

球形 Dirac 方程的空间格点求解及假态问题

赵斌

Spherical Dirac equation on the lattice and the problem of the spurious states

Zhao Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 052401 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.052401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.052401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I5>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

包含非中心电耦极矩的环状非谐振子势场赝自旋对称性的三对角化表示

Tridiagonal representation with pseudospin symmetry for a noncentral electric dipole and a ring-shaped anharmonic oscillator potential

物理学报.2016, 65(2): 020301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.020301>

三层密度分层流体毛细重力波二阶 Stokes 波解

Second-order Stokes wave solutions for gravity capillary water waves in three-layer density-stratified fluid

物理学报.2014, 63(14): 140301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.140301>

Klein-Gordon 方程 Q 球解中能量稳定性和扰动研究

Study of energy stability and perturbation in the Q-ball solutions of Klein-Gordon equation

物理学报.2013, 62(23): 230301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.230301>

双环形 Hulth 閼势束缚态的近似解析解

Approximate analytical solutions of bound states for the double ring-shaped Hulth 閼 potential

物理学报.2013, 62(20): 200301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.200301>

环状非有心球谐振子势场赝自旋对称性的三对角化表示

Pseudospin symmetry for a noncentral electric dipole ring-shaped potential in the tridiagonal representation

物理学报.2012, 61(24): 240301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.240301>

球形 Dirac 方程的空间格点求解及假态问题*

赵斌†

(北京航空航天大学物理科学与核能工程学院, 宇宙中的核物理交叉研究中心, 北京 100191)

(2015年10月15日收到; 2015年11月30日收到修改稿)

本文在空间格点上利用虚时间步长方法求解了球形 Dirac 方程, 着重研究了出现的假态问题. 利用三点数值导数公式离散方程中一阶导数项, 可以证明对于量子数为 κ 和 $-\kappa$ 的单粒子能级能量是完全相同的, 其中一个为物理解, 另一个为假态. 通过在径向 Dirac 方程中引入 Wilson 项, 可以解决假态问题, 得到全部物理解. 文章以 Woods-Saxon 势为例, 考虑 Wilson 项后, 得到与打靶法一致的结果.

关键词: 球形 Dirac 方程, 空间格点, 假态, Wilson 项

PACS: 24.10.Jv, 21.60.-n, 21.10.Pc, 03.65.Ge

DOI: 10.7498/aps.65.052401

1 引言

近年来, 随着新一代放射性核束装置的不断兴建、运行以及探测设备的升级, 使得对远离 β 稳定线原子核的研究成为热点. 远离 β 稳定线的原子核, 特别是近中子滴线或质子滴线的原子核中会出现很多新奇的物理现象, 如晕现象^[1], 传统幻数的消失和新幻数的产生^[2], 以及新的集体运动模式^[3]等. 这些奇特现象的发现对基于稳定原子核性质所发展起来的传统原子核理论提出了新的挑战.

在相对论框架下, 相对论连续谱 Hartree-Bogoliubov (RCHB) 理论^[4]成功地对 ^{11}Li 中发现的晕现象给出了微观自洽的解释^[5], 并预言了 Ca 和 Zr 等中重原子核中多个价中子形成的巨晕现象^[6,7], 证明了连续谱在晕现象中所起的作用; 再现了奇特原子核中相互作用截面以及电荷交换反应截面等实验结果^[8,9]; 揭示了奇特原子核中更好的赝自旋对称性^[10-20]; 预言了超核中的奇特现象^[21,22], 超重核中新的幻数^[23]. RCHB 理论考虑连续谱效应, 预言远离 β 稳定线的丰中子原子核的质量^[24], 可以为天文上快中子俘获过程提供重要

的物理输入量^[25,26].

鉴于 RCHB 理论取得的成功, 把 RCHB 理论推广到形变原子核研究如形变晕等问题是很有意义的. 对于这一问题, 在过去的几十年里已经有很多努力. 直接在坐标空间求解形变系统的耦合道方程^[27,28]收敛很困难, 而 Woods-Saxon 基展开的方法^[29,30]对于重核在实现的时候很耗时间. 为了描述原子核的形变, 可以在三维的坐标空间格点上离散求解相对论 Hartree-Bogoliubov (RHB) 方程, 这样任意形状的原子核都能被描述.

虚时间步长方法 (imaginary time step method, ITS method) 是在坐标空间求解微分方程的有效方法, 目前已经被成功运用于非相对论的自洽平均场计算^[31,32]. 但是直接把 ITS 方法运用于相对论情况会出现变分塌缩 (variational collapse) 问题^[33-35]. 在坐标空间求解 Dirac 方程还会出现假态问题^[36,37].

对于变分塌缩问题, Zhang 等^[33]提出把求解 Dirac 方程转化为求解对应的大分量满足的类 Schrödinger 方程的方法进行解决. 随后 Hagino 和 Tanimura^[34]给出了不同的解决办法, 即所谓的反转哈密顿量矩阵方法 (inverse Hamiltonian

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2013CB834400)、国家自然科学基金 (批准号: 11175002, 11335002, 11375015) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20110001110087) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: bzhao@buaa.edu.cn

method).

为了自洽求解, 理解假态问题的产生原因和解决假态问题是至关重要的. 文献 [38] 指出假态的产生可以分为两类, 一类是由于数学或物理模型, 一类是由于采用的数值方法. 在求解 Dirac 方程的时候, 采用很多数值方法都会出现假态问题 [39-41]. 坐标空间求解径向 Dirac 方程出现的假态, 类似于格点量子色动力学 (QCD) 中的假态 [36], 是由所采用的数值导数公式引起的.

在格点 QCD 中, 为了解决假态问题 Wilson 引入了动量的二次项 [42], 这一项会对色散关系有额外的贡献, 使得假态能量被抬高, 从而消除假态与物理解的简并. 在相对论平均场框架下, 为了实现三维情况下的自洽求解, 文献 [37] 对 Wilson 项做了改进, 引入了动量的高阶偶次项, 从而能在对物理解影响很小的情况下排除假态. 直角坐标系下的假态问题已经解决, 但是考虑到计算资源和计算时间等方面的限制, 在某些情况下求解具有球对称性的径向 Dirac 方程还是很有意义的, 而对于坐标空间中径向 Dirac 方程的假态问题也需要重视.

本文首先给出在坐标空间利用 ITS 方法求解径向 Dirac 方程的理论框架, 然后给出以 ^{16}O 为例, 求解 Woods-Saxon 势的数值细节, 最后展示和分析了求解得到的假态, 并给出添加 Wilson 项后解决假态的结果.

2 理论框架

2.1 径向 Dirac 方程

在相对论平均场框架下, 核子被描述为在矢量势 $V(\mathbf{r})$ 和标量势 $S(\mathbf{r})$ 组成的平均场中运动的 Dirac 粒子 [43-45]. 核子满足的 Dirac 方程是

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) + \beta(M + S(\mathbf{r}))\Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中, $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 是 Dirac 矩阵, M 是核子质量. 在球形情况下, Dirac 旋量可以写作

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r)Y_{jm}^l \\ iF(r)Y_{jm}^{\tilde{l}} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

对于 $l = j \pm 1/2$ 有 $\tilde{l} = 2j - l = j \mp 1/2$. 其中 $G(r)$ 和 $F(r)$ 分别是波函数大小分量, $Y_{jm}^l(\hat{\mathbf{r}})$ 为自旋球谐函数, 具体形式如下

$$Y_{jm}^l(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{m_l, m_s} \langle lm_l \frac{1}{2} m_s | jm \rangle Y_{lm_l}(\hat{\mathbf{r}}) \chi_{m_s}, \quad (3)$$

其中, Y_{lm_l} 是球谐函数, χ_{m_s} 是自旋波函数. 把 $\Psi(\mathbf{r})$ 代入 Dirac 方程化简, 对于球形的矢量势 $V(\mathbf{r})$ 和标量势 $S(\mathbf{r})$ 可以把定态 Dirac 方程 (1) 约化成径向 Dirac 方程

$$\mathbf{H}_D \phi = E_D \phi, \quad (4)$$

其中, 径向 Dirac 方程的哈密顿量 \mathbf{H}_D 为

$$\mathbf{H}_D = \begin{pmatrix} V + S & \hbar c \left(-\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) \\ \hbar c \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) & V - S - 2Mc^2 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

哈密顿量中量子数 $\kappa = (-1)^{j+l+1/2}(j+1/2)$. 波函数

$$\phi = \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix}, \quad (6)$$

G, F 分别是波函数大小分量.

2.2 ITS 方法

ITS 方法的基本思想 [31] 是对于任意给定的初始波函数 $|\Psi^{(0)}\rangle$, 如果它不是哈密顿量 \hat{h} 的本征态, 随着时间趋向于无穷大, $e^{-\hat{h}T} |\Psi^{(0)}\rangle$ 会收敛到哈密顿量的最低能量对应的波函数, 即

$$\lim_{T \rightarrow \infty} e^{-\hat{h}T} |\Psi^{(0)}\rangle \propto |\phi_1\rangle. \quad (7)$$

但是直接利用 ITS 方法求解径向 Dirac 方程 (4) 会出现变分塌缩问题, 这是因为它的原理是寻找哈密顿量的最小值, 而 Dirac 方程哈密顿量由于 Dirac 海的存在没有最小值. 文献 [34] 提出利用反转哈密顿量矩阵方法解决这个问题. 反转哈密顿量矩阵方法通过把哈密顿量作反转并且引入能量偏移 E_0 改变原来 Dirac 方程哈密顿量能谱的形状, 使它出现最大最小值, 从而可以利用 ITS 方法进行求解.

利用 ITS 方法结合反转哈密顿量矩阵方法求解 Dirac 方程的过程是, 对于任意给定的初始波函数 $|\Psi^{(0)}\rangle$, 如果把能量偏移 E_0 放置在费米海底部附近, 随着时间趋向于无穷大, $e^{T/(\hat{h}-E_0)} |\Psi^{(0)}\rangle$ 最终会收敛到哈密顿量在费米海中的最低的能量对应的波函数, 即

$$\lim_{T \rightarrow \infty} e^{T/(\hat{h}-E_0)} |\Psi^{(0)}\rangle \propto |\phi_1\rangle, \quad (8)$$

对应的能量通过对哈密顿量取期待值得到 $E_1 = \langle \phi_1 | \hat{h} | \phi_1 \rangle$.

在实际的计算中, 可以把连续变化的时间 T 以时间间隔 ΔT 分割, 这样对于时间很短的每一步变

化, 指数 $e^{\Delta T/(\hbar-E_0)}$ 可以展开到时间的一阶, 那么迭代过程中的前后两步的波函数满足

$$|\Psi^{(n+1)}\rangle \propto \left(1 + \frac{\Delta T}{\hbar - E_0}\right) |\Psi^{(n)}\rangle, \quad (9)$$

因为演化算符不是么正的, 所以需要在演化的每一步都进行归一化.

在坐标空间求解, 需要把哈密顿量中的一阶导数项利用数值导数公式替换, 边界条件采用盒子边界条件 $G(0) = 0, F(0) = 0$. 以三点数值导数公式为例^[46], 一阶导数可以表示为

$$y'(r_i) = \frac{y(r_{i+1}) - y(r_{i-1}))}{2h}, \quad (10)$$

其中, h 表示步长, $y(r_i)$ 表示第 i 个格点的函数值, $y'(r_i)$ 表示函数在第 i 个格点的一阶导数值. 利用(10)式离散哈密顿量中的一阶导数项会导致假态的出现.

为了得到哈密顿量的全部本征值, 可以有两种方法. 一种方法是每次给定一个初始波函数, 通过不断改变能量偏移 E_0 得到不同的能级. 另一种方法是固定 E_0 在费米海底部附近, 通过给定一组正交归一的波函数进行演化, 在每一步演化完成后再采用施密特正交化方法进行正交归一化, 最终得到所需的所有波函数. 需要注意的是这两种方法在具体求解过程中会遇到困难. 对于第一种方法, 在求解时可能出现恰好 E_0 等于哈密顿量本征值的情况, 因为 $\hbar - E_0$ 出现在分母上, 这时分母发散, 将导致无法求解. 对于第二种方法, 在正交化的过程中会导致假态波函数与物理解波函数的混合, 受假态波函数影响将无法得到全部正确的物理解波函数^[37]. 如果能消除假态对物理解的影响, 就可以得到全部物理解.

2.3 Wilson 项

文献^[37]提出在直角坐标系下通过加入 Wilson 项消除假态, 直角坐标系下的 Wilson 项为:

$$H_w = (-1)^m h^{2m-1} R \beta \sum_{i=1}^3 \partial_i^{2m}, \quad (11)$$

其中, h 是步长, m, R 是参数. 与直角坐标系的方法类似, 对于径向 Dirac 方程可以引入如下形式的 Wilson 项:

$$H_w = \begin{pmatrix} (-1)^m h^{2m-1} R \partial_r^{2m} & 0 \\ 0 & (-1)^{m+1} h^{2m-1} R \partial_r^{2m} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

引入 Wilson 项后最终需要求解的方程变成

$$H\phi = E\phi, \quad (13)$$

其中, 哈密顿量 $H = H_D + H_w$. 通过选择合适的参数 R 可以把出现在束缚态中的假态抬高到连续谱中, 从而通过给定一组正交归一的初始波函数进行演化求解得到束缚态能级.

Dirac 方程的能量可以通过对能量进行修正得到

$$E_D = E - E_w, \quad (14)$$

其中, $E = \langle \phi | H | \phi \rangle, E_w = \langle \phi | H_w | \phi \rangle$. 为了计算简单, 波函数不进行修正, 可以通过选择合适的参数 m, R 使波函数与 Dirac 方程的波函数差别很小.

3 数值细节

为了在空间格点上求解径向 Dirac 方程, 选择盒子大小 $R_{\max} = 20$ fm, 格点间距 $h = 0.1$ fm. ITS 方法时间间隔 $\Delta T = 10$ MeV. 势场选择 Woods-Saxon 形式的势场, 具体为^[47]

$$V(r) + S(r) = \frac{V^0}{1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}}, \quad (15)$$

$$V(r) - S(r) = \frac{-\lambda V^0}{1 + e^{\frac{r-R^{ls}}{a^{ls}}}}, \quad (16)$$

其中, $R_0 = r_0 A^{1/3}, R^{ls} = r_0^{ls} A^{1/3}$, 对于质子和中子 V^0 分别是

$$V_n^0 = V \left(1 - K \frac{N - Z}{N + Z}\right), \quad (17)$$

$$V_p^0 = V \left(1 + K \frac{N - Z}{N + Z}\right), \quad (18)$$

这里 N, Z, A 分别表示中子数, 质子数, 质量数. 在下面的讨论中原子核选择 ^{16}O , 势场中 $V, K, \lambda, r_0, a, r_0^{ls}, a^{ls}$ 的取值同文献^[47].

4 结果讨论

4.1 假态分析

图 1 展示了利用 ITS 方法求解 Woods-Saxon 势得到的 ^{16}O 中子单粒子能谱. 其中径向 Dirac 方程中一阶导数项利用三点数值导数公式离散. 从图中可以发现, 对于 ^{16}O 可以得到 12 条束缚的中子单粒子能级. 这些能级分别按照 κ 对应的量子数 nl_j 进行标记, 其中 n 表示能级在相同的 κ 量子数中从

低到高的顺序, l 表示轨道角动量, j 表示总角动量. 从图中可以看到一个异常的简并现象, 即量子数 κ 和 $-\kappa$ 中的单粒子能级能量相同, 如 $1s_{1/2}$ 与 $1p_{1/2}$ 能级. 为了探究简并能级之间的区别和联系, 我们以 $s_{1/2}$ 和 $p_{1/2}$ 态为例观察它们的波函数.

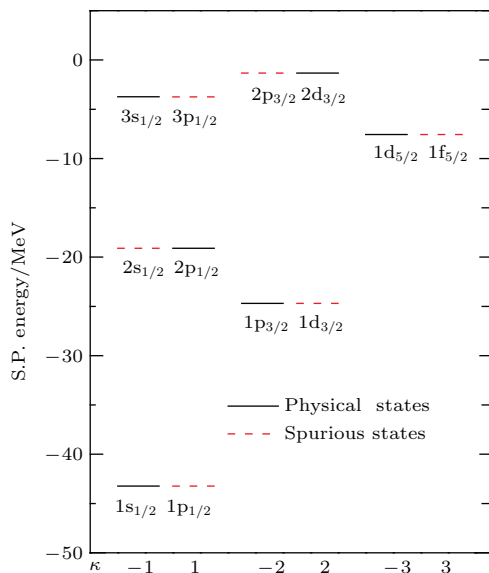


图1 (网刊彩色) 利用虚时间步长方法求解 Woods-Saxon 势的径向 Dirac 方程得到的 ^{16}O 中子单粒子能级
Fig. 1. (color online) The neutron single particle energy levels of ^{16}O obtained by solving the radial Dirac equation with Woods-Saxon potential using imaginary time step method.

图2展示了 $s_{1/2}$ 和 $p_{1/2}$ 态中的束缚态单粒子波函数. 从图2可以发现, $1s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $3s_{1/2}$ 的波函数在整个区间光滑分布, 节点数满足物理上的要求, 表明它们对应物理解. 另一方面, $1p_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $3p_{1/2}$ 的波函数剧烈震荡, 更进一步可以发现, 它们的波函数在相邻格点上值的符号相反, 这表明它们并不是满足物理上要求的解, 而是由于数值方法引起的假态. 通过对能量和波函数的分析表明, 对于假态虽然在能量上与其对应的物理解相同, 但是在波函数上却表现出巨大的差别. 根据波函数的行为, 我们可以很容易地把图1中的单粒子能级进行区分.

求解 Woods-Saxon 势的结果表明, 采用三点数值导数公式离散哈密顿量中一阶导数项, 所得的解会有波函数剧烈震荡的假态, 并且出现在量子数 κ 中的假态, 会与量子数 $-\kappa$ 中物理解的能量相同. 实际上可以证明, 如果利用三点数值导数公式离散一阶导数项, 对于任意势场 $V(r)$ 和 $S(r)$, 量子

数为 κ 和 $-\kappa$ 中的单粒子能级在能量上会出现简并, 而在波函数上表现出巨大的差别, 它们一个为物理解, 另一个为假态. 下面给出具体的证明过程.

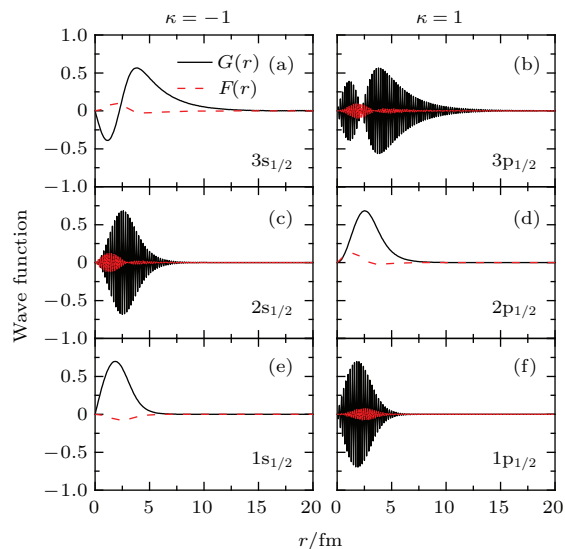


图2 (网刊彩色) 利用虚时间步长方法求解 Woods-Saxon 势的径向 Dirac 方程得到的 ^{16}O 量子数 $\kappa = 1$ 和 $\kappa = -1$ 中的中子物理解和假态波函数

Fig. 2. (color online) ^{16}O neutron wave functions of physical states and spurious states in quantum numbers $\kappa = 1$ and $\kappa = -1$ obtained by solving radial Dirac equation with Woods-Saxon potential.

首先, 通过三点数值导数公式离散一阶导数项, 我们可以得到径向 Dirac 方程在坐标空间的哈密顿量矩阵 (取 $\hbar = c = 1$)

$$\mathbf{H}_\kappa = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{C}_\kappa \\ \mathbf{C}_\kappa^\text{T} & \mathbf{B} \end{pmatrix}, \quad (19)$$

其中, T 表示矩阵转置. 块矩阵 \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C}_κ 分别为

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \Sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \Sigma_n \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \Delta_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \Delta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \Delta_n \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$C_{\kappa} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa}{r_1} & -\frac{1}{2h} & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{2h} & \frac{\kappa}{r_2} & -\frac{1}{2h} & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2h} & \frac{\kappa}{r_3} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{\kappa}{r_n} \end{pmatrix}, \quad (22)$$

其中, r_i 是第 i 个格点的坐标值, $\Sigma_i = V_i + S_i$ 和 $\Delta_i = V_i - S_i - 2M$ 是第 i 个格点上的势场的值, n 是格点个数.

引入块对角矩阵 U

$$U = \begin{pmatrix} \mathbf{u} & 0 \\ 0 & -\mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

其中 \mathbf{u} 是对角线上矩阵元为 ± 1 交替的对角矩阵

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (-1)^{n+1} \end{pmatrix}, \quad (24)$$

并且满足 $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{-1} = \mathbf{u}^T$, U 也满足同样的性质. 利用 U 可以证明 H_{κ} 和 $H_{-\kappa}$ 满足关系

$$H_{\kappa} = UH_{-\kappa}U^{-1}. \quad (25)$$

为了证明方程 (25) 成立, 对右端利用矩阵乘法进行计算

$$UH_{-\kappa}U^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}A\mathbf{u} & -\mathbf{u}C_{-\kappa}\mathbf{u} \\ -(\mathbf{u}C_{-\kappa}\mathbf{u})^T & \mathbf{u}B\mathbf{u} \end{pmatrix}, \quad (26)$$

通过与 H_{κ} 的对应矩阵元对比, 可以发现需要证明以下关系

$$A = \mathbf{u}A\mathbf{u}, \quad (27)$$

$$B = \mathbf{u}B\mathbf{u}, \quad (28)$$

$$C_{\kappa} = -\mathbf{u}C_{-\kappa}\mathbf{u}. \quad (29)$$

对于方程 (27) 和 (28), 考虑到矩阵 \mathbf{u} , A 和 B 都是对角矩阵, 所以它们可以互相对易, 于是

$$A = \mathbf{u}A\mathbf{u} = A\mathbf{u}\mathbf{u} = A, \quad (30)$$

$$B = \mathbf{u}B\mathbf{u} = B\mathbf{u}\mathbf{u} = B. \quad (31)$$

对于方程 (29) 的正确性也很容易验证. $C_{-\kappa}$ 右乘 \mathbf{u} 的效果是对 $C_{-\kappa}$ 的列进行变换, 对应于 \mathbf{u} 中为 1 的矩阵元的列不变, 对应于 \mathbf{u} 中为 -1 的矩阵元的列符号改变. $C_{-\kappa}$ 左乘 \mathbf{u} 的效果是对 $C_{-\kappa}$ 行进

行变换, 对应于 \mathbf{u} 中为 1 的矩阵元的行不变, 对应于 \mathbf{u} 中为 -1 的矩阵元的行符号改变. 所以, 先对 $C_{-\kappa}$ 做列变换再做行变换, 恰好得到 $-C_{\kappa}$. 于是方程 (29) 得证.

对于 H_{κ} 和 $H_{-\kappa}$, 它们分别满足下面的本征方程

$$H_{\kappa}\phi_{\kappa} = E_{\kappa}\phi_{\kappa}, \quad (32)$$

$$H_{-\kappa}\phi_{-\kappa} = E_{-\kappa}\phi_{-\kappa}, \quad (33)$$

方程 (33) 左乘 U 并且插入 $I = U^{-1}U$ 得,

$$UH_{-\kappa}U^{-1}U\phi_{-\kappa} = E_{-\kappa}U\phi_{-\kappa}, \quad (34)$$

利用方程 (25) 我们可以把方程 (34) 替换为

$$H_{\kappa}U\phi_{-\kappa} = E_{-\kappa}U\phi_{-\kappa}, \quad (35)$$

再与方程 (32) 对比可以发现, 如果 H_{κ} 是非简并的, 那么就有

$$E_{\kappa} = E_{-\kappa}, \quad (36)$$

$$\phi_{\kappa} = U\phi_{-\kappa}. \quad (37)$$

这说明, 利用三点数值导数公式离散一阶导数项, 对于 κ 和 $-\kappa$ 的哈密顿量矩阵, 它们的本征值是完全相同的, 而波函数可以通过 U 矩阵联系起来. 而 U 是一个对角线上矩阵元为 ± 1 交替变化的矩阵, 所以假态波函数在每个格点上的幅值与物理解相同, 但是相邻格点的波函数符号相反, 表现出剧烈震荡的现象, 这与图 1 和图 2 给出的结果符合.

4.2 Wilson 项的作用

假态对于我们关心的物理是没有贡献的, 并且假态的出现会使能谱变得复杂, 增加了求解 Dirac 方程的难度. 求解在径向 Dirac 方程基础上添加了 Wilson 项的方程 (13) 可以避免假态问题. 为了说明 Wilson 项的作用, 通过改变 Wilson 项中各个参数的值, 研究它们对能量和波函数的影响.

图 3 以假态 $1p_{1/2}$ 和物理解 $2p_{1/2}$ 为例给出了 Wilson 项分别采用二阶导数 ($m = 1$) 和四阶导数 ($m = 2$) 时单粒子能级能量随 Wilson 项参数 R 变化的结果. 其中一阶导数项采用三点数值导数公式离散, Wilson 项采用二阶导数时用五数值导数公式离散, 采用四阶导数时用九数值导数公式离散. 通过调节 Wilson 项的参数 R , 可以发现假态能量随参数增加近似线性增加, 而物理解的能量几乎不变. 通过对比 Wilson 项中导数取不同阶数的结

果, 可以发现阶数增高, 假态被抬高的速度加快, 例如当 $R = 0.2$ 时, 对于 $m = 1$ 假态 $1p_{1/2}$ 只被抬高到大约 -30 MeV, 而对于 $m = 2$ 假态 $1p_{1/2}$ 已经被抬高到连续谱中. 通过选取合适的参数 R , 所有假态都能被抬高到连续谱中.

图 4 展示了假态 $1p_{1/2}$ 和物理解 $2p_{1/2}$ 波函数以及 Wilson 项修正能 E_w 随着 Wilson 项参数 R 变化的过程. 其中, 一阶导数项利用三点数值导数公式离散, Wilson 项采用二阶导数并用五点数值导数公式离散. 从图 4 可以发现, 在参数变化过程中假态和物理解的波函数几乎不变, 而 Wilson 项的能量 E_w 随参数 R 增大而增大. 在相同的参数 R 下, 假态的 E_w 与物理解相比会大很多, 而且随 R 增加增大很快. 这样通过选择合适的参数 R 就可以把假态抬高到连续谱, 而物理解的能量几乎不变, 通过 (14) 式进行修正就能得到 Dirac 方程的能级能量. 为了减小对波函数的影响, 参数 R 应该越小越好, 图 3 中二阶导数和四阶导数的结果表明, 我

们可以通过提高 Wilson 项导数阶数的方法实现在尽量小的 R 的情况下把假态排除的目的.

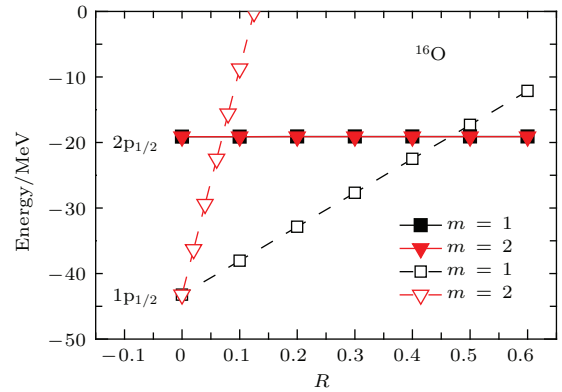


图 3 (网刊彩色) Wilson 项分别采用二阶导数 ($m = 1$) 和四阶导数 ($m = 2$) 时, 假态 $1p_{1/2}$ 和物理解 $2p_{1/2}$ 能量随 Wilson 项参数 R 的演化

Fig. 3. (color online) The energies of $1p_{1/2}$ and $2p_{1/2}$ states as a function of parameter R with the second-order derivative ($m = 1$) and fourth-order derivative ($m = 2$).

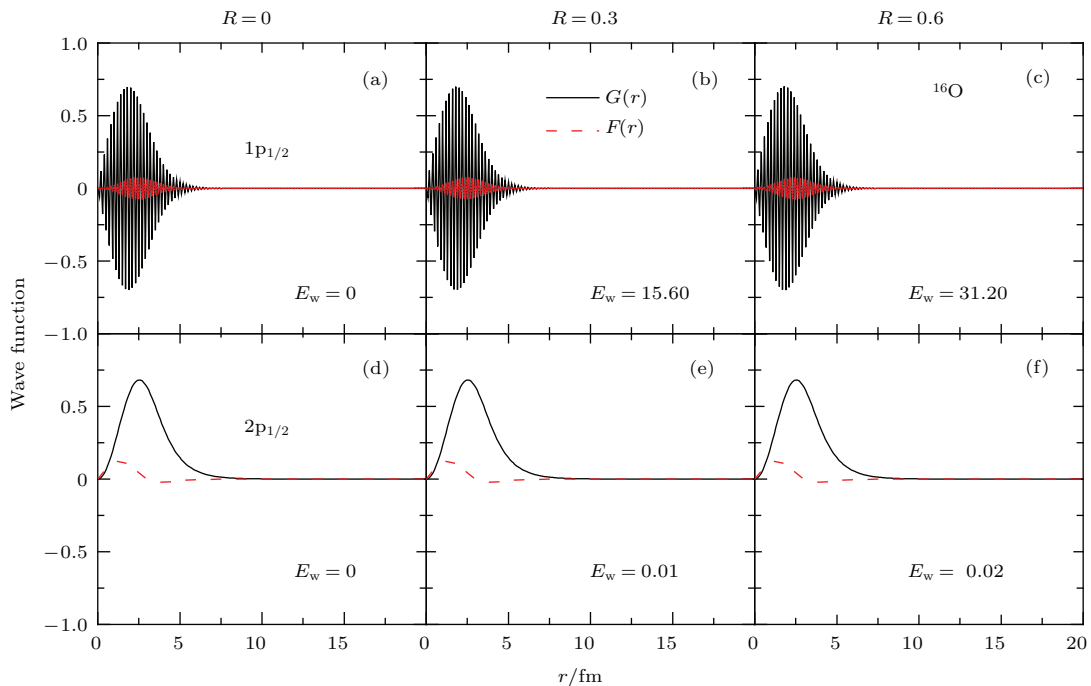


图 4 (网刊彩色) 假态 $1p_{1/2}$ 和物理解 $2p_{1/2}$ 波函数及 Wilson 项修正能 E_w 随 Wilson 项参数 R 的演化

Fig. 4. (color online) The wave functions and the energy corrections of Wilson term E_w of $1p_{1/2}$ and $2p_{1/2}$ states as a function of parameter R .

4.3 排除假态后的结果

为了表明 Wilson 项排除假态的有效性, 通过给定一组正交归一的波函数利用 ITS 方法求解 Woods-Saxon 势的径向 Dirac 方程. 表 1 给出了 $m = 2, R = 0.2$ 时计算 Woods-Saxon 势得到的

^{16}O 中子全部束缚态能级, 其中一阶导数项分别利用三点数值导数公式和五点数值导数公式离散. 同时还给出利用打靶法 (shooting method) [4] 计算得到的结果. 从结果可以看到, 利用三点数值导数公式计算的结果与打靶法相比差别在 10^{-2} MeV 的量

表 1 虚时间步长方法和打靶法求解 Woods-Saxon 势的径向 Dirac 方程得到的 ^{16}O 中子单粒子能级结果对比. $|\Delta E|$ 表示两种方法得到的单粒子能级能量的差别. 利用虚时间步长方法计算时一阶导数项分别用三点数值导数公式和五点数值导数公式离散, Wilson 项采用四阶导数并用九点数值导数公式离散, 参数 $R = 0.2$. 表中能量单位均为 MeV

Table 1. The comparison of ^{16}O neutron single particle energies obtained by solving radial Dirac equation with shooting method and imaginary time step method. $|\Delta E|$ is the difference of single particle energies between two methods. In the calculation of imaginary time step method, the first-order derivative term is discretized by three- and five-point differential formula and the Wilson term is fourth-order derivative discretized by nine-point differential formula. The parameter R is set to be 0.2. All quantities are in MeV.

nl_j	打靶法	虚时间步长方法		$ \Delta E $	
		三点公式	五点公式	三点公式	五点公式
$1s_{1/2}$	-43.2023	-43.2264	-43.2023	0.0241	0.0000
$1p_{3/2}$	-24.6826	-24.7003	-24.6827	0.0177	0.0001
$1p_{1/2}$	-19.0383	-19.0939	-19.0385	0.0556	0.0002
$1d_{5/2}$	-7.5480	-7.5583	-7.5481	0.0103	0.0001
$2s_{1/2}$	-3.6714	-3.7374	-3.6716	0.0660	0.0002
$1d_{3/2}$	-1.2954	-1.3285	-1.2949	0.0331	0.0005

级, 而用五点数值导数公式计算的结果与打靶法的差别在 10^{-4} MeV 的量级. 结果表明, 通过增加离散动能项的数值导数公式的点数, 可以显著地提高计算精度. 通过两种方法结果的对比, 很好地说明了通过添加 Wilson 项排除假态的有效性.

5 总 结

本文在空间格点上利用 ITS 方法求解径向 Dirac 方程, 研究并解决了出现的假态问题. 证明了利用三点数值导数公式离散哈密顿量中一阶导数项时, 对于量子数 κ 和 $-\kappa$ 中的单粒子能级能量是相同的. 通过在径向 Dirac 方程中添加 Wilson 项, 选取合适的参数 m , R 可以把束缚态中的假态抬高到连续谱中, 这样就能得到不包含假态的全部束缚态单粒子能级. 文中以 Woods-Saxon 势为例, 展示了得到的 ^{16}O 中子束缚态中的假态以及通过添加 Wilson 项排除了假态的结果. 通过与打靶法结果进行对比, 可以发现两种方法给出一致的结果, 很好地说明了利用 Wilson 项排除假态的有效性.

感谢孟杰教授对作者的悉心指导和耐心帮助, 使得本工作能够顺利完成. 感谢张颖老师提供虚时间步长方法, 感谢梁豪兆老师和耿立升老师, 与他们的讨论使作者了解到 QCD 中假态的信息及处理方法. 感谢张双全, 赵鹏巍, 夏学伟, 孙亭亭, 任修磊, 胡金牛, 王田田, 申时行, 施智, 陈启

博, 牛中明, 宋凌霜, 张炜, 任政学, 王媛媛等老师和同学在很多方面的帮助.

参考文献

- [1] Tanihata I 1995 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **35** 505
- [2] Ozawa A, Kobayashi T, Suzuki T, Yoshida K, Tanihata I 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 5493
- [3] Zilges A, Babilon M, Hartmann T, Savran D, Volz S 2005 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **55** 408
- [4] Meng J, Toki H, Zhou S G, Zhang S Q, Long W H, Geng L S 2006 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **57** 470
- [5] Meng J, Ring P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3963
- [6] Meng J, Ring P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 460
- [7] Meng J, Toki H, Zeng J Y, Zhang S Q, Zhou S G 2002 *Phys. Rev. C* **65** 041302
- [8] Meng J, Tanihata I, Yamaji S 1998 *Phys. Lett. B* **419** 1
- [9] Meng J, Zhou S G, Tanihata I 2002 *Phys. Lett. B* **532** 209
- [10] Meng J, Sugawara-Tanabe K, Yamaji S, Ring P, Arima A 1998 *Phys. Rev. C* **58** R628
- [11] Meng J, Sugawara-Tanabe K, Yamaji S, Arima A 1999 *Phys. Rev. C* **59** 154
- [12] Ginocchio J N 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 436
- [13] Ginocchio J N, Leviatan A, Meng J, Zhou S G 1997 *Phys. Rev. C* **69** 034303
- [14] Guo J Y 2012 *Phys. Rev. C* **85** 021302
- [15] Lu B N, Zhao E G, Zhou S G 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 072501
- [16] Liang H Z, Shen S H, Zhao P W, Meng J 2013 *Phys. Rev. C* **87** 014334
- [17] Shen S H, Liang H Z, Zhao P W, Zhang S Q, Meng J 2013 *Phys. Rev. C* **88** 024311

- [18] Guo J Y, Chen S W, Niu Z M, Li D P, Liu Q 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 062502
- [19] Liang H Z, Meng J, Zhou S G 2015 *Phys. Rep.* **570** 1
- [20] Zhang M C 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 61 (in Chinese) [张民仓 2009 物理学报 **58** 61]
- [21] Lu H F, Meng J 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 1775
- [22] Lu H F, Meng J, Zhang S Q, Zhou S G 2003 *Eur. Phys. J. A* **17** 19
- [23] Zhang W, Meng J, Zhang S Q, Geng L S, Toki H 2005 *Nucl. Phys. A* **753** 106
- [24] Qu X Y, Chen Y, Zhang S Q, Zhao P W, Shin I J, Lim Y, Kim Y, Meng J 2013 *Sci. China: Phys. Mech.* **56** 2031
- [25] Sun B H, Meng J 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 2429
- [26] Li Z, Niu Z M, Sun B H, Wang N, Meng J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 072601 (in Chinese) [李竹, 牛中明, 孙保华, 王宁, 孟杰 2012 物理学报 **61** 072601]
- [27] Price C E, Walker G E 1987 *Phys. Rev. C* **36** 354
- [28] Meng J, Lu H F, Zhang S Q, Zhou S G 2003 *Nucl. Phys. A* **722** C366
- [29] Zhou S G, Meng J, Ring P 2003 *Phys. Rev. C* **68** 034323
- [30] Zhou S G, Meng J, Ring P, Zhao E G 2010 *Phys. Rev. C* **82** 3481
- [31] Davies K T R, Flocard H, Krieger S, Weiss M S 1980 *Nucl. Phys. A* **342** 111
- [32] Bonche P, Flocard H, Heenen P H 2005 *Comput. Phys. Commun.* **171** 49
- [33] Zhang Y, Liang H Z, Meng J 2010 *Int. J. Mod. Phys. E* **19** 55
- [34] Hagino K, Tanimura Y 2010 *Phys. Rev. C* **82** 057301
- [35] Grant I P 1982 *Phys. Rev. A* **25** 1230
- [36] Salomonson S, Öster P 1989 *Phys. Rev. A* **40** 5548
- [37] Tanimura Y, Hagino K, Liang H Z 2015 *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2015** 073D01
- [38] Zhao S 2007 *Comput. Method. Appl. M.* **196** 5031
- [39] Shabaev V M, Tupitsyn I I, Yerokhin V A, Plunien G, Soff G 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 130405
- [40] Pestka G 2003 *Phys. Scripta.* **68** 254
- [41] Müller C, Grün N, Scheid W 1998 *Phys. Lett. A* **242** 245
- [42] Wilson K G 1975 *Proceedings of the First Half of the 1975 International School of Subnuclear Physics* Erice, Sicily, July 11–August 1, 1975 p69
- [43] Serot B D, Walecka J D 1986 *Adv. Nucl. Phys.* **16**
- [44] Reinhard P G 1989 *Rep. Prog. Phys.* **52** 439
- [45] Meng J 1998 *Nucl. Phys. A* **635** 3
- [46] Abramowitz M, Stegun I A 1964 *Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (New York: Dover Publications) p914
- [47] Koepf W, Ring P 1991 *Z. Phys. A: Hadrons Nucl.* **339** 81

Spherical Dirac equation on the lattice and the problem of the spurious states*

Zhao Bin[†]

(School of Physics and Nuclear Energy Engineering, International Research Center for Nuclei and Particles in the Cosmos, Beihang University, Beijing 100191, China)

(Received 15 October 2015; revised manuscript received 30 November 2015)

Abstract

With the development of radioactive ion beam facilities, the study of exotic nuclei with unusual N/Z ratio has attracted much attention. Compared with the stable nuclei, the exotic nuclei have many novel features, such as the halo phenomenon. In order to describe the halo phenomenon with the diffused density distribution, the correct asymptotic behaviors of wave functions should be treated properly. The relativistic continuum Hartree-Bogoliubov (RCHB) theory which provides a unified and self-consistent description of mean field, pair correlation and continuum has achieved great success in describing the spherical exotic nuclei. In order to study the halo phenomenon in deformed nuclei, it is necessary to extend RCHB theory to the deformed case. However, solving the relativistic Hartree-Bogoliubov equation in space is extremely difficult and time consuming. Imaginary time step method is an efficient method to solve differential equations in coordinate space. It has been used extensively in the nonrelativistic case. For Dirac equation, it is very challenging to use the imaginary time step method due to the Dirac sea. This problem can be solved by the inverse Hamiltonian method. However, the problem of spurious states comes out. In this paper, we solve the radial Dirac equation by the imaginary time step method in coordinate space and study the problem of spurious states. It can be proved that for any potential, when using the three-point differential formula to discretize the first-order derivative operator, the energies of the single-particle states respectively with quantum numbers κ and $-\kappa$ are identical. One of them is a physical state and the other is a spurious state. Although they have the same energies, their wave functions have different behaviors. The wave function of physical state is smooth in space while that of spurious state fluctuates dramatically. Following the method in lattice quantum chromodynamics calculation, the spurious state in radial Dirac equation can be removed by introducing the Wilson term. Taking Woods-Saxon potential for example, the imaginary time step method with the Wilson term is implanted successfully and provides the same results as those from the shooting method, which demonstrates its future application to solving the Dirac equation in coordinate space.

Keywords: spherical Dirac equation, lattice in coordinate, spurious states, Wilson term

PACS: 24.10.Jv, 21.60.-n, 21.10.Pc, 03.65.Ge

DOI: 10.7498/aps.65.052401

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2013CB834400), the National Natural Science Foundation of China (Grants Nos. 11175002, 11335002, 11375015), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20110001110087).

[†] Corresponding author. E-mail: bzhao@buaa.edu.cn