

描述大形变核中对力的硬核 Bose-Hubbard 模型 *

潘 峰^{1,2} 戴连荣¹

1(辽宁师范大学物理系 大连 116029)

2(路易斯安那州立大学物理及天文系 巴顿鲁日 70803-4001 美国)

摘要 讨论了一种描述大形变偶偶核邻近轨道对力相互作用近似的硬核 Bose-Hubbard 模型. 利用代数方法得到了该模型对激发谱和相应波函数的严格解. 该结果可推广到具有任意自旋和有限格点的硬核 Bose-Hubbard 和 Fermi-Hubbard 模型中去.

关键词 硬核 Bose-Hubbard 模型 对力 邻近轨道相互作用近似

近来, Bose-Hubbard 模型(BHM)^[1] 不断受到理论和实验研究者的广泛注意, 这是因为该模型可用于描述粒状和具有短程关联的超导体^[2,3]、Josephson 结阵^[4,5], 以及近来令人关注的光学阵列中的冷却原子^[6]. 在这些情况下, 相关的粒子, 即 Cooper 对或阵列通量至少是近似为玻色型的. 类似的情况出现在原子核的对力模型中. 众所周知, 所有轨道之间的对力强度都取为常数的模型在许多情况下, 特别是对于大形变核系统并不是好的近似. 在文献[7]中提出了一种依赖于轨道的高斯型对力相互作用

$$G_{\alpha\beta} = A_e^{-B(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)^2}, \quad (1)$$

其中 ϵ_α 和 ϵ_β 分别为 α 和 β 轨道中的单粒子能量, 参数 $A < 0$ 和 $B > 0$ (可根据常数对力强度模型中给出的第一激发态来确定). 在这个模型中, 显然能级靠得较近的轨道之间的对力最强; 当两轨道之间的能量差增大时对力强度很快衰减. 作为近似, 我们可进一步把大形变核系统中的对力简化为邻近轨道相互作用, 即最邻近轨道之间的对力仍用(1)式给出, 而其它情形下的对力忽略不计.

令 a_i^\dagger 为第 i 轨道中的单核子产生算符, a_i^\dagger 为对应的时间反演态算符. 费米子对算符可表为

$$b_i^\dagger = a_i^\dagger a_i^\dagger, \quad b_i = a_i a_i. \quad (2)$$

它们满足如下广义形变玻色子代数^[8]:

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}(1 - 2N_i), \quad [N_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}b_j^\dagger, \quad [N_i, b_j] = -\delta_{ij}b_j, \quad (3)$$

2000-04-29 收稿

* 国家教委重点跟踪服务基金(960401)及辽宁省教委科研基金资助(990311011)

其中 $N_i = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i + a_i^\dagger a_i)$. 对偶偶核系统 N_i 是第 i 轨道的核子对数算符. 由于泡利原理, 每一轨道上最多只能容纳一个对. 所以这时的核子对可被等价地当做玻色子来处理, 但组态空间和哈氏量都要被投影在无轨道被双对占有的子空间内. 这样, 偶偶核系统平均场加对力的哈氏量可写为

$$\hat{H} = \sum_i t_{ii} b_i^\dagger b_i. \quad (4)$$

算符, $t_{ii} = 2\epsilon_i + G_{ii}$, 其中 $G_{ii} = A$, ϵ_i 为单核子能量, $t_{i+1,i} = t_{i,i+1} = G_{i+1,i}$, 对其它情况 $t_{ij} = 0$. 显然(4)式对应一种特殊的硬核 BHM. 其差别仅在于在 BHM 中 t 矩阵元 $t_{i+1,i}$ 都相等, $t_{ii} = 0$, 而在本模型中 $t_{i+1,i}$ 一般是依赖于轨道的. 此外, 在核对力模型中轨道数是有限的, 而在 BHM 中一般系统的格点是无限的和满足周期性边界条件的.

以往核对力哈氏量的对角化都近似用 BCS 理论和 HFB 方法来处理, 并结合无规相近似(RPA)来进一步修正. 但是, BCS 和 HFB 理论在处理核系统时都存在严重的缺陷, 粒子数不守恒就是其中之一, 这就产生了多余伪态、波函数不正交等等的一系列弊病. 另一方面, BCS 和 HFB 方法还割裂了一类很重要的物理情形. 利用粒子数投影技术的纠正方法使计算更加复杂化, 且对于对力高激发谱的修正并没有显著的作用. 近年来, 比波格留波夫变换更好的计算技术得到了很大的发展^[7,9], 这些方法都克服了粒子数不守恒的缺陷. 在这些近似计算中都要用到组态能量或福克空间基底的截断技术.

对力问题的严格解最先由 Richardson 对等强度对力 $G_{ij} = -|G|$ 哈氏量的波函数和激发能的解析解开始^[10-12]. 将此推广到依赖轨道对力严格解的方法和结果也已在最近完成^[13-15]. 这些工作都是依靠 Bethe 假定, 从而要利用一组非线性方程来确定激发能和相应的波函数. 在凝聚态物理中, 类似的方法早已用于对硬核 BHM 的求解^[16]. 当轨道数和价核子对数都很大时, 求出这类非线性方程的所有根是非常困难的, 而在大形变核系统中所涉及的轨道数和价核子对数都很大. 所以对大形变核的实际计算, Bethe 假定方法并不实用. 本文将指出, 描述大形变核的对力哈氏量(4)式可利用简单快速的代数方法对角化.

容易验证, k 对激发时(4)式的本征态可表示为

$$|k; \zeta\rangle = \sum_{i_1 i_2 \dots i_k} C_{i_1 i_2 \dots i_k}^{(\zeta)} b_{i_1}^\dagger b_{i_2}^\dagger \dots b_{i_k}^\dagger |0\rangle, \quad (5)$$

其中 $|0\rangle$ 是硬核玻色子的真空态, 求和指标要满足条件 $i_1 < i_2 < \dots < i_k$, $C_{i_1 i_2 \dots i_k}^{(\zeta)}$ 是由下式给出的 Slater 行列式,

$$\begin{vmatrix} g_{i_1}^{\zeta_1} & g_{i_2}^{\zeta_1} & \cdots & g_{i_k}^{\zeta_1} \\ g_{i_1}^{\zeta_2} & g_{i_2}^{\zeta_2} & \cdots & g_{i_k}^{\zeta_2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ g_{i_1}^{\zeta_p} & g_{i_2}^{\zeta_p} & \cdots & g_{i_k}^{\zeta_p} \end{vmatrix}, \quad (6)$$

ζ 是为了区分当核子对数相同时的不同本征态而引入的附加量子数, $g_{i_p}^{\zeta_p}$ 是 t 矩阵的第 p

个本征矢。与(5)式相应的对激发能可表示为 t 矩阵的 k 个不同本征值之和, 即

$$E_k^{(\zeta)} = \sum_{j=1}^k E^{(\zeta_j)}, \quad (7)$$

其中 $E^{(\zeta_p)}$ 是 t 矩阵的第 p 个本征值, 即

$$\sum_j t_{ij} g_j^{(\zeta_p)} = E^{(\zeta_p)} g_i^{(\zeta_p)}. \quad (8)$$

容易检验, 公式(5)–(8)当 t 矩阵为厄米矩阵时成立。为了方便, 以下假定 t 为实矩阵。首先, 直接将哈氏量(4)式作用到(5)式上可得到

$$\sum_{i, i_1 < i_2 < \dots < i_k} C_{i_1 i_2 \dots i_k}^{(\zeta)} t_{ii_1} b_i^\dagger b_{i_2}^\dagger \dots b_{i_k}^\dagger |0\rangle + \dots + \sum_{i, i_1 < i_2 < \dots < i_k} C_{i_1 i_2 \dots i_k}^{(\zeta)} t_{ii_k} b_{i_1}^\dagger b_{i_2}^\dagger \dots b_{i_{k-1}}^\dagger b_i^\dagger |0\rangle, \quad (9)$$

这里对求和指标 i 没有限制, 但 $\{i_1, i_2, \dots, i_{p-1}, \mu, i_{p+1}, i_k\}$ 中的任一对指标都不能取相同值, 其中 $\mu = i$ 或 $\mu = i_p$ 。对固定的 i , 在(9)式中的第 p 求和项中的指标, i_p ($p = 1, 2, \dots, k$) 仅能取 $i_p = i, i \pm 1$ 。然而, 根据我们的假定(5)式, 在求和中 i_p 必须满足 $i_{p-1} < i_p < i_{p+1}$ 。因此, 这就导出了如下的 3 个条件:

$$i_{p-1} \leq i \leq i_{p+1}, i_{p-1} \leq i - 1 \leq i_{p+1}, i_{p-1} \leq i + 1 \leq i_{p+1}. \quad (10)$$

显然, 这 3 个条件可归结为

$$i_{p-1} < i < i_{p+1}. \quad (11)$$

由于在 $\{i_1, i_2, \dots, i_{p-1}, \mu, i_p, \dots, i_k\}$ 中没有一对指标能取相同值, 所以只要(11)式满足, 其他条件不是显然满足就是导致(9)式中的相应项为零。于是, 利用本征方程(8), 我们有

$$H|k; \zeta\rangle = \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_k} \sum_{\mu=1}^k (-)^P E^{(\zeta_{P(\mu)})} \times \\ g_{i_1}^{(\zeta_{P(1)})} g_{i_2}^{(\zeta_{P(2)})} \dots g_{i_\mu}^{(\zeta_{P(\mu)})} \dots g_{i_k}^{(\zeta_{P(k)})} b_{i_1}^\dagger b_{i_2}^\dagger \dots b_{i_k}^\dagger |0\rangle = E_k^{(\zeta)} |k; \zeta\rangle, \quad (12)$$

其中 P 取遍 $(1, 2, \dots, k)$ 中的所有置换, $E^{(\zeta_p)}$ 为(8)式给出的 t 矩阵的第 μ 个本征值。(12)式对任意 k 都成立。显然波函数(5)式中不存在轨道被双对占有的组分。设总轨道数为 N , 则 k 对激发能由 t 矩阵的 N 个本征值中的 k 个互不相同的本征值之和给出。因此, 对给定的对数 k , 总的激发态数目为 $N! / k! (N-k)!$ 。这样, (4)式的本征值问题就已简单地解出。

以上结果容易被推广到具有任意自旋 s 及有限格点的硬核 BHM 和 Fermi-Hubbard 模型(FHM), 其哈氏量为

$$H = \sum_{ij} t_{ij} \mathcal{P} E_{ij} \mathcal{P}, \quad (13)$$

其中 \mathcal{P} 是保证无格点被双占有的投影算符, $t_{ij} = t_{ii} \delta_{ji+1} + t_{ii+1} \delta_{ji+1} + t_{ii-1} \delta_{ji-1}$; E_{ij} 是 $U(N)$ 的生成元

$$E_{ij} = \sum_{s=-s}^s f_{is}^\dagger f_{js}, \quad (14)$$

其中 f_{is}^\dagger 是第 i 格点上具有自旋为 s 的玻色子或费米子产生算符。(13)式的本征值由 t 矩阵 N 个本征值中的 k 个不同本征值之和给出,

$$E_k^{(\zeta)} = \sum_{i=1}^k E^{(\zeta_i)} \quad (15)$$

对应的波函数为

$$|k; \zeta, (\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_k)\rangle = \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_k} C_{i_1 i_2 \cdots i_k}^{(\zeta)} f_{i_1 \sigma_1}^\dagger f_{i_2 \sigma_2}^\dagger \cdots f_{i_k \sigma_k}^\dagger |0\rangle. \quad (16)$$

(16)式可进一步用 $U(2s+1)$ 群链的量子数来标志. 例如, (16) 式可用 $U(2s+1) \supset U(2s) \supset \cdots \supset U(1)$ 正则基写为

$$|k; \zeta, [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{2s+1}]w\rangle = \sum_{m; i_1 < i_2 < \cdots < i_k} C_{i_1 i_2 \cdots i_k}^{(\zeta)} a_m^{[\lambda]w} |Y_m^{[\lambda]}(\omega; w)\rangle, \quad (17)$$

其中 $[\lambda] \equiv [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_{2s+1}]$ 标记 $U(2s+1)$ 的不可约表示, 其共轭表示 $[\bar{\lambda}]$ 同时标记 $U(N)$ 的不可约表示, m 是 $U(2s+1)$ 的特殊 Gel'fand 基或对称群 S_k 的标准基的态指标^[17], 其展开系数 $C_{i_1 i_2 \cdots i_k}^{(\zeta)}$ 由(6)式中的 Slater 行列式给出, $\omega \equiv (i_1, i_2, \cdots, i_k)$, 符号 $(\omega; w)$ 表示先将 k 个不同的数码 i_1, \cdots, i_k 填入杨盘, 在求和后将盘中的前 f_1 个数码 $i_1, i_2, \cdots, i_{f_1}$ 代换为 σ_1 , 次 f_2 个数码 $i_{f_1+1}, \cdots, i_{f_2}$ 代换为 σ_2 等等, 其最后得到的是对应于 $U(2s+1)$ 不可约表示 $[\lambda]$ 的 Weyl 盘 w , $a_m^{[\lambda]w}$ 是相应的对称化系数^[17]. 文献[18]给出了用 k 粒子乘积态 $f_{i_1 \sigma_1}^\dagger f_{i_2 \sigma_2}^\dagger \cdots f_{i_k \sigma_k}^\dagger |0\rangle$ 构造特殊 Gel'fand 基 $|Y_m^{[\lambda]}(\omega)\rangle$ 的一般方法.

系统的总自旋 S 和其三分量 S_0 由 $U(2s+1) \supset SU(2) \supset U(1)$ 的分歧律决定, 在 $U(2s+1) \downarrow SU(2)$ 中存在分歧多重性, 所以需要引入附加量子数 τ . 于是, S 和 S_0 都是好量子数的波函数可表为

$$|k, \zeta; [\lambda] \tau S S_0\rangle = \sum_w B_w^{SS_0} |k, \zeta; [\lambda] w\rangle, \quad (18)$$

其中 $B_w^{SS_0}$ 是从 $U(2s+1)$ 的 Gel'fand 基变换到 $U(2s+1) \supset SU(2) \supset U(1)$ 基的变换系数. 这一结果说明, 除对格点的置换对称性不同外, 硬核 BHM 和 FHM 具有类似的性质.

本文给出了描述大形变核系统中对力在邻近轨道相互作用近似下的硬核 Bose-Hubbard 模型, 并给出了简单的代数解. 该结果可用于对大形变核系统对力问题的进一步应用研究, 其严格解至少可用于检验各种不同的近似方法. 而 BHM 在凝聚态物理中的应用是众所周知的. 在量子多体问题中, 一般需要在 2^N 维的 Hilbert 子空间内来对角化如(4)式给出的哈氏量, 其中 N 是价核子对数. 对于大形变核, 要考虑的价核子一般都有几十对, 所以这种对角化在实际计算中就特别困难. 而本文指出, 在本模型中人们仅需对角化一个 $N \times N$ 的 t 矩阵就完全确定了(4)式的所有本征值和相应的波函数, 这就使大规模的精确计算成为可能. 关于该模型在核结构中的进一步应用将另文发表.

参考文献(References)

- 1 Fisher M P A, Weichman P B, Grinstein G et al. Phys. Rev., 1989, **B40**:546
- 2 Orr B G, Jaeger H M, Goldman A M et al. Phys. Rev. Lett., 1986, **56**:378
- 3 Hebard A F, Paalanen M A. Phys. Rev. Lett., 1990, **65**:927
- 4 van Oudenaarden A, Mooij J E. Phys. Rev. Lett., 1996, **76**:4947

- 5 van der Zant H S J, Fritschy F C, Elion W J et al. Phys. Rev. Lett., 1992, **69**:2971
- 6 Jaksch D, Bruder C, Cirac J I et al. Phys. Rev. Lett., 1998, **81**:3108
- 7 Molique H, Dudek J. Phys. Rev., 1997, **C56**:1795
- 8 PAN F J. Math. Phys., 1994, **34**:5065
- 9 WU C S, ZENG J Y. Phys. Rev., 1989, **39**:666
- 10 Richardson R W. Phys. Lett., 1963, **5**:82
- 11 Richardson R W. J. Math. Phys., 1965, **6**:1034
- 12 Richardson R W, Sherman N. Nucl. Phys., 1964, **52**:221
- 13 PAN F, Draayer J P. Phys. Lett., 1998, **B442**:7
- 14 PAN F, Draayer J P. Ann. Phys. (NY), 1999, **271**:120
- 15 PAN F, Draayer J P, GUO L. J. Phys., 2000, **A33**:1597
- 16 Shastry B S, Jha S S, Singh V. Lect. Notes. Phys. Berlin: Springer-Verlag, 1985. 242
- 17 PAN F, CHEN J Q. J. Math. Phys., 1993, **35**:4305; 4316
- 18 Chen J Q. Group Representation Theory For Physicists, Singapore: World Scientific, 1989

A Hard-Core Bose-Hubbard Model for the Description of Pairing Interactions in Well-Deformed Nuclei*

PAN Feng^{1,2} DAI Lian Rong¹

1(Department of Physics, Liaoning Normal University, Dalian 116029, China)

2(Department of Physics & Astronomy, Louisiana State University, Baton Rouge 70803-4001, USA)

Abstract Exact algebraic solutions of a hard-core Bose-Hubbard model for the description of nearest orbit pairing interaction in well-deformed even-even nuclei were derived based on a simple algebraic routine. Excitation energies and the corresponding wavefunctions of the model were obtained. Further extensions to arbitrary spin cases and the corresponding Fermi-Hubbard model were also presented.

Key words Hard-core Bose-Hubbard model, pairing force, Nearest orbit interaction

Received 29 April 2000

* Supported by the Key Track Follow-up Service Foundation of The State Education Commission of China (960401) and Science Foundation of The Liaoning Education Commission (990311011)