

文章编号: 1007-4627(2013)03-0260-08

壳模型哈密顿量本征值的美与奇

赵玉民

(上海交通大学物理与天文系, 粒子物理与核物理研究所, 上海 200240)

摘要: 本征值问题是自然科学中基本运算之一, 对于超大矩阵的对角化是当今许多科学问题的瓶颈。在应用原子核壳模型理论研究较重的原子核结构时, 因为壳模型组态太大, 通常的方法是基于各种物理考虑做某些组态截断, 另一个思路是利用新的算法和飞速发展的计算机资源对这些大矩阵对角化或者近似对角化。总结了本课题组近年来在壳模型哈密顿量本征值近似方面研究的主要结果, 包括最低本征值半经验公式及多种外推方法、本征值与对角元的相关性等。

关键词: 壳模型; 本征值; 哈密顿量; 组态截断

中图分类号: O571.2 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.30.03.260

1 引言

现代科学许多问题与矩阵本征值有关, 长期以来人们基于不同的条件发展了多种矩阵对角化的方法。例如 Jacobi 算法。该算法的实质是把矩阵经过一系列的正交变换, 逐次消去绝对值最大的非零矩阵元。这种方法适用于维数不太大(比如小于 3 000)的实对称矩阵, 给出所有的本征值和本征函数。当维数进一步增加时, 循环次数增加, 收敛的速度越来越慢。

在原子核壳模型计算中, 人们感兴趣的往往是比较低的能级, 所以不需要把所有本征值全部求出来。在这种情况下 Lanczos 算法^[1]有较大优越性。如果只计算最低的几个本征值, Lanczos 方法效率很高, 在现代计算机上已经能够对角化很大的矩阵; 大型计算机可以对角化维数大约为 10 亿的稀疏矩阵, 能处理 pf 壳层的原子核。但是更重原子核的壳模型计算的组态空间维数远远大于 10 亿, 组态空间维数随着价核子个数和单粒子轨道数呈现爆炸式增长, 对这些原子核壳模型哈密顿量对角化遥遥无期。即使将来能计算出这些本征值, 所得到的波函数是由天文数字量级的、近乎随机的和很小的系数乘以各种组态的叠加, 没有直观的图象, 物理解释也很困难。所以人们基于物理考虑引入各种空间截断和近似方法, 比如配对近似理

论^[2]和角动量投影方法^[3]等。

另外一个思路是近似对角化, 即得到近似的本征值。如果近似程度足够好, 人们也可以使用近似的本征值作为理论计算结果, 例如东京研究组的外推法^[4]。这些外推法可以用现有的计算能力处理维数在现有基础上再多几个数量级的矩阵。然而, 其在实际计算中的可靠性还有待于更多的检验。

人们对本征值问题的兴趣起源于随机相互作用的原子核结构理论工作^[5], 那里需要比较准确地估计给定自旋的壳模型哈密顿量的本征值。过去估计本征值的方法, 比较常用的是误差函数方法^[6]以及通过矩阵的迹和宽度等的经验方法。Velázquez 和 Zuker^[7]、Papenbrock 和 Weidenmüller^[8]给出了一些简单公式, 但是这些方法有很大的误差。

我们利用壳模型哈密顿量本征值的特点, 研究提取壳模型哈密顿量本征值的近似方法。本文是对本课题组近年来在这方面多种尝试的总结。

2 最低本征值的半经验公式

我们标记维数为 D_I 、自旋为 I 的哈密顿量为 $H^{(I)}$, 其矩阵元为 $H_{i,j}^{(I)} = \langle \phi_i | H^{(I)} | \phi_j \rangle$, 其中 $\phi_i^{(I)}$ 和 $\phi_j^{(I)}$ 代表了第 i 个和第 j 个基矢。本征值记为 $E_i^{(I)}$ ($i = 1, 2, 3, \dots, D_I$), 其中最小的本征值为 $E_{(\min)}^{(I)}$ 。在统计

收稿日期: 2012-10-13; 修改日期: 2013-03-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11145005, 11225524)

作者简介: 赵玉民(1967-), 男, 河北抚宁人, 教授, 博士, 从事原子核结构研究; E-mail: ymzhao@sjtu.edu.cn.

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

意义上, 可以通过求解以下的积分方程得到其近似值 $E_{(\min)}^{(I)}$:

$$\int_{-\infty}^{E_{(\min)}^{(I)}} \rho(E^{(I)}) dE^{(I)} = \frac{1}{2d}. \quad (1)$$

如果本征能谱 $E_i^{(I)}$ ($i = 1, 2, 3, \dots, D_I$) 近似满足高斯分布^[9], 可以得到^[10]:

$$E_{(\min)}^{(I)} = \overline{E^{(I)}} - \phi(D_I) \sigma_2 = \overline{E^{(I)}} - \sqrt{\frac{\ln D_I}{\ln 2}} \sigma_2, \quad (2)$$

其中: $\overline{E^{(I)}}$ 为中心值; σ_2 为能谱分布宽度,

$$\sigma_2 = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{D_I} \frac{(H_{i,j}^{(I)})^2}{D_I} - \left(\sum_i \frac{H_{i,i}^{(I)}}{D_I} \right)^2}. \quad (3)$$

但是通过数值实验可以看到, 式(2)的适用性不太好。多年来许多研究组如 Velázquez 和 Zuker^[7], Papenbrock 和 Weidenmüller^[8], Ratcliff^[11], Margetan, Klar 和 Vary^[12] 等提出各种各样的壳模型哈密顿量最小本征值经验公式, 相对精度大约在 10% ~ 25%。

我们在文献 [13] 提出一个新的最低本征值公式:

$$E_{(\min)}^{(I)} = \overline{E^{(I)}} - \phi(D_I) \sigma_2, \quad (4)$$

$\phi(D_I) = \sqrt{a \ln D_I + b}$; 对于不同系统, $a = 0.99 \sim 1.04$, $b = 0.35 \sim 0.55$, 所以式(4)可近似写为 $E_{(\min)}^{(I)} = \overline{E^{(I)}} - \phi(D_I) \sigma_2 = \overline{E^{(I)}} - \sqrt{\ln D_I + 1/2} \sigma_2$ 。通过数值实验可以看到(见表 1), 该式比传统近似公式精度有较大的提高, 对于随机相互作用两体系综的适用性很好。

表 1 最小本征值 3 种预言结果与精确结果比较的相对误差*

壳层	粒子数	D_I	I	ϵ_A	ϵ_B	ϵ_C
$\frac{31}{2}$	4	20	13	0.130	0.087	0.061
$\frac{31}{2}$	4	29	20	0.121	0.100	0.067
$\frac{17}{2}$	6	21	5	0.097	0.073	0.047
$\frac{17}{2}$	6	40	10	0.121	0.088	0.057
$\frac{7}{2}, \frac{5}{2}$	4	17	2	0.148	0.124	0.078
$\frac{7}{2}, \frac{5}{2}$	4	19	12	0.151	0.131	0.084
$s_{\frac{1}{2}} d_{\frac{3}{2}} h_{\frac{11}{2}}$	$n_p = n_n = 3$	136	20	0.210	0.141	0.099
$s_{\frac{1}{2}} d_{\frac{3}{2}} h_{\frac{11}{2}}$	$n_p = n_n = 3$	508	17	0.239	0.123	0.091

* ϵ_A , 由式(1)利用误差函数法计算 $E_{(\min)}^{(I)}$; ϵ_B , 由公式(4)计算 $E_{(\min)}^{(I)}$; ϵ_C , 由式(8)计算 $E_{(\min)}^{(I)}$; 可以看到, 引入三阶矩 σ_3 能够把最低本征值的预言精度提高 20% ~ 40%。

在式(4)的基础上容易想到的改进是考虑能谱分布对于高斯系综的偏离。为此考虑三阶矩的贡献^[14]:

$$E_{(\min)}^{(I)} = \overline{E^{(I)}} - C_2 \sigma_2 + C_3 \sigma_3, \quad (5)$$

$$\sigma_3 = \left\{ \frac{1}{D_I} \sum_{i=1}^{D_I} \left[\sum_{k=1}^{D_I} H_{ki}^{(I)} \left(\sum_{j=1}^{D_I} H_{ij}^{(I)} H_{jk}^{(I)} \right) \right] - 3 \frac{1}{D_I^2} \left[\sum_{i=1}^{D_I} \left(\sum_{j=1}^{D_I} H_{ij}^{(I)} \right)^2 \right] \sum_{i=1}^{D_I} H_{ii}^{(I)} + 2 \frac{1}{D_I^3} \left(\sum_{i=1}^{D_I} H_{ii}^{(I)} \right)^3 \right\}^{1/3}. \quad (6)$$

的分布宽度不相同:

$$\sigma_2^{\text{left}} = \left[\frac{\sum_{i=1}^{D_I/2} \left(E_i^{(I)} - \overline{E^{(I)}} \right)^2}{\frac{D_I}{2}} \right]^{1/2} = \sigma_2 - \delta;$$

$$\sigma_2^{\text{right}} = \left[\frac{\sum_{i=d/2+1}^{D_I} \left(E_i^{(I)} - \overline{E^{(I)}} \right)^2}{\frac{D_I}{2}} \right]^{1/2} = \sigma_2 + \delta.$$

本征值整体的分布宽度为

$$\sigma_2^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_2^{\text{left}} \right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_2^{\text{right}} \right)^2$$

最简单的方法是, 假定以 $\overline{E^{(I)}}$ 为中心, 左右两边能谱

$$= \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_2 - \delta) \right]^2 + \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_2 + \delta) \right]^2$$

$$= \sigma_2^2 + \delta^2 \simeq \sigma_2^2,$$

其中 δ^2 为小量, 可以忽略。由于本征值以 $\overline{E^{(I)}}$ 为中心的左右分布不对称, 式(4)变为

$$E_{(\min)}^{(I)} = \overline{E^{(I)}} - \Phi(D_I)\sigma_2^{\text{left}}$$

$$= \overline{E^{(I)}} - \Phi(D_I)(\sigma_2 - \delta). \quad (7)$$

由 $\sigma_3^3 = \int (E^{(I)} - \overline{E^{(I)}})^3 \rho(E^{(I)}) dE^{(I)}$ 可以得到

$$\sigma_3^3 = \int_{-\infty}^0 (E^{(I)} - \overline{E^{(I)}})^3 \rho_{\text{left}}(E^{(I)}) dE^{(I)} +$$

$$\int_0^{\infty} (E^{(I)} - \overline{E^{(I)}})^3 \rho_{\text{right}}(E^{(I)}) dE^{(I)}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} [(\sigma_2 + \delta)^3 - (\sigma_2 - \delta)^3]$$

$$= 6\sqrt{\frac{2}{\pi}}\delta + 2\sqrt{\frac{2}{\pi}}\delta^3 \simeq 6\sqrt{\frac{2}{\pi}}\delta.$$

代入式(7)得到

$$E_{(\min)}^{(I)} = \overline{E^{(I)}} - \Phi(D_I) \left[1 - \frac{\sqrt{\pi}}{6\sqrt{2}} \left(\frac{\sigma_3}{\sigma_2} \right)^3 \right] \sigma_2. \quad (8)$$

从表 1 可以看到, 三阶矩的引入可以进一步提高最低本征值的预言精度。这里三阶修正的数学形式完全是解析的, 关于本征值分布函数呈双高斯分布的假定是一个精巧和美妙的想法。数值实验表明, 如果简单地把式(8)中的系数 $\frac{\sqrt{\pi}}{6\sqrt{2}}$ 代替以一个 $\ln D_I$ 的函数, 即

$$E_{(\min)}^{(I)} = \overline{E^{(I)}} - \Phi(D_I) \times$$

$$\left[1 - (0.26 + 0.04 \ln D_I) \left(\frac{\sigma_3}{\sigma_2} \right)^3 \right] \sigma_2, \quad (9)$$

那么预言精度再一次提高 20% ~ 30%。这说明式(8)给出的 $E_{(\min)}^{(I)}$ 与三阶矩的关系符合实际的变化趋势。

3 本征值与对角元的相关性

我们注意到壳模型哈密顿量的主对角元和所有本征值从小到大排序后存在很好的线性关系^[15-16]。利用这一线性关系, 可以预言所有的本征能量。当维数比较大的时候, 对于高激发态适用性更好。

标记壳模型哈密顿量的精确本征值为 $E_i^{(I)\text{exact}} (i = 1, 2, 3, \dots, D)$, 而利用线性关系预言的本征值是 $E_i^{(I)\text{pred}} (i = 1, 2, 3, \dots, D)$ 。对 $E_i^{(I)\text{exact}}$ 和哈密顿量的对角元 $H_{ii}^{(I)}$ 由小到大排序, 即 $E_1^{(I)\text{exact}} (H_{11}^{(I)})$ 为最小

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

值, $E_2^{(I)\text{exact}} (H_{22}^{(I)})$ 为第 2 个最小值等。定义线性相关系数为

$$r = \frac{\sum_i (H_{ii}^{(I)} - \overline{H^{(I)}})(E_i^{(I)\text{exact}} - \overline{H^{(I)}})}{\sqrt{\sum_i (E_i^{(I)\text{exact}} - \overline{H^{(I)}})^2 \sum_i (H_{ii}^{(I)} - \overline{H^{(I)}})^2}}.$$

r 的绝对值 $|r| \leq 1$ 。如果 $E_i^{(I)\text{exact}}$ 和 $H_{ii}^{(I)} (i = 1, 2, \dots, D)$ 的线性关系很好, 那么 $|r| \rightarrow 1$ 。从经验上发现, 壳模型哈密顿量无论采用有效相互作用还是随机两体系综, 线性相关系数都非常接近于 1。

我们在指出这个事实的初期, 许多同行对此半信半疑。这主要是因为这个现象初看起来实在太奇特了。根据处理小维数矩阵的经验, 本征值和对角元原则上是没有任何关系的。这里摘录有马朗人教授对此经验的描述 [International Journal of Modern Physics E, Vol. 17 (supplement) 334-341]: “In April of 2007, Zhao showed me the results of linear correlation between eigenvalues and diagonal matrix elements for two-body random Hamiltonians, which were originally obtained by Shen^[15]. At first I did not believe them. However, we had many discussions on their results. ... We all got excited at this very important discovery”。随着时间的推移, 我们逐步意识到, 这个线性关系虽然奇特, 但是其实是很容易理解的。因为壳模型哈密顿量的本征值近似服从高斯分布^[17-20], 从经验上我们知道壳模型哈密顿量的对角元接近高斯分布, 而两组高斯分布的随机数必然是(近似)线性相关的。

假定排序后本征值与排序对角元素存在线性关系, 得到

$$E_i^{(I)\text{pred}} = AH_{ii}^{(I)} + B, \quad (10)$$

这里

$$A = \frac{\sqrt{\overline{H^{(I)2}} - \overline{H^{(I)}}^2}}{\sqrt{\frac{\sum_i H_{ii}^{(I)2}}{D} - \overline{H^{(I)}}^2}}, \quad B = (1 - A)\overline{H}. \quad (11)$$

图 1(a) 中给出了 ^{24}Mg 原子核角动量 $I = 0^+$ 时哈密顿量本征值与对角元各自从小到大排序后的相关性, 线性相关系数接近于 1。图 1(b) 作为一个实例给出了 ^{24}Mg 的哈密顿量直接对角化的精确本征值与利用式(10)预言结果的比较。可以看到, 式(10)能够比较合理地预言严格对角化给出的低位态能级结构。

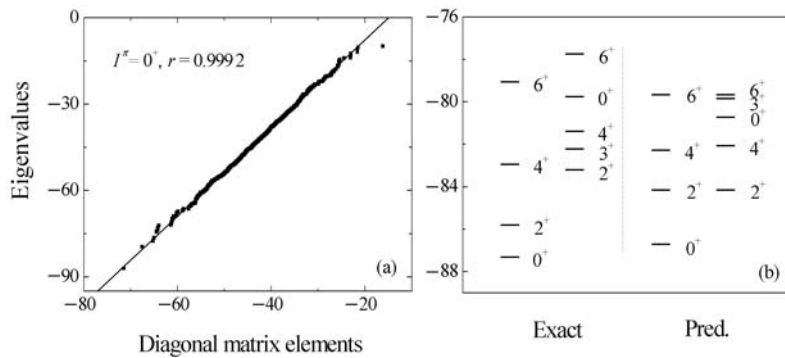


图 1 壳模型哈密顿量本征值与对角元的线性关系和式 (10) 的预言结果

(a) USD 相互作用下 ^{24}Mg 原子核在角动量 $I = 0^+$ 时哈密顿量本征值与对角元的相关性, 线性相关系数约为 0.999; (b) ^{24}Mg 原子核由哈密顿量对角化得到的精确本征值和利用本征值与对角元的线性相关预言的结果, 两者比较接近; 这说明式 (10) 比较合理地重现了哈密顿量严格对角化的结果。

我们对于不同系统研究了式 (10) 的可靠性。结果表明, 式 (10) 预言低位态能量的相对误差大约 10^{-2} 量级, 而对于高位态可靠性略高。

4 本征值的外推方法

传统上人们一般通过选取单粒子能级较低的组态截断壳模型空间, 而实际上壳模型的哈密顿量除了单粒子项以外还有两体相互作用, 所以我们提出另外一个观点, 把哈密顿量的对角元素从小到大排序, 对角元素小的基矢 $\phi_i^{(I)}$ 作为截断子空间。

为了说明这一点, 我们考察了哈密顿量矩阵元绝对值的分布。图 2 给出了 ^{24}Mg 角动量为 $I^\pi = 0^+$ [(a) 和 (b)] 以及 $I^\pi = 2^+$ [(c) 和 (d)] 的壳模型哈密顿量的矩阵元绝对值分布, 从深色到浅色对应矩阵元绝对值从大到零。可以看出, 在哈密顿量对角元素从小到大大排序之前, 矩阵元的分布是完全随机的; 而在排序以后, 矩阵元绝对值随着与对角元素的“距离”增加单调下降。所以在计算较低的本征值时, 那些“远离”对角元素的那些基矢 $\phi_i^{(I)}$ 可以忽略。

在哈密顿量的对角元素从小到大排序后, 截断壳

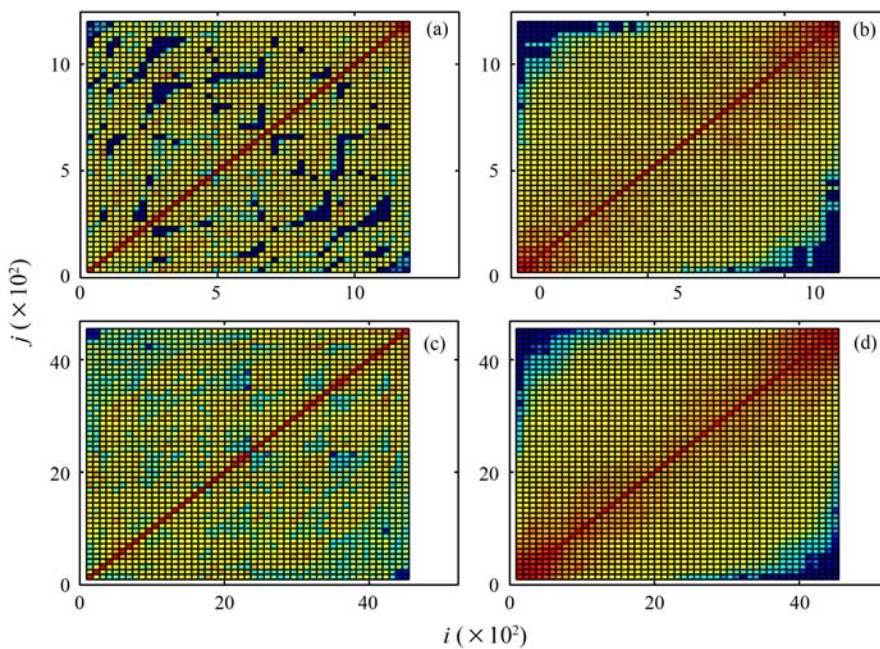


图 2 (在线彩图) 壳模型哈密顿量的主对角元在排序前((a)和(c))以及排序后((b)和(d))的矩阵元绝对值分布图 颜色从深到浅对应于矩阵元的绝对值从大到零; 结果取自 ^{24}Mg 在 USD 相互作用的角动量为 $I^\pi = 0^+$ [(a)和(b)] 以及 $I^\pi = 2^+$ [(c)和(d)] 的哈密顿量; 可以看出, 哈密顿量在对角元素在排序前对应的矩阵元大小分布是完全随机的, 而在排序后, 矩阵元绝对值随着相对对角元素距离的增加单调下降的趋势。

模型空间： $\phi_i^{(l)}$ ($i = 1, \dots, d_l$, $d_l < D_l$)，新的哈密顿量标记为 $h^{(l)}$, $h_{ij}^{(l)} = H_{ij}^{(l)}$ 。通过对角化 $h^{(l)}$ ，得到最低能量 $\epsilon_d(h^{(l)})$ 。定义 $M(d) = \frac{\sum |H_{ii+d}^{(l)}|}{D-d}$, $d = 1, 2, 3, \dots, D$ 。这个量描述相对于对角元素的“距离” d 的矩阵元的平均大小。图 3 给出了 ^{24}Mg 原子核角动量为 $I^\pi = 0^+$ [(a) 和 (c)] 以及 $I^\pi = 2^+$ [(b) 和 (d)] 的 $M(d)$ 和 $\epsilon_d(h^{(l)})$ 关于 $\ln d$ 的关系曲线。可以看出， ϵ_d 随着 $\ln d$ 的增加开始时近似沿着直线下降，而 d 大于拐点 $d = D_0$ 时斜率变小。所以由维数很小的 $h^{(l)}$ 通过外推预言最低本征值需要知道两个结果：第 1 是 D_0 的大小；第 2 是 $d > D_0$ 时斜率的大小。

从图 (3) 可以看出， D_0 很接近于 $M(d) = 0$ 时对应的 $d = d_0$ 。经过大量的实例表明，这个准确度很高。所以可以通过考察哈密顿量矩阵元的分布得到 $\epsilon_d(h) - \ln d$ 线性变化的拐点 D_0 。从经验上注意到， $d < d_0$ 时 $\epsilon_d - \ln d$ 的斜率在 $d > d_0$ 时为 $d < d_0$ 时斜率的 $\frac{2}{5}$ 。在这些假设下得到^[21]：

$$E_{(\min)}^{(l)} = 0.4k \ln D_l + 0.6k \ln d_0 + b, \quad (12)$$

这里的 k 和 b 为 $\epsilon_d - \ln d$ 关系在 $d < d_0$ 时的斜率与截距，这些值可以通过若干个截断空间的基态能量计算得到。式 (12) 的预言结果的精度比前两节的方法有很大

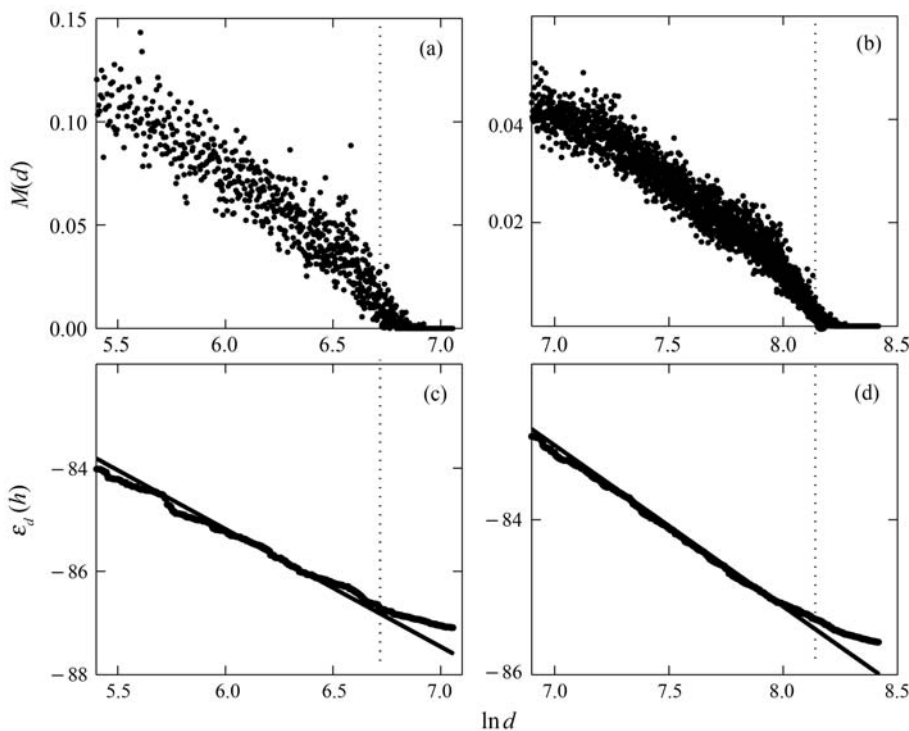


图 3 哈密顿量矩阵元 $H_{ij}^{(l)}$ 在给定基矢距离下的平均绝对值 ($M(d)$)，截断空间下哈密顿量 h 的基态能量 $\epsilon_d(h)$ 关于 d 的关系曲线图

^{24}Mg 原子核在角动量为 $I^\pi = 0^+$ 以及 $I^\pi = 2^+$ 状态下的结果分别画在 [(a) 和 (c)] 与 [(b) 和 (d)] 的图上；可以看出，当 $M(d) = 0$ 时对应的 d_0 值和 $\epsilon_d(h^{(l)}) - \ln d$ 关系图上斜率变化的拐点 D_0 是一致的，即 $d_0 = D_0$ ；在图 [(a) 和 (c)] 与 [(b) 和 (d)] 中，使用了相同的坐标范围，虚线为拐点位置。

的提高，相对误差大约为千分之三。

5 微扰外推法

微扰法是物理学中常用的近似方法，本节通过微扰法考虑来自被忽略组态 $\phi_i^{(l)}$ 的影响，从而提高外推法得到近似本征值的可靠性^[22-23]。对于维数为 d 的、截断子空间的壳模型哈密顿量 $h^{(l)}$ ，我们定

义正交变换 V , $(V^T h^{(l)} V)_{ij} = \delta_{ij} \epsilon_i$ 。 V 的第 i 列 (标记为 V_i) 是 $h^{(l)}$ 的第 i 个本征矢，对应的本征能量为 ϵ_i ，即 $h^{(l)} V_i = \epsilon_i V_i$ 。对于全空间哈密顿量 $H^{(l)}$ 的第 w 个最小态 $\Psi_w^{(l)}$ ，得到

$$H^{(l)\text{eff}}(E_w^{(l)}) |\Psi_w^{(l)}\rangle = E_w^{(l)} |\Psi_w^{(l)}\rangle, \quad (13)$$

其中 $H^{(l)\text{eff}}$ 是截断空间下的有效哈密顿量， $|\Psi_w^{(l)}\rangle$ 是波

函数 $\Psi_w^{(l)}$ 在截断空间下的投影。 $|\psi_w\rangle = \sum_{\gamma}^d |\gamma\rangle \langle \gamma | \Psi_w\rangle$, 有效哈密顿量 $H^{(l)\text{eff}}(E_w^{(l)})$ 为

$$H^{(l)\text{eff}}(E_w^{(l)}) = h + \sum_{k=2}^{\infty} V^T A (B^{k-2}) C V, \quad (14)$$

其中

$$\begin{aligned} A_{i,j} &= H_{i,d+j}^{(l)}, \\ B_{i,j} &= (1 - \delta_{ij}) \frac{H_{d+i,d+j}^{(l)}}{E_w^{(l)} - H_{d+i,d+i}^{(l)}}, \\ C_{i,j} &= \frac{H_{d+i,j}^{(l)}}{E_w^{(l)} - H_{d+i,d+i}^{(l)}}. \end{aligned}$$

在实际应用中, k 的求和范围是从 2 到某个 n (而不是

无穷大)。当 $n=2$ 时, 式 (14) 简化为

$$H^{\text{eff}}(\epsilon_1) = \epsilon_1 + \sum_i^{D-d} \frac{\left(\sum_{l=1}^d V_{l,1} H_{l,d+i} \right)^2}{\epsilon_1 - H_{d+i,d+i}}. \quad (15)$$

这是最低本征值的二级微扰公式。

加入微扰修正后, 外推方法的精度进一步提高。图 4 给出了壳模型截断空间下基态能量的二级微扰值 [记为: $\epsilon_d^P(h^{(l)})$] 随截断空间维数的自然对数平方 $\left[\ln \left(\frac{D}{d} \right) \right]^2$ 的关系。可以看出, 两者有很好的线性关系:

$$\epsilon_d^P(h) = E_{(\min)}^I + a \left(\ln \frac{D}{d} \right)^2. \quad (16)$$

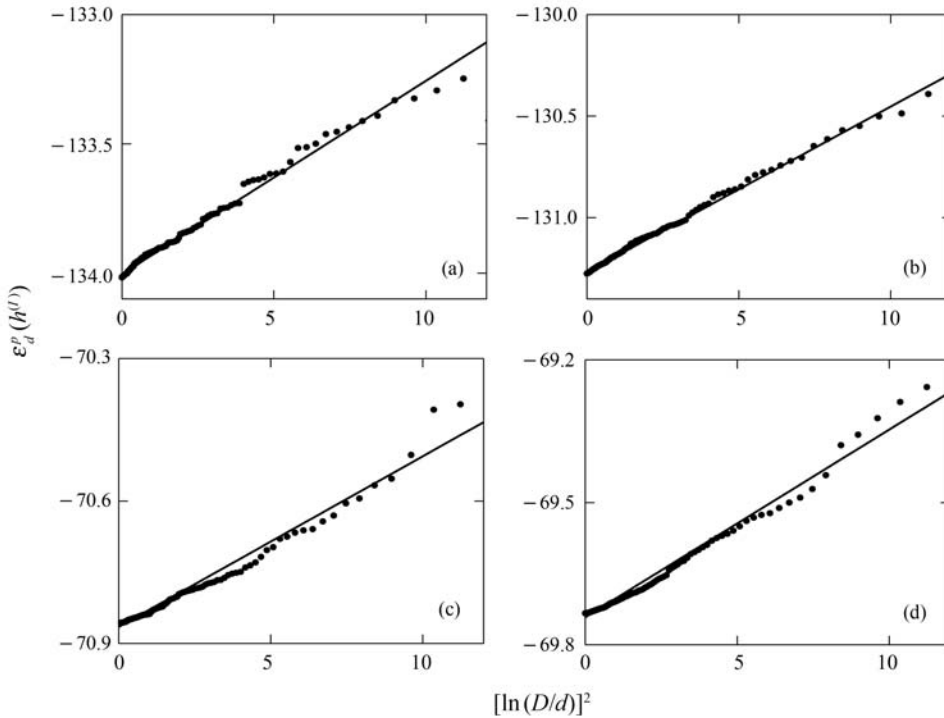


图 4 壳模型截断空间下基态能量的二阶微扰值 $\epsilon_d^P(h)$ 与 $\left[\ln \left(\frac{D}{d} \right) \right]^2$ 之间的线性关系

(a) 和 (b) 是 USDB 相互作用下 sd 壳 ^{28}Si 原子核在角动量为 $I^\pi = 0^+$ 和 $I^\pi = 2^+$ 状态下的结果, (c) 和 (d) 分别是 GXPF1 相互作用下 pf 壳 ^{46}Ti 原子核在角动量为 $I^\pi = 0^+$ 和 $I^\pi = 2^+$ 状态下的结果; 可以看出, $\epsilon_d^P(h)$ 与 $\left[\ln \left(\frac{D}{d} \right) \right]^2$ 有很好的线性关系。

根据大量的数值实验, 微扰外推法的相对精度在 10^{-4} 量级。对于 sd 壳和 pf 壳的原子核来说, 预言本征值的误差在 50 keV 左右, 已经接近实用的精度。如果进一步考虑高阶微扰, 外推的精度会进一步提高。

微扰法不仅可以计算壳模型哈密顿量的本征值, 还能计算对应状态的波函数以及其他物理量, 而且数

值实验表明这些物理量在外推过程中数值稳定性很好, 取很小的截断子空间就得到稳定的、接近严格结果的计算值。在图 5 中以 ^{24}Mg 和 ^{45}Ti 原子核为例, 利用微扰外推法计算它们的电四极跃迁、电四极矩和磁偶极矩。可以看出, 即使在很小的子空间微扰法也给出与严格对角化很接近的计算结果。

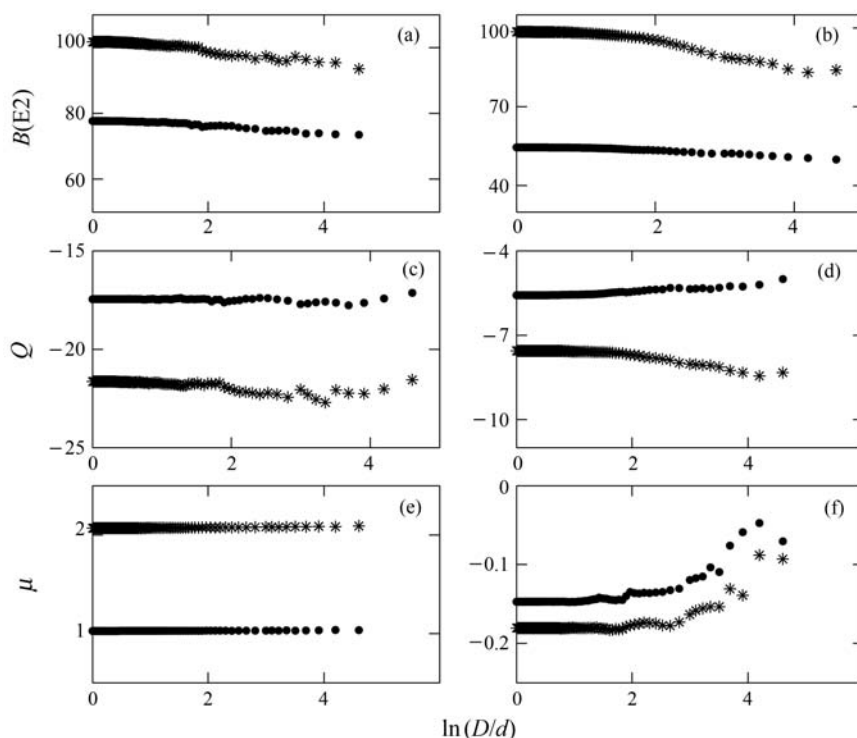


图 5 外推法预言原子核 E2 跃迁强度 (记为 $B(E2)$, 单位为 $e^2\text{fm}^4$)、电四极矩 (记为 Q , 单位为 efm^2)、磁偶极矩 (记为 μ , 单位为 μ_N), 左图对应 ^{24}Mg 原子核, 右图对应 ^{45}Ti 原子核

(a) 中实心圆、星号分别对应 $2^+ \rightarrow 0^+$ 和 $4^+ \rightarrow 2^+$ 的电四极跃迁; (b) 中实心圆、星号分别对应 $3/2^- \rightarrow 7/2^-$ 和 $3/2^- \rightarrow 5/2^-$ 的电四极跃迁; (c) 和 (e) 中实心圆、星号分别对应角动量为 $I^\pi = 2^+$ 和 $I^\pi = 4^+$ 的电四极矩和磁偶极矩; (d) 和 (f) 中实心圆、星号分别对应角动量为 $I^\pi = \frac{7}{2}^-$ 和 $I^\pi = \frac{5}{2}^-$ 的电四极矩和磁偶极矩; D 是组态空间未做截断的维数, d 是截断子空间的维数, $\ln\left(\frac{D}{d}\right) = 0$ 的结果是直接对角化的严格结果, $\ln\left(\frac{D}{d}\right) = 4$ 时, $\frac{D}{d} \sim 55$, 计算结果与严格对角化结果符合很好, 所以这些物理量具有很好的外推性。

6 讨论和总结

壳模型理论是原子核结构理论的基础, 所以壳模型哈密顿量本征值是原子核结构理论核心问题之一。

我们从壳模型哈密顿量本征值的统计性质出发, 由多极矩展开出发研究最低的本征值经验公式。这些公式的预言精度与传统的统计方法相比有很大改善, 其中三极矩的修正形式是假定本征值呈现双高斯分布而解析推导得到的, 修正的系数为 $-\sqrt{\pi}/(6\sqrt{2})$; 修正系数的经验值 $-(0.26 + 0.04\ln D_I)$ 可以进一步降低最低本征值的预言误差。

我们指出, 壳模型组态空间的维数在 100 以上时, 壳模型哈密顿量的本征值和对角元素从小到大排序后两者存在初看很奇特的、适用性很好的线性关系。这个关系可以近似地预言壳模型哈密顿量所有的本征值。对于有效相互作用如 sd 壳的 USD 相互作用, 其相对精度在 10^{-2} 。这里一个奇特而美妙之

处在于, 当哈密顿量矩阵的维数 $D_I > 100$ 时, 虽然式(10) ~ (11)的系数与非对角元素的分布次序无关, 但是我们大量的、不同系统的数值实验表明, 如果人为地打乱原有的对应次序, 那么本征值和对角元素的线性关系无一例外地变差^[24]。也就是说, 当维数比较大时, 壳模型哈密顿量矩阵的非对角元素的分布次序恰如其分地“选择了”本征值和对角元素的线性关系的最佳点, 而对于这一现象的物理起源, 我们还一无所知。

我们发展了外推法和微扰外推法预言壳模型哈密顿量的本征值, 预言的本征值精度进一步提高。这里用对角元素的大小作为空间截断的依据, 数值实验表明, 这种截断效率优于传统的用单粒子能量截断, 而且对于本征值而言外推时变化光滑。外推法的好处是在很小的子空间对角化哈密顿量矩阵可以得到全空间矩阵对角化本征值的近似结果。在此基础上引入微扰

法考虑被忽略的组态的贡献, 可以进一步提高外推预言的精度, 对于 *sd* 壳和 *pf* 壳原子核, 二阶微扰外推法的误差大约为 50 keV。微扰外推法还能定量给出波函数和电磁跃迁结果^[23]。数值计算表明这些物理量具有很稳定的外推性质。把上面的方法应用于超大矩阵是应该进一步考虑的问题。

致谢 感谢沈佳杰博士和有马朗人教授的合作。

参考文献(References):

- [1] PRESS W H, TEUKOLSKY S A, VETTERLING W T, *et al.* Numerical recipes in C++: the art of scientific computing[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [2] CHEN J Q. Nucl Phys A, 1997, **626**: 686; ZHAO Y M, YOSHINAGA N, YAMAJI S, *et al.* Phys Rev C, 2000, **62**: 014304; FU G J, ZHAO Y M, PITTLE S, *et al.* Phys Rev C, 2013, **87**: 044310.
- [3] HARA K, SUN Y. Int Jour Mod Phys E, 1995, **4**: 637.
- [4] SHIMIZU N, UTSUNO Y, MIZUSAKI T, *et al.* Phys Rev C, 2010, **82**: 061305.
- [5] ZHAO Y M, ARIMAA, YOSHINAGA N. Phys Rep, 2004, **400**: 1.
- [6] WONG S S M. Nuclear Statistical Spectroscopy[M]. New York: Oxford University Press, 1986.
- [7] VELÁZQUEZ V, ZUKER A P. Phys Rev Lett, 2002, **88**: 072502.
- [8] PAPANBROCK T, WEIDENMÜLLER H A. Rev Mod Phys, 2007, **79**: 997.
- [9] MON K K, FRENCH J B. Ann Phys, 1975, **95**: 90.
- [10] ABRAMOWITZ M, STEGUN I A. Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables[M]. New York: Dover Publications, 1964.
- [11] RATCLIFF K F. Phys Rev C, 1971, **3**: 117.
- [12] MARGETAN F J, KLAR A, VARY J P. Phys Rev C, 1983, **27**: 852.
- [13] YOSHINAGA N, ARIMA A, ZHAO Y M. Phys Rev C, 2006, **73**: 017303.
- [14] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A, *et al.* Phys Rev C, 2008, **77**: 054312.
- [15] SHEN J J, ARIMA A, ZHAO Y M, *et al.* Phys Rev C, 2008, **78**: 044305.
- [16] YOSHINAGA N, ARIMA A, SHEN J J, *et al.* Phys Rev C, 2009, **79**: 017301.
- [17] FRENCH J B, WONG S S M. Phys Lett B, 1970, **33**: 449.
- [18] BOHIGAS O, FLORES J. Phys Lett B, 1971, **34**: 261.
- [19] BRODY T A, FLORES J, FRENCH J B. Rev Mod Phys, 1981, **53**: 385.
- [20] ZELEVINSKY V, BROWN B A, FRAZIER N. Phys Rept, 1996, **276**: 85.
- [21] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A. Phys Rev C, 2010, **82**: 014309.
- [22] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A, *et al.* Phys Rev C, 2011, **83**: 044322.
- [23] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A. Phys Rev C, 2012, **85**: 064325.
- [24] SHEN J J, ZHAO Y M, Sci China Ser G: Phys Mech Astron, 2009, **52**: 1477.

Beauty and Strangeness in Eigenvalues of Nuclear Shell Model Hamiltonian

ZHAO Yumin¹⁾

(Institute of Particle and Nuclear Physics, Department of Physics and Astronomy,
Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: The eigenvalue problem is one of the fundamental issues of sciences. Many research fields have been challenged by diagonalizing huge matrices. The nuclear structure theorists face this problem in studies of medium-heavy nuclei in terms of the nuclear shell model, in which the configuration space is too gigantic to handle. Thus one usually truncates the nuclear shell model configuration space based on various considerations. Another approach is to make use of super computers by various algorithms, and/or to obtain approximate eigenvalues. In this paper we review our recent efforts in obtaining approximate eigenvalues of the nuclear shell model Hamiltonian, with the focus on our semi-empirical approach and a number of extrapolation approaches towards predicting the lowest eigenvalue, as well as strong correlation between the sorted eigenvalues and the diagonal matrix elements, and so on.

Key words: shell model; eigenvalues; Hamiltonian; truncation

Received date: 13 Oct. 2012; **Revised date:** 10 Mar. 2013

Foundation item: National Natural Science Foundation of China(11145005, 11225524)

1) E-mail: ymzhao@sjtu.edu.cn

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