

占有几率重整化 Hartree-Fock 近似的 Lipkin 模型

潘正英 裘志洪 孙跃德
(复旦大学物理二系)

摘 要

本文在“空穴”态占有几率重整化基础上,进一步引入了包括“粒子”态占有几率的重整化 Hartree-Fock 近似,并用 Lipkin 模型对此方法与 Hartree-Fock 近似方法进行了检验. 结果表明前者比后者更接近真实解,而且占有几率图的影响与两体相互作用强度密切相关.

一、引 言

用唯象现实核力对有限核进行的一阶 Hartree-Fock (或 BHF) 计算中,不能得到正确的核饱和性质,均方根半径和结合能的计算结果不能同时吻合,一些作者^[1,2]提出在 HF 单粒子位的定义中引入占有几率图(或重组图),这样定义的新的单粒子位称为占有几率重整化的 HF 位(简称 RHF 位). 其主要思想是认为在真实的物理基态中 HF 单粒子态中的“占有”态,不是一直被占有,而是有一定的占有几率. 按占有几率的定义

$$P_m = \langle \phi_g | b_m^\dagger b_m | \phi_g \rangle / \langle \phi_g | \phi_g \rangle \quad (1)$$

式中 b_m^\dagger 是单粒子态 $|m\rangle$ 的产生算符, $|\phi_g\rangle$ 是多体系统基态的真实波函数, RHF 单粒子位的定义如图 1(b) 所示,由占有几率 $\langle P_h \rangle (h \leq k_F)$ 的一阶近似^[4]得图 1(c).

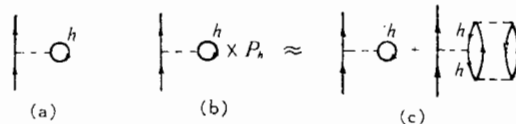


图1 单粒子位. (a) HF 单粒子位, (b) RHF 单粒子位.

我们知道 HF 单粒子位抵消了微扰展开中的所有泡泡图,可以证明^[7]在引入了 RHF 位后可以抵消掉更多的高阶连接图,如图 2 所示. 上图中(a)、(b)是 HF 单粒子位抵消图, (c1)、(c2)、(c3)、(c4)之和代表一类推广时序图,它们是引入占有几率重整化后新增加的抵消图. 抵消更多的连接图是否能改善微扰展开的收敛性? 为了研究占有几率图的影响及单粒子位与微扰展开收敛性的关系,本文用修正的 Lipkin 模型^[5,6]的严格解检验 RHF

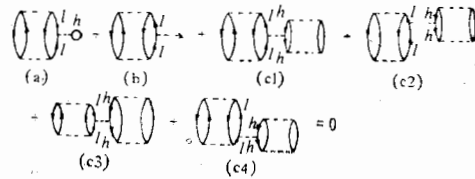


图 2 RHF 抵消图

与 HF 近似的单粒子位及基态能量.

二、RHF 方法与 Lipkin 模型

两能级多体 Lipkin 模型是检验多体方法的有效工具. 其单粒子态由两个量子数标记, $\sigma = \pm 1$ 及 $p = 1, 2, \dots, n$. 这些态由 n 个无自旋的费米子占有. 系统的哈密顿量为:

$$H = H_0 + H_1 \quad (2)$$

其中

$$H_0 = \frac{1}{2} \varepsilon \sum_{p,\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \quad (2.1)$$

$$H_1 = \frac{1}{2} v \sum_{p,p',\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p'\sigma}^+ a_{p'-\sigma} a_{p-\sigma} + \frac{1}{2} w \sum_{p,p',\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p'-\sigma}^+ a_{p'\sigma} a_{p-\sigma} \\ + \frac{1}{2} u \sum_{p,p',\sigma} \{ a_{p\sigma}^+ a_{p'\sigma}^+ a_{p'-\sigma} a_{p\sigma} + a_{p\sigma}^+ a_{p'-\sigma}^+ a_{p'\sigma} a_{p\sigma} \} \quad (2.2)$$

式中 H_0 为一体部分, H_1 为两体部分, u, v, w 是相互作用强度参数. 所有的相互作用对其中的量子数 p 是对称的. 根据算符的对易关系可引入准自旋算子

$$J_+ \equiv \sum_p a_{p+}^+ a_{p-} \\ J_- \equiv \sum_p a_{p-}^+ a_{p+} \\ J_z \equiv \frac{1}{2} \sum_{p,\sigma} \sigma a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \\ J^2 \equiv J_z^2 + \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) \quad (3)$$

将 (3) 式代入 (2) 中即得到以准自旋算子为参量的哈密顿量

$$\hat{H} = \varepsilon J_z + \frac{v}{2} (J_+^2 + J_-^2) + \frac{w}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) \\ - \frac{w}{2} \hat{N} + \frac{u}{2} (\hat{N} - 1)(J_+ + J_-) \quad (4)$$

式中

$$\hat{N} = \sum_{p,\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \quad (4.1)$$

是粒子数算子. 由于

$$[\hat{H}, J^2] = 0 \quad (4.2)$$

J^2 是好量子数, 原来占有数表象 2^n 维矩阵的对角化问题约化为 $|J^2, J_z\rangle$ 表象中 $(n+1)$ 维矩阵的对角化, 并可利用角动量代数严格求解.

由于 Lipkin 模型相互作用不改变态的量子数 p 标记, 使 HF 单粒子态及 RHF 单粒子态仍保持了对量子数 p 的对称性. 以 Lipkin 模型的未微扰单粒子态 $|u_{p\sigma}\rangle$ 为基矢, 可分别将 HF 与 RHF 单粒子态 $|\varphi_{p\alpha}\rangle$ 与 $|\varphi_{p\alpha'}\rangle$ 表示为

$$|\varphi_{p\alpha}\rangle = b_{p\alpha}^+ |0\rangle = \sum_{\sigma} c_{\alpha\sigma} |u_{p\sigma}\rangle \quad (5)$$

$$|\varphi_{p\alpha'}\rangle = b_{p\alpha'}^+ |0\rangle = \sum_{\sigma} c_{\alpha'\sigma} |u_{p\sigma}\rangle \quad (6)$$

其中

$$p = 1, 2, \dots, n, \quad \sigma = \pm 1, \\ \alpha = a, b \quad \alpha' = a', b'$$

a, a' 标记费米面以下的态, b, b' 标记费米面以上的态. 这样得到的 HF 及 RHF 单粒子态仍是 n 度简并的.

以 $|u_{p\sigma}\rangle$ 为基矢的 HF 方程为

$$\sum_{\sigma'} \langle u_{p\sigma} | H_0 + U^{\text{HF}} | u_{p\sigma'} \rangle \langle u_{p\sigma'} | \varphi_{p\alpha} \rangle = \epsilon_{\alpha}^{\text{HF}} \langle u_{p\sigma} | \varphi_{p\alpha} \rangle \quad (7.1)$$

$$\begin{cases} \langle u_{p\sigma} | U^{\text{HF}} | u_{p\sigma'} \rangle = \sum_{j=1}^n \langle u_{p\sigma} \varphi_{ja} | \nu | u_{p\sigma'} \varphi_{ja} \rangle \\ = \sum_{\substack{j=1 \\ \sigma'_i \sigma''_i}}^n c_{\alpha\sigma'_i}^* c_{\alpha\sigma''_i} \sum_{j=1}^n \langle u_{p\sigma} u_{j\sigma'_i} | \nu | u_{p\sigma'} u_{j\sigma''_i} \rangle \end{cases} \quad (7.2)$$

式中

$$\langle u_{p\sigma} u_{j\sigma'_i} | \nu | u_{p\sigma'} u_{j\sigma''_i} \rangle \equiv \langle u_{p\sigma} u_{j\sigma'_i} | H_1 | (u_{p\sigma'} u_{j\sigma''_i} - u_{j\sigma''_i} u_{p\sigma'}) \rangle$$

即 ν 顶点, 表示反对称化的 H_1 顶点.

在实际核的 RHF^[2,3] 计算中, “粒子”态的占有几率可忽略不计^[2], 所以在图 1 的定义中只考虑了“空穴”态的占有几率. 由于总粒子数守恒及 Lipkin 模型“粒子”态和“空穴”态的对称性, 把粒子态占有几率考虑在内更为合理, 本文引入了同时包括“粒子”、“空穴”态占有几率的重整化单粒子位. 定义

$$\langle i | U^{\text{RHF}} | j \rangle \equiv \sum_{h \leq k_F} \langle ih | \nu | jh \rangle \langle P_h \rangle + \sum_{p > k_F} \langle ip | \nu | jp \rangle \langle P_p \rangle \quad (8)$$

式中 $\langle P_h \rangle$ 、 $\langle P_p \rangle$ 分别是“空穴”态及“粒子”态的占有几率. 由真实占有几率的连接图展

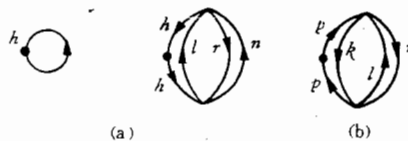


图 3 占有几率的连接图展开. (a) “空穴”态占有几率 (b) “粒子”态占有几率

开^[4]的最低阶近似得

$$\langle P_h \rangle \equiv \frac{\langle \psi_g | b_h^\dagger b_h | \psi_g \rangle}{\langle \psi_g | \psi_g \rangle} \approx 1 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,n > k_F \\ r \leq k_F}} \frac{|v_{hrln}|^2}{(\epsilon_h + \epsilon_r - \epsilon_l - \epsilon_n)^2} + \dots \quad (9.1)$$

$$\langle P_p \rangle \equiv \frac{\langle \psi_g | b_p^\dagger b_p | \psi_g \rangle}{\langle \psi_g | \psi_g \rangle} \approx \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,r \leq k_F \\ l > k_F}} \frac{|v_{krpl}|^2}{(\epsilon_k + \epsilon_r - \epsilon_p - \epsilon_l)^2} + \dots \quad (9.2)$$

式中 ϵ 是单粒子态的能量. 在占有几率的一阶近似下得到 (8) 式的图解表示:

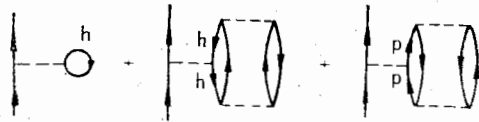


图 4 RHF_{II} 单粒子位

这样定义的单粒子位在微扰展开中又多了一类抵消图. 结果图 5 中这一类图的总贡献为零.

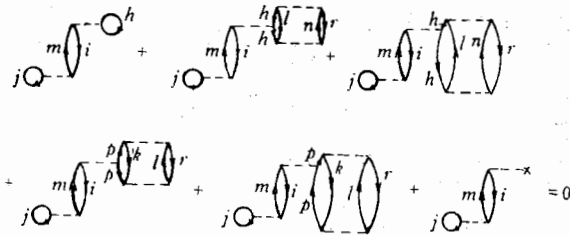


图 5 RHF_{II} 抵消图

图中 (b) 和 (c) 这一类推广时序图是引进“空穴”态占有几率新增加的抵消图, (d) 和 (e) 是由于“粒子”态占有几率的引入而新抵消的另一类推广时序图. 图 5 的解析式即

$$\sum_{\substack{m > k_F \\ j, i \leq k_F}} \frac{v_{jmi}}{A} \left\{ \sum_h v_{ihmh} \left[1 - \frac{1}{2} \sum_{l,n} \frac{|v_{hrln}|^2}{B^2} \right] + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k,r}} v_{ipmp} \frac{|v_{krpl}|^2}{C^2} - U_{im}^{\text{RHF II}} \right\} = 0 \quad (9.3)$$

式中

$$A \equiv \epsilon_i - \epsilon_m \quad B \equiv \epsilon_h + \epsilon_r - \epsilon_l - \epsilon_n$$

$$C \equiv \epsilon_k + \epsilon_r - \epsilon_p - \epsilon_l,$$

ϵ 代表单粒子能量.

对 Lipkin 模型, 由于 HF 及 RHF 单粒子态对量子数 p 是对称的, 占有几率与 p 无关, 所以

$$\begin{aligned} \langle P_{p\alpha} \rangle &= \langle P_{q\alpha} \rangle = \langle P_\alpha \rangle \\ \langle P_{p\alpha'} \rangle &= \langle P_{q\alpha'} \rangle = \langle P_{\alpha'} \rangle \end{aligned} \quad (9.4)$$

在 $|u_{p\sigma}\rangle$ 表象中,重整化 HF 方程可简化为

$$\begin{cases} \sum_{a'} \langle u_{p\sigma} | H_0 + U^{\text{RHFII}} | u_{p\sigma'} \rangle \langle u_{p\sigma'} | u_{p\sigma'} \rangle = \epsilon_a^{\text{RHFII}} \langle u_{p\sigma} | u_{p\sigma'} \rangle & (10.1) \\ \langle u_{p\sigma} | U^{\text{RHFII}} | u_{p\sigma'} \rangle = \sum_{j=1}^n \langle u_{p\sigma} \varphi_{ja'} | v | u_{p\sigma'} \varphi_{ja'} \rangle \langle P_{a'} \rangle \\ + \sum_{m=1}^n \langle u_{p\sigma} \varphi_{mb'} | v | u_{p\sigma'} \varphi_{mb'} \rangle \langle P_{b'} \rangle & (10.2) \end{cases}$$

式中 $\langle P_{a'} \rangle$ ($\langle P_{b'} \rangle$) 是费米面以下(上)的单粒子态占有几率. 对 Lipkin 模型的 HF 及 RHF 单粒子态, 精确到 (9.1)、(9.2) 式的一阶近似仍有

$$\langle P_{a'} \rangle + \langle P_{b'} \rangle = 1 \quad (11)$$

(10) 式中既要求单粒子位与单粒子波函数的自治 (HF 自治), 又要求占有几率与波函数、单粒子位自治. 将 (9.1)、(9.2) 及 (6) 式代入 (10.1)、(10.2) 即得到自治方程. 将所设的 $c_{a-}^{(0)}$ 、 $\epsilon_a^{(0)}$ 及 $\epsilon_b^{(0)}$ 代入 (10.2) 解得 $U^{\text{RHFII}^{(0)}}$, 再代入 (10.1) 得到一级近似能量 $\epsilon_a^{(1)}$ 、 $\epsilon_b^{(1)}$ 及波函数 $c_{a-}^{(1)}$, 如此继续迭代直到 $c_{a-}^{(n+1)} = c_{a-}^{(n)}$ 或 $\epsilon_a^{(n+1)} = \epsilon_a^{(n)}$, 便得到自治的单粒子位及单粒子态. 由所得的 RHF_{II} 单粒子能量及波函数, 利用基态能量的微扰展开式可以计算 RHF_{II} 近似下的基态能量. 忽略“粒子”态占有几率的 RHF 基态能量^[2]为:

$$\begin{aligned} E_0^{\text{RHF}} &= \sum_p \langle \varphi_{pa'} | H_0 | \varphi_{pa'} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{p,q} \langle \varphi_{pa'} \varphi_{qa'} | v | \varphi_{pa'} \varphi_{qa'} \rangle \langle P_{pa'} \rangle \langle P_{qa'} \rangle \\ &+ \sum_{q'} (1 - \langle P_{q'a'} \rangle) \langle \varphi_{q'a'} | U^{\text{RHF}} | \varphi_{q'a'} \rangle \end{aligned} \quad (12)$$

将 RHF 的定义 (1c) 及 (9.4) 代入 (12) 式得

$$E_0^{\text{RHF}} = \sum_p \langle \varphi_{pa'} | H_0 | \varphi_{pa'} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{q'j} \langle \varphi_{q'a'} \varphi_{ja'} | v | \varphi_{q'a'} \varphi_{ja'} \rangle (1 - \langle P_{b'} \rangle^2) \quad (12.1)$$

式中 $\langle P_{b'} \rangle$ 是 RHF 近似中“粒子”态的占有几率, 是一级小量.

$$\langle P_{b'} \rangle = 1 - \langle P_{a'} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{p',q',r} \frac{|\langle \varphi_{pa'} \varphi_{ra'} | v | \varphi_{q'b'} \varphi_{p'b'} \rangle|^2}{4(\epsilon_{b'} - \epsilon_{a'})^2} \quad (13)$$

进一步包括“粒子”态占有几率后, RHF_{II} 的基态能量为

$$E_0^{\text{RHFII}} = \sum_p \langle \varphi_{pa'} | H_0 | \varphi_{pa'} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{q'j} \langle \varphi_{q'a'} \varphi_{ja'} | v | \varphi_{q'a'} \varphi_{ja'} \rangle (1 - o(P_{b'}^2)) \quad (14)$$

在我们的计算中 $\langle P_{b'} \rangle \leq 0.08$, $\langle P_{b'} \rangle^2$ 是二级小量故忽略不计.

三、计算结果和讨论

在 Lipkin 哈密顿量中粒子数 $n = 4$ 及 $n = 8$, 相互作用强度参数取表中所列的值, 我们计算了基态能量的严格解、HF 及 RHF_{II} 近似解, 并将这些结果进行了比较, 结果表明:

1) 考虑基态能量微扰展开的一阶近似连接图时, 精确到四位有效数字 E_0^{RHF} 与 E_0^{RHFII} 相等.

$$\langle \phi_0^{\text{RHF}} | H | \phi_0^{\text{RHF}} \rangle \approx \langle \phi_0^{\text{HF}} | H | \phi_0^{\text{HF}} \rangle \quad (15)$$

由于 $|\phi_0^{\text{HF}}\rangle$ 是满足变分条件 $\delta\langle\phi_0^{\text{HF}}|H|\phi_0^{\text{HF}}\rangle = 0$ 的变分极值, $|\phi_0^{\text{RHF}}\rangle$ 不再满足此变分条件, 对任何不满足变分条件的 Slater 行列式都有

$$\langle\phi'_0|H|\phi_0\rangle \geq E_0^{\text{HF}} \quad (16)$$

(15) 式中等号的成立是因为占有几率图仅考虑了剩余相互作用的影响, 不会破坏原变分结果.

2) 当相互作用强度参数 W 为负值时 (表 1.1, 1.2), 单粒子能级定性结果如下:

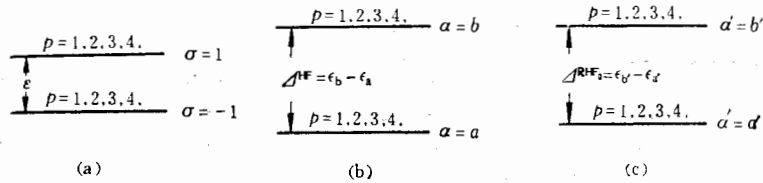


图 6 (a) Lipkin 模型无相互作用单粒子能级 (b) HF 未微扰单粒子能级 (c) RHF_{II} 未微扰单粒子能级

此时 $\Delta^{\text{HF}} \approx \Delta^{\text{RHF}_{\text{II}}} > \epsilon$, 且随着二体相互作用强度的增大, Δ^{HF} 和 $\Delta^{\text{RHF}_{\text{II}}}$ 也随之增大, 因此以 HF 及 RHF_{II} 单粒子态为基矢能改善连接图微扰展开的收敛性. HF 及 RHF_{II} 基态都是稳定的.

由于占有几率图是对三体图的重组, 其结果抵消了微扰展开中的大量高阶图. 所以我们同时计算了包括二阶图在内的基态能量 $E_0^{\text{RHF}_{\text{II}}}$.

$$E_0^{\text{RHF}_{\text{II}}} = \sum_p \langle\varphi_{p a'}|H_0|\varphi_{p a'}\rangle + \left(\text{O-O} + \left[\text{---} \right] \right) (H_0(P_b^2)) \quad (17)$$

结果 $E_0^{\text{RHF}_{\text{II}}}$ 比 E_0^{HF} 更接近基态能量的严格解.

3) 相互作用强度参数 W 为正值时 (表 1.3), 单粒子能级定性如下

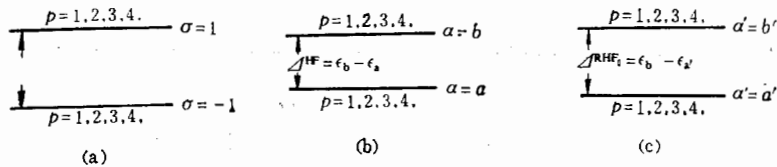


图 7 (a) Lipkin 模型无相互作用单粒子能级 (b) HF 未微扰单粒子能级 (c) RHF_{II} 未微扰单粒子能级.

此时

$$\Delta^{\text{HF}} < \epsilon \quad \Delta^{\text{RHF}_{\text{II}}} = \epsilon_{b'} - \epsilon_{a'} < \epsilon \quad \Delta^{\text{RHF}_{\text{II}}} > \Delta^{\text{HF}}$$

由侵入态的计算^[6]可知在此情况下, 以 H_0^{HF} 为未微扰哈密顿量的有效相互作用展开是发散的, 与 HF 未微扰基比较, 以 RHF_{II} 单粒子态为基的微扰展开收敛性略有改善, 但 $\Delta^{\text{RHF}_{\text{II}}}$ 仍较 ϵ 小, 基态仍是不稳定的, 尚需考虑其它更有效的方法以改善微扰展开的收敛性.

4) 表 1 与表 2 的比较表明占有几率图的影响与粒子数关系不大.

结果表明, 占有几率图的影响与相互作用强度有密切关系, 当相互作用强度减弱时,

表 1 四粒子 Lipkin 模型基态能量严格解、HF 及 RHF_{II} 近似解表 1.1 $\varepsilon = 1, u = v = 0.3W$

W/ε	-0.10	-0.20	-0.26	-0.30	-0.40	-0.60	-0.80	-1.00
E_0^{exact}	-2.0162	-2.1111	-2.2535	-2.3883	-2.8120	-3.8191	-4.9054	-6.0238
E_0^{HF}	-2.0132	-2.1071	-2.2535	-2.3861	-2.7936	-3.7562	-4.8196	-5.9079
$E_0^{\text{RHF}_{II}}$	-2.0132	-2.1071	-2.2535	-2.3861	-2.7936	-3.7562	-4.8196	-5.9079
$E_{0z}^{\text{RHF}_{II}}$	-2.0154	-2.1090	-2.2535	-2.3868	-2.8004	-3.7882	-4.8583	-5.9615
$P_{b'}$	0.0005	0.0003	0.0000	0.0001	0.0007	0.0016	0.0021	0.0023

表 1.2 $\varepsilon = 1, u = 0.3W, V = 10u$

W/ε	-0.20	-0.30	-0.60	-1.00
E_0^{exact}	-3.2926	-4.5365	-8.6065	-14.182
E_0^{HF}	-3.1465	-4.3981	-8.4092	-13.878
$E_0^{\text{RHF}_{II}}$	-3.1465	-4.3981	-8.4092	-13.878
$E_{0z}^{\text{RHF}_{II}}$	-3.2204	-4.4821	-8.5486	-14.100
$P_{b'}$	0.0067	0.0051	0.0042	0.0040

表 1.3 $\varepsilon = 1, u = V = 0.3W$

W/ε	0.10	0.60	$E_0^{\text{RHF}_{II}}$	-2.006	-2.085
E_0^{exact}	-2.008	-2.127	$E_{0z}^{\text{RHF}_{II}}$	-2.009	-2.248
E_0^{HF}	-2.006	-2.087	$\Delta^{\text{RHF}_{II}} = \varepsilon_{b'} - \varepsilon_{a'}$	0.902	0.513
$\Delta^{\text{HF}} = \varepsilon_b - \varepsilon_a$	0.902	0.413	$P_{b'}$	0.0008	0.080

表 2 八粒子 Lipkin 模型基态能量严格解、HF 及 RHF_{II} 近似解 $\varepsilon = 1, u = v = 0.3W$

W/ε	-0.10	-0.20	-0.26	-0.40	-0.60	-0.80	-1.00
E_0^{exact}	-4.3601	-6.2228	-7.6318	-11.141	-16.333	-21.591	-26.876
E_0^{HF}	-4.3593	-6.2040	-7.5989	-11.085	-16.257	-21.503	-26.779
$E_0^{\text{RHF}_{II}}$	-4.3593	-6.2040	-7.5989	-11.085	-16.257	-21.503	-26.779
$E_{0z}^{\text{RHF}_{II}}$	-4.3597	-6.2154	-7.6212	-11.132	-16.335	-21.611	-26.915
$P_{b'}$	0.00004	0.00058	0.00087	0.0012	0.0013	0.0014	0.0014

费米面以下的单粒子态的占有几率近似为1, RHF_{II} 自动过渡到 HF, 此时高阶图对基态能量几乎没有贡献, 随着相互作用强度的增加, 占有几率图的影响也随之增大, 可望在实际核的 Hartree-Fock 计算中重整化的影响会显得较为重要。

本工作得到郭子斯教授的热情指导, 工作过程中和高能所厉光烈同志进行过有益的讨论, 作者表示感谢。

参 考 文 献

- [1] K. T. R. Davies and M. Baranger, *Phys. Rev.*, C1(1970), 1640.
- [2] B. H. Brandow, *Phys. Rev.*, 152(1966), 863.
- [3] R. J. McCarthy and K. T. R. Davies, *Phys. Rev.*, C1(1970), 1644.
- [4] D. J. Thouless, *The Quantum Mechanics of Many-Body Systems.* (Academic Press Inc., New York, 1961), p. 47.

- [5] H. J. Lipkin, N. Meshkov and A. J. Glick, *Nucl. Phys.*, **62**(1965), 188.
[6] J. M. Leinaas, T. T. S. Kuo, *Phys. Lett.*, **62B**(1976), 275.
[7] T. T. S. Kuo and E. O. Osnes, "Lecture Notes on Many Body Theory of Nuclear Structure," unpublished (Univ. of Oslo and State Univ. of New York at Stony Brook, 1976).

OCCUPATION RENORMALIZED HARTREE-FOCK APPROXIMATION IN LIPKIN MODEL

PAN ZHENG-ING QIU ZHI-HONG SHENG YIAO-DE
(*Fu-dan University*)

ABSTRACT

The occupation renormalized Hartree-Fock single particle potential is extended to include the 'particle' state occupation. The exact solution, the solution of the occupation renormalized Hartree-Fock approximation and that of the Hartree-Fock approximation are calculated in Lipkin Model. It turns out that the RHF solution is more close to the exact one than the HF solution. The effect of occupation probability depends on the strength of the interaction of the two body term.