

变分法与无规及高阶无规位相近似法(I)* 1)

吳 式 樞
(吉林大学物理系)

提 要

本文目的是指明,无规与高阶无规位相近似法(以下简称 RPA 及 HRPA)也可由一变分法推得,由此可使我們能更清楚地了解 RPA 及 HRPA 的久期方程不具有厄密性的原因,此外变分法还自然地指出了使相应的久期方程会具有厄密性的途径以及一个确定粒子填充数的方法.

一、引 言

近年来 RPA 及 HRPA 方法已得到广泛的注意与应用,除了最初 Sawada^[1] 与 Suhl-Werthamer^[2] 所提出的推导方法以及与之密切相关的密度矩阵法^[3]外, Thouless^[4] 还曾指出应用量子格林函数方法也可以推得同样的結論. RPA 及 HRPA 的久期方程不是厄密的,这是理論的特色还是由于推导过程中所引入的近似所致,从已有的推导方法却都不能得到一个明确的解答. 变分法是一个久已熟知的方法,如能証明, RPA 与 HRPA 的結論也可由变分法推得,这将有助于加深对 RPA 及 HRPA 的了解. 本文的目的是指明,这不仅是可能的,而且由此可以清楚地闡明 RPA 及 HRPA 的久期方程不具有厄密性的原因;此外由变分法还可自然地指出一个使相应的久期方程会具有厄密性的途径以及一个确定粒子填充数的方法. 为了使变分法的引入以及由此而得的結論和 RPA 及 HRPA 間的关系可以叙述得更清楚,我們将在第二节对 RPA 及 HRPA 方法做一个与我們的討論有关的簡短回顾,虽然这一节基本上不含有新的內容.

二、RPA 与 HRPA 方法的簡短回顾

設体系的哈密頓量为:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{W}, \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_0 = \sum_r \epsilon_r \xi_r^\dagger \xi_r, \quad (2)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} \sum_{rskl} \langle rs | w | kl \rangle \xi_r^\dagger \xi_s^\dagger \xi_l \xi_k, \quad (3)$$

式中 ξ_r^\dagger, ξ_r 分别代表单粒子情态 φ_r 的费米子产生与消灭算符. 熟知地,如 Ψ_0 表示 \mathbf{H} 的一个严格本征态, $\mathbf{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0$, 且算符 \mathcal{A} 满足

$$[\mathbf{H}, \mathcal{A}] = \Delta E \mathcal{A}, \quad (4)$$

則 $\Psi = \mathcal{A}\Psi_0$ 也是 \mathbf{H} 的一个严格本征态,并有

* 1964年1月23日收到.

1) 本文曾于1963年8月在中国物理学会年会上报告过.

$$\mathbf{H}\Psi = (E_0 + \Delta E)\Psi, \quad (5)$$

令 $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \dots, \mathcal{A}_\mu$ 表示一组线性无关的算符, 設

$$\mathcal{A} = \sum_{i=1}^{\mu} c_i \mathcal{A}_i, \quad (6)$$

式中 c_i 为未定常数, 引用收缩运算, 容易求得

$$[\mathbf{H}, \mathcal{A}_i] = \sum_j X_{ji} \mathcal{A}_j + \mathbf{R}_i \quad (7)$$

$$\approx \sum_j X_{ji} \mathcal{A}_j, \quad (8)$$

式中 \mathbf{R}_i 表示剩余项, 即 $[\mathbf{H}, \mathcal{A}_i]$ 中所含不能通过收缩运算化为 $\sum_j \sigma_j \mathcal{A}_j$ 形式的项, σ_j 表示常数系数. RPA 与 HRP A 的基本假设是: 倘 $\mathcal{A}_i (i = 1, 2, \dots, \mu)$ 选择恰当, 则 \mathbf{R}_i 可以忽略不计, 由此有式(8). 以式(6)代入式(4)并顾及到式(8), 可以立即求得

$$\sum_i X_{ji} c_i = \Delta E c_j, \quad (9)$$

上式就是确定 ΔE 与 c_i 的久期方程. 式(9)中 X_{ji} 仍为粒子填充数 $n_r = \langle \Psi_0 | f_r^{-1} \sum_{\mu} \xi_{r\mu}^+ \xi_{r\mu} | \Psi_0 \rangle$ 的函数, 倘 Ψ_0 为未知, 则 n_r 亦未知; 但如可以直接求得 n_r , 则不需要知道 Ψ_0 就可以由式(9)求得 ΔE 与 c_i . 如果 Ψ_0 为激发态或非满壳层核基态的严格波函数, Ψ_0 与其零级近似波函数 $\Phi_0 (\mathbf{H}_0 \Phi_0 = E_0^0 \Phi_0)$ 相差可以很大, 因而应用 Φ_0 以近似地求 n_r 是不合适的; 但如 Ψ_0 为满壳层核或接近满壳层性质的支满壳层核 (以下为了简便, 这二情况将统称满壳层核) 的严格基态波函数, 则以 Φ_0 计算 n_r , 近似程度将会好得多. 由此, 为了避开求解 Ψ_0 , 实际应用 RPA 与 HRP A 时恒约定选 Ψ_0 为满壳层核的严格基态波函数, 这时对 n_r 近似地有

$$n_r = 1 \text{ 如 } e_r \leq e_f, \quad n_r = 0 \text{ 如 } e_r > e_f, \quad (10)$$

式中 e_f 表示费米面能量. 注意, 上述约定, 原则上不局限 RPA 及 HRP A 的应用范围, 因为对任一核恒可选得相应的 Ψ_0 . 例如倘拟计算 O^{16} 的情态, 可选 O^{16} 自己的严格基态波函数为 Ψ_0 ; 而若拟计算 Si^{29} 的情态, Ψ_0 可选为 Si^{28} 的严格基态波函数 (参看第四节). $\mathcal{A}_i (i = 1, 2, \dots, \mu)$ 的选择同壳模型组态混合计算的考虑相似, 所不同的只是 \mathcal{A}_i 中除了按组态混合考虑应顾及的项 (正向项) 外还包含与之相应的反向项, 由于正向项与反向项间的矩阵元 X_{ji} 即使引入了式(10)的近似亦恒不都等于零, 因此通过反向项的引入使 RPA 及 HRP A 有可能顾及到基态关联的影响, 从而比一般的组态混合计算向前推进了一步. 根据刚才所叙述的 \mathcal{A}_i 的选择方法, 剩余项 \mathbf{R}_i 可以忽略不计的一个理由很明显就可看为和进行组态混合计算时忽略去零级能量相差较大的组态的理由一样. 熟知地, HRP A 和 RPA 的区别只在于 \mathcal{A}_i 的选择, 如 \mathcal{A}_i 选择得更完备, 所得结论就称为 HRP A. 因 \mathcal{A}_i 中含有反向项, 由式(7)计算得的 X_{ji} 不都满足 $X_{ji} = X_{ij}^*$, 因而久期方程(9)不是厄密的. 显然式(10)不是严格的, 为了避开求 Ψ_0 而又能修正由式(10)得到的结论, 一般的也是颇为明显的一个做法^[2,5] 是: 在 \mathcal{A}_i 中引入含有涨落因子 $(\xi_r^+ \xi_r - n_r)$ 的项, 引入后应用式(8)导出新的久期方程(9), 然后再以式(10)代入所得式(9)的 X_{ji} 中. 在 RPA 及 HRP A 理论范围内求解 Ψ_0 的方法请参看文献[6], 这里就不重复了.

三、变分法

对应于式(6), 让我们引入以下线性变分函数:

$$\Psi = \sum_i c_i \mathcal{A}_i \Psi_0, \quad (6')$$

式中 \mathcal{A}_i 与 Ψ_0 的含意与第二节中所引入的完全相同, c_i 为变分参数. 設 Ψ_0 为已知, 如拟要求 Ψ 为

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi, \quad E = E_0 + \Delta E,$$

的近似解, 根据变分原理, c_i 与 E 应满足的久期方程为

$$\sum_i (H_{ji} - E\Delta_{ji})c_i = 0; \quad (11)$$

式中

$$H_{ji} = \langle \mathcal{A}_j \Psi_0 | \mathbf{H} | \mathcal{A}_i \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_j^\dagger \mathbf{H} \mathcal{A}_i | \Psi_0 \rangle, \quad (12)$$

$$\Delta_{ji} = \langle \mathcal{A}_j \Psi_0 | \mathcal{A}_i \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_j^\dagger \mathcal{A}_i | \Psi_0 \rangle, \quad (13)$$

显然我們有 $H_{ji} = H_{ji}^*$, $\Delta_{ji} = \Delta_{ji}^*$, 亦即矩阵 $\mathbf{H} - E\Delta$ $\{(\mathbf{H} - E\Delta)_{ji} \equiv H_{ji} - E\Delta_{ji}\}$ 是厄密的. 虽然 Ψ_0 仍为未知, 但如通过近似方法, 可以求得

$$\left. \begin{aligned} H_{ji} &\approx H_{ji}(n_1, \dots, n_r, \dots), \\ \Delta_{ji} &\approx \Delta_{ji}(n_1, \dots, n_r, \dots), \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

和第二节相同, 式中 $n_r = \langle \Psi_0 | f_r^{-1} \sum_\mu \xi_r^\dagger \xi_{r,\mu} | \Psi_0 \rangle$. 以式(14)代入式(11), 可以求得

$$E = E(n_1, \dots, n_r, \dots), \quad (15)$$

根据变分原理, 这說明, 我們可以通过求式(15)的极值以确定 n_1, \dots, n_r, \dots , 即为了避开 Ψ_0 , 我們也可以引入以下变分方法: 不仅将 $c_i (i = 1, 2, \dots, \mu)$, 而且将 $n_r (r = 1, 2, \dots)$ 选为变分参数. 变分 c_i 可以求得式(11), 以式(14)代入式(11)有

$$\sum_i (H_{ji}(n_1, \dots, n_r, \dots) - E\Delta_{ji}(n_1, \dots, n_r, \dots))c_i = 0, \quad (11')$$

由此可以求得

$$\left. \begin{aligned} E &= E(n_1, \dots, n_r, \dots), \\ c_i &= c_i(n_1, \dots, n_r, \dots). \end{aligned} \right\} \quad (15')$$

再在粒子数守恒的附属条件

$$\langle \Psi | \mathfrak{N} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle = N(n_1, \dots, n_r, \dots) = N_0, \quad 0 \leq n_r \leq 1 \quad (16)$$

下变分 n_r , 通过求式(15)的极值以确定 n_r , 以所得 n_r 代入式(15'), 即得到拟求的解. 自然, 在实际进行数值計算时并不一定要按以上所述的步骤. 式(16)中 N_0 表示体系所含粒子的总数, $\mathfrak{N} = \sum_i \xi_i^\dagger \xi_i$ 表示总粒子数算符.

因 \mathcal{A}_i 也应是綫性无关的, 对 \mathcal{A}_i 的选择显然恆可以提出以下的要求:

$$\langle \mathcal{A}_j \Psi_0 | \mathcal{A}_i \Psi_0 \rangle = \Delta_{ij} \delta_{ij}, \quad (17)$$

由此, 久期方程(11)可改写为

$$\sum_i H_{ji} c_i = E \Delta_{ji} c_i. \quad (18)$$

下面我們証明, RPA 与 HRPA 的久期方程(9)是式(18)的一个近似. 因

$$\mathbf{H} \mathcal{A}_i = [\mathbf{H}, \mathcal{A}_i] + \mathcal{A}_i \mathbf{H}, \quad (19)$$

以式(19)代入式(12)并顾及到式(8), 式(17)以及 $\mathbf{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0$, 有

$$\begin{aligned} H_{ji} &= \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_j^\dagger [\mathbf{H}, \mathcal{A}_i] + \mathcal{A}_i^\dagger \mathcal{A}_i \mathbf{H} | \Psi_0 \rangle \\ &\approx \langle \Psi_0 | \{ \mathcal{A}_j^\dagger \sum_k X_{ki} \mathcal{A}_k \} + E_0 \mathcal{A}_j^\dagger \mathcal{A}_i | \Psi_0 \rangle \\ &= (X_{ji} + E_0 \delta_{ij}) \Delta_{ji}, \end{aligned} \quad (20)$$

以式(20)代入式(18), 立即得到式(9), 命題因而証毕. 因久期方程(18)是厄密的, 由式(20)我們看到, RPA 与 HRPA 的久期方程(9)不具有厄密性的原因是由于引用了收縮

运算以近似地計算 $[\mathbf{H}, \mathcal{A}_i]$ 所致。此外, 因式(9)是式(18)的近似, 我們还可有以下結論: 1) 为了改进式(10)的近似假設, 我們現在也可应用变分原理联立式(9)与式(16)以確定 n_r ; 2) 式(9)所得根 ΔE 有可能是复数, 本来复数的 ΔE 或 $E = E_0 + \Delta E$ 仍可能有物理意义^[5], 但因式(18)的根 E 必定是实数, 这說明, 式(9)所得解只有当 $\text{Im}(\Delta E) \approx 0$ 时才可能有实际意义。注意, 式(10)并不与变分法相抵触, 因为以式(10)代入式(16), 式(16)将自然得到滿足; 又在收縮运算的近似下, 如 \mathcal{A}_i 的选择滿足式(17), 我們將恆有

$$\langle \mathcal{A}_i \Psi_0 | \mathbf{R}_i | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \mathcal{A}_i^\dagger \mathbf{R}_i | \Psi_0 \rangle = 0;$$

因按定义 \mathbf{R}_i 不能写为 $\sum_j \sigma_j \mathcal{A}_j$ 形式的項, 故应用式(7)以計算 H_{ii} 在收縮运算下所得結果将与式(20)完全一样。

熟知地, 收縮运算本身并不会破坏矩陣元的厄密性¹⁾, 因此如果不利用 $\mathbf{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0$ 而也只用收縮方法計算式(20)的第二項, 即如完全应用收縮以計算 H_{ii} , 对由此求得的 H_{ii} 必有

$$H_{ii} = H_{ii}(n_1, \dots, n_r, \dots) = H_{ii}(n_1, \dots, n_r, \dots)^*. \quad (21)$$

这說明, 倘式(18)中对角元 H_{ii} 应用式(20), 但非对角元 $H_{ij}(i \neq j)$ 应用式(21), 所得久期方程将保持 \mathbf{H} 所有的对称性。注意, 式(21)不及式(20)准确, 另外, 如以式(10)代入式(21), 正向項与反向項間的 H_{ij} 将等于零, 因此虽然这久期方程保留有正确的对称性, 应用变分原理以这式与式(16)联立有无可能得到比以式(9)与式(16)联立更好的結果, 甚至有无可能由此顾及反向項的影响(即求得不同于式(10)的极值), 还需要通过对具体实例进行数值計算才能判定, 这方面工作姚玉洁和作者正在进行。

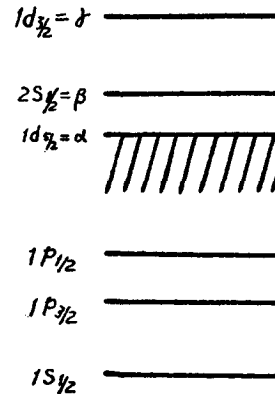
四、举 例

这节我們將討論两个簡單例子, 目的是希望借此表明由式(21)与(20)所得的久期方程間的关系, 并对式(16)作一点注释。由于并不是对实例进行定量分析, 为了使所写表达式不致不必要的冗长, 我們將忽略同位旋, 并将对式(6)的 \mathcal{A} 做較簡單的选择, 虽然由此而得的近似对实际应用可能是不够的。为了确定起見, 我們假定所选 φ_r 与 ϵ_r 就是壳模型的单粒子波函数与能量, 并明确地認为 \mathbf{H} 不仅是厄密的, 而且具有旋轉, 時間反演等不变性, 由此 H_{ii} 将和磁量子数 M 无关, 而且是实数。

(1) 无規位相近似

設体系只含有 14 个粒子, Ψ_0 为其严格基态波函数, 而且我們只討論其低激发态。令 \mathcal{A} 选为

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= c_{\beta a} \mathcal{A}_{\beta a}(JM) + c_{r a} \mathcal{A}_{r a}(JM) + \tilde{c}_{\beta a} \tilde{\mathcal{A}}_{\beta a}(JM) + \tilde{c}_{r a} \tilde{\mathcal{A}}_{r a}(JM) \\ &= a_{\beta a} n_{\beta a}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{A}_{\beta a}(JM) + a_{r a} n_{r a}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{A}_{r a}(JM) + \tilde{a}_{\beta a} n_{\beta a}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathcal{A}}_{\beta a}(JM) + \tilde{a}_{r a} n_{r a}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathcal{A}}_{r a}(JM), \quad (22) \end{aligned}$$



1) 这点通过考虑 $\langle \mathcal{A}_i \Phi | \mathbf{H} | \mathcal{A}_i \Phi \rangle$, 并注意到

$$\langle \mathcal{A}_i \Phi | \mathbf{H} | \mathcal{A}_i \Phi \rangle = \langle \mathcal{A}_i \Phi | \mathbf{H} | \mathcal{A}_i \Phi \rangle^*,$$

就可立即看出, 其中 Φ 表示 \mathbf{H}_0 的本征态 ($\mathbf{H}_0\Phi = E^0\Phi$), 且 $\mathcal{A}_i\Phi \neq 0$, $\mathcal{A}_i\Phi \neq 0$.

式中 $n_{ab} = (1 - n_a)n_b$, 正向項 $\mathcal{A}_{ab}(JM)$ 与反向項 $\tilde{\mathcal{A}}_{ab}(JM)$ 的表达式如下:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{A}_{ab}(JM) &= \sum_{m_a m_b} \xi_{n_a i_a m_a}^+ \xi_{n_b j_b - m_b} (-1)^{i_b - m_b} C_{i_a m_a i_b m_b}^{JM} \\ \tilde{\mathcal{A}}_{ab}(JM) &= (-1)^{J-M} \mathcal{A}_{ab}^+(J, -M) = (-1)^{i_b - i_a + J} \mathcal{A}_{ba}(JM). \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

因我們只討論体系的低激发态,除了式(22)所含变分系数 c 及 \tilde{c} 或 a 及 \tilde{a} 外,作为比式(10)进一步的近似,我們可只将 n_a, n_β 与 n_r 选为变分参数而将其他的 n_r 近似地取为

$$n_r = 1, \text{ 如 } \epsilon_r < \epsilon_f = \epsilon_a; \quad n_r = 0, \text{ 如 } \epsilon_r > \epsilon_r. \quad (24)$$

应用 $\mathcal{R}\mathcal{A} = [\mathcal{R}, \mathcal{A}] + \mathcal{A}\mathcal{R}$, 很明显,对于式(22)的 \mathcal{A} , 式(16)的粒子数守恒附属条件自然满足. 由式(20)亦即按 RPA 方法所得的久期方程是熟知的,其表达式为

$$\begin{bmatrix} X - \Delta E \mathbf{I} & Y \\ -Y & -X - \Delta E \mathbf{I} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c \\ \tilde{c} \end{bmatrix} = 0, \quad c = \begin{bmatrix} c_{\beta a} \\ c_{\gamma a} \end{bmatrix}, \quad \tilde{c} = \begin{bmatrix} \tilde{c}_{\beta a} \\ \tilde{c}_{\gamma a} \end{bmatrix}, \quad (25)$$

式中 $\mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$,

$$X = \begin{bmatrix} X_{\beta a, \beta a} & A_{\beta a, \gamma a}(n_r - n_a) \\ A_{\beta a, \gamma a}(n_\beta - n_a) & X_{\gamma a, \gamma a} \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} B_{\beta a, \beta a}(n_\beta - n_a) & B_{\beta a, \gamma a}(n_r - n_a) \\ B_{\beta a, \gamma a}(n_\beta - n_a) & B_{\gamma a, \gamma a}(n_r - n_a) \end{bmatrix}.$$

通过計算容易求得,由式(21)而得的久期方程可以写成如下形式:

$$\begin{bmatrix} X_{\beta a, \beta a} - \Delta E & -A_{\beta a, \gamma a} n_{\beta a, \gamma a}^{\frac{1}{2}} & B_{\beta a, \beta a} n_{\beta a, \alpha \beta}^{\frac{1}{2}} & B_{\beta a, \gamma a} n_{\beta a, \alpha \gamma}^{\frac{1}{2}} \\ -A_{\beta a, \gamma a} n_{\beta a, \gamma a}^{\frac{1}{2}} & X_{\gamma a, \gamma a} - \Delta E & B_{\beta a, \gamma a} n_{\gamma a, \alpha \beta}^{\frac{1}{2}} & B_{\gamma a, \gamma a} n_{\gamma a, \alpha \gamma}^{\frac{1}{2}} \\ B_{\beta a, \beta a} n_{\beta a, \alpha \beta}^{\frac{1}{2}} & B_{\beta a, \gamma a} n_{\gamma a, \alpha \beta}^{\frac{1}{2}} & -X_{\beta a, \beta a} - \Delta E & -A_{\beta a, \gamma a} n_{\alpha \beta, \alpha \gamma}^{\frac{1}{2}} \\ B_{\beta a, \gamma a} n_{\beta a, \alpha \gamma}^{\frac{1}{2}} & B_{\gamma a, \gamma a} n_{\gamma a, \alpha \gamma}^{\frac{1}{2}} & -A_{\beta a, \gamma a} n_{\alpha \beta, \alpha \gamma}^{\frac{1}{2}} & -X_{\gamma a, \gamma a} - \Delta E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_{\beta a} \\ a_{\gamma a} \\ \tilde{a}_{\beta a} \\ \tilde{a}_{\gamma a} \end{bmatrix} = 0, \quad (26)$$

式中 $n_{ab, cd} = (1 - n_a)n_b(1 - n_c)n_d$. 对比式(25)与(26),我們看到,除了各矩陣元所含与 n_σ ($\sigma = \alpha, \beta, \gamma$) 有关的因子不同外,这两个久期方程的其余部分是一样的,但性质却不相同,式(26)是对称的而式(25)則不是. 此外,如以式(10)代入,式(26)退化为平常的壳模型組态混合計算,而式(25)中的 X 这时虽和壳模型結果一致,其 Y 却仍不等于零. 这說明,即使以式(10)代入,式(25)仍可顾及反向項的影响;而式(26)却不然,只有当所得 n_σ 的极值不等于式(10)时,我們才有可能由式(26)通过其保留有正确的对称性而求得較好的結果. 因式(16)自然满足,变分 n_σ 以求式(25)或(26)的极值时,除了要求 $0 \leq n_\sigma \leq 1$ 外, n_σ 現在不受其他条件的限制. 令 n_σ^0 表 n_σ 的极值. 注意,倘我們用收縮方法以近似地計算 $\langle \Psi | \mathcal{R} | \Psi \rangle$, 式(16)并不自然满足,其表达式如下:

$$\begin{aligned} & (j_a n_a + j_\beta n_\beta) \{ |c_{\beta a}|^2 n_a (1 - n_\beta) + |\tilde{c}_{\beta a}|^2 n_\beta (1 - n_a) \} + \\ & + (j_a n_a + j_r n_r) \{ |c_{\gamma a}|^2 n_a (1 - n_r) + |\tilde{c}_{\gamma a}|^2 n_r (1 - n_a) \} \\ & = \frac{5}{2} \{ |c_{\beta a}|^2 n_a (1 - n_\beta) + |\tilde{c}_{\beta a}|^2 n_\beta (1 - n_a) + |c_{\gamma a}|^2 n_a (1 - n_r) + \\ & + |\tilde{c}_{\gamma a}|^2 n_r (1 - n_a) \}, \end{aligned} \quad (27)$$

或

$$\begin{aligned} & (j_a n_a + j_\beta n_\beta) \{ |a_{\beta a}|^2 + |\tilde{a}_{\beta a}|^2 \} + (j_a n_a + j_r n_r) \{ |a_{\gamma a}|^2 + |\tilde{a}_{\gamma a}|^2 \} \\ & = \frac{5}{2} \{ |a_{\beta a}|^2 + |\tilde{a}_{\beta a}|^2 + |a_{\gamma a}|^2 + |\tilde{a}_{\gamma a}|^2 \}. \end{aligned} \quad (27')$$

很明显, 式(10)满足式(27)及(27'), 但以 n_0^0 代入, 式(27)或(27')却不一定成立, 因而式(27)或(27')可以作为收缩运算近似程度的一个判据。由于求得式(25)与(26)时我们都引用了收缩运算, 倘式(27)或(27')以 n_0^0 代入很不满足, 为了自洽起见, 显然我们还可取式(27)或(27')作为附属条件, 即不仅在 $0 \leq n_\sigma \leq 1$, 而且在式(27)或(27')的要求下变分 n_σ 以求式(25)与(26)的极值, 如所得 n_σ 的极值不等于式(10), 我们将仍可由此得到比一般的 RPA 计算更好的结果。

(2) 高阶无规位相近似¹⁾

设体系含有 15 个粒子, 我们只讨论其 $J = \frac{1}{2}$ 的基态。令 Ψ_0 与 $n_\sigma (\sigma = \alpha, \beta, \gamma)$ 的含意如例(1), 并将 \mathcal{A} 选为

$$\mathcal{A} = \sum_{i=1}^4 c_i \mathcal{A}_i = \sum_{i=1}^4 a_i \mathcal{A}'_i, \quad (28)$$

式中 \mathcal{A}_i 与 \mathcal{A}'_i 的含意如下:

i	1	2	3	4
\mathcal{A}_i	$\xi_{2S, J=\frac{1}{2}, M}^+$	$\mathcal{A}_{J=\frac{1}{2}, M}^1(\beta\gamma\alpha)$	$\mathcal{A}_{J=\frac{1}{2}, M}^2(\gamma\alpha\beta)$	$\mathcal{A}_{J=\frac{1}{2}, M}^3(\beta\alpha\gamma)$
\mathcal{A}'_i	$(1-n_\beta)^{-\frac{1}{2}} \xi_{2S, J=\frac{1}{2}, M}^+$	$n_\beta^{-\frac{1}{2}} \mathcal{A}_{J=\frac{1}{2}, M}^1(\beta\gamma\alpha)$	$n_\gamma^{-\frac{1}{2}} \mathcal{A}_{J=\frac{1}{2}, M}^2(\gamma\alpha\beta)$	$n_\beta^{-\frac{1}{2}} \mathcal{A}_{J=\frac{1}{2}, M}^3(\beta\alpha\gamma)$

表中 $n_{abc} = (1-n_a)(1-n_b)n_c$, \mathcal{A}_{JM}^{abc} 的定义为

$$\mathcal{A}_{JM}^{abc} = \sum_{m_a m_b m_c} \xi_{n_a m_a}^+ \xi_{n_b m_b}^+ \xi_{n_c m_c} (-1)^{i_c - m_c} C_{i_a m_a i}^{JM} C_{i_b m_b i}^{JM} C_{i_c m_c i}^{JM}$$

很明显, \mathcal{A}_1 与 \mathcal{A}_2 为正向项而 \mathcal{A}_3 与 \mathcal{A}_4 为反向项。经过直接计算容易求得, 式(29)为由式(21)而式(30)为由式(20)亦即按 HRP A 方法所求得的久期方程, 这两个方程的对比关系和例(1)完全一样, 只是和式(25)相比, 式(30)更缺少对称性, 因而对非满壳层核由式(21)所求得的久期方程可能会有更大一些的重要性。显然, 对式(28)的 \mathcal{A} , 式(16)亦自然满足, 同样, 我们也可引用收缩运算以计算式(16), 由此所得表达式的作用和例(1)相同, 这里就不重述了。因计算是直接的, 但表达式却颇繁长, 这里也不写出了。

$$\begin{bmatrix} A_{11} - \Delta E & A_{12} [n_\alpha (1-n_\beta)^2 (1-n_\gamma)]^{1/2} & A_{13} [(1-n_\alpha)n_\beta(1-n_\beta)(1-n_\gamma)]^{1/2} & A_{14} [(1-n_\alpha)(1-n_\beta)^2 n_\gamma]^{1/2} \\ A_{12} [n_\alpha (1-n_\beta)^2 (1-n_\gamma)]^{1/2} & A_{22} - \Delta E & A_{23} n_\beta^{\frac{1}{2}} \alpha, \beta\alpha & A_{24} n_\beta^{\frac{1}{2}} \alpha, \alpha\gamma \\ A_{13} [(1-n_\alpha)n_\beta(1-n_\beta)(1-n_\gamma)]^{1/2} & A_{23} n_\beta^{\frac{1}{2}} \alpha, \beta\alpha & A_{33} - \Delta E & A_{34} n_\beta^{\frac{1}{2}} \gamma, \beta \\ A_{14} [(1-n_\alpha)(1-n_\beta)^2 n_\gamma]^{1/2} & A_{24} n_\beta^{\frac{1}{2}} \alpha, \alpha\gamma & A_{34} n_\beta^{\frac{1}{2}} \gamma, \beta & A_{44} - \Delta E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = 0, \quad (29)$$

1) 这个例子主要是由研究生姚玉洁计算的。

式中 $n_{ab,ba} = (1-n_a)n_b(1-n_b)n_a$.

$$\begin{bmatrix} A_{11} - \Delta E & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{12}(n_a + n_\beta n_\gamma - n_\gamma n_a - n_a n_\beta) & A_{22} - \Delta E & A_{23}(n_\beta - n_a) & A_{24}(n_a - n_\gamma) \\ A_{13}(n_\beta + n_\gamma n_a - n_a n_\beta - n_\beta n_\gamma) & A_{23}(n_a - n_\beta) & A_{33} - \Delta E & A_{34}(n_\beta - n_\gamma) \\ A_{14}(n_\gamma + n_a n_\beta - n_\beta n_\gamma - n_\gamma n_a) & A_{24}(n_\gamma - n_a) & A_{34}(n_\gamma - n_\beta) & A_{44} - \Delta E \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = 0. \quad (30)$$

参 考 文 献

- [1] Sawada, K., *Phys. Rev.*, **106** (1957), 372; Sawada, K., Brueckner, K. A., Fukuda, N. and Brout, R., *Phys. Rev.*, **108** (1957), 507.
 [2] Suhl, H. and Werthamer, N. R., *Phys. Rev.*, **122** (1961), 359; Sawicki, J., *ibid.*, **126** (1962), 2231.
 [3] Ehrenreich, H. and Cohen, M. H., *Phys. Rev.*, **115** (1959), 786; Goldstone, J. and Gottfried, K., *Nuovo Cim.*, **13** (1959), 849; Sawicki, J., *Nucl. Phys.*, **23** (1961), 285.
 [4] Thouless, D. J., *Nucl. Phys.*, **22** (1961), 78; Brown, G. E., Evans, J. A. and Thouless, D. J., *ibid.*, **24** (1961), 1.
 [5] Fano, G. and Sawicki, J., *Nuovo Cim.*, **25** (1962), 586.
 [6] Baranger, M., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 957; Goswami, A. and Pal, M. K., *Nucl. Phys.*, **44** (1963), 294.

ON A VARIATIONAL METHOD AND THE RP-HRP APPROXIMATION

WU SHI-SHU

(Department of Physics, Chilin University)

ABSTRACT

It is shown that the RP-HRP (random phase and higher random phase) approximation may be derived by a variational method. The reason why the secular equation of the RP-HRP approximation is nonhermitian is then made clear and a procedure which can lead it to be hermitian is suggested. It is further pointed out that the variation principle may also serve as a method to determine the average occupation numbers $n_r = \langle \Psi_0 | f_r^{-1} \sum_\mu \xi_{r\mu}^+ \xi_{r\mu} | \Psi_0 \rangle$.