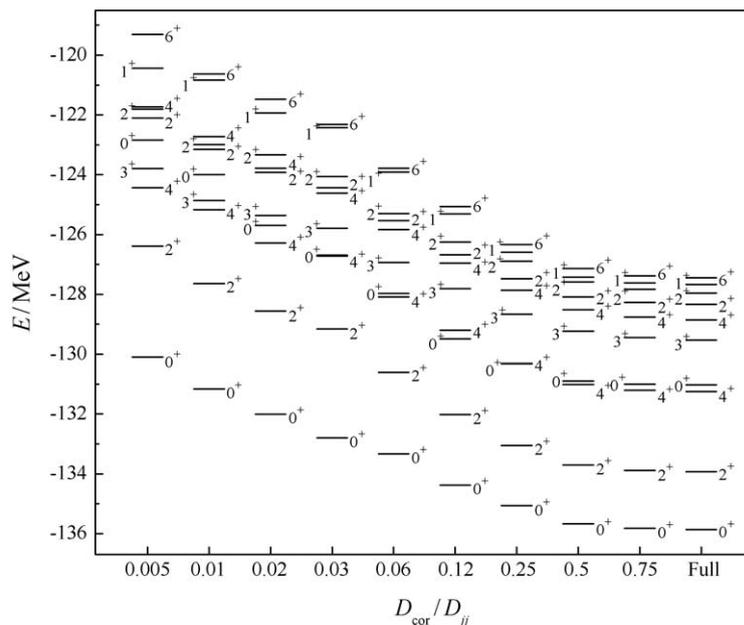


图 1 ^{28}Si 低激发态在不同截断尺度下的收敛情况

D_{cor} 和 D_{jj} 分别表示在关联基下截断的矩阵的维数和 jj 耦合表象下全空间的维数。

为了进一步分析, 我们通过计算截断空间波函数和全空间波函数之间的内积来检验收敛性。在图 2 中, 给出了 ^{28}Si 最低的 0^+ , 2^+ , 4^+ 和 6^+ 态波函数内积随着截断空间大小的变化。以 0^+ 为例, 当截断空间和全空间波函数内积几乎为 1 的时候, 关联基基矢的维数也只有 M-scheme 下维数的 2%。换句话说, 关联基计算是从全 M-scheme 空间找出了最重要的态, 从而使得能截断计算能够具有很好的收敛性。另一方面, 之所以相对少的组态就能描述好波函数可以由图 3 给出的结果说明。壳模型计算的最终波函数是一系列组态波函数的线性叠加的。图 3 中展示了每个组态对于

最终 ^{28}Si 基态波函数贡献的振幅(波函数展开系数)。我们看到在关联基下, 不同的组态对最终波函数的贡献是随着其组态能而指数衰减的。那些有着较低能量的组态几乎已经占了波函数的全部贡献, 这也就使得我们能给出一个合理的截断之后舍去高能量部分后没有丢失波函数的重要组分, 从而保证了截断计算能够给出比较好的结果。而在 M-scheme 表象下, 组态波函数的振幅几乎呈随机分布(图 3(b)), 组态能量和其振幅贡献也没有明确的关系。为了能够得到精确的结果, M-scheme 下的计算只能包含所有的组态, 因此得到矩阵维数很大。

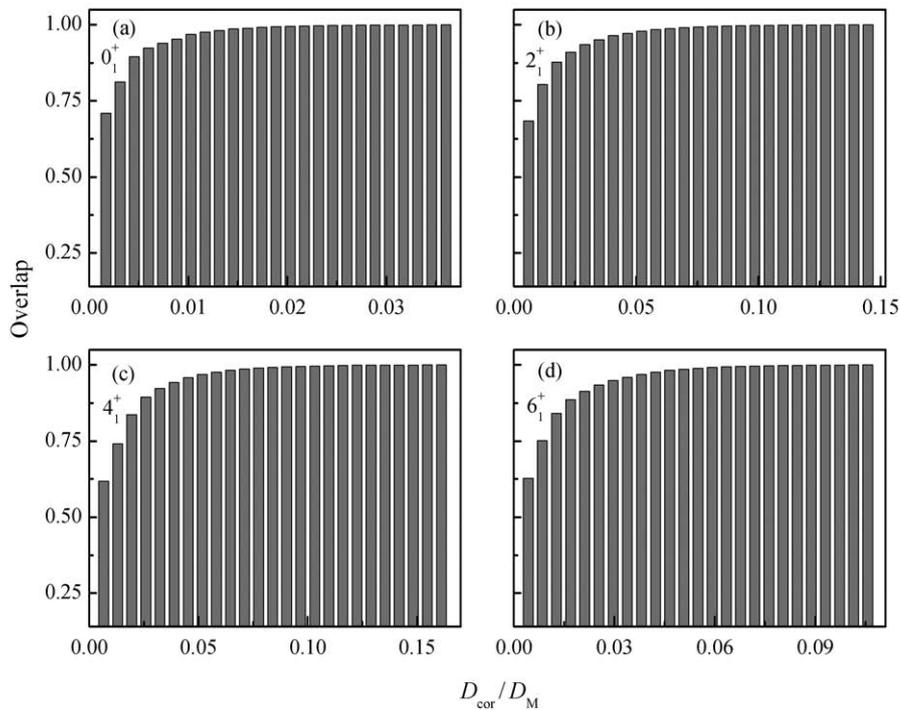


图 2 ^{28}Si 最低的 0_1^+ , 2_1^+ , 4_1^+ , 6_1^+ 在截断空间和全空间波函数之间的内积随着截断空间的变化

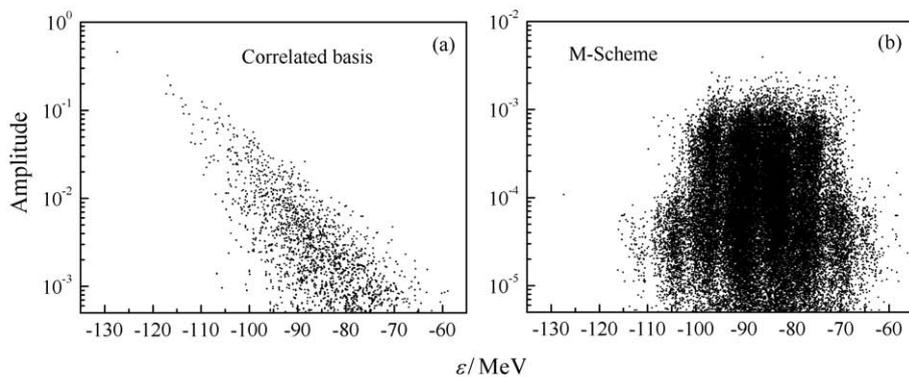


图 3 ^{28}Si 基态波函数在 M-scheme 和关联基振幅的分布。其中 ϵ 表示非微扰能量

最后为了说明本文中采用的 $\Delta\epsilon_{ic}$ 作为选取组态的判据的有效性,我们在图 4 中比较了通过简单的用组态的非微扰能量作为截断判据 $\Delta\epsilon_{ic}$ 和用组态的相互作用强度作为判据 χ_{ic} 计算收敛性的比较。图 4 中三角表示的用 χ_{ic} 作为截断判据的计算结果,事实上代表了在一个模型空间下可以做到的最好的截断计算,而我们看到由简单的 $\Delta\epsilon_{ic}$ (图中用圆点表示) 的结果在发生收敛时很快地接近了理想的情况。由于以 χ_{ic} 为截断判据的计算较为耗时(由于要涉及所有组态能量的比较),而以 $\Delta\epsilon_{ic}$ 作为截断判据的计算则非常高效,同时又有良好的收敛性。因此,这也就意味着我们在实际计算中用 $\Delta\epsilon_{ic}$ 作为截断判据就已经足够了。

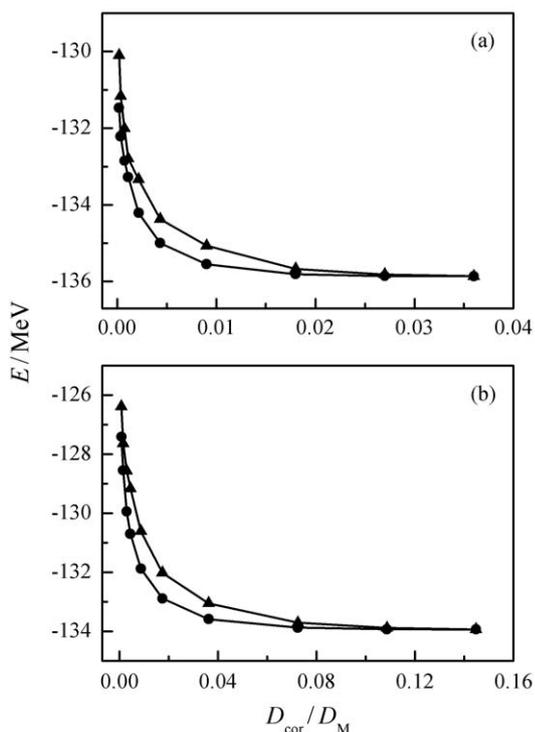


图 4 在关联基下通过 $\Delta\epsilon_{ic}$ (图中三角) 和 χ_{ic} (图中圆点) 的截断方法进行计算的比较

4 总结

本文我们引入了关联基的方法,建立了壳模型基矢,并且在关联基矢的基础上建立了一种有效的截断计算的方法。总结起来,首先通过在每个分布下对角化哈密顿量矩阵得到具有好的角动量的关联基。然后,这个系统的哈密顿量可以在关联基矢的表象下得以重建。由于关联基已经包含了分布之内的相互作用,

这使得我们可以根据组态能量评估每个基矢的重要性。这也就自然地提供了一种通过设定某个能量截断来简化模型空间的办法。关联基下截断和标准壳模型的计算比较结果说明了这种方法的有效性。

致谢 感谢瑞典皇家理工学院(KTH)元冲博士的讨论与指导。

参考文献:

- [1] SHERRILL C D, SCHAEFER H F. *Adv Quantum Chem*, 1999, **34**: 143.
- [2] MIZUSAKI T, KANEKO K, HONMA M, *et al.* *Phys Rev C*, 2010, **82**: 024310.
- [3] TOIVANEN J. arXiv: nucl-th/0610028.
- [4] QI C, XU F R. *Chin Phys C*, 2008, **32**, (S2): 112.
- [5] QI C, XU F R. arXiv:nucl-th/0701036.
- [6] VARY J P, MARIS P, NG E, *et al.* *J Phys: Conference Series*, 2009, **180**: 012083.
- [7] MARIS P, VARY J P, NAVRATIL P, *et al.* *Phys Rev Lett*, 2011, **106**: 202502.
- [8] KLEINSCHMIDT M, TATCHEN J, MARIAN C M. *J Chem Phys*, 2006, **124**: 124101.
- [9] CAURIER E, MARTINEZ-PINEDO G, NOWACKI F, *et al.* *Rev Mod Phys*, 2005, **77**: 427.
- [10] CAURIER E, NOWACKI F. *Acta Phys Pol B*, 1999, **30**: 705.
- [11] SHIMIZU N, ABE T, TSUNODA Y, *et al.* arXiv: 1207.4554.
- [12] TSUNODA Y, OTSUKA T, SHIMIZU N, *et al.* arXiv: 1309.5851.
- [13] SHIMIZU N, MIZUSAKI T, KANEKO K. *Phys Lett B*, 2013, **723**: 251.
- [14] BONNARD J, JUILLET O. *Phys Rev Lett*, 2013, **111**: 012502.
- [15] BOOTH G H, THOM A J W, ALAVI A. *J Chem Phys*, 2009, **131**: 054106.
- [16] PAPPENBROCK T, DEAN D J. *J Phys G Nucl Part Phys*, 2005, **31**: S1377.
- [17] THAKUR B, PITTEL S, SANDULESCU N. *Phys Rev C*, 2008, **78**: 041303.
- [18] DUKELSKY J, PITTEL S. *Rep Prog Phys*, 2004, **67**: 513.
- [19] PITTEL S, SANDULESCU N. *Phys Rev C*, 2006, **73**: 014301(R).
- [20] ROTH R, NAVRATIL P. *Phys Rev Lett*, 2007, **99**: 092501;
- [21] ROTH R. *Phys Rev C*, 2009, **79**: 064326.
- [22] KRUSE M K G, JURGENSON E D, NAVRATIL P, *et al.* *Phys Rev C*, 2013, **87**: 044301.

- [23] BIANCO D, ANDREOZZI F, IUDICE N L, *et al.* Phys Rev C, 2012, **85**: 034332.
- [24] FRENCH J B, HALBERT E C, MCGRORY J B, *et al.* Adv Nucl Phys, 1969, **3**: 193.
- [25] WHITEHEAD R R, WATT A, COLE B J, *et al.* Adv Nucl Phys, 1977, **9**: 123.
- [26] ETCHEGOYEN A, RAE W D M, GODWIN N S, *et al.* MSU NSCL Report, 1985: 524.
- [27] LODWIN P O. Rev Mod Phys 1964, **36**: 966.
- [28] HOROI M, BROWN B A, OTSUKA T, *et al.* Phys Rev C, 2006, **73**: 061305.

Shell-model Truncated Calculation in Correlated Basis

JIAO Longfei¹⁾, XU Furong

(*State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, School of Physics,
Peking University, Beijing 100871, China*)

Abstract: We present a new basis selection algorithm for truncated shell model calculations. In this method the basis is taken as the correlated eigenvectors of the Hamiltonian in each shell-model partition. A truncation scheme is established by naturally taking the low-lying correlated basis vectors in the different partitions, which is equivalent to the j - j coupling scheme of the shell model when all correlated basis vectors are considered. The calculations are compared with standard shell model calculations. The convergence properties of the correlated basis method are also discussed. The calculation results show that one can get both good convergence of energies and wave functions, which indicate the effectiveness of correlated basis shell-model calculation.

Key words: shell model; truncation scheme; correlated basis

Received date: 23 May 2014; **Revised date:** 10 Jun. 2014

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (11235001, 11320101004)

1) E-mail: l.f.jiao@pku.edu.cn.

<http://www.npr.ac.cn>