

“核结构计算 Tübingen 方法”的综述

郑仁蓉 林辛未

(西南师大物理系 重庆 630715)

摘要 本文简要综述了“核结构计算 Tübingen 系列方法”的内容、计算结果举例、优缺点及展望。

关键词 核结构计算, 准粒子变换, 变分法.

1 引言

“核物理动态”1991年第4期曾发表了一篇 J. P. Elliott 写的“壳模型综述”的译文^[1]. 该文在 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 方法中, 专门提到了德国 Tübingen 大学在这方面的工 作使 HFB 方法得以发展. 本文想就这个问题, 简要综述一下“核结构计算的 Tübingen 方法”. 目前, 该方法已有较大发展, 其中一小部份综述, 就长达 50 页^[2]. 我们在此抽出其精华加以 简述, 并对其中后期的发展作以补充综述.

HFB 方法的基本思想是, 用最一般的准 粒子变换—HFB 变换来构成尝试波函数, 通 过变分选取最优化的组态和最低的能级. 由于 HFB 波函数兼有对关联和核形变两种核结构 的最其本效应, 而角动量和粒子数等不守恒特 征可以用限制条件或投影方法来补救, 这种方 法显得十分诱人. Tübingen 核结构研究组从 80 年代初就开始从事这方面的工作. 他们的 主要贡献在于将以上思想逐渐发展成一系列 的计算方法, 并用于实际核的计算, 且取得了 令人鼓舞的结果. 为实现大模型空间的核结构 计算, 指出了一条可行之路.

2 系列计算方法

核结构计算 Tübingen 方法分两个系列, 即 Monster (Model for handling many number- and spin- projected two quasiparticle excitations

with realistic interactions and model spaces) 系列 和 Vampir (Variation after mean field projection in realistic model spaces.) 系列. 两系列在应用 上有时又有交叉.

2.1 Monster 系列

2.1.1 Monster (HFB)

对所选择的单粒子基矢的产生和消灭算 符 $(C_i^\dagger, C_i; i=1, 2, \dots, M)$ 作 HFB 准 粒子变换

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger &= \sum_{i=1}^M (A_{i\alpha} C_i^\dagger + B_{i\alpha} C_i) \\ a_\alpha &= \sum_{i=1}^M (A_{i\alpha}^* C_i + B_{i\alpha}^* C_i^\dagger) \end{aligned} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, M) \quad (1)$$

HFB 准粒子真空态为

$$|F\rangle = \prod_{\alpha} a_{\alpha}(F) |0\rangle \quad (2)$$

严格地讲, 描述偶 A 核的完备基矢空间 应包括真空态, 两准 粒子态, 四准 粒子态 …… 等所有偶准粒子态的基矢. 在 Monster (HFB) 方法中, 则只取最重要的准粒子真空态 和两准粒子态

$$|F\rangle, \quad a_{\alpha}^{\dagger}(F) a_{\beta}^{\dagger}(F) |F\rangle \quad (\alpha < \beta = 1, \dots, M) \quad (3)$$

来构成模型空间.

描述奇 A 核的完备的准粒子基矢空间由 所有奇准粒子激发态组成, 在 Monster (HFB) 方法中则只取单准粒子态

$$a_{\alpha}^{\dagger}(F) |F\rangle \quad \alpha = 1, \dots, M \quad (4)$$

来展开模型空间.

变换式(1)的系数 A, B 由标准的 HFB 变分法

$$\delta \langle F | H - \sum \lambda_r N_r | F \rangle = 0 \quad (5)$$

来确定. 其中 $N_r (\tau=n, \pi)$ 为 neutron 数和质子数.

为了得到符合物理意义的解, 可以将(5)式的解 $|F\rangle$ 用投影方法来对偶 A 核组态(3) (或奇 A 核组态(4))破缺的对称性进行修补, 得到一组满足对称性要求的基矢

$$\hat{P}(A, T_z, I, M; k) |F\rangle,$$

$$\hat{P}(A, T_z, I, M; k) a_\alpha^+ (F) a_\beta^+ (F) |F\rangle$$

$$(k = -I, \dots, +I, \alpha < \beta = 1, \dots, M) \quad (6)$$

或(对奇 A 核)

$$\hat{P}(A, T_z, I, M; k) a_\alpha^+ (F) |F\rangle$$

$$(k = -I, \dots, +I, \alpha = 1, \dots, M) \quad (7)$$

其中 $\hat{P}(A, T_z, I, M; k)$ 为粒子数(A)、电荷数($T_z = (N-Z)/2$)和角动量($I, M; K$)投影算符的乘积.

将哈密顿算符在组态(6)或(7)中平均值对混合系数 f 变分, 可得一推广的本征值方程

$$(H - EN)f = 0 \quad (8)$$

其中 N 为组态中各基矢间内积所构成的迭加矩阵. 为保证哈密顿算符对角化以后所得到的本征态

$$|\psi^{AT_z I}; a\rangle = \sum_k \{ \hat{P} |F\rangle f_k^{AT_z I} + \sum_{\alpha < \beta} \hat{P} a_\alpha^+ a_\beta^+ |F\rangle f_{k, \alpha, \beta}^{AT_z I} \} \quad (9)$$

对奇 A 核为:

$$|\psi^{AT_z I}; a\rangle = \sum_k \left(\sum_\alpha \hat{P} a_\alpha^+ |F\rangle f_{k, \alpha}^{AT_z I} \right) \quad (10)$$

正交归一, 还要求 $f^+ N f = 1$.

概括地讲, Monster (HFB) 方法取各核子的动能和两体有效相互作用势构成哈密顿 H , 并将其在模型空间(6)或(7)中对角化, 则可得到所研究核的能谱和相应的波函数.

为了简化数字运算, 在 HFB 变换上硬性加进了四个限制条件: (1) 质子、中子态不混合, (2) 正负宇称态不混合, (3) 轴对称 (即要求准粒子组态是角动量第三分量算符 \hat{I}_z 的本征态), (4) HFB 变换系数取为实数.

实际计算表明, 这些限制条件大大简化了

数字运算, 却仍不失去核的主要物理性质, (详见图 1), 实现了壳模型无法实现的中重核的计算.

2.1.2 Monster (Vampir)

由于 Monster (HFB) 的尝试波函数的雏形取自 HFB 方法的解, 由这个态所决定的平均场对所有角动量的态都相同, 这对于结构随角动量 I 有较大变化的态及很高自旋态的描述就不太适合, 而采用扩大基矢空间(6)或(7)的办法, 由于计算量的大增, 又不太现实. 为了解决这个矛盾, 用 Vampir 解 (下面要详述) 来代替 HFB 解, 以后步骤均保持不变, 就给出了 Monster (Vampir) 方法.

2.2 Vampir 系列

在这个系列中包括 Vampir, 描述激发态的 Excited Vampir; 根据 HFB 变换系数取实数或复数还可以分为实数 (Real) Vampir 和复数 (Complex) Vampir; 若尝试波函数不只是取一个 HFB 行列式, 而是取几个行列式的迭加, 则又可以派生出“几个行列式 (Few Determinants) 的 Vampir”, 简称 Fed Vampir 或描述激发态的 Excited Fed Vampir. 在 Vampir 系列中, 体系哈密顿算符的构造与 Monster 相同.

2.2.1 Vampir, Real Vampir 和 Complex Vampir

尝试波函数如先对 HFB 真空(2)取投影, 又对 K 求和, 即

$$|\xi; SM\rangle = \sum_{k=-I}^I P(A, T_z, I, M; K) |F\rangle f_k = \sum_k |F_k\rangle f_k \quad (11)$$

其中 $S = AT_z I$ 表示所有恢复后的对称性的总和. 将能量平均值 $E = \langle \xi; SM | \hat{H} | \xi; SM \rangle$ 对混合系数 f_k 变分, 得与(8)式形式相同的推广的本征值方程,

$$\sum_{k=-I}^I \{ H_{kk} - EN \} f_k = 0 \quad (12)$$

其中 $H_{kk} = \langle F_k | \hat{H} | F_k \rangle$; $N_{kk} = \langle F_k | F_k \rangle$. 式(12)解的正交归一性, 由 $f^+ N f = 1$ 来保证.

对变换 HFB 的变分, 可以根据 Thouless 原理

$$|F_d\rangle = C(d) \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} d_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger}(F_0) a_{\beta}^{\dagger}(F_0)\right\} |F_0\rangle \quad (13)$$

将对(1)中系数 A, B 的变分变为对参数 $d_{\alpha\beta}$ 的变分. 取方程(12)式的最低能量解 $E_1(d, f)$ 对 $d_{\alpha\beta}$ 变分, 得变分方程组为

$$\frac{\partial E_1(d, f)}{\partial d_{\alpha\beta}} = 0 \quad (14)$$

$$(\alpha = 1, 2, \dots, M-1, \beta = \alpha + 1, \alpha + 2, \dots, M)$$

同时满足(12), (14)方程的解, 即由此给出的 HFB 变换 F_1 和混合系数 f , 还可以相差一个么正变换. 这可以对角化, 由 F_1 所确定的准粒子变换后的哈密顿算符中的 $H''(F_1)$ 部分, 来确定所允许的么正变换.

在具体数字运算时, 如对 HFB 变换加上五个限制条件: (1)时间反演不变(即成对粒子中的每一个粒子被占有的几率相同), (2)轴对称, (3)不允许质子、中子态混合, (4)不允许不同宇称的态混合, (5)只允许实数 HFB 变换系数, 则可将这样的 Vampir 称为实数 Vampir. 它可用于描述偶偶核的正宇称、偶角动量态. 若去掉以上(3)、(4)、(5)条限制, 只保留时间反演不变和轴对称两条, 则称为复数 Vampir 方法. 它可以描述偶偶核和奇奇核的任意角动量和任意宇称的态.

2. 2. 2 Fed Vampir(FV)

取得上述 Vampir 解以后, 在固定已有解变换 F_1 的前提下, 将尝试波函数后面再加上一个 HFB 行列式, 对第二个 HFB 变换 F_2 以及所有的混合系数(共计 $2 \times (2I + 1)$ 个)变分, 还可改进所得能级和波函数... 这种依次加进 HFB 行列式的方法, 实际上是以 HFB 行列式的线性组合作为尝试波函数, 所以叫 Fed Vampir 方法. 它也可按 2. 2. 1 节中限制条件的多少, 分为实的和复的两种. 计算表明, 一个或少数复数 HFB 行列式, 可以得到多个 HFB 实数行列式才能得到的解(见图 4). 这说明复数 HFB 尝试波函数包括了比实数 HFB 波函数多得多的关联作用. 多个行列式变分对结果

的改进也说明, 不同能级间最重要的关联作用与通常认识不同, 它并非完全按本征态的能级差由小到大排列^[7].

2. 2. 3 Excited Fed Vampir(EFV)

若用 Gram-Schmidt 正交方法, 将已得出的解排除在尝试波函数的变分空间之外, 按以上两节的步骤就可以得到 Excited Fed Vampir 方法, 用以描述次晕带态以及更高的激发态.

3 计算结果举例

关于核结构计算的 Tübingen 方法已经发表了数十篇文章, 其中最典型的部份见参考文献[2~7]. 这个方法主要用于质量分布在 $A=130$ 区域和 $A=70$ 区域以及一些轻核区的核结构计算. 限于篇幅, 我们只举几例以说明其方法的效力和特点.

图 1 是用 Monster(HFB)方法计算后画出的铈同位素 $^{128}\text{Ce} - ^{134}\text{Ce}$ 的晕带特性图. 上排是激发能 E_{α} 与总角动量 I 的关系; 中排是 γ 跃迁能 $E_{\gamma}(I \rightarrow I-2)$ 与总角动量 I 的关系; 第三排为约化跃迁几率 $B(E_2, I \rightarrow I-2)$ 与对应的刚性转子的 B_{rot} 的比值. 虚线为实验值, 实线为计算值. 显而易见, 第一、二排与实验值符合得相当好. 第二排的曲线形状, 明显地再现了回弯现象. 第三排, 似乎有的理论点值与当时的实验值背道而驰. 但幸运的是, 后来的实验值更正了这种反常现象, 更进一步说明了 Monster(HFB)方法抓住了物理实质, 其内部是自洽的. 值得指出的是, 以上 Ce 的四种同位素的计算, 所取哈密顿算符中的相互作用都相同, 而有关参量只是按 ^{130}Ce 的实验值来调整选取的. 所以, 计算与实验相符并非偶然.

图 2 用的是 Monster(Vampir)方法, 它通过不同轨道的占有数解释了 ^{130}Ce 和 ^{128}Ba 两种核中不同的回弯机制.

对 ^{130}Ce 核(见图 2(a)), 回弯处 $h_{11/2}$ 质子占有数突然从 1.3 增加到 2, 形成顺排.

而在 ^{128}Ba 核中, 有一对 neutron 从 $h_{11/2}$ 散射到 $g_{7/2}$ 轨道, 因而增加了顺排能量.

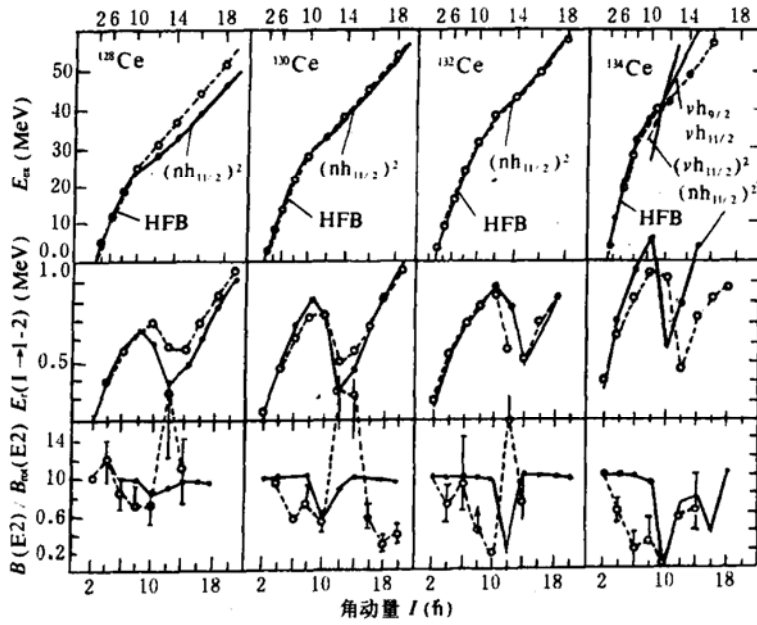


图 1 一些 Ce 同位素的晕带特征

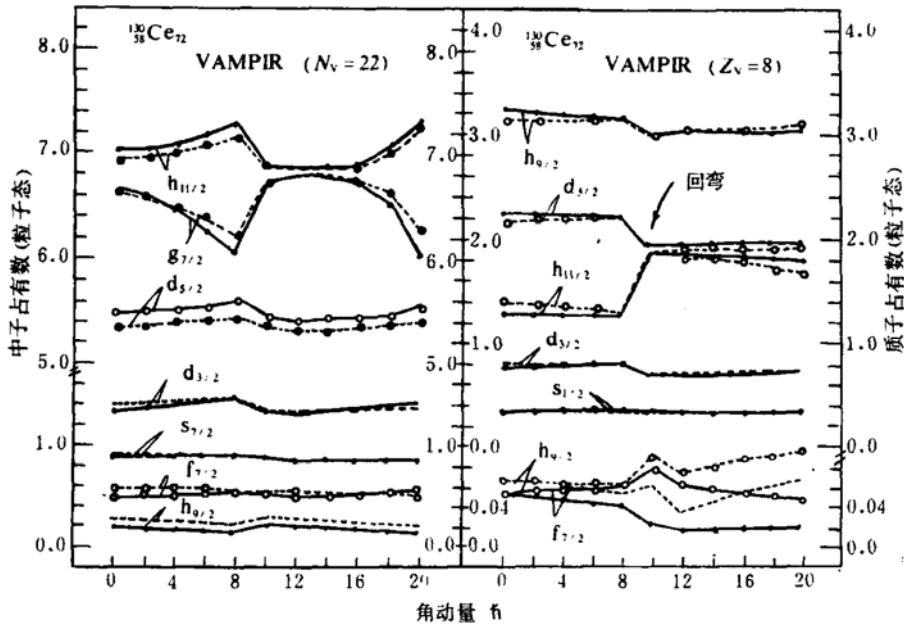


图 2(a) ^{130}Ce 核中单粒子态的占有数
虚线表示内禀态占有数, 实线对应 Vampir 方法投影后的真空态

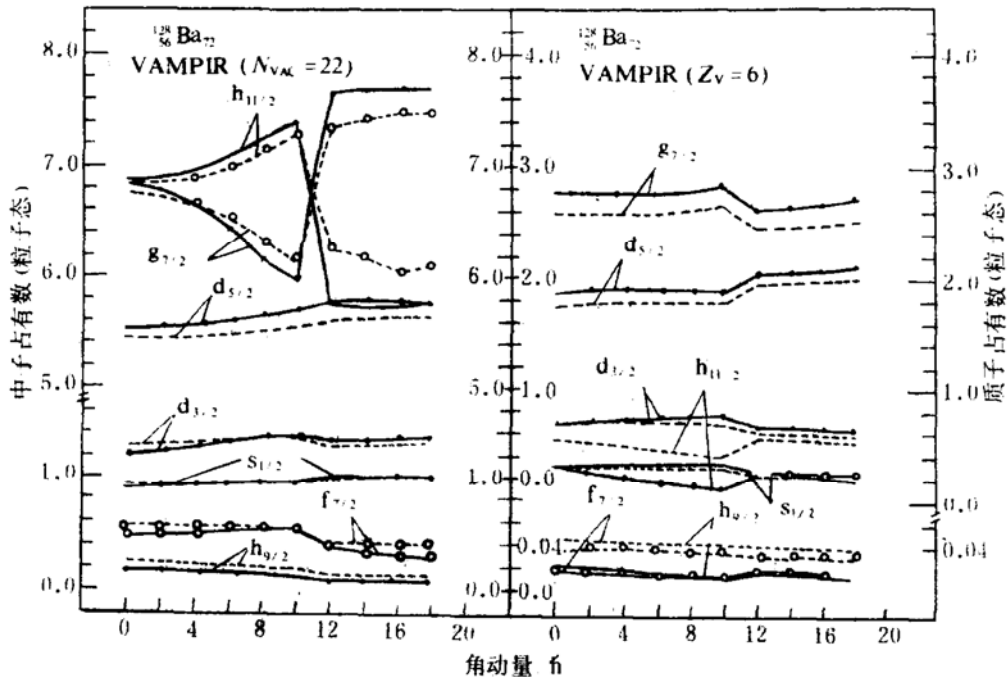


图 2(b) ^{128}Ba 核中单粒子态的占有数
虚线和实线所代表意义同图 2(a)

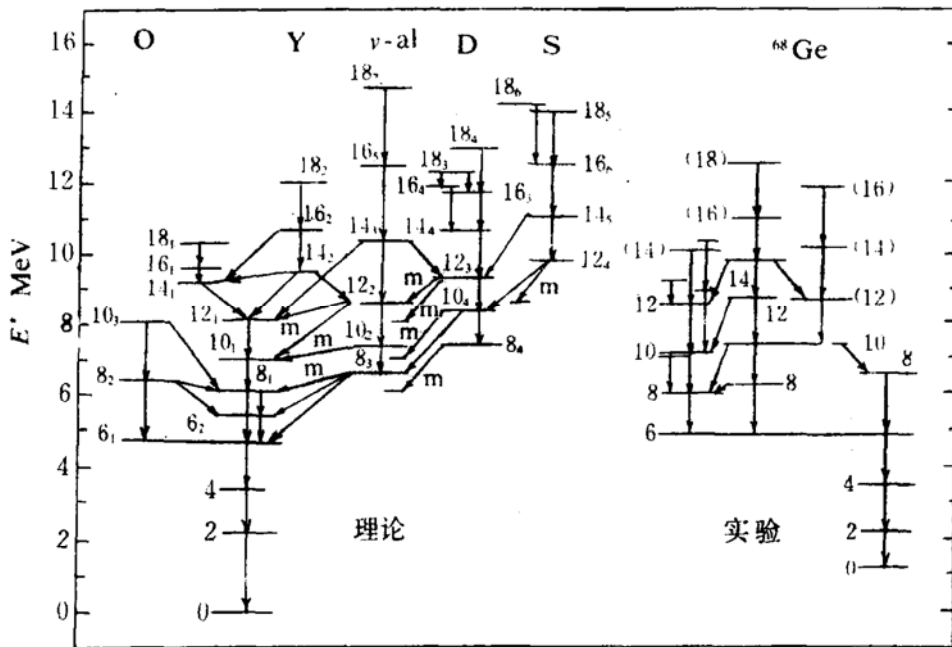


图 3 用 EFV 方法得到的 ^{68}Ge 理论谱与实验谱的比较. 理论谱上的 m 表示 M1 跃迁

图 3 为用实数 EFV 方法计算的 ^{68}Ge 的能谱与实验能谱的比较图. 它基本再现了实验上多个能带共存和复杂衰变纲图两个特点.

了更多的关联作用

4 Tübingen 计算方法分析

由于以上计算方法均来源于变分法, 因此它们能用最少的组态来包含最多的关联作用, 实现了壳模型组态混合方法不能实现的大模型空间的核结构计算. 另一方面, 由于采用了变分前态的投影方法, 因之消除了纯 HFB 方法中许多非物理效应. 而实际应用于真实核的计算, 也表明了这种方法适用范围很广, 计算结果不错.

该计算方法的局限性主要在于, 为了简化数字运算, Tübingen 方法至今还保留了对 HFB 变换要求时间反演不变和轴对称两条限制条件, 这使方法的应用范围也受到限制(如 Vampir 系列方法尚不能用于奇 A 核的计算). 与此相比, SCM 方法实现了前者不能实现的中重核的运算, 是一个大的突破. 但一般地讲, Tübingen 方法的计算量仍然较大. 上述两条不足, 在计算机运算速度和内存不断改进的前提下, 比如并行计算机的使用, 可望得到进一步完善.

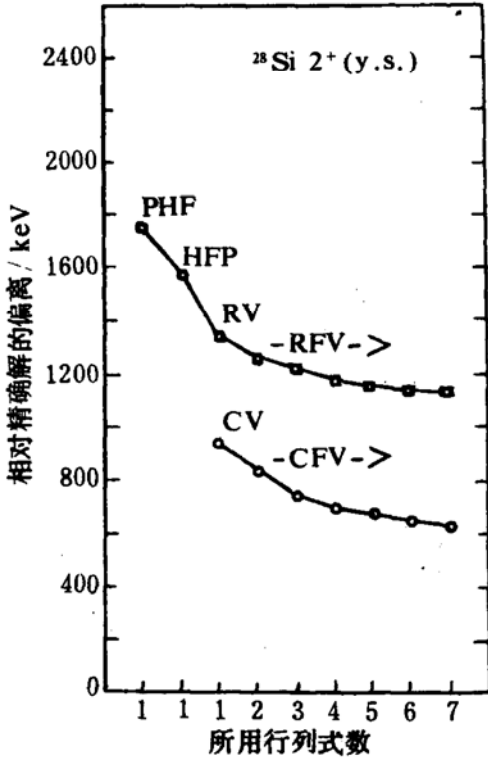


图 4 不同方法计算 $^{28}\text{Si} 2^+$ 晕态值与 SCM 精确值的比较图

图 4 是核 ^{28}Si 的晕带 2^+ 态能量偏离所谓壳模型组态混合 (SCM) 精确解的值^[7]. 而 PHF、HFP、RV、RFV、CV 和 CFV, 分别对应投影前的 Hartree-Fock 方法; 投影后的 Hartree-Fock 方法; 实数 Vampir; 实数、几个行列式的 Vampir; 复数 Vampir; 和复数、几个行列式的 Vampir; 横坐标则为所取行列式的个数. 图中明显可见, CV 和 CFV 结果优于其它方法. 这说明复数 HFB 行列式比实数行列式, 包含

参 考 文 献

- 1 Elliot J P. 核物理动态, 1991, 8(4): 17
- 2 Schmid K W, et al. Rep. Prog. Phys., 1987, 50: 731
- 3 Hammaren E, Schmid K W, et al. Nucl. Phys. 1985, A 437: 1
- 4 Hammaren E, Schmid K W, et al. Nucl. Phys. 1986, A 454: 301.
- 5 Zheng Renrong, Schmid K W, et al. Nucl. Phys. 1989, A 494: 214
- 6 Petrovici A, Schmid K W, et al. Nucl. Phys. 1990, A 517: 108
- 7 郑仁蓉, 林辛未. 高能物理与核物理, 1991, 15: 1001.

A Brief Summary for Nuclear Structure Calculation Tübingen Method

Zheng Renrong Lin Xinwei

(Department of Physics, Southwest Normal University, Chongqing 630715)

Abstract A brief Summary for nuclear structure calculation Tübingen method, including its contents, examples of calculated results, as well as its advantages, shortcomings and perspective, is presented.

Key Words nuclear structure calculation, quasiparticle transformation, variational calculus.

第六届高电荷态离子物理国际会议 在美国堪萨斯州立大学举行

高电荷态离子物理,是当今基础理论研究中人们关注的热门课题之一,近十几年来在国外是一门十分活跃的学科。有关的国际会议每两年举行一次。第六届高电荷态离子物理国际会议,于1992年9月28日至10月2日在美国中部的曼哈顿城——堪萨斯州立大学召开。参加会议的有美、英、法、德、日、加拿大、苏独联体等22个国家、近200名原子物理科学工作者和学生代表。会议由堪萨斯州立大学物理系和麦克唐纳实验室主办,由美国国家能源部化学分部及布鲁克仪器公司赞助。会议内容分八个专题:

- (1) 低能离子——原子碰撞过程中电荷和能量的再分布;
- (2) 高能离子——原子碰撞的单电子及多电子变化过程;
- (3) 带少数电子(即高电离程度)的离子结构和跃迁几率;
- (4) 等离子体的高电荷态离子;
- (5) 电子—离子及离子—离子碰撞;
- (6) 利用储存或诱捕的离子的实验;
- (7) 高电荷态离子与表面和固体的相互作用;
- (8) 高电荷态离子的产生和利用。

大会报告39篇,论文摘要及墙报共135篇;会议还专门针对一些热门话题和前沿课题,作了简短报告,并展开了热烈讨论。与会者认为,这是一次高水平的有关原子物理基础理论研究和实验技术的交流会议,特别是美国堪萨斯州立大学麦克唐纳实验室、美国洛伦兹·利物冒尔·国家实验室,以及法国、德国等一些科学工作者,所作的大量的理论计算

和实验研究工作,引起了与会者的极大兴趣和高度重视。作为实验的先决条件——有关的仪器设备,如ECR离子源(Electron Cyclotron Resonance Ion Source)、EBIS源(Electron Beam Ion Source)、EBIT源(Electron Beam Ion Trap)等源的研制成功、迅速发展和广泛利用,引起了同行及有关行业(离子源研制者)的关注,欧美一些国家的大专院校和科研院所,特别是国家实验室纷纷投资、上马这些设备,并已取得了研究进展和阶段性学术成果。

中国北京大学在美国加州洛伦兹伯克利实验室作访问学者的姚淑德(教师),以及在美国堪萨斯州立大学攻读博士学位的原北大研究生吴务春等七位留美学生,参加了会议,并有论文摘要发表。在美国作博士后的陈政(堪萨斯州立大学)、郭小钦(罗拉多州机拉大学)、王建义(密苏里州罗拉大学)等三人在会上作了学术报告,这些报告和论文摘要,都得到了与会者的好评。老一辈的中国学者姜贵恩(美籍华人),也出席了会议,与会的中国学者、学生及美籍台湾科学工作者和学生,聚集一堂,大家一致认为:这是一次对基础理论研究有指导意义的较重要的会议,联想国内在这方面的理论工作和实验工作都开展的较少,皆同心渴望——在改革开放和加速科技进步的大好形势下,我国也应在这个领域加快步伐,投入一定的人力和资金,迎头赶上,尽早实现在此学术领域中零的突破。

会议决定,第七届高电荷态离子物理国际会议将于1994年9月23日至28日,在奥地利的维也纳城举行。

(美国伯克利实验室 姚淑德访问学者供稿)