

Hartree-Fock 解多重性的研究^{*}

井孝功 赵国权 姚玉洁 杨善德 吴式枢

(吉林大学理论物理中心、物理系, 长春 130023)

摘 要

本文利用推广的三能级可解模型对 Hartree-Fock (HF) 单粒位的自洽求解做了详细考察, 指出求解过程中出现的多解性应当引起注意. 此外, 本文还讨论了 HF 解在力参数的某些区域发生突变的原因、它的稳定性以及它和两体相互作用强度的关系.

一、引 言

众所周知, 核多体问题的近似求解与单粒基底的选择有关, 而 HF 单粒位形式简单、便于计算, 作为初级近似在微观领域的理论计算中已被广泛应用. 由于推广的三能级可解模型^[1]可以严格求解, 因此, 它为各种理论方法优劣的比较提供了一个可靠的依据. 本文利用推广的三能级可解模型对 HF 单粒位的自洽求解过程作了详细考察, 计算结果表明求解过程中出现的多解性应当引起注意, 而且, 解的稳定性判断也不容忽视. 文中还对 HF 解在力参数一定区域发生突变的某些原因及 HF 解的稳定性与两体相互作用强度的关系进行了讨论. 期望上述结论对真实核力下多体问题的理论计算有益.

二、三能级可解模型下的 HF 本征方程

HF 单粒本征方程为

$$(t + u^{\text{HF}})|\alpha\rangle = \epsilon_{\alpha}^{\text{HF}}|\alpha\rangle, \quad (1)$$

其中, 由变分原理导出的 HF 单粒位 u^{HF} 满足

$$u_{\alpha\beta}^{\text{HF}} = \sum_{\gamma} v_{\alpha\beta\gamma} n_{\gamma}, \quad (2)$$

n_{γ} 为 γ 单粒态上的粒子数, v 为两体相互作用. 在推广的三能级可解模型中, 由于两体相互作用只存在于相同退化指标的态间, 且体系的哈密顿量与退化指标无关, 因此, HF 单粒能级的退化指标与模型单粒基 $|pa\rangle$ (a 是能级标志, 可取 z, y, x ; p 是退化标志, 取 $1, 2, 3, \dots, \Omega$, Ω 为单粒能级退化度) 退化指标相同, 且 HF 本征态 $|\rho\alpha\rangle$ 可展开为

* 国家自然科学基金和国家教委博士点基金资助.

本文 1992 年 3 月 24 日收到.

$$|p\alpha\rangle = \sum_a |pa\rangle C_{a\alpha}. \quad (3)$$

HF 本征方程可以写成

$$\sum_{b=\alpha, \gamma, \beta} [u_{pa\alpha b}^{\text{HF}} + (\epsilon_a - \epsilon_a^{\text{HF}})\delta_{ab}] C_{ba} = 0, \quad (4)$$

其中, ϵ_a 为模型基单粒能量, ϵ_a^{HF} 、 C_{ba} ($\alpha=1, 2, 3$) 分别为待求的 HF 单粒能量与相应的本征矢. 为了简单, 只考虑满壳(粒子数 $N=\Omega$) 的情形, 这时 $n_1=1, n_2=n_3=0$.

利用

$$u_{pa\alpha b}^{\text{HF}} = \sum_{qcd} C_{c1}^* v_{paqc\alpha bqd} C_{d1} \quad (5)$$

及文献[1]所给出的两体相互作用阵元 $v_{paqc\alpha bqd}$ 的表达式可导出计算 $u_{pa\alpha b}^{\text{HF}}$ 的具体公式, 详见附录. 从 u^{HF} 阵元的表达式不难看出, 它不仅与力的强度参数 (U, V, X, W, T) 及退化度 (Ω) 有关, 而且与待求的 HF 波函数 C_{a1} 相关, 所以, HF 所满足的方程已不是通常意义下的本征方程, 不能用通常求解本征方程的方法去求解, 而必须进行自洽求解.

所谓自洽求解, 即先给定 $u_{pa\alpha b}^{\text{HF}}$ 中 C_{a1} 的初值 $C_{a1}^{(0)}$, 再计算 $u_{pa\alpha b}^{\text{HF}}$ 并求解 HF 本征方程, 将求得的波函数 $C_{a1}^{(1)}$ 与初值 $C_{a1}^{(0)}$ 比较, 若其重迭

$$D = |\sum_a C_{a1}^{(0)*} C_{a1}^{(1)}|$$

满足事先给定的精度要求, 即 $D \geq \Delta$ (本文选 $\Delta=0.999999$), 则认为自洽成功, 否则将 $C_{a1}^{(1)}$ 作为初值重复上述步骤, 直至满足精度要求为止.

三、计算结果与讨论

1. HF 自洽求解过程中的多解性

由于 u^{HF} 的矩阵元与所选 HF 波函数初值 $C_{a1}^{(0)}$ 有关, 而 $C_{a1}^{(0)}$ 除了要满足归一化条件

$$\sum_a |C_{a1}^{(0)}|^2 = 1$$

外没有其它的限制条件, 原则上, 初值可以有无穷多种选择, 因此, 可能导致对一组确定的力参数得到多组不同的自洽结果, 此即 HF 自洽求解过程中的多解性. 本文在计算中选取 96 组不同的归一化的初值.

例如, 选 $\Omega=4, \epsilon_x=2.5, \epsilon_y=2.0, \epsilon_z=0.0$ (下同), 针对不同力参数的计算结果列在表 1 与表 2 中.

表中

$$\bar{H}(4) = \langle \Phi_0(4) | \hat{H} | \Phi_0(4) \rangle,$$

$$B_0(4) = |\langle \Psi_0(4) | \Phi_0(4) \rangle|,$$

$E_0(4)$ 与 $|\Psi_0(4)\rangle$ 分别为 $N=4$ 粒子体系严格基态能量与本征矢, $|\Phi_0(4)\rangle$ 是由 HF 波函数 C_{a1} 构成的 $N=4$ 粒子体系的 Slater 行列式.

在表 1 中, 各参数下均有 3 组不同的自洽解, 在表 2 中, 随着参数 T 的增加, 解的组数由 1 增加到 4. 出现多组解的直接原因是 u^{HF} 与待求 HF 波函数 C_{a1} 有关, 而其根本原因是由于变分原理给出 $\bar{H}(4)$ 的极值可能有多.

表 1

X	$E_0(4)$	$\epsilon_{\text{HF}}^{\text{H}}$	$\bar{H}(4)$	$B_0(4)$	\mathcal{E}_{min}
-0.50	-19.86	-7.58	-12.70	0.36	-1.86
		-7.55	-12.66	0.41	-2.37
		-7.46	-12.27	0.47	-4.31
-0.35	-18.35	-8.05	-13.67	0.41	0.86
		-8.01	-13.56	0.45	0.48
		-7.86	-12.92	0.50	-1.11
-0.20	-17.33	-8.54	-14.66	0.50	3.44
		-8.49	-14.51	0.51	3.18
		-8.29	-13.65	0.50	1.97

$$U=0.22, V=-0.70, W=1.0, T=2.0$$

表 2

T	$E_0(4)$	$\epsilon_{\text{HF}}^{\text{H}}$	$\bar{H}(4)$	$B_0(4)$	\mathcal{E}_{min}
1.40	-25.83	-11.70	-20.88	0.90	8.21
1.85	-24.24	-9.91	-17.47	0.84	3.95
		-7.83	-11.76	0.24	3.82
1.90	-24.10	-9.71	-17.10	0.83	3.41
		-8.82	-15.47	0.58	4.83
		-7.92	-11.94	0.24	3.89
1.97	-23.92	-9.43	-16.59	0.82	2.59
		-9.13	-16.43	0.63	2.35
		-8.91	-15.62	0.54	2.58
		-8.04	-12.19	0.24	3.98
1.98	-23.90	-9.39	-16.52	0.82	2.37
		-9.14	-16.45	0.63	2.55
		-8.92	-15.64	0.54	2.76
		-8.06	-12.23	0.24	4.00
1.99	-23.87	-9.35	-16.44	0.82	2.34
		-9.15	-16.47	0.63	2.74
		-8.94	-15.67	0.54	2.93
		-8.08	-12.27	0.24	4.01

$$U=-0.55, V=-1.80, X=-0.40, W=-0.45$$

为了从求得的多组解中选出满足要求的稳定解,第一步要判断解的稳定性. Thouless 给出 HF 取稳定解的条件^[2]是:若满足

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \quad (6)$$

的 \mathcal{E} 的最小者 $\mathcal{E}_{\text{min}} > 0$, 则 HF 为稳定解. 其中

$$\begin{aligned} A_{\min ij} &= (\epsilon_m - \epsilon_i) \delta_{mn} \delta_{ij} + V_{mjn}, \\ B_{\min ij} &= V_{mij}, \end{aligned} \quad (7)$$

m, n 取单粒子态, i, j 取单洞眼态. 由上式求出的 \mathcal{E}_{\min} 已列在表 1 与表 2 中, 显然, 在表 1 中, $X = -0.50$ 时无稳定 HF 解, $X = -0.35$ 时头两组为稳定解, 而 $X = -0.20$ 时三组解皆为稳定解. 在表 2 中, 全部为稳定的 HF 解. 关于非稳定解的详细讨论, 将在另文中给出.

第二步是要根据所处理的具体问题在稳定解中找出满足某种要求的解. 由于 HF 单粒位是由能量变分原理导出的, 因此, 通常的要求是由 $\bar{H}(4)$ 取最小值确定 HF 解(简称方式 1). 据此不难看出, 在表 1 中, $X = -0.35$ 与 $X = -0.20$ 时皆应选中第一组解, 在表 2 中, $T = 1.40 - 1.98$ 时也皆选中第一组解, 而 $T = 1.99$ 时应选其第二组解. 显而易见, 在多组解中, 如此选出的解能保证在计算 $\bar{H}(4)$ 时得到最佳结果. 实际上, 这种选择方式并非唯一可行的, 例如, 从波函数最大重叠原理出发, 亦可按 $B_0(4)$ 取最大值的的要求选择解(简称方式 2). 当高级近似可以忽略, 即 HF 是很好的近似时, 可以期望两种选择方式给出一致的结果. 在表 2 中, 当 $T = 1.40 - 1.98$ 时, 两种选择方式的确给出了完全一致的结果. 此外, 本文还给出了两者不一致的实例, 例如, 在表 1 中, $X = -0.35$ 与 $X = -0.20$ 时, 按方式 1 皆选中第一组, 而按方式 2 则皆选中第二组, 在表 2 中, $T = 1.99$ 时, 按方式 1 选中第二组, 而按方式 2 则选中第一组. 这里, 两种选择方式得到的结果表现出了不协调, 而它却为根据所处理的具体问题的要求选择解提供了一种可能, 若关注 $\bar{H}(4)$ 的结果可按方式 1 选, 若更关注 $B_0(4)$ 的结果则可按方式 2 选. 应该指出, 除上述选择方式外, 也不排除使用其它的选择方式.

2. 与体系相变无关的 HF 解突变

我们在文献[1]中曾指出 HF 解在参数的某些区域会发生突变, 在文献[3]中已详细地讨论了 HF 解突变与体系相变的关系. 本文将探讨在力参数的某些区域体系的严格解并无相变发生而 HF 解发生突变的原因. 例如, 在表 2 中, 当 T 从 1.98 变到 1.99 时, 按照方式 1 所选的 HF 解就会发生突变, 而此时体系并无相变发生. 为了说明 HF 解发生这种突变的原因, 将表 2 中对应 $\bar{H}(4)$ 最低的两组稳定解的 $\bar{H}(4)$ 随参数 T 变化的曲线绘在图 1.

从图 1 可看出, 两组解对应的 $\bar{H}(4)$ 随 T 的变化都是平滑的, 但两者在 $T = 1.987$ 附近相交, 按选择方式 1, 当 $T < 1.987$ 时应选第一组解, 而当 $T > 1.987$ 时应选第二组解, 实际上, 两者差别是明显的, 于是, HF 解便在 $T = 1.987$ 附近发生了突变. 产生这种突变的直接原因是作为选择解的条件的量发生交叉.

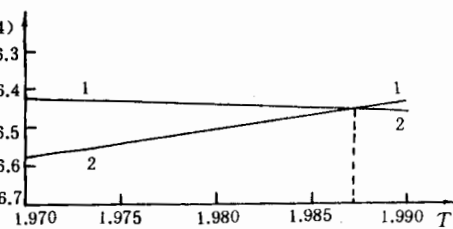


图 1

为了说明 HF 解发生突变的另一原因, 将有关结果列在表 3, 表中其它力参数取值与表 2 同. 由表 3 中 \mathcal{E}_{\min} 数值可知各组解都是稳定的. 当两组解的 $\bar{H}(4)$ 相差不大而 $B_0(4)$ 又有明显差别时, 也可以用方式 2 作为选择解的条件. 据此由表 3 可以看出, $T \leq 2.09$ 时应取第三组解, 而 $T = 2.10$ 时只能选其第一组

解,两组解有明显差别导致 HF 解发生突变.这种 HF 解突变产生的直接原因是随着 T 的增加第三组解的稳定性逐渐变坏,直至 $T=2.10$ 时第三组解不再出现.

表 3

T	$E_0(4)$	ϵ_1^{HF}	$H(4)$	$B_0(4)$	\mathcal{E}_{\min}
2.08	-23.67	-9.28	-16.67	0.618	4.13
		-9.07	-15.90	0.532	4.21
		-8.97	-15.81	0.803	0.75
		-8.24	-12.59	0.245	4.13
2.09	-23.65	-9.29	-16.70	0.617	4.27
		-9.08	-15.93	0.532	4.34
		-8.92	-15.75	0.801	0.29
		-8.25	-12.63	0.245	4.14
2.10	-23.63	-9.30	-16.72	0.617	4.40
		-9.10	-15.96	0.531	4.46
		-8.27	-12.66	0.245	4.15

总之,计算结果表明无论用哪种方式选择的 HF 解,在上述参数区域附近都会有突变发生,只不过发生突变的具体位置有所不同而已.由于体系在此区域附近无相变发生,因此,这种 HF 解的突变是 HF 近似方法本身带来的,与体系的真实相变无必然联系.

3. HF 解的稳定性与力参数的关系

为了解 HF 解的稳定性与两体相互作用强度的关系,我们逐个对力的强度参数(取其它力的强度参数为零)进行了系统地考察,计算结果列在表 4 中,从表 4 可以看出,随着力的强度参数的增加,也就是随着两体相互作用的增强,HF 解的稳定性会减弱,以至变为非稳定解,甚至无解.

表 4

参数值	$\mathcal{E}_{\min}(T)$	$\mathcal{E}_{\min}(W)$	$\mathcal{E}_{\min}(X)$	$\mathcal{E}_{\min}(V)$	$\mathcal{E}_{\min}(U)$
0.2	1.60	1.60	1.02	0.80	1.85
0.4	1.02	1.20	-0.16	-0.40	1.75
0.6	0.43	0.80	-1.36	-1.60	
0.8	-0.16	0.40	-2.56	-2.80	
1.0	-0.76		-3.76	-4.00	

附 录

$$\begin{aligned}
 u_{pzpc}^{\text{HF}} = & C_{z1}^* [U(\Omega-1)(C_{y1}+C_{z1})] \\
 & + C_{y1}^* [U(\Omega-1)C_{z1} - 2WC_{y1} + (U\Omega-T)C_{z1}] \\
 & + C_{z1}^* [U(\Omega-1)C_{z1} + (U\Omega-T)C_{y1} - 2WC_{z1}];
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_{pzpy}^{\text{HF}} &= C_{z1}^* [U(\Omega-1)C_{x1} + 2V(\Omega-1)C_{y1} + 2X(\Omega-1)C_{z1}] \\
&\quad + C_{y1}^* [2W\Omega C_{x1} + U(\Omega-1)C_{y1} + (\Omega T - U)C_{z1}] \\
&\quad + C_{z1}^* [(\Omega T - U)C_{x1} + 2X(\Omega-1)C_{y1} + (\Omega U - T)C_{z1}], \\
u_{pzpx}^{\text{HF}} &= C_{z1}^* [U(\Omega-1)C_{x1} + 2X(\Omega-1)C_{y1} + 2V(\Omega-1)C_{z1}] \\
&\quad + C_{y1}^* [(T\Omega - U)C_{x1} + (U\Omega - T)C_{y1} + 2X(\Omega-1)C_{z1}] \\
&\quad + C_{z1}^* [2W\Omega C_{x1} + (\Omega T - U)C_{y1} + U(\Omega-1)C_{z1}], \\
u_{pypy}^{\text{HF}} &= C_{z1}^* [-2WC_{x1} + U(\Omega-1)C_{y1} + (U\Omega - T)C_{z1}] \\
&\quad + C_{y1}^* [U(\Omega-1)(C_{z1} + C_{x1})] \\
&\quad + C_{z1}^* [(U\Omega - T)C_{x1} + U(\Omega-1)C_{y1} + 2WC_{z1}], \\
u_{pypx}^{\text{HF}} &= C_{z1}^* [(U\Omega - T)C_{x1} + (T\Omega - U)C_{y1} + 2X(\Omega-1)C_{z1}] \\
&\quad + C_{y1}^* [2X(\Omega-1)C_{x1} + U(\Omega-1)C_{y1} + 2U(\Omega-1)C_{z1}] \\
&\quad + C_{z1}^* [(T\Omega - U)C_{x1} + 2W\Omega C_{y1} + U(\Omega-1)C_{z1}], \\
u_{pxpx}^{\text{HF}} &= C_{z1}^* [-2WC_{x1} + (U\Omega - T)C_{y1} + U(\Omega-1)C_{z1}] \\
&\quad + C_{y1}^* [(U\Omega - T)C_{x1} - 2WC_{y1} + U(\Omega-1)C_{z1}] \\
&\quad + C_{z1}^* [U(\Omega-1)(C_{z1} + C_{y1})].
\end{aligned}$$

且有

$$u_{pypz}^{\text{HF}} = u_{pzpy}^{\text{HF}}; \quad u_{pxpe}^{\text{HF}} = u_{pzpx}^{\text{HF}}; \quad u_{pzpy}^{\text{HF}} = u_{pypx}^{\text{HF}}.$$

参 考 文 献

- [1] Y. J. Yao et al., *High Energy Phys. and Nucl. Phys.*, **14**(1990), 83.
 [2] D. J. Thouless, *Nucl. Phys.*, **21**(1960), 225.
 [3] S. S. Wu et al., *Chinese Phys. Lett.*, **8**(1991), 454.

Study of Multiplicity of Hartree-Fock Solutions

JING XIAOGONG ZHAO GUOQUAN YAO YUJIE YANG SHANDE WU SHISHU
 (Jilin University, 130023)

ABSTRACT

By means of a generalized three-level solvable model, the self-consistent procedure for solving the Hartree-Fock (HF) equation is studied in some detail. It is pointed out that due attention must be paid for the multiplicity of solutions. Different criteria for the choice of an adequate solution are considered and discussed. Further, the reason of the sudden jump of the HF solution in certain force-parameter (FP) region, the stability of the HF solution and its dependence on FPs are investigated.