带"耦合"的对易式计算技术

赵玉民
(南京大学物理系　南京　210008)

摘　要　最近，人们发展和完善了带耦合的对易式计算技术，它在低能核结构的研究中是很有用的，它直接导致了广义维克定理和配对壳模型的建立以及能量权重的电磁跃迁求和规则的广泛研究.

关键词　对易式　耦合　配对壳模型　EWSR

对易式计算是物理学中经常碰到的运算. 最近，核结构研究中的下述问题使人们不得不掌握所谓的带角动量耦合的对易式计算技巧：(1)系统学中的所谓 EWSR (Energy－weighted Sum Rule)的推导，(2)NPSM (Nuclear Pair Shell Model)的建立. 实际上，人们在过去的研究中曾经多次碰到过这类问题，但是由于推导太复杂和容易出错，往往仅选择最简单的情况计算. 这个技术最近由陈金全、Heyde 等发展和完善起来[1,2]. 由于篇幅的限制，这里仅举几个简单的例子，稍复杂的情况可参阅有关文献.

设任意算符 A、B 和 C 分别带总角动量 a、b 和 c. 一个算符如果由若干个子算符耦合而成，并且这些"子算符"的角动量的代数和为整数，则称之为玻色型算符，否则称之为费米型算符.

定义：$(A,B)\equiv AB+\theta_{ab}BA$，其中 $\theta_{ab}=\pm 1$，$\theta_{ab}=1$ 时仅当 AB 均为费米型的算符. 带耦合的对易式为 $(A,B)^e_\varepsilon\equiv\sum C^{e\varepsilon}_{a\alpha b\beta}(A,B)$

考虑对易式：$[(A\times B)^e,C]^d$

经过简单推导可得

$$[(A\times B)^e,C]^d=\sum_f(-)^{b+c}\hat{e}\hat{f}\Big\{(-)^{a+d}\cdot\begin{Bmatrix}a&b&e\\c&d&f\end{Bmatrix}[A\times(B,C)^f]^d+\theta_{bc}(-)^{e+f}\begin{Bmatrix}a&b&e\\c&d&f\end{Bmatrix}[(A,C)^f\times B]^d\Big\}\tag{1}$$

1994－08－18 收稿.

上式中的 A、B、C 的形式是任意的，它可以是费米子，也可是玻色子，或是费米子玻色子集团. 这里的耦合也是普遍的，不仅适合 SO(3) 或 SU(2)的耦合，也适于其它如 SU(3)甚至点群的耦合. 一般计算带耦合的对易式时，人们总是先打开耦合再收缩，然后重新耦合. 这里的"重新耦合"是非常麻烦且是容易出错的地方，CG 系数重新耦合中出现大量的 $\hat{j}/\hat{j}'$ 因子 ($\hat{j}\equiv\sqrt{2j+1}$) 和相因子，有时是"灾难性的". 而在(1)式中则刚好避开了这一环节.

由(1)式作递推运算，可以建立带耦合的维克定理，即耦合算子的重排[1].

下面举几个简例说明这种算法的应用.

1)假设一个四费米子(或玻色子)态为

$$\psi^{J+}_M|0\rangle=(A^+\times A^+)^J_M|0\rangle,$$

$$\text{其中 } A^+=\sqrt{\frac{1}{2}}(a^+_j\times a^+_j)^r_\mu$$

计算它的重叠(Overlap)：

$$\begin{aligned}&\langle 0|\psi^J_M\psi^{J+}_M|0\rangle\\&=\frac{1}{\hat{J}}\langle 0|[(\tilde{A}\times\tilde{A})^J\times(A^+\times A^+)^J]^0|0\rangle\\&=\frac{1}{\hat{J}}\langle 0|\{[(\tilde{A}\times\tilde{A})^J,A^+]^r\times A^+\}^0|0\rangle\end{aligned}$$

重复应用递推(1)式，可得

$$\begin{aligned}&\langle 0|\psi^J_M\psi^{J+}_M|0\rangle\\&=2+(-)^{2j}4(2r+1)\sum_t(2t+1)\cdot\begin{Bmatrix}r&r&J\\r&r&t\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}r&r&t\\j&j&j\end{Bmatrix}^2\end{aligned}$$

2)EWSR 的表达式为

$$\sum_f E(\lambda_f^+)B(S\lambda;0_1^+\to\lambda_f^+)=\frac{\hat{\lambda}}{2}(-)^{\lambda+1}\cdot\langle 0_1^+|\{[\hat{H},\hat{T}(S\lambda)],\hat{T}(S\lambda)\}^0|0_1^+\rangle$$

这里 H 为系统的哈密顿量，$T(S\lambda)$为单体电磁跃迁算子，λ 为多级性. 显然，对易式的计算带有角动量的耦合. 常碰到的形式如 $(\hat{A}^a\cdot\hat{A}^a,X^\lambda)^\lambda$ 的对易式.

考虑这些算子性质，由(1)式容易给出：

$$(\hat{A}^a\cdot\hat{A}^a,X^\lambda)^\lambda=\sum_L\frac{\hat{L}}{\hat{a}}(-)^a[(\hat{A}^a,X^\lambda)^L\times A^a]^\lambda+\sum_L\frac{\hat{L}}{\hat{a}}(-)^{L+\lambda}[\hat{A}^a\times(\hat{A}^a,X^\lambda)^L]^\lambda$$

该式在 EWSR 的研究中是非常有用的.

3)建立 NPSM 的困难在于计算耦合的费米子团的复杂性. 可以证明：在多对基下所有的单体、二体和对产生或多极算子的计算都可以归结为 Overlap 的计算；1 对与 1 对的 Overlap 是易于得到的. 因此，如果 N 对的 Overlap 的计算能够用 $N-1$ 对的 Overlap 表达，则可以直接用核子对作为“构件(building blocks)”研究核结构，这里仅说明应用广义维克定理如何得到从 $N-1$ 对到 N 对 Overlap 的递推关系.

标记：

$$A(r_i,J_i)^{J_N}_{M_N}\equiv\{\cdots[(A^{r_1}\times A^{r_2})^{J_2}\times A^{r_3}]^{J_3}\times\cdots\times A^{r_N}\}^{J_N}_{M_N}$$

多对基：

$$|r_1\cdots r_N;J_1\cdots J_N\rangle\equiv A^+(r_i;J_i)^{J_N}_{M_N}|0\rangle$$

N 对的 Overlap：

$$\langle S_1\cdots S_N;J'_1\cdots J'_N|r_1\cdots r_N;J_1\cdots J_N\rangle=\frac{\hat{J}'_{N-1}}{\hat{J}_N}\langle 0|A(S_i;J'_i)^{J'_{N-1}}_{M'_{N-1}}\times[\tilde{A}^{S_N},A^+(r_i;J_i)^{J_N}]^{J'_{N-1}}_{M'_{N-1}}|0\rangle$$

式中，$[\tilde{A}^{S_N},A^+(r_i;J_i)^{J_N}]^{J'_{N-1}}_{M'_{N-1}}$是 1 对与 N 对的对易式，可以通过(1)式把它用 1 对与 $N-1$ 对的对易式来表达. 重复应用(1)式，使得 $[\tilde{A}^{S_N},A^+(r_i;J_i)^{J_N}]^{J'_{N-1}}_{M'_{N-1}}$ 全部收缩完毕，成为 $N-1$ 对的对产生算符的一个复杂的表达式.

总之，带耦合的对易式计算技术是很有用的. 它是理解和掌握配对壳模型的关键，也是分析和计算能量权重电磁跃迁求和规则的基础.

感谢陈金全教授和 Heyde K 教授的指教和帮助.

参 考 文 献

1 Heyde K, et al. Phys. Rev., 1992, C44: R2262; ibid., 1994, C49: 156

2 陈金全等. Nucl. Phys., 1993, A554: 61; ibid., 1993, A562: 218

Technique of Calculating Commutators for Coupled Operators

Zhao Yumin

(*Department of Physics, Nanjing University, Nanjing* 210008)

Abstract Technique of calculating commutators for coupled operators, which leads directly to the foundation of generalized-Wick theorem for coupled clusters, Nuclear Pair Shell Model, and the detailed study of Energy-weighted sum rule of electromatic transitions, was developed recently. This Technique is reviewed briefly here.

Key Words commutators coupling NPSM EWSR