

RPA 的复数本征解与相变

姚玉洁 井孝功 赵国权 吴式枢

(吉林大学理论物理中心、物理系, 长春 130023)

摘 要

应用推广的三能级可解模型, 本文研究了满壳体系的相变、哈吹-福克(HF)解的稳定性和无规位相近似(RRA)方程的复数解, 并较为仔细地讨论了相变与RPA方程复数解之间的关系. 结果表明, RPA方程出现复数解时并不必然地预示着体系发生了相变. 一般来说, 复数解的出现乃是近似变坏的结果.

一、前 言

多体体系在某些条件下将发生结构上的变化, 即发生了相变. 对相变的研究无疑是一个重要的课题, 人们如何从物理上正确地给出可能的信息以预示真实相变的发生, 是一个令人感兴趣的有意义的问题. 文献[1, 2]指出, 随着力参数的变化, 哈吹-福克(HF)解的突变和无规位相近似(RPA)方程的复数解的出现, 可以作为体系发生相变的一种信息. 对于前者, 我们已进行过讨论^[3]. 本文将就后者做进一步的讨论. 与文献[3]相同, 我们仍采用推广的三能级可解模型. 因为利用该模型可以让我们得到体系的严格能量值及相应的严格波函数, 从而可以准确地知道体系是否发生了相变, 如果发生了相变, 那么相变点在哪里? 另一方面, 利用该模型, 可以让我们在HF基下, 求出RPA方程的解, 进而比较两者, 得出较明确的结论.

本文讨论了以下的问题: 如果RPA方程出现了复数解, 那么这是否就一定预示着体系确实存在有相变? 反之, 如果体系确实存在相变, 那么相应的RPA方程解是否必然是复数解? 如果RPA方程仅有实数解, 那么体系是否就一定不存在相变? 事实上, 后两个问题也可以作为一个问题来讨论.

根据我们计算的结果表明, 对以上问题的回答均是否定的.

二、严格解与 RPA 方程解

1. 严格解与体系的相变

与文献[3, 5]采用的符号相同, 用 E_n 及 $|\Psi_n(N)\rangle$ 分别表示 N 个粒子体系严格能量值及相应的严格波函数. H 表示推广的三能级可解模型的哈密顿量, 其形式及所使用的符

* 本工作由国家自然科学基金和国家教委博士点基金资助

本文1992年4月2日收到.

号见文献[5]. 为书写简单, 本文将用 $|\Phi_n\rangle$ 简记基矢, 特别约定对最大权重态记为 $|\Phi_0\rangle$. 对于 N 个粒子体系, 在给定的 (λ_μ) 不可约表示^[4]中, 当力参数取为 $z \equiv (V, X, W, U, T)$ 时, 严格波函数可以写为: $|\Psi_k(z)\rangle = \sum_n |\Phi_n\rangle C_k^n(z)$, 其中 $C_k^n(z)$ 为在 Z 参数下, 第 k 个严格波函数在 $|\Phi_n\rangle$ 上的分量. 本征方程可写为:

$$\sum_n [\langle \Phi_m | H | \Phi_n \rangle - E_k \delta_{mn}] C_k^n(z) = 0. \quad (1)$$

我们约定, 由(1)式解出的 $|\Psi_k(z)\rangle$ $k=0, 1, 2, \dots$, 按 E_k 递增的次序排列, 这一约定也适用于近似解的排列.

当 $|\Psi_k(z)\rangle$ 或 $\partial|\Psi_k(z)\rangle/\partial z$ 随力参数 Z 的变化发生突变时, 我们就说体系的状态发生了一级或二级相变. 如若所有的 C_k^n 或 C_k^n/Z ($n=0, 1, 2, \dots$) ($k=0, 1, 2, \dots$) 随 Z 的变化都很平滑, 则我们可以确切地说, 体系不存在相变. 对基态 $|\Psi_0(z)\rangle$ 而言, 若 C_0^n 中或 $\partial C_0^n/\partial Z$ 中 ($n=0, 1, 2, \dots$) 有一个或几个随 Z 的变化发生了突变, 我们就说体系的基态发生了一级或二级相变. 本文将着重考察基态的相变.

2. RPA 方程的解及 HF 解的稳定性

记 HF 单粒子能基为 $\epsilon_a, a=1, 2, 3$, 且 $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \epsilon_3$, 在模型空间中我们通过对 HF 本征方程的自洽求解, 给出了 HF 波函数的完备系 $(|pa\rangle)$ ^[5].

我们从粒子-空穴格林函数出发, 并将哈密顿量 H_1 改写为:

$$H_1 = (1/4) \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta,\gamma\delta} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma,$$

(其中 V 表示反对称化了的二体矩阵元), 则可给出熟知的 RPA 方程^[6]. 在 HF 基下, 正向项取为 $(p3, p1)$ $(p2, p1)$ 及 $(p3, q1)$, $(p2, q1)$ ($p \neq q$). 反向项取为 $(p1, p3)$, $(p1, p2)$ 及 $(p1, q3)$, $(p1, q2)$ ($p \neq q$). 由于哈密顿量不引起不同退化态之间的混杂, 因而使得 8×8 维矩阵整齐地分成了两个互不关联的 4×4 维矩阵, 分别对应 $p=q$ 和 $p \neq q$ 的情况. 对于这两种情况我们均作了数值计算. 一般来说, 后者给出的是高激发态, 因此本文仅就前者予以讨论. 在 $p=q$ 的情况下, RPA 方程的形式为:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X(\lambda) \\ Y(\lambda) \end{pmatrix} = \mathcal{E}_\lambda \begin{pmatrix} X(\lambda) \\ Y(\lambda) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

在 HF 基下, A, B 为下述子矩阵:

$$A = \begin{pmatrix} \epsilon_3 - \epsilon_1 + V_{31,13} & V_{31,12} \\ V_{21,13} & \epsilon_2 - \epsilon_1 + V_{21,12} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} V_{33,11}, V_{32,11} \\ V_{23,11}, V_{22,11} \end{pmatrix}$$

$$\text{且: } X(\lambda) = \begin{pmatrix} X_{31}(\lambda) \\ X_{21}(\lambda) \end{pmatrix}, Y(\lambda) = \begin{pmatrix} Y_{13}(\lambda) \\ Y_{12}(\lambda) \end{pmatrix}.$$

其中 $V_{ab,cd}$ 为反对称二体相互作用元. a, b, c, d 均可取 $1, 2, 3$.

利用: $|pa\rangle = \sum_a |pa\rangle f_{aa}$, 可得二体阵元为:

$$V_{ab,cd} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} f_{\alpha a}^* f_{\beta b}^* \langle paq\beta | H_1 | p\gamma q\delta \rangle f_{\gamma c} f_{\delta d}. \quad (3)$$

$\langle paq\beta | H_1 | p\gamma q\delta \rangle$ 的具体形式与文献[5]中(7)式相同.

Thouless 曾经指出^[1], 如果矩阵

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \quad (4)$$

是恒正的,则 HF 解必是稳定的;进而,如果 HF 解是稳定的,则 RPA 方程的能量本征值 (RPAE) 则一定是实的. 但以下结论:“如果 HF 解不稳定,则 RPAE 一定是复的;或,如果 RPAE 是实的,则 HF 解一定稳定.”却不成立.

我们将通过对力参数的某种方式的改变,来追踪 RPA 方程的本征值 RPAE 及相应的波函数,并考虑相应的 HF 解的稳定性. 我们将 HF 解是否稳定, RPAE 是否为复数与严格解是否存有相变联系起来,以确定 HF 解的稳定性与 RPA 的复数解之间的关系,以及确定 RPA 复数解的出现是否能反映体系的真实相变.

方程(2)可改写为:

$$(X^+(\lambda), Y^+(\lambda)) \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X(\lambda) \\ Y(\lambda) \end{pmatrix} = \mathcal{E}\lambda(X^+(\lambda)X(\lambda) - Y^+(\lambda)Y(\lambda)). \quad (5)$$

由于矩阵(4)是厄米矩阵,故(5)式的左边必为实数,而(5)式右边的 $(X^+X - Y^+Y)$ 也必为实数,若 \mathcal{E} 为复数时,只能有 $(X^+X - Y^+Y) = 0$ (数值计算也证实了这一点),从而波函数自身正交,这样 RPA 方程的解就不完备了,然而,一般来说, RPA 方程的解应该构成完备系. 从这种意义上来讲, RPA 方程出现复数解的现象,很可能预示着这是近似变坏的结果. 事实上,我们通过数值上与严格解的比较也证实了这一点.

三、计算结果及讨论

本文对 $N=4$ (退化度 $\Omega=4$) 的多体体系,在 $(\lambda\mu) = (40)$ 的不可约表示中进行了数值计算. 该不可约表示的维数为 15, 因此 RPA 方程的解只能相应其中的一小分解,且主要为低激发态的解. 模型空间的三条能级的能量固定取值为: $\epsilon_x^0 = 0.00$, $\epsilon_y^0 = 2.00$, $\epsilon_z^0 = 2.50$.

我们将所得的典型结果分述如下.

表 1

T	E_0	C_0^x	C_0^y	C_0^z	E_1	C_1^x	C_1^y	C_1^z	$E_1 - E_0$	RPA _{eq.} 解 $\mathcal{E}\lambda$
0.34	-1.86	0.00	0.36	0.76	-1.69	0.00	-0.57	0.28	0.17	± 2.46 ± 0.05
0.35	-1.89	0.00	-0.35	0.74	-1.73	0.00	-0.58	0.31	0.17	± 2.52 ± 0.04
0.36	-1.93	0.00	-0.33	0.73	-1.76	0.00	-0.59	0.34	0.16	± 2.58 ± 10.02
0.37	-1.96	0.00	-0.31	0.71	-1.80	0.00	-0.60	0.37	0.16	± 2.64 ± 10.04
0.38	-2.00	0.00	-0.28	0.70	-1.84	0.00	-0.62	0.40	0.16	± 2.70 ± 10.06
0.39	-2.03	0.00	-0.26	0.67	-1.87	0.00	-0.63	0.42	0.16	± 2.77 ± 10.08
0.40	-2.07	0.00	-0.24	0.66	-1.91	0.00	-0.64	0.45	0.16	± 2.83 ± 10.09

1. 在某种力参数的变化范围内,体系不存在相变,但 RPA 方程却出现复数解的情况. 仅举两套数据加以说明.

(1) 当力参数 $U=V=X=0, W=-0.5$, 使 T 在 $(0, 3)$ 范围内变化时, 严格基态、第一激发态均不存在相变, 但在 $0.36 \leq T < 2.0$ 的范围内, RPA 方程却出现复数解(见表 1).

在表 1 中列出了 E_0, E_1 和 $|\Psi_0\rangle, |\Psi_1\rangle$ 的三个分量(尽管它们都有 15 个分量), 其中除了它们与最大权重态的重迭积分 C_0^0, C_1^0 之外, 还列出了 $C_0^1, C_0^2, C_1^1, C_1^2$. 它们表征严格基态和严格第一激发态的单粒子-单空穴的激发成分.

相应的 HF 解的稳定性是这样的: 在 $0 < T < 0.36$ 的范围内, HF 解是稳定的, RPAE 是实的, 在 $0.36 \leq T < 2.0$ 的范围内, HF 解是不稳定的, RPAE 是复的, 在 $2.0 \leq T < 3.0$ 的范围内, HF 解也是不稳定的, 但 RPAE 却为实的.

(2) 当力参数 $U=0.22, V=-0.7, W=-1.0, T=2.0$, 使 X 在 $(-2, +2)$ 之间变化时, 严格态不存在相变, 但在 $-0.5 \leq X < -0.40$ 的范围内, RPA 方程却出现复数解. 与表 1 的符号相同, 我们将部分数据列于表 2 之中, 在这个 RPAE 为复数的参数范围内, HF 解是不稳定的, 但同样在 $X > -0.40$ 的范围内, HF 解也是不稳定的, 而 RPAE 却为实的.

表 2

X	E_0	C_0^0	C_0^1	C_0^2	E_1	C_1^0	C_1^1	C_1^2	$E_1 - E_0$	RPAE 解 \mathcal{E}_1
-0.42	-19.00	0.05	-0.20	-0.21	-18.05	0.01	0.17	-0.16	0.95	± 12.01 ± 15.22
-0.40	-18.81	0.05	-0.20	-0.21	-17.80	0.01	0.15	-0.15	1.00	± 10.59 ± 15.30
-0.39	-18.71	0.05	-0.20	-0.21	-17.69	0.01	0.14	-0.14	1.01	± 1.24 ± 15.34
-0.38	-18.62	0.04	-0.20	-0.21	-17.57	0.01	0.13	-0.13	1.05	± 1.85 ± 15.38
-0.37	-18.52	0.04	-0.20	-0.21	-17.45	0.01	0.12	-0.12	1.07	± 2.31 ± 15.42

2. 在某种力参数的变化范围内 RPA 方程不存在复数解, 即全部为实数解时, 体系并不一定没有相变. 仅举三套数据加以说明.

(1) 当力参数 $U=V=X=W=0$, 使 T 在 $(-2, +2)$ 范围内变化时, RPA 方程均为实数解, 但它的实数解却可以反映体系所存在的相变.

在该力参数的范围内, 严格基态在 $T=-0.53$ 和 $T=0.75$ 两处附近发生相变. 这套数据在文献[3]中, 我们是用以与 HF 近似解作比较的, 本文将用以与 RPA 解作比较. 由于在 $T=-0.53$ 处 RPA 解与 HF 近似解一样, 可以反映相变, 而在 $T=0.75$ 处 HF 解却不能反映相变, 因此, 我们在图 1 中仅画出了在 $T=0.75$ 附近的有关曲线. 曲线 c 给出了严格基态的 C_0^0 随 T 的变化曲线, 明显地存有一级相变. 事实上计算还表明, 严格的第一激发态的 C_1^0 随 T 的变化在 $T=0.75$ 附近, 也存有一级相变. 曲线 b 给出了严格的激发能量 $(E_1 - E_0)$ 随 T 变化的示意曲线. 曲线 a 给出了 RPA 方程的能量解 \mathcal{E}_1 随 T 变化的示意曲线. 由图 1 可以明显看出 RPA 方程的解尽管均是实数解, 但它却可以相当好地反映体

系的真实相变.同时,这再一次说明,文献[3]中提及的 HF 解不能反映相变的原因之一是某些高级图的不可忽略.此处,当 $T \leq 0.75$ 时,尽管 RPAE 仍为实的,但其相应的 HF 解却已不稳定了.这时的 HF 近似已是不好的近似了,但由于 HF 波函数的完备关系没有被破坏,因此作为一个表象的基底总是可以的.

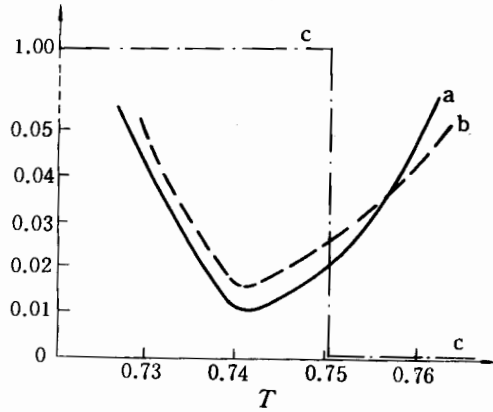


图 1

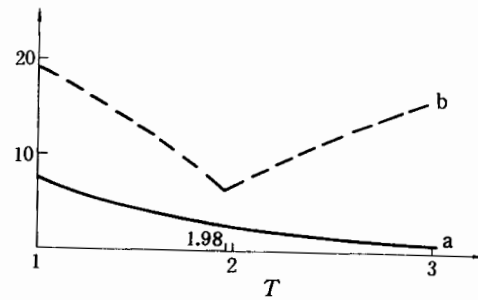


图 2

(2) 当力参数 $U = -0.55$ $V = -1.80$ $X = -0.40$ $w = -0.45$ 使 T 在 $(0, 3)$ 范围内变化时,体系并不存有任何相变. RPA 方程全部为实数解,相应的 HF 解均为稳定的,但 RPAE \mathcal{E}_1 却在 $T = 1.98$ 处有一突变.

图 2 中曲线 a 表示严格激发能量 $(E_1 - E_0)$ 随 T 的变化,它是平滑的.实际上 $|\Psi_0\rangle$ 及 $|\Psi_1\rangle$ 随 T 的变化均是平滑的,即体系不存有任何相变.

图 2 中曲线 b 表示 RPAE 的 \mathcal{E}_1 随 T 的变化,由图可以明显地看出, \mathcal{E}_1 在 $T = 1.98$ 附近有导数的突变.产生这一不反映真实情况的突变的原因是因为 HF 单粒子能量在 $T = 1.98$ 附近有一突变.

(3) 当力参数 $U = V = X = T = 0$, 使 W 在 $(-1, 0)$ 范围内变化时,计算表明,严格基态和第一激发态在 $W = -0.335$ 附近均发生突变(见表 3),即体系存有相变.但 RPAE 却总为实的,相应的 HF 解在 $-0.35 < W < -0.325$ 之外均稳定.

表 3

W	-0.39	-0.38	-0.37	-0.36	-0.35	-0.34	-0.33	-0.32	-0.31	-0.30
C_0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00
C_1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00

以上结果表明, HF 解不稳定时,相应的 RPAE 可以有实数解,反之, RPAE 有实数解时,相应的 HF 解可以不稳定.我们希望强调的是,我们的计算结果表明,在 RPA 方程的复数解和体系的真实相变之间并不存在必然的内在的联系,亦即, RPA 方程出现复数解时,并不必然地预示着体系发生了相变, RPA 方程均为实数解时,也并不必然地表明,体系不存在相变.一般来说, RPA 方程的复数解的出现,往往是近似变坏的结果.

参 考 文 献

[1] Thouless, *Nucl. Phys.*, **21**(1960), 225, **22**(1961), 78.

- [2] Jiang et al. ,*Phys. Rev. Lett.* ,**61**(1988),38.
[3] Wu Shishu et al. ,*Chinese Phys. Lett.* ,**8**(1991),454.
[4] Hecht,*Nucl. Phys.* ,**62**(1965),1.
[5] Yao Yujie et al. ,*High Energy and Nuclear Physics* , **14**(1990),83.
[6] 吴式枢,中国科学,**16**(1973),255,**5**(1974),471;Wu Shishu,*Scientia Sinica* ,**16**(1973),347.

Imaginary Eigenvalue Solution in RPA and Phase Transition

YAO YUJIE JING XIAOGONG ZHAO GUOQUAN WU SHISHU

(Centre for Theoretical Physics and Physics Department, Jilin University, Changchun 130023)

ABSTRACT

The phase transition (PT) of a many-particle system with a close-shell configuration, the stability of the Hartree-Fock(HF) solution and the random phase approximation (RPA) are studied by means of a generalized three-level solvable model. The question whether the occurrence of an imaginary eigenvalue solution in RPA (OISA) may be considered as a signature of PT is explored in some detail, It is found that there is no close relation between OISA and PT. Generally, OISA shows that RPA becomes poor.