

EFV 方法的可行性验证*

郑仁蓉 林辛未

(西南师范大学物理系, 重庆 630715)

摘 要

本文在已有的 EFV 方法基本思想和数值运算的基础上, 对 $1s0d$ 壳的 F^{18} , Ne^{20} , Ne^{22} 和 Si^{28} 四种核的不同态进行了实际运算, 验证了 EFV 方法的可行性, 说明了该方法中所包括的各种关联作用的重要性. 为大模型空间中 EFV¹⁾ 方法的应用铺平了道路.

一、引 言

EFV 是一种原子核结构的微观描述方法, 其基本思想和数值计算公式已经在参考文献[1—4]中给出(本文所用的所有符号的意义均与^[1,2]两篇文章相同). 简而言之, 这种方法逐次增加对称性 ($S = AT, I^*$) 投影的 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 行列式的个数, 并取其线性迭加作为尝试波函数, 通过变分确定各行列式的 HFB 变换和线性迭加混合系数, 由此得到两组变分方程(第一组为推广的本征值方程, 第二组是所谓的梯度方程). 解此两组方程就得到基态能量和波函数. 若将已得到的低能态排除在变分空间之外, 同样的方法可以描述激发态. 为了数值运算方便, 我们对 HFB 变换加上时间反演不变和轴对称两个限制条件. 这样 EFV 可用于描述偶偶核和奇奇核的任意宇称与任意角动量的态. 本文的目的是验证 EFV 的可行性. 为此我们必须选择一个合理的模型空间. 这个空间应是足够大, 以便说明方法的本质意义, 然而它又应是足够小, 以便和费时虽多, 但尚可适用的 Shell-model Configuration Mixing (SCM) 方法的“精确解”进行比较, 验证 EFV 的可行性. 这就是本文仅仅选取 $1s0d$ 壳作为模型空间的理由. 所采用的单粒子能量为实验值^[5] $\epsilon(0d5/2) = -4.15\text{MeV}$, $\epsilon(1s\frac{1}{2}) = -3.28\text{MeV}$ 和 $\epsilon(0d3/2) = 0.93\text{MeV}$. 两体相互作用采用的是 Chung-Wildenthal 力^[6],

$$\hat{V}(A) = \hat{V}(A=18) \left(\frac{18}{A}\right)^\alpha,$$

指数 $\alpha = 1/3$. 我们用 EFV 和 Glasgow 壳模型程序计算了不同 $1s0d$ 壳核的能量, 波函数和一些选择态的电磁跃迁. 下面我们将比较和讨论这些结果, 最后给出简短的结论.

本文 1990 年 12 月 13 日收到.

* 国家自然科学基金部份资助.

1) EFV: Excited Fed (FEW Determinants) VAMPIR (Variation After Mean-fields Projection In Realistic model-spaces).

二、计算结果和讨论

1. 奇奇核 F^{18}

图1为由SCM计算所得的 F^{18} 的全部28个能级.横轴是总角动量,纵轴是相对 O^{16}

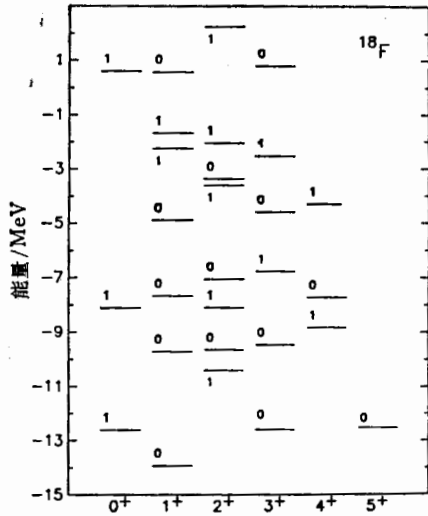


图1 F^{18} 核的能谱
(用SCM和CEV两种方法计算的 F^{18} 的能谱完全相同)

核的结合能.能级上的数值表示同位旋 T .复数EXCITED VAMPIR (CEV)的计算结果,准确到小数点后第四位,仍能精确地重现所有这些能态的值.这说明 F^{18} 中的每一个态都可以由单个对称性投影组态($n_m = 1$,见[1,2])来表示.这正如[2]中论述:尽管有时间反演不变和轴对称两个限制条件,对称性投影后的HFB行列式仍然包含了所有可能的二核子耦合.即两个价核子体系总是可以用“独立准粒子”图象加以描绘.

F^{18} 核的SCM解法并不十分困难,我们用CEV方法去计算的目的,一是对计算机程序的测试;另一方面由于实数EXCITED VAMPIR (REV)^[7]不能用于奇奇核,这个例子也表明,只有包含质子-中子关联的复数HFB变换才使EFV方法可以用于奇奇核的研究.

2. 偶偶核的奇角动量态

偶偶核的奇角动量态同样不属于REV的研究范围,只是因为[2]中所论的复数

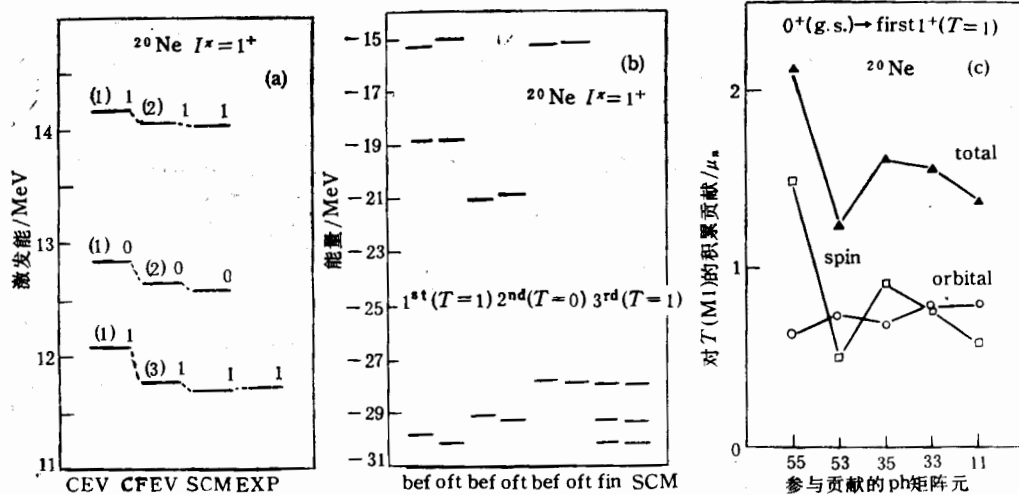


图2 Ne^{20} 核的 $I^\pi = 1^+$ 态[图(b)中的oft应为aft]

EXCITED FED VAMPIR (CEFV) 包括了非自然宇称对关联, 才使这些态的描述成为可能。

图 2 为 Ne^{20} 核的 $I^\pi = 1^+$ 态的情况。其中 (a) 为最低三个 1^+ 态。纵坐标是激发能。最左边一列 CEV 表示一个态仅仅利用单个(能级左边标号(1))对称性投影 HFB 行列式。能级右边标号为总同位旋。第二列为更一般的 CEFV 的结果。其中最低的能态用了三个对称性投影组态, 较高的两个能态则均用了两个。倒数第二列是完全壳模型对角化的结果。最右边一列为强 $M1$ 跃迁到达的同位旋矢量态的实验值^[9]。正如所见, CEV 描述的三个态相对于精确谱 SCM 的能量差分别为 373, 259 和 132keV, CEFV 显著地改进这些值, 使能量差下降到 75, 70 和 23keV。因此在 Ne^{20} 的 1^+ 态情况下, 只用很少几个组态, 就基本再现了精确解。

有趣的是, 由 CEFV 得到的相对于 CEV 产生最主要关联作用的组态具有相当高的激发能。这点可以从图 2(b) 中看出: 这里(a)中 CEFV 列的三个 1^+ 态得到更详细的分析。例如, 图中 $1st(T=1)$ 表示能量最低的第一个 1^+ 态, 总同位旋 $T=1$, 对应的能级则为构成这个态的三个组态在第一组推广的本征值方程对角化以前 (bef) 和以后 (aft) 的能量值。图中附加组态所对应的高激发能暗示了正如 CEFV 所做的, 通过变分来选择组态的重要性。这也是为什么按未受微扰的能量来截断 SCM 组态空间, 即使在小模型空间也常常不是十分有效的理由。图中“fin”是 CEFV 的最后结果, 与(a)中第二列的意义相同, 但零点标度有差异。最后一列则再度给出 SCM 的精确解。

图 2(c) 对 (a) 中的最低 1^+ 态——强 $M1$ 跃迁到达的同位旋矢量态进行了进一步的分析。首先, 将总的 $M1$ 跃迁振幅分解成不同的谱振幅之和:

$$\begin{aligned} \langle 1_1^+; T=1 | \hat{T}(M1) | 0_g^+; T=0 \rangle \\ = \sum_{ik} \frac{\langle i | \hat{T}(M1) | k \rangle}{\sqrt{3}} \langle 1_1^+; T=1 | [c_i^+ c_k]_0^+ | 0_g^+; T=0 \rangle, \quad (1) \end{aligned}$$

其中

$$[c_i^+ c_k]_M^{L\pi_0} = \sum_{m_i m_k} \delta((-1)^{l_i+l_k, \pi_0}) (-1)^{j_i-k} (j_i j_k L | m_i - m_k M) c_{i m_i}^+ c_{k m_k}. \quad (2)$$

其次, 分解 $M1$ 算符, 将自旋和轨道的贡献分开:

$$\hat{T}(M1) = \hat{T}_l(M1) + \hat{T}_s(M1) = \mu_n g_l l + \mu_n g_s s. \quad (3)$$

在图 2(c) 中: 横坐标表示对跃迁振幅 $T(M1)$ 有贡献的不同粒子-空穴(Ph) 矩阵元的组成。例如“53”表示对 $T(M1)$ 有贡献的 $0d5/2$ 粒子和 $0d3/2$ 空穴的单粒子矩阵元。图中三条折线示意跃迁振幅 $T(M1)$ 的轨道 (orbital), 自旋 (spin), 和总值 (total) 三个部份, 它们分别对应(3)式中右边的第一项和第二项及(3)式左边所给出的矩阵元值。纵坐标“对 $T(M1)$ 贡献的积累值”, 我们以轨道折线为例来说明: 对应横坐标“55”的点是 $0d5/2$ 粒子和 $0d5/2$ 空穴的单粒子矩阵元对 $T(M1)$ 轨道部份的贡献(见(1)式), 而横坐标“53”所对应的点则表示“55”矩阵元和“53”矩阵元对 $T(M1)$ 轨道部份贡献的代数和。……而横坐标最右边的“11”所对应的点则为所有各有贡献矩阵元(“55”, “53”, “35”, “33”, “11”)的总代数和。这就是所谓“积累值”的意义。

由图 2(c) 可见, 轨道部份 $0d5/2$ 占压倒优势, 而 $0d5/2$ 的自旋优势被其它轨道自

旋的贡献所抵消。轨道和自旋部份对跃迁振幅贡献的比值为 1.37, 与重核中由强 $M1$ 跃迁到达的, 多态迭加的同位旋矢量态情况相似^[1]。计算得总的约化跃迁几率 $B(M1)$ 为 $1.89 \mu_n^2$ 与实验值 $1.99 \pm 0.38 \mu_n^2$ 相比, 结果相当好。

计算表明, 对 Ne^{20} 的 7^+ 态和 Ne^{22} 的 9^+ 态, 单个行列式的 CEV 就能给出 SCM 的精确值。而 Ne^{22} 核最低的两个 7^+ 态, 超越平均场的关联作用就显得很重要, 因为 CEV 给出这两个态能量值的偏差为 970 和 740 keV, 而 CFEV 则使此偏差下降到 310 和 180 keV。由于篇幅原因, 图就不在这里列入了。

然而, 在对 Ne^{20} 和 Ne^{22} 核的 3^+ 和 5^+ 态的描述中发生了困难。其原因是, CEFV 的尝试波函数虽然包含了所有可能的二核子耦合, 但它可能丢失诸如四个核子或更多核子间的耦合, 当这些“丢失耦合”起重要作用时, 困难就会发生。值得指出的是, “耦合丢失”不是方法的本质困难, 而是来源于加在 HFB 变换上的限制。既然 CEFV 的许多优越性(这点在下面的结果中还会继续表现)来自于实数 EV(REV) 和 EFV(REFV) 的五个限制条件减少到两个^[2], 可望在释放现有 CEFV 的最后两个限制以后, 方法将进一步得到改进。

3. 偶偶核的偶角动量态

与前面的计算不同, 对这些态的描述可以应用更多限制的实平均场方法。因此本文的复平均场方法 (CEV) 的优越性可以和多种其它方法相比较而看出。

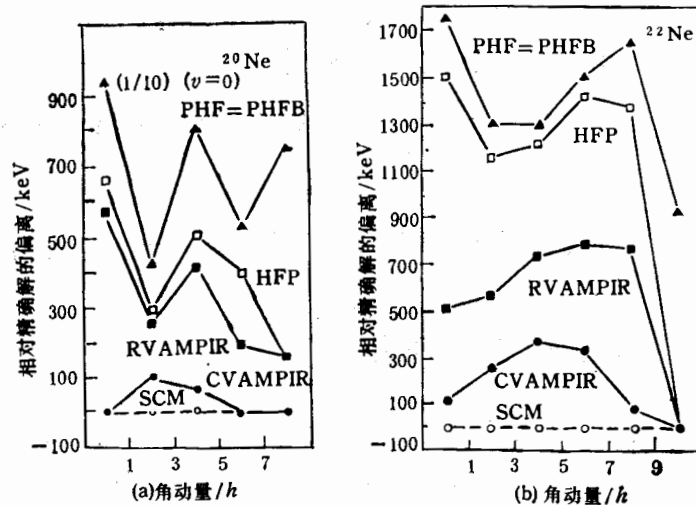


图3 不同方法计算基带各态的比较

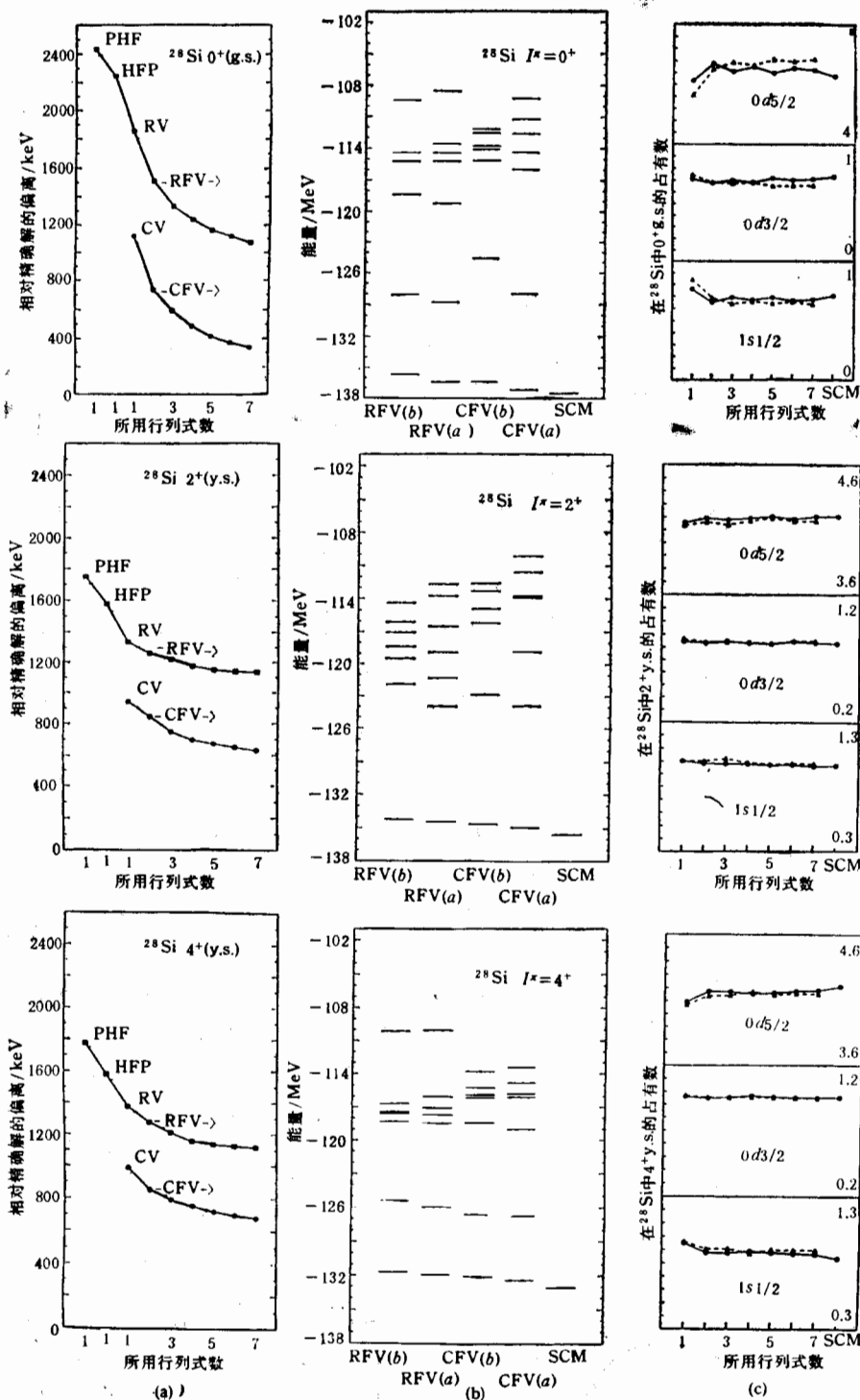
图 3(a), (b) 中的纵坐标分别为 Ne^{20} 和 Ne^{22} 基带各态(即能量最低的 $0^+, 2^+, 4^+, 6^+, 8^+$ 和 10^+ 态)能量相对于 SCM 精确解的偏差值。为了方便观看, 由横坐标标定的确定角动量值所对应的图象分离点用直线相连。(a) 中用 PHF = PHFB 标记的折线, 表示在时间反演不变, 轴对称, 质子-中子不混合, 不同宇称不混合, 及只允许实数 HF 变换这五个条件限制下的实平均场 HF 方法, 且对称性投影在变分之后。因为在内禀参照系

中,所选的哈密顿量不产生任何对关联,它与变分后的 HFB (PHFB) 结果相同. 图中 (1/10) ($\nu = 0$) 点来自于仅仅考虑 Seniority $\nu = 0$ 组态的壳模型计算. 对于形变核 Ne^{20} 这种方法相当糟. $\nu = 0$ 的 0^+ 基态高出 SCM 精确解 9MeV. PHF = PHFB 方法产生的偏差值在 2^+ 的 424 和 0^+ 的 944keV 之间. 与 SCM 基态总能量 -41.412MeV 相比,这些偏差是相当小的. 然而正如图中所示,它们随角动量的变化很大,因此基带不同态间的激发能会与精确解相差很大,而精确解却很好地再现了实验谱^[9]. 下一条由 HFP 标记的折线与 PHF 的唯一区别是, HFP 的对称性投影在变分之前. 这里相对精确解的偏差减少到 8^+ 态的 158 和 0^+ 态的 660keV 之间, 然而仍随角动量变化很大. 实数 VAMPIR (RVAMPIR) 包括了同类核子对, 除了 6^+ 态以外, 相对 HFP 都只有小的改进, 仍然有在 8^+ 态的 158 到 0^+ 态的 570keV 之间的偏差. 但如果用修正的表面 δ 相互作用 (MSDI) 和与质量无关的 Chung-Wildenthal 力^[10] (包括 $T = 1$ 的对关联) 可使结果得到可观的改进. 对 MSDI, 只有 130keV 相对于精确 0^+ 基态的能量差. 本文与质量有关的 Chung-Wildenthal 力给出的相同核子对的重要性似乎差很多. 最后, 由 CVAMPIR 标记的折线显示了复数 VAMPIR 的结果. 这时 SCM 基带的成员 $0^+, 6^+$, 和 8^+ 态的能量值均精确地再现, 2^+ 和 4^+ 态分别只有 98 和 66keV 的偏离. 这表明在这些态中以前未曾包括的非自然宇称(主要是质子-中子)对关联的重要性. 作为 $1s0d$ 壳的四个价核子体系 Ne^{20} , 它最大的 SCM 组态空间为 100×100 维的数量级, 不算是困难的 SCM 问题, 但对于至少是基带各态, 完全 SCM 展开几乎完全可用仅仅单个对称性投影行列式来代表, 这也是对 SCM 方法的一个简化.

图 3(b) 是对 Ne^{22} 核的类似研究. 同样, 除了 10^+ 态以外, 变分前投影的 HF 计算 (HFP) 给出的改进不大. 然而同类核子对现在变得更重要了: 实数 RVAMPIR 在这里得到了比 HFP 更好的结果. 这是因为与 Ne^{20} 相比, Ne^{22} 多两个中子, 来自于中子-中子的对关联增强了同类核子关联的重要性. 与实数 RVAMPIR 相比, 复数 CVAMPIR 结果好得多: 基态 0^+ 相对精确解的偏离由 516keV 下降到 111keV, 对于 8^+ 态代替 770keV 的偏离, 现在只有 77keV; 而 $2^+, 4^+, 6^+$ 和 10^+ 态与 SCM 的能量差分别为 259, 374, 334 和 0keV, 这些偏差相对于 SCM 基态能 -58.820MeV 很小. 这说明, ①即使在中子剩余的核 Ne^{22} 中, 非自然宇称对关联照样效应明显. ②至少对 Ne^{22} 的基带各态, 波函数的完全 SCM 展开仍然可用单个对称性投影的 HFB 行列式来表示. 本例 Ne^{22} 的 CVAMPIR 能量偏差比 Ne^{20} 情况稍大是因为 Ne^{22} 的 SCM 组态空间维数 1000×1000 比 Ne^{20} 情况大一个数量级.

4. Si^{28} 核的基带 $0^+, 2^+, 4^+$ 态

在所有 $1s0d$ 壳的偶偶核中, Si^{28} 的 SCM 组态空间最大, 它有 8 个价核子, 分别有 3327 个 0^+ 、13562 个 2^+ 和 15089 个 4^+ SCM 组态. 很明显, SCM 组态空间加大, 我们近似方法的偏差也会增大. 本例从“最糟”的情况来检测方法的有效性. 以便更直接验证 EFV 方法的主要目的——实现大模型空间核结构计算的可行性. 计算结果如图 4. 图中(a)为用不同方法计算所得“能量与 SCM 精确解的偏差值”(纵坐标), 随方法所用“行列式的个数”(横坐标)的变化. 多个行列式是对 RFV (Real Fed Vampir) 和 CFV

图4 ^{28}Si 核的基态 0^+ , 2^+ 和 4^+ 态

(Complex Fed Vampir) 而言. 图 4(b) 则类似于图 2(b), 画的是用 RFV 和 CFV 两种不同方法时(见横坐标), 确定态所含的各对称性投影行列式在第一组变分方程对角化之

前(b)和对角化之后(a)对“能量”(纵坐标)的贡献,最右边一列为 SCM 能量精确值。图 4(c)为质子或中子“球形基矢态的占有数”(纵坐标)作为依次建造的 Fed Vampir“组态个数”(横坐标)的函数。虚线是实数 RFV 运算结果,实线则对应虚数 CFV 运算,SCM 的占有数也在图中最右边给出。

让我们先看第一排 0^+ 态的情况。图(a)中可看到,走出简单的平均场图象,应用 FV (Fed Vampir) 无论对实数还是复数计算方法均可给出可观的改进。依次加进 6 个投影行列式的实数 RFV 得到相对于 RV (Real Vampir) 765keV 的改进,而 CFV 相对于 CV (Complex Vampir) 的改进为 778keV,最后剩下的相对 SCM 精确解的偏差只有 337keV。充分显示了不同能态之间关联作用的显著效应。若上下两条曲线比较看,则表现了 Si^{28} 核基态中非自然宇称对关联的十分重要性:复数变换单个对称性投影行列式就能得到多加 5 个行列式的 RFV 方法相同的结果,而 CFV 的最后结果比对应的 RFV 解改善 737keV 之多。第一排图(b)显示,对 Si^{28} 的 0^+ 态,RFV, CFV 分别相对于单个行列式的 RV, CV 解的主要关联作用来自高激发能组态。除第一个附加组态能量较低外(RFV 中大约 8MeV 激发能,CFV 中大约 11MeV),所有其它贡献对实数 RFV 均来自 17 到 26MeV 之间的组态,对复数 CFV 来自 21 到 24MeV 之间的组态。值得注意的是,在多个行列式 FV 变分计算的链中,组态的次序并不与对应激发能的增加相一致。对应能量的由低到高顺次排列,RFV 的组态序列为 1245367,而 CFV 的组态序列是 1235467。这种附加组态不按能量递增的次序,再次说明,超出平均场近似时,只有用变分方法才能得到与所求态关联最大的高能组态。尽管对总能量有可观的影响,组态间的关联对基态 0^+ 的占有数影响并不大,这可以从第一排图(c)看出:CV 的占有数几乎与最后的 CFV 相同,且与精确的 SCM 解相当一致。实数解表现出较大的变化,但与精确解的一致性也不差。

图 4 第二排为基带 2^+ 态情况。(a)表明 6 个附加行列式的 RFV 产生 200keV 的能量修正,而 CFV 给出 309keV 的修正。这里一个行列式的 CV 解比 7 个行列式的 RFV 解还低 195keV。但 CFV 相对于精确解(-135.536MeV)仍留下 630keV 偏差,从图中趋势看, 2^+ 态可能还包括一些 CFV 没有包含的“丢失耦合”。图(b)中 2^+ 态各组态出现的次序对 RFV 是 1524367,对 CFV 为 1275364。图(c)中占有数随组态数的变化甚至小于基态 0^+ 的情况。

第三排 Si^{28} 的 4^+ 态情况与 2^+ 态相当类似。(a)中 RFV 产生与 RV 解 260keV 的关联作用,CFV 对 CV 的关联为 311keV, CV 解在 RFV 最后解以下 127keV。在一共 7 个行列式的 CFV 以后还剩下 678keV 相对于精确解的偏差,说明 4^+ 态有某些部份要归于“丢失耦合”。(b)中 RFV 组态序列为 1246537,而 CFV 的对应序列是 1253467。(c)中占有数随组态数增加只有微小的变化。

Si^{28} 基带最低三个态的结果再一次综合在图 5 中。图中用不同的方法给出 0^+ , 2^+ 和 4^+ 态的能量(相对于 O^{16} 核)。黑点为归一化到 SCM 基态的实验值^[11]。横坐标 RFV(7) 和 CFV(7) 的(7)表示一共用了 7 个行列式。图中除了说明从 PHF 到 CFV(7) 的各种方法改进渐增以外,意外的是,尽管从 PHF 到 SCM 计算结合能增加了 1.8MeV 但 2^+ 和 4^+ 态的能量差(大约 50keV) 在所有方法中均相同。但 2^+ 到 0^+ 态的能量差情况

却不是如此。其原因是,由于 CV 和 CFV 的 HFB 行列式仍有两个对称性限制条件,又因为 0^+ , 2^+ , 4^+ 态的 SCM 组态空间一个比一个大,因此很可能在 2^+ 和 4^+ 态中丢失的耦合比 0^+ 态多,于是造成不同能态之间的能量差不平衡。

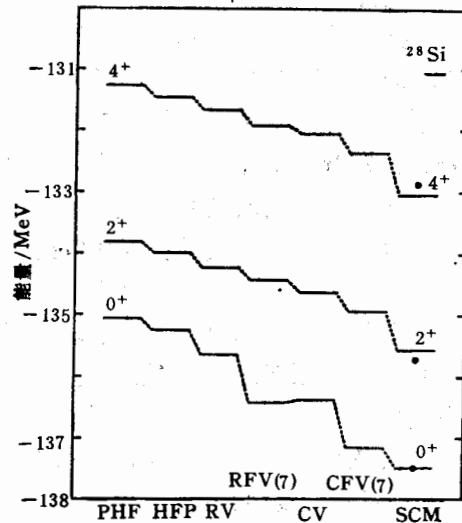


图5 不同方法得到的 ^{28}Si 基带 0^+ , 2^+ 和 4^+ 态的能量值

三、结 论

本文的整个运算说明了由于复数 EFV 方法包括了不同能态的关联作用和非自然宇称对关联,所以它可以合理地给出 SCM 精确解和实验值。从而验证了 EFV 方法的可行性,为把 EFV 方法推向 SCM 力所不及的大空间核结构计算铺平了道路。有些能态与精确解符合不理想的原因主要来自“丢失耦合”,它可望继续释放加在 HFB 变换上的限制而找回。

参 考 文 献

- [1] 郑仁蓉、朱顺泉,高能物理与核物理, Vol. 14(1990), 1088.
- [2] 郑仁蓉、朱顺泉,高能物理与核物理, 15(1991), 496.
- [3] K. W. Schmid, Zheng Renrong et al., *Nucl. Phys.*, A499(1989), 63.
- [4] Zheng Renrong, K. W. Schmid et al., *Nucl. Phys.*, A494(1989), 214.
- [5] F. Ajzenberg-Selove, *Nucl. Phys.*, A460(1986), 1.
- [6] B. H. Wildenthal, *Progr. in Part. and Nucl. Phys.*, 11(1983), 5.
- [7] K. W. Schmid, F. Gruemmer, *Rep. Progr. Phys.*, 50(1987), 731.
- [8] A. Richter, in Proc. of Int. Conf. on Nucl. Phys., Florence, Aug. 29—Sept. 3, 1983, Edizione Compositori, Florence, Italy.
- [9] F. Ajzenberg-selove, *Nucl. Phys.*, A392(1983), 1.
- [10] K. W. Schmid et al., *Nucl. Phys.*, A431(1984), 205.
- [11] P. M. Endt, C. Van der Leun, *Nucl. Phys.*, A310(1978), 1.
- [12] W. L. Bendel, L. W. Fagg, S. K. Numrich et al., *Phys. Rev.*, C3(1971), 1821.

The Verification on the Feasibility of EFV

ZHENG RENRONG LIN XINWEI

(Southwest Normal University, Chongqing 630715)

ABSTRACT

Based on the basic idea and numerical formulas of EFV different states of nuclei F^{18} , Ne^{20} , Ne^{22} , and Si^{28} in $1s0d$ shell are calculated. The feasibility of EFV is verified and the importance of various correlations in the procedure is showed.