

# 反对称的分子动力学中 **multi-slater** 行列式 的变分及其应用于有多种团簇结构的 $^{10}\text{Be}$

文献阅读汇报: Myo, T., Lyu, M., Zhao, Q.,  
Isaka, M., Wan, N., Takemoto, H., & Horio-  
uchi, H. (2023). Physical Review C, 108(6),  
064314.

汇报人: 刘博然

April 15, 2024



## 1. 简介

- 1.1. 研究背景
- 1.2. 研究目标

## 2. 理论框架

- 2.1. 哈密顿量
- 2.2. AMD 反对称分子动力学
- 2.3. 多 slater 行列式的变分

## 3. 结果

- 3.1. spin-fix
- 3.2. spin-free
- 3.3. energy spectrum

## 4. 结论

### 研究背景及场景

- 核聚集现象的重要性：原子核的 **cluster** 结构是原子核以及平均场态的重要性质，其中一些核子形成了团簇结构例如  $\alpha$  粒子。
- 反对称分动力学 (**AMD**) 模型：为了描述核多体波函数，提出了 **AMD** 模型，该模型使用斯莱特行列式形式表示核子波函数。在 **AMD** 中，核子波函数呈现为具有特定重心位置的高斯波包，质心参数的分布控制着团簇的出现和原子核的平均场状态，这些参数是根据总能量的变分原理来确定的。
- 生成坐标方法 (**GCM**)：**AMD** 波函数可以通过 **GCM** 扩展到 **multi-configuration** 形式，其中不同的高斯参数集用于不同的斯莱特行列式。这种方法允许在总系统能量最小化过程中确定斯莱特行列式的权重。
- 最近，有两种核的变分方法，利用 **AMD** 波函数来处理由现实核核子相互作用引起的短程和张量关联。一种是“张量优化反对称分子动力学” (**TOAMD**) [11–14]。另一种是“高动量反对称分子动力学” (**HM-AMD**) [15–18]，但计算代价很高。

### 研究目标

这篇文章的研究目标是用一种新的方法来优化反称化分子动力学 (AMD) 中的多斯莱特行列式，并将其应用于  $^{10}\text{Be}$  原子核，以揭示其基态和激发态的组态特性以及壳层结构类型。具体而言，研究旨在：

1. 提出一种新的方法来优化反对称分子动力学 (AMD) 中的 multi-slater 行列式，这些行列式以线性组合的形式存在。
2. 自动寻找最优的生成坐标，反映原子核的聚集结构和相对运动。
3. 通过引入正交条件，探索激发态的组态。
4. 复现并预测  $^{10}\text{Be}$  的能量谱，并与实验数据进行比较验证。
5. 展示该方法在核物理研究中的潜在应用和计算效率。

## 1. 简介

- 1.1. 研究背景
- 1.2. 研究目标

## 2. 理论框架

- 2.1. 哈密顿量
- 2.2. AMD 反对称分子动力学
- 2.3. 多 slater 行列式的变分

## 3. 结果

- 3.1. spin-fix
- 3.2. spin-free
- 3.3. energy spectrum

## 4. 结论

# 哈密顿量

相互作用  $v_{ij}$



使用质量数为  $A$  的两体核子相互作用的哈密顿：

$$H = \sum_i^A t_i - T_{c.m.} + \sum_{i < j}^A v_{ij} \quad (1)$$

其中  $t_i$  是每个核子的动能， $T_{c.m.}$  是质心动能。

$$v_{ij} = v_{ij}^{\text{central}} + v_{ij}^{LS} + v_{ij}^{\text{Coulomb}} \quad (2)$$

$v_{ij}$  是核子对  $i$  和  $j$  之间的相互作用势能，包括中心相互作用势能、LS 相互作用势能和库仑相互作用势能（对于质子）。

---

注释：这个哈密顿量为后续的 AMD 波函数和 multicoil 方法的介绍和应用提供了基础。

# 哈密顿量

相互作用中的分量  $v_{ij}^{\text{central}}$



两个核子 i 和 j 之间中心相互作用  $v_{ij}^{\text{central}}$ , 使用的是 Volkov No. 2 相互作用:

$$v_{ij}^{\text{central}} = \sum_{k=1}^2 v_k \exp \left[ -\left( \frac{r_{ij}}{a_k} \right)^2 \right] (W + BP_\sigma - HP_\tau - MP_\sigma P_\tau) \quad (3)$$

其中, 相互作用的强度参数  $v_1 = -60.65 \text{ MeV}$ ,  $v_2 = 61.14 \text{ MeV}$ ,  $a_1 = 1.80 \text{ fm}$ , 和  $a_2 = 1.01 \text{ fm}$ 。式子中 Majorana 参数  $M=0.6$ , ( $W = 0.4$ ), Bartlett 参数  $B = 0.125$ , 海森堡交换参数  $H = 0.125$ 。

---

注释: T. Suhara and Y. Kanada-En'yo, Prog. Theor. Phys. 123, 303 (2010).

Volkov No. 2 相互作用:<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0029558265902440>

# 哈密顿量

相互作用中的分量  $v_{ij}^{ls}$  和  $v_{ij}^{Coulomb}$



对于自旋轨道部分，使用的是 G3RS 相互作用的自旋轨道项，这是一个带有投影到三重奇态上的投影算子  $P_{31}$  的 two-range 高斯分布

$$v_{ij}^{ls} = \sum_{k=1}^2 u_k \exp \left[ -\left( \frac{r_{ij}}{b_k} \right)^2 \right] P_{31} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (4)$$

$$P_{31} = \frac{1 + P_\sigma}{2} \frac{1 + P_\tau}{2} \quad (5)$$

其中  $b_1 = 0.600\text{fm}$  和  $b_2 = 0.477\text{fm}$ ，以及自旋轨道力的强度  $u_1 = -2000\text{MeV}$  和  $u_2 = 2000\text{MeV}$ 。

库仑力  $v_{ij}^{Coulomb}$  的库仑值近似为七个高斯函数的和。

# AMD 反对称分子动力学

## AMD 波函数



用于核多体系统的 AMD 框架：AMD 波函数 ( $\Phi_{\text{AMD}}$ ) 是 A 个核子的一个斯莱特行列式，表示为：

$$\Phi_{\text{AMD}} = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \left\{ \prod_{i=1}^A \phi_i(\mathbf{r}_i) \right\}, \quad (6)$$

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \left( \frac{2\nu}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\nu(\mathbf{r}-\mathbf{Z}_i)^2} \chi_{\sigma,i} \chi_{\tau,i}, \quad (7)$$

$$\chi_{\sigma,i} = \alpha_i |\uparrow\rangle + \beta_i |\downarrow\rangle. \quad (8)$$

单核子波函数  $\phi_i(\mathbf{r})$  具有一个高斯波包，这个高斯波包有一个范围参数  $\nu$  以及单个质心的位置  $Z_i$ ， $i$  的范围是 1 到 A。自旋部分  $\chi_\sigma$  是 z 方向的上 ( $\uparrow$ ) 和下 ( $\downarrow$ ) 分量的混合状态，同位旋部分  $\chi_\tau$  是一个质子或者中子的。每个核子的变分参数分别为  $Z_i, \alpha_i, \beta_i$  均为复数。

---

注释：设置  $\nu = 0.235 \text{ fm}^{-2}$ ，并且加入条件  $\sum_{i=1}^A Z_i = \mathbf{0}$ 。

在这个方程中，变分参数是通过虚时间演化定的，虚时间演化如下：

$$X_i = \{Z_i, \alpha_i, \beta_i\} \quad (9)$$

$$\Phi_{\text{AMD}}^{\pm} = P^{\pm} \Phi_{\text{AMD}}, \quad (10)$$

$$E_{\text{AMD}}^{\pm} = \frac{\langle \Phi_{\text{AMD}}^{\pm} | H | \Phi_{\text{AMD}}^{\pm} \rangle}{\langle \Phi_{\text{AMD}}^{\pm} | \Phi_{\text{AMD}}^{\pm} \rangle}, \quad (11)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = -\mu \frac{\partial E_{\text{AMD}}^{\pm}}{\partial X_i^*}, \quad \text{and c.c.} \quad (12)$$

这里的  $X_i$  代表单个核子的参数集合， $P^{\pm}$  是一个宇称投影算符， $\mu$  是一个任意正数。这个方程满足能量最小化的条件，即  $dE_{\text{AMD}}^{\pm}/dt \leq 0$ 。在这项研究中，通过宇称投影波函数解冷却方程，直到能量  $E_{\text{AMD}}^{\pm}$  收敛。

最后，利用角动量投影算符  $P_{MK}^J$ ，我们得到了角动量  $\mathbf{J}$  的本征态，其量子数为  $M$  和  $K$ ，以及宇称 ( $\pm$ )，还有总能量  $E_{\text{AMD}}^{J^\pm}$ ：

$$\Psi_{MK,\text{AMD}}^{J^\pm} = P_{MK}^J P^\pm \Phi_{\text{AMD}} \quad (13)$$

$$E_{\text{AMD}}^{J^\pm} = \frac{\langle \Psi_{MK,\text{AMD}}^{J^\pm} | H | \Psi_{MK,\text{AMD}}^{J^\pm} \rangle}{\langle \Psi_{MK,\text{AMD}}^{J^\pm} | \Psi_{MK,\text{AMD}}^{J^\pm} \rangle} \quad (14)$$

之后投影后的 AMD basis 态简记为  $\Psi_n$ 。

AMD 波函数通常通过应用 GCM 扩展到多组态（多重 Slater 行列式）。

$$\Psi_{\text{GCM}} = \sum_{n=1}^N C_n \Psi_n, \quad (15)$$

$$H_{mn} = \langle \Psi_m | H | \Psi_n \rangle, \quad N_{mn} = \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle, \quad (16)$$

$$E_{\text{GCM}} = \frac{\langle \Psi_{\text{GCM}} | H | \Psi_{\text{GCM}} \rangle}{\langle \Psi_{\text{GCM}} | \Psi_{\text{GCM}} \rangle}, \quad (17)$$

(16) 式子中的  $m$  和  $n$  代表在参数集为  $\{X_i\}$  的冷却方程投影的 AMD basis 态的量子数。这些基之间是非正交的。哈密顿量和 (norm matrix) 范数矩阵元分别给出为  $H_{mn}$  和  $N_{mn}$ 。根据总能量的变分原理,  $\delta E_{\text{GCM}} = 0$ , 解以下特征值问题, 得到总能量  $E_{\text{GCM}}$  以及每个  $J^\pm$  的系数  $\{C_n\}$ :

$$\sum_{n=1}^N (H_{mn} - E_{\text{GCM}} N_{mn}) C_n = 0 \quad (18)$$

# 多 slater 行列式的变分

cooling 方程的拓展



总能量  $E_{GCM}$  和取  $E_{GCM}$  最小值的 cooling 方程可以表达为：

$$\Phi = \sum_{n=1}^N C_n \Phi_n, \quad E_{GCM} = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (19)$$

$$\frac{dX_{n,i}}{dt} = -\mu \frac{\partial E_{GCM}}{\partial X_{n,i}^*}, \quad \text{and c.c.} \quad (20)$$

通过数值求解这些方程，可以得到总能量  $E_{GCM}$ ，并同时优化多个 AMD basis 态中的所有参数。最后，在 basis 态  $\{\Phi_n\}$  的角动量投影之后，解决方程 (18) 中的特征值问题。方程 (19)(20) 中的方程表示对 multi-basis states 进行冷却，我们简称这种新方法为“multicool”。

---

注释：在构建 basis 态时，每个波函数和方程都带有宇称投影，简化后省略了宇称土的符号。每个 AMD 结构都具有变分参数  $X_{n,i} = \{Z_{n,i}, \alpha_{n,i}, \beta_{n,i}, C_n\}$  其中包括系数  $C_n$ 。

# 多 slater 行列式的变分

正交投影方法 (为了得到激发态 slater 行列式)



我们首先固定在 `multicool` 中获得的组态  $\{\Phi_n\}$ , 将其视为  $\{\Phi_{c_0}\}$ , 其中  $c_0 = 1, \dots, N$ 。将  $\{\Phi_{c_0}\}$  乘以一个实正参数  $\lambda$  定义**赝势 (pseudo potential)**  $V_\lambda$ , 并将此势加到哈密顿量中:

$$H_\lambda = H + V_\lambda, \quad V_\lambda = \lambda \sum_{c_0=1}^N |\Phi_{c_0}\rangle \langle \Phi_{c_0}| \quad (21)$$

$$\Phi_\lambda = \sum_{n=1}^N C_{\lambda,n} \Phi_{\lambda,n}, \quad E_{GCM,\lambda} = \frac{\langle \Phi_\lambda | H_\lambda | \Phi_\lambda \rangle}{\langle \Phi_\lambda | \Phi_\lambda \rangle} \quad (22)$$

利用带有宇称投影的  $\{\Phi_{c_0}\}$  和特定值的  $\lambda$ , 我们对总能量  $E_{GCM,\lambda}$  进行变分。解方程 (19)(20) 中的 `multicool` 方程以获得  $H_\lambda$ , 并确定基态  $\{\Phi_{\lambda,n}\}$  和总波函数  $\Phi_\lambda$ 。然后从一个小的值开始增加  $\lambda$ , 当  $\lambda$  足够大时,  $\Phi_\lambda$  可以与  $\{\Phi_{c_0}\}$  正交。在每个  $\lambda$  处, 我们估计总能量  $E_{GCM,\lambda}$ , 并减去赝势的贡献, 尽管其贡献很小。

# 多 slater 行列式的变分

产生多重态的激发态组态



在 `multicool` 中，角动量投影的内禀 (intrinsic) 态没有进行变分。由于这个近似，当组态  $\Phi_{c_0}$  在空间上变形到一定方向上时，组态  $\Phi_{\lambda,n}$  可以沿着另一个方向变形。这些组态在固有坐标系中可以彼此正交，但在角动量投影后它们可能具有有限的 overlap。

为了避免这种情况，我们对组合  $\Phi_{c_0}$  进行旋转，并将它们添加到赝势的投影项中。在这项研究中，我们采用两种旋转方式： $(x, y, z) \rightarrow (z, x, y)$  和  $(x, y, z) \rightarrow (y, z, x)$ ，其中包括了宇称投影，赝势中的 basis 数量变为  $3N$ 。我们将包括旋转在内的组合描述为  $\{\Phi_c\}$ ，其中  $c = 1, \dots, 3N$ 。

$$V_\lambda = \lambda \sum_{c=1}^{3N} |\Phi_c\rangle \langle \Phi_c| \quad (23)$$

我们使用这个势能在 `multicool` 中来产生多重的激发态组态。目前的正交条件是在角动量投影后 Schmidt 正交化的简化情况。

总结了一个质量数为 A 的原子核的 multicool 的计算过程。

- 用数字 N 随机生成初始 AMD basis 的参数。这个 basis 的参数是方程 (19)(20) 中的  $\{X_{n,i}\}$ , 其中  $n = 1, \dots, N$  以及粒子  $i = 1, \dots, A$ 。在固有坐标中进行宇称投影后, 通过解决哈密顿矩阵的特征值问题确定初始系数  $\{C_n\}$ 。
- 利用公式 (19)(20) 中的多个 AMD basis 态解决 multicool 方程, 最小化总能量并确定所有的变分参数  $\{X_{n,i}\}$ 。组态  $\{\Phi_n\}$  在核的基态中占主导地位。我们将  $\{\Phi_n\}$  视作在赝势中使用的  $\{\Phi_c\}$ ,  $\{\Phi_c\}$  中包括  $\{\Phi_n\}$  的旋转, 其中  $c = 1, \dots, 3N$ 。
- 在上页式子 (23) 的赝势中放入一个确定的  $\lambda$ , 解 multicool 方程得到激发态的组态。对应不同的  $\lambda$ , 得到组态集合  $\{\Phi_{\lambda,n}\}$ 。
- 最后, 我们在 GCM 中对各种  $\lambda$  下的  $\{\Phi_n\}$  和  $\{\Phi_{\lambda,n}\}$  进行叠加, 并解决公式 (24) 中带有角动量投影的哈密顿矩阵的特征值问题。得到核的基态和激发态。实质上将  $\lambda$  视为一种约束参数, 用于生成 GCM basis。

$$\sum_{n=1}^N (H_{mn} - E_{\text{GCM}} N_{mn}) C_n = 0 \quad (24)$$

## 1. 简介

- 1.1. 研究背景
- 1.2. 研究目标

## 2. 理论框架

- 2.1. 哈密顿量
- 2.2. AMD 反对称分子动力学
- 2.3. 多 slater 行列式的变分

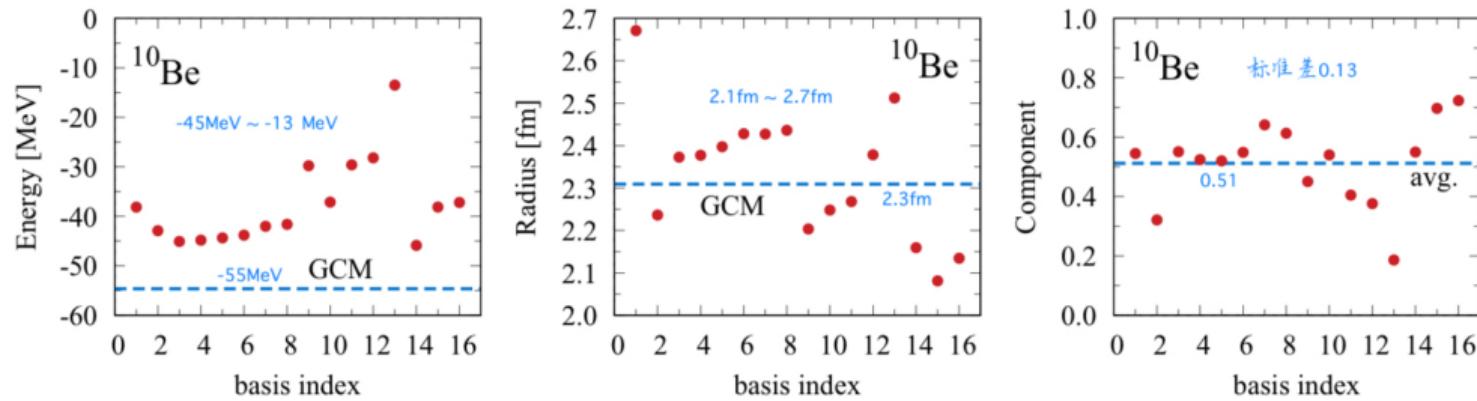
## 3. 结果

- 3.1. spin-fix
- 3.2. spin-free
- 3.3. energy spectrum

## 4. 结论

# spin-fix 和 spin-free

- spin-fix: 在变分过程中保持核子固有自旋方向不变，称为“自旋固定”，在自旋固定的情况下， $^{10}\text{Be}$  中五个核子自旋为向上 ( $\alpha_i = 1, \beta_i = 0$ ) 和五个核子向下 ( $\alpha_i = 0, \beta_i = 1$ ) 的方向。
- spin-free: 另一种是在变分过程中优化每个核子的自旋方向，称为“自旋自由”

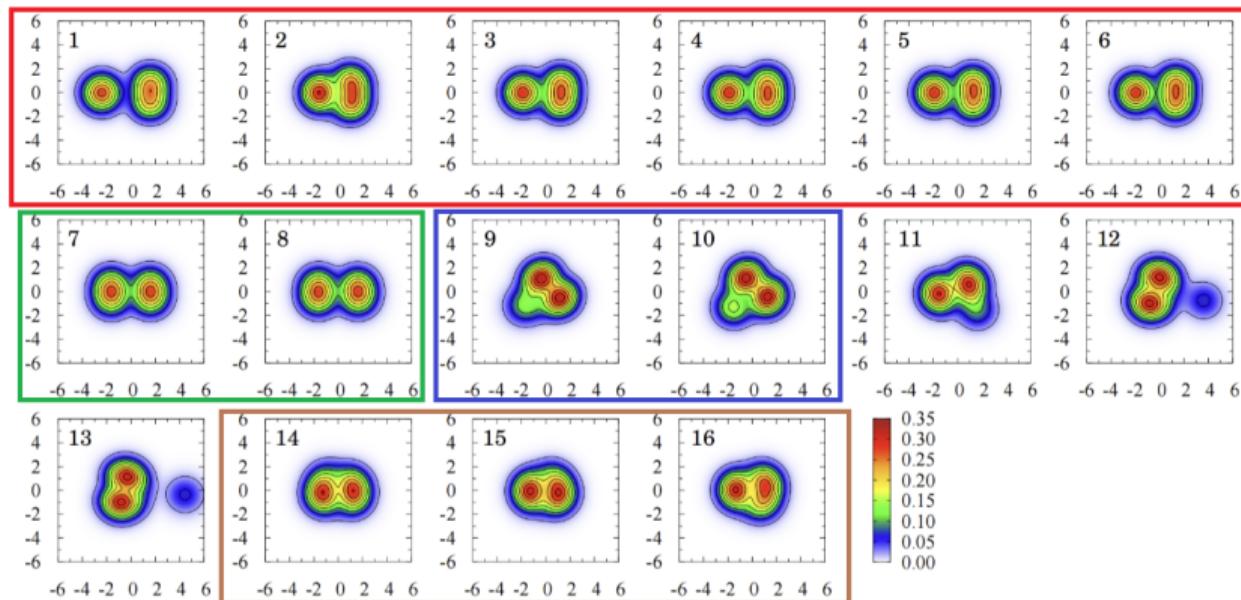


**Figure:** 图 1. 显示了在自旋固定情况下，对于  $^{10}\text{Be}$  的本征正宇称态的组态。水平轴是 basis 指数  $n$ 。每个构组态的总能量以 (MeV) 为单位 (左侧)，matter 半径以 (fm) 为单位 (中间)，以及分量 ( $|\langle \Phi_n | \Phi \rangle|^2$ ) (右侧) 均用红色点表示。蓝色虚线代表带有 GCM 的总波函数的能量和半径，以及分量的平均值 (对于分量部分，所有组态都对总波函数有贡献，表明了强烈的构型混合)。

注释：计算结果随机给出了 16 个组态的顺序，文中按照具有类似结构（如密度和团簇）的组态的顺序进行了重新排列。

# 结果

## spin-fix



**Figure:** 在自旋固定的情况下， $^{10}\text{Be}$  组态的 intrinsic 密度分布。密度单位和轴单位分别为  $\text{fm}^{-3}$  和  $\text{fm}$ 。每个面板中的数字表示图 1 中使用的基指数。根据空间结构对它们进行分类。

# 结果

spin-fix

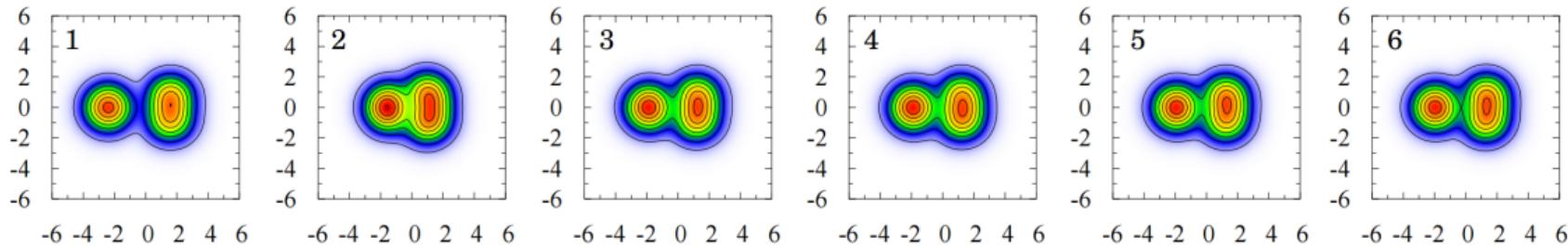


Figure:  ${}^6\text{He} + \alpha$  组态

其中第 1 个 basis state 给出了最大的半径 2.67fm，第 2 个 basis state 给出了它们中间最小的半径 2.24fm。这种差异来自于  ${}^6\text{He}$  和  $\alpha$  之间的距离，这表明了广义坐标方法 (GCM) 中相对运动的效应。如果相对距离变小，接近于第 16 个 basis state 所显示的壳层状状态，其半径较小，为 2.13fm。

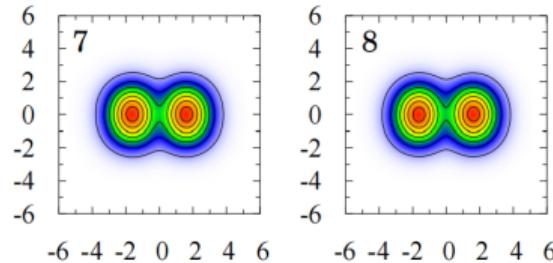


Figure:  ${}^5\text{He} + {}^5\text{He}$  组态

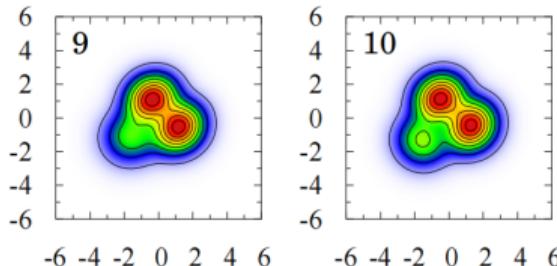


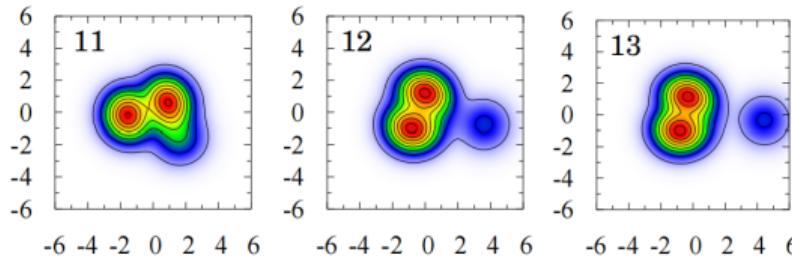
Figure:  ${}^8\text{He} + 2\text{n}$

${}^5\text{He} + {}^5\text{He}$ : 如果两个  ${}^5\text{He}$  核之间的相对距离变小，该状态接近第 14basis 态的对称类壳态，小半径为 2.16 fm。

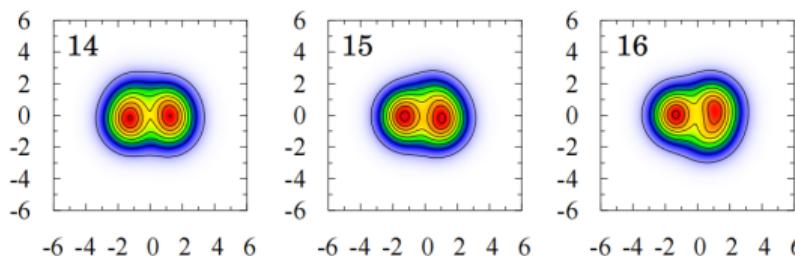
${}^8\text{He} + 2\text{n}$ : the dineutron is spatially enhanced in the 10th basis state(双中子在空间上得到了增强)

# 结果

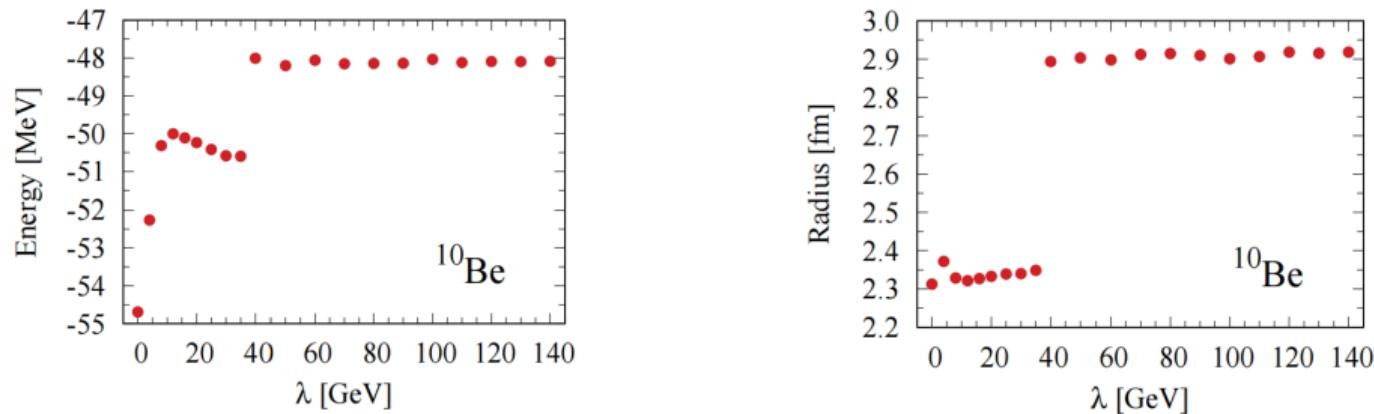
spin-fix



${}^9\text{Be} + \text{n}$ : 相对距离不同。



${}^{10}\text{Be}$ : 小半径的类壳结构

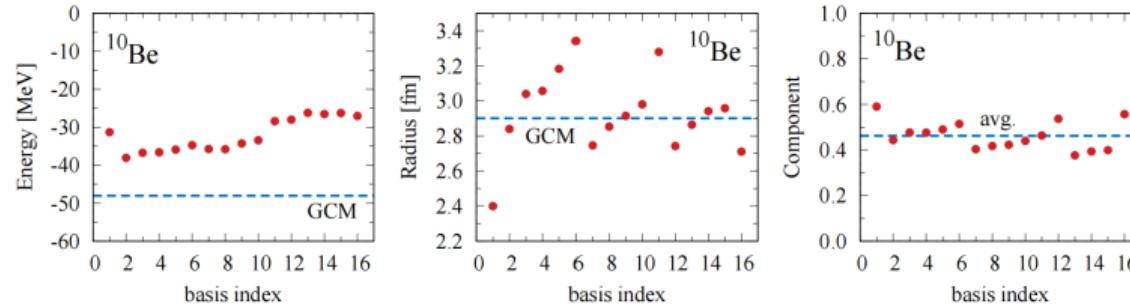


**Figure:** 图 3. 在自旋固定的情况下，总波函数的本征能量和半径为正宇称。赝势的强度  $\lambda$  发生了变化，总能量中去除了赝势的贡献。

$\lambda$  从 0 开始增加，当  $\lambda = 10\text{GeV}$  时，总能量大约增加 5 MeV，之后略微下降，并在  $\lambda = 40\text{GeV}$  时迅速上升，达到 -48 MeV 的稳定能量，具有大约 7 MeV 的激发能量。对于半径，也确认了相同的趋势，激发态显示出从基态的 2.3 fm 扩展到 2.9 fm 的稳定半径。这些结果表明，在  $\lambda = 40\text{GeV}$  之后， $^{10}\text{Be}$  发生了组态转变。

# 结果

spin-fix(激发态)

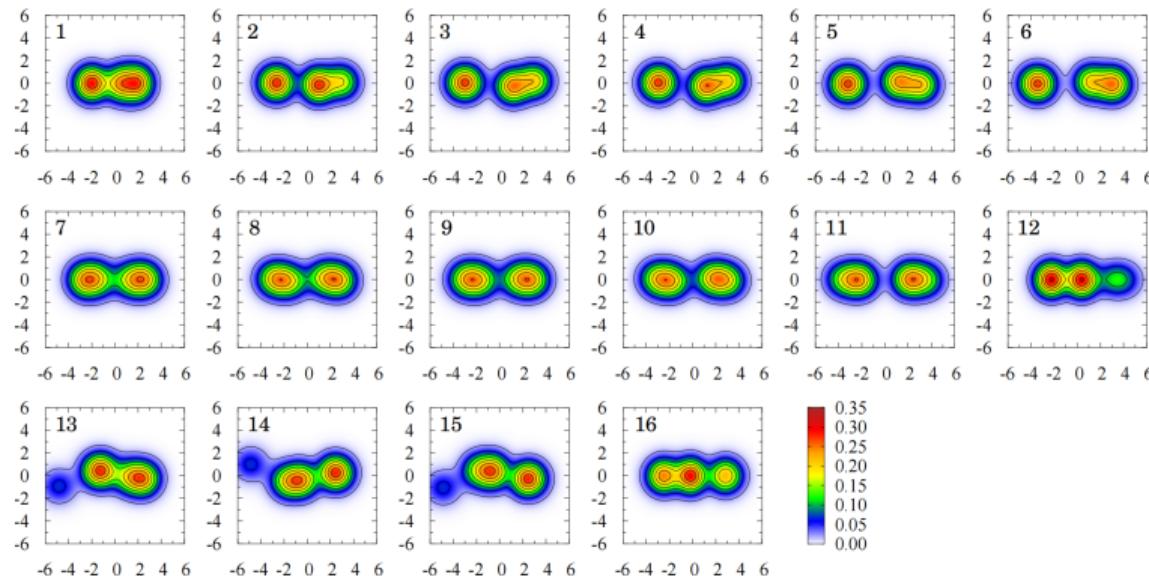


**Figure:** 图 4. 正宇称态下， $^{10}\text{Be}$  的组态在自旋固定情况下。在赝势中使用了强度  $\lambda = 100 \text{ GeV}$ 。水平轴代表 basis 态 index  $n$ 。总能量以 MeV 为单位（左）、物质半径以 fm 为单位（中）以及分量  $|\langle \Phi_{\lambda,n} | \Phi_\lambda \rangle|^2$ （右）用红色点表示每个配置。蓝色虚线代表使用 GCM 的总波函数的能量和半径以及分量的平均值。

对于  $^{10}\text{Be}$  的激发态，我们在图 4 中展示了总能量、半径和组态的组成部分。能量分布在-38 MeV 到-26 MeV 之间，半径也广泛分布在 2.4 fm 到 3.4 fm 之间。对于组成部分，所有组态对总波函数的贡献具有相似的值，约为 0.4-0.6，表明了强烈的组态混合，其平均值为 0.46，标准偏差为 0.06。这些趋势与图 1 中的情况相同，并且组态的一致性在激发态比基态更强。

# 结果

spin-fix(激发态)



**Figure:** 图 5. 使用强度为  $\lambda = 100\text{GeV}$  的赝势，在自旋固定情况下，每个  $^{10}\text{Be}$  组态的固有密度分布。密度和坐标轴的单位分别是  $\text{fm}^{-3}$  和  $\text{fm}$ 。

展示了  $^{10}\text{Be}$  激发态组态的密度分布，这些分布与图 2 中基态组态的分布显著不同。发现所有组态都具有各种聚簇的延长结构，类似于直线链。

# 结果

spin-fix(激发态)

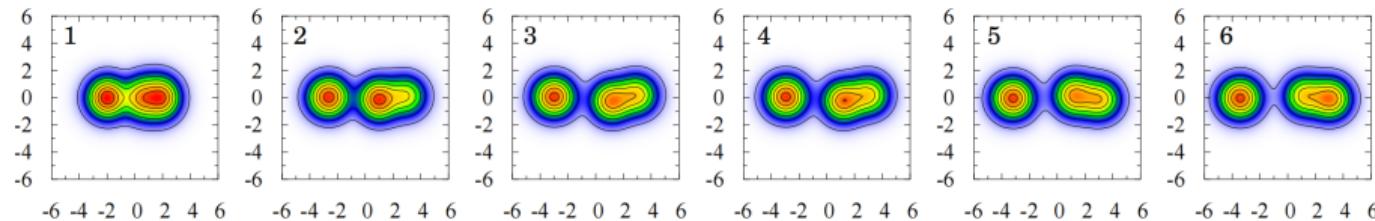


Figure:  ${}^6\text{He} + \alpha$  组态

在第 1 个 basis 态中， ${}^6\text{He}$  和  $\alpha$  之间的小相对距离得到了确认，在所有 basis 态中半径最小，为 2.4fm。两个价中子位于两个  $\alpha$  之间，靠近  $\alpha$  的右侧，形成  ${}^6\text{He}$ 。在第 2 和第 3 个 basis 态中， ${}^6\text{He}$  和  $\alpha$  在空间上分离， ${}^6\text{He}$  中的两个价中子位于密度的右端。在第 6 个 basis 态中， ${}^6\text{He}$  和  $\alpha$  最分离，半径显示所有 basis 态中最大的值，为 3.35 fm。这个 basis 态对应于从第 1 个 basis 态扩展的相对运动

# 结果

spin-fix(激发态)

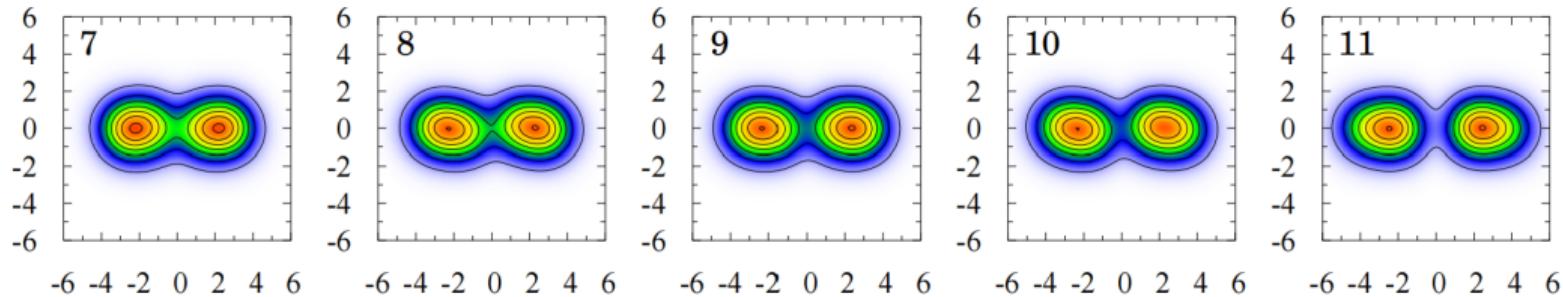


Figure:  ${}^5\text{He} + {}^5\text{He}$  组态

上图的 basis 态现实的组态具有各种相对距离，代表了 GCM 效应。其中，第 7 个 basis 态给出了所有 basis 态中最小的半径，为 2.75 fm，第 11 个 basis 态给出了最大的半径，为 3.3 fm。值得注意的是，两个  ${}^5\text{He}$  核的变形方向通常沿着水平轴，与图 2 中基态的组态的变形方向不同。两个价中子的位置也取决于 basis 态；见下页。

# 结果

spin-fix(激发态)

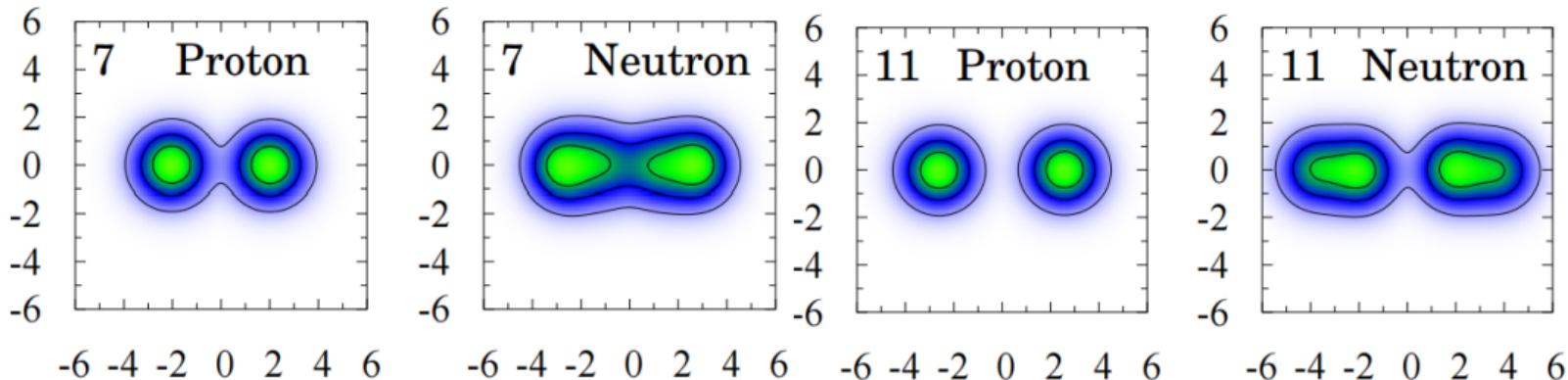


Figure: 图 6. 在给定相同条件下, 图 5 中  $^{10}\text{Be}$  的第 7 个 (上部) 和第 11 个 (下部) 组态中的质子和中子的密度分布。

在 7 中主要位于两个  $\alpha$  之间, 在 11 中沿着水平轴的密度左端和右端。即在图 6 中, 展示了两个 basis 态的质子和中子密度分布, 可以看出中子分布的差异。在质子部分, 确认了质子对之间的不同距离。

# 结果

spin-fix(激发态)

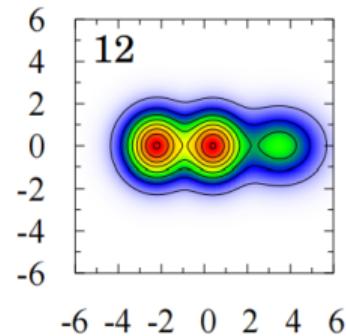


Figure:  ${}^8\text{Be} + 2\text{n}$

在第 12 个 basis 态中，两个中子与两个接触的作为  ${}^8\text{Be}$  的  $\alpha$  粒子分离，表明了  ${}^8\text{Be} + 2\text{n}$  结构

# 结果

spin-fix(激发态)

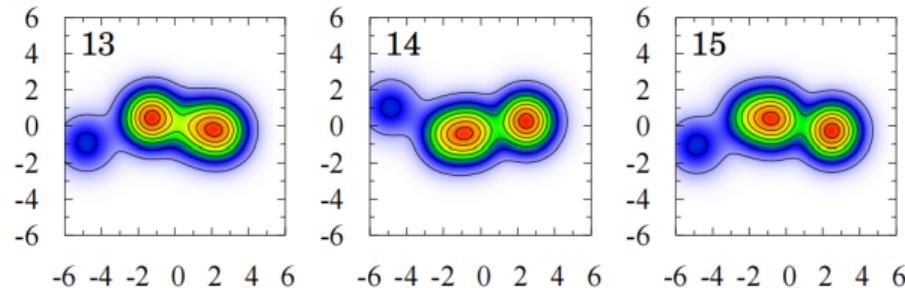


Figure:  ${}^9\text{Be} + \text{n}$

${}^9\text{Be} + \text{n}$  组态也确认在第 13、14 和 15 个 basis 态中，最后一个中子位于密度左端，略有弯曲。在分布中， ${}^9\text{Be}$  显示了  ${}^5\text{He} + \alpha$  结构，价中子位于两个  $\alpha$  之间（第 13 个）和  ${}^9\text{Be}$  左端（第 14、15 个）。

# 结果

spin-fix(激发态)

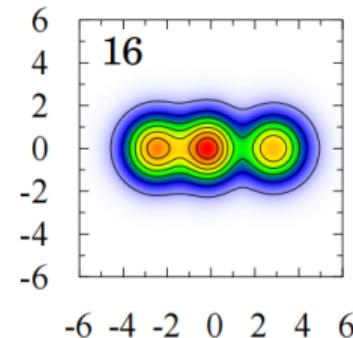


Figure:  ${}^7\text{Li} + {}^3\text{H}$

第 16 个 basis 态显示了  ${}^7\text{Li} + {}^3\text{H}$  (氚) 组态，其中  ${}^7\text{Li}$  中式  $\alpha$  和  ${}^3\text{H}$  相互的接触结构。这意味着在  ${}^{10}\text{Be}$  中形成了一个  $\alpha$  团簇和两个氚。在激发态组态中，我们没有确认空间紧凑的壳层状状态。

	Energy [MeV]	Radius [fm]
Single	-49.5	2.18
Multicool	-56.0	2.23
Multicool, $\lambda = 3 \times 10^5$ MeV	-45.5	2.75

Figure: 表 III.  $^{10}\text{Be}$  在无自旋情况下，本征基态的总能量和物质半径为正宇称。三种计算分别代表单一 basis 状态、multicool，以及使用强度为  $\lambda$  的伪势进行的 multicool。

与固定自旋情况相同。在表 III 中，我们得到了 multicool 计算得到的 basis 态能量，并与单个 AMD basis state 的结果进行了比较。单个 basis state 给出的总能量为 -49.5 MeV，而 multicool 给出的能量为 -56.0 MeV，能量增益为 5.5 MeV。在 multicool 中，半径为 2.23 fm，这比固定自旋情况下的 2.31 fm 要小，如表 I 所示。这是因为通过核子之间的相互作用改变自旋方向，两个核子可以更接近彼此。与固定自旋情况相比，这种效应使得  $^{10}\text{Be}$  的总能量增加了 1.3 MeV。

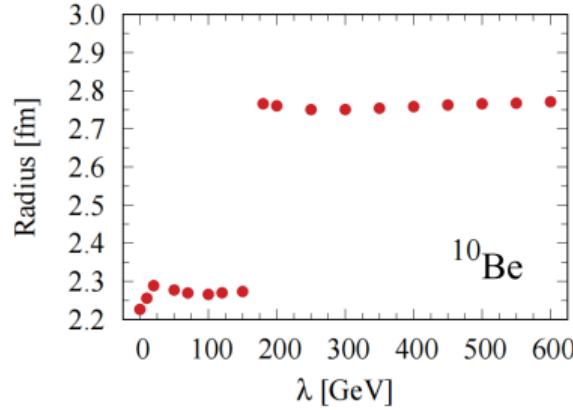
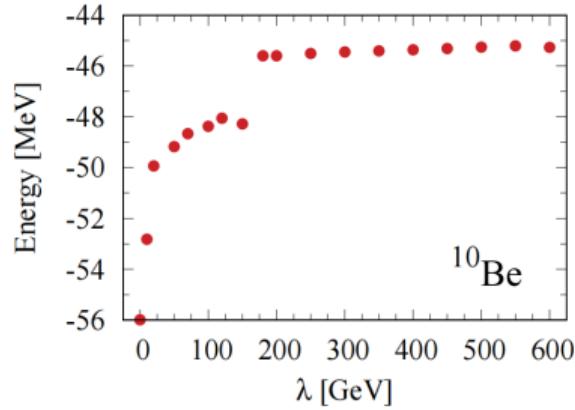


Figure: 图 7. 在无自旋情况下具有正宇称,  $^{10}\text{Be}$  的总波函数的固有能量和半径。赝势的强度  $\lambda$  发生变化。

在图 7 中展示了改变  $\lambda$  强度时  $^{10}\text{Be}$  总能量和半径的结果。总体趋势与固定自旋情况相似 (如图 3)。当我们使用大于  $1.8 \times 10^5 \text{ MeV}$  的  $\lambda$  值时, 系统转变为具有更高能量和更大半径的稳定解。如下页中表 III 所示, 激发能量大约为 11 MeV, 从 -56 MeV 增加到 -45 MeV, 半径变得与固定自旋情况下的 2.9 fm 相比略小, 为 2.75 fm。

# 结果

## Energy spectrum



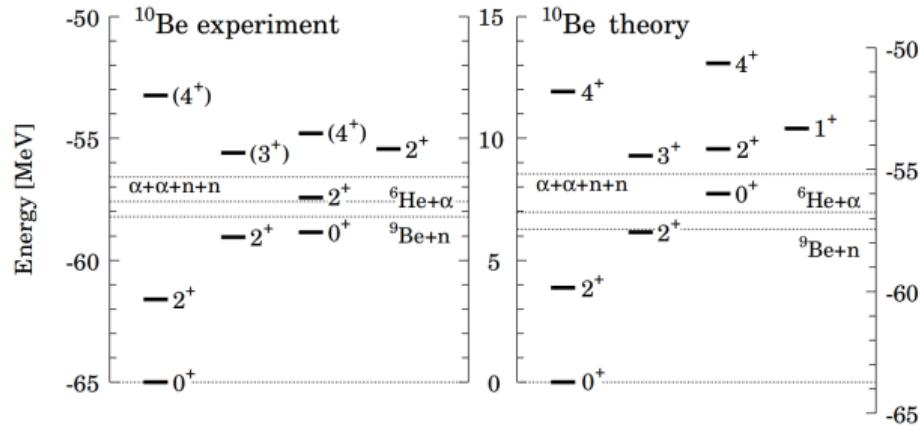
	Energy	$r_m$	$r_p$	$r_n$	$r_{ch}$
${}^6\text{He}(0^+)$	-29.2 [-29.3]	2.38	1.88	2.59	2.04 [2.068(11)]
${}^9\text{Be}(3/2^-)$	-57.5 [-58.2]	2.44	2.37	2.50	2.51 [2.519(12)]

**Figure:** 表 IV.  ${}^6\text{He}$  和  ${}^9\text{Be}$  的总能量和半径。物质半径、质子半径、中子半径和电荷半径分别表示为  $r_m$ ,  $r_p$ ,  $r_n$  和  $r_{ch}$ 。方括号中的数值是实验能量和电荷半径 [35, 36]。能量和半径的单位分别为 MeV 和 fm。

我们以类似于  ${}^{10}\text{Be}$  的方式, 使用 multicool 方法计算了  ${}^6\text{He}$  和  ${}^9\text{Be}$  的能量。 ${}^6\text{He}$  的  $0^+$  基态能量为 -29.2 MeV, 双中子分离能量为 1.6 MeV, 由  $\alpha$  粒子的能量为 -27.6 MeV 测得。以及  ${}^6\text{He} + \alpha$  的阈值能量为 -56.8 MeV。 ${}^9\text{Be}$  的  $3/2^-$  基态能量为 -57.5 MeV, 这就是  ${}^{10}\text{Be} + n$  的阈值能量。文中在表 IV 中总结了这些值及其半径, 并与实验值进行了比较。

# 结果

## Energy spectrum



**Figure:** 图 8.  ${}^{10}\text{Be}$  的能谱, 以 MeV 为单位。左图表示实验结果 [38], 右图表示多重冷却结果。图中左侧和右侧的刻度代表总能量, 中间的刻度代表激发能量。 $\alpha + \alpha + n + n$ ,  ${}^6\text{He} + \alpha$  和  ${}^9\text{Be} + n$  的阈值能量用虚线水平线表示。

对于  ${}^{10}\text{Be}$ , 能量谱如图 8 所示, 并与实验结果进行了比较。目前的结果与正宇称态的观测谱相当吻合。在下页表 V 中, 列出了每个态的总能量和半径。

# 结果

## Energy spectrum



	Energy [MeV]	Radius [fm]
$0_1^+$	-63.72	2.33
$0_2^+$	-56.01	2.88
$1^+$	-53.31	2.51
$2_1^+$	-59.84	2.33
$2_2^+$	-57.54	2.42
$2_3^+$	-54.16	2.89
$3^+$	-54.25	2.40
$4_1^+$	-51.99	2.40
$4_2^+$	-50.64	2.91

Figure: 表 V. 多重冷却中  $^{10}\text{Be}$  状态的总能量, 以 MeV 为单位。物质半径以 fm 为单位显示。

对于  $0^+$  态,  $0_1^+$  态在空间上是紧凑的, 主要由  $\lambda$  值较小的组态描述, 这些组态在  $^{10}\text{Be}$  的结构转变之前。总能量为 -63.7 MeV, 接近实验值 -64.98 MeV。对于仅使用固定自旋 basis 态的情况, 能量为 -62.5 MeV, 自旋自由情况为 -62.8 MeV, 它们的耦合增加了约 1 MeV 的能量。

# 结果

## Energy spectrum

	Energy [MeV]	Radius [fm]
$0_1^+$	-63.72	2.33
$0_2^+$	-56.01	2.88
$1^+$	-53.31	2.51
$2_1^+$	-59.84	2.33
$2_2^+$	-57.54	2.42
$2_3^+$	-54.16	2.89
$3^+$	-54.25	2.40
$4_1^+$	-51.99	2.40
$4_2^+$	-50.64	2.91

Figure: 表 V. 多重冷却中  $^{10}\text{Be}$  状态的总能量, 以 MeV 为单位。物质半径以 fm 为单位显示。

$0_2^+$  态在空间上是扩展 (spatially extended) 的, 半径为 2.88 fm, 主要由较大半径的激发态组态描述, 这些组态是使用大  $\lambda$  值产生的。 $0_2^+$  态比  $\alpha + \alpha + n + n$  的阈值能量 -55.2 MeV 低约 0.8 MeV。激发能量为 7.7 MeV, 比实验值 6.2 MeV 略高 1.5 MeV。这种状态主要由固定自旋情况下具有大半径的 basis 态描述。仅使用固定自旋 basis 态时,  $0_2^+$  态的能量为 -55.7 MeV, 与 full basis 态中的 -56.0 MeV 接近, 半径为 2.89 fm。仅使用自旋自由 basis 态时, 能量为 -52.1 MeV, 半径为 2.82 fm。

# 结果

## Energy spectrum

	Energy [MeV]	Radius [fm]
$0_1^+$	-63.72	2.33
$0_2^+$	-56.01	2.88
$1^+$	-53.31	2.51
$2_1^+$	-59.84	2.33
$2_2^+$	-57.54	2.42
$2_3^+$	-54.16	2.89
$3^+$	-54.25	2.40
$4_1^+$	-51.99	2.40
$4_2^+$	-50.64	2.91

Figure: 表 5V. 多重冷却中  $^{10}\text{Be}$  状态的总能量, 以 MeV 为单位。物质半径以 fm 为单位显示。

我们预测了激发能量为 10 MeV 的  $1^+$  态, 这在实验中尚未观察到, 但在其他理论中有预测。对于  $2^+$  态,  $2_1^+$  和  $2_2^+$  态是很紧凑的状态。 $2_3^+$  态给出了大半径, 主要由大半径的激发态组态描述。这种状态可以是 the band member of  $0_2^+$  态, 因为这两个态具有相似的大半径, 为 2.9 fm。

# 结果

## Energy spectrum

	Energy [MeV]	Radius [fm]
$0_1^+$	-63.72	2.33
$0_2^+$	-56.01	2.88
$1^+$	-53.31	2.51
$2_1^+$	-59.84	2.33
$2_2^+$	-57.54	2.42
$2_3^+$	-54.16	2.89
$3^+$	-54.25	2.40
$4_1^+$	-51.99	2.40
$4_2^+$	-50.64	2.91

Figure: 表 5V. 多重冷却中  $^{10}\text{Be}$  状态的总能量, 以 MeV 为单位。物质半径以 fm 为单位显示。

$3^+$  态, 它可以是  $K^\pi = 2^+$  能带中, 与  $2_2^+$  态显示出相似的半径, 约为 2.4 fm[23, 24]。据实验可知, 这种状态的候选态具有类似的激发能量 9.4 MeV[38]。

两个  $4^+$  态,  $4_1^+$  态可以是 the band member of  $0_1^+$  和  $2_1^+$  态, 这三个态给出了大约 2.3-2.4 fm 的相似半径。 $4_2^+$  态显示出大半径, 可以是 the band member of  $0_2^+$  和  $2_3^+$  态, 这三个态也给出了大约 2.9 fm 的相似半径。

# 结果

## Energy spectrum

	Multicool	MO[23]	$\beta-\gamma$ [24]	DC[25]	$\beta-\gamma K$ [26]
$0_1^+$	0 (-63.7)	0 (-61.4)	0 (-59.2)	0 (-60.4)	0 (-63)
$0_2^+$	7.7 (-56.0)	8.1 (-53.3)	8.0 (-51.2)	9.5 (-50.9)	12 (-51)
$1^+$	10.4	10.1	-	-	-
$2_1^+$	3.9	3.3	3.3	-	-
$2_2^+$	6.2	5.7	5.8	-	-
$2_3^+$	9.6	9.5	9.9	-	-
$3^+$	9.5	9.6	9.2	-	-
$4_1^+$	11.7	10.6	11.0	-	-
$4_2^+$	13.1	12.5	13.5	-	-

**Figure:** 表 VI.<sup>10</sup>Be 的激发能量在使用相同哈密顿量的 multicool 方法中与四种理论。单位是兆电子伏特 (MeV)。括号内的值表示总能量

并将 multicool 方法得到的结果与其他模型进行比较：

模型
$\alpha + \alpha + n + n$ 分子轨道模型 (MO)
$\beta-\gamma$ 变形约束的 AMD 方法 ( $\beta-\gamma$ )
dineutron condensation model 的 AMD 方法 (DC)
在 K 量子数投影中带有 $\beta-\gamma$ 约束的 AMD 方法 ( $\beta-\gamma K$ )

multicool 方法  $0_1^+$  能量更低，并且给出了最低的激发能量 7.7 MeV，比对后得到最终结论是 multicool 方法结合赝势能能够产生适合激发态的组态。

# 结果

## Energy spectrum



	Expt.	Multicool	MO[23]	$\beta$ - $\gamma$ [24]	DC[25]
	$r_m$	2.30(2)	2.33	—	2.39
$0_1^+$	$r_p$	—	2.21	—	2.31
	$r_n$	—	2.40	—	2.41
	$r_{ch}$	2.357(18)	2.36	2.51	—
	$r_m$	—	2.88	—	2.98
$0_2^+$	$r_p$	—	2.70	—	2.66
	$r_n$	—	2.99	—	3.14
	$r_{ch}$	—	2.82	2.93	—

**Figure:** 表 VII. 与实验 [36, 39] 及使用相同哈密顿量的其他理论相比,  $^{10}\text{Be}$  的  $0_{1,2}^+$  态的四种半径, 单位为 fm。

在表 VII 中, 我们列出了  $^{10}\text{Be}$  的两个  $0^+$  状态的径向特性, 并与实验值和理论值进行了比较。对于  $0_1^+$  状态, multicool 给出了  $2.33\text{ fm}$  的物质半径, 它接近实验值并且比其他理论的更小。在 multicool 方法中得到的电荷半径与实验值 [36] 一致。对于  $0_2^+$  态, 我们的结果给出了较大的半径, 在这种状态下, 质子和中子的半径相比  $0_1^+$  态增加了大约  $0.5\text{ fm}$ 。这是在其他理论中也观察到的一个共同特征。

# 结果

## Energy spectrum

	Experiment	Multicool	MO[23]	$\beta\text{-}\gamma$ [24]
$2_1^+ \rightarrow 0_1^+$	10.5(1.0), 9.2(3)	7.9	11.26	9.4
$2_1^+ \rightarrow 0_2^+$	0.66(24)	0.09	0.23	1.2
$2_2^+ \rightarrow 0_1^+$	0.11(2)	0.37	0.44	0.7
$2_2^+ \rightarrow 0_2^+$	–	<0.002	0.00	–
$2_3^+ \rightarrow 0_1^+$	–	0.05	0.19	–
$2_3^+ \rightarrow 0_2^+$	–	27.1	35.56	–

Figure: 表 VIII

最后，在表 VIII 中，列出了从  $2^+$  态到  $0^+$  态的电四极跃迁强度  $B(E2)$ ，其中一些与实验和理论值进行了比较。在 multicool 方法中，我们几乎获得了与其他理论一致的结果。对于  $2_3^+$  到  $0_2^+$  的跃迁，这些态通常具有较大的半径，并且  $E2$  强度显示出较大的值，这与分子轨道 (MO) 模型 [23] 中的结果一致。

## 1. 简介

- 1.1. 研究背景
- 1.2. 研究目标

## 2. 理论框架

- 2.1. 哈密顿量
- 2.2. AMD 反对称分子动力学
- 2.3. 多 slater 行列式的变分

## 3. 结果

- 3.1. spin-fix
- 3.2. spin-free
- 3.3. energy spectrum

## 4. 结论

## 总结

- 提出新方法优化 AMD 中多 Slater 行列式。同时确定 Slater 行列式的组态和它们的权重，并最小化总波函数的能量。在 AMD 中，核子波函数采用高斯波包形式，所有 Slater 行列式的高斯质心参数等通过总波函数的变分来确定。
- 介绍了 multicoil 计算方法，用于多个 AMD basis 态，首先获得基态的组态，然后在基态组态的正交条件下获得激发态组态。同时得到适当的生成坐标，如团簇间的距离，在能量变分计算中可以自动获得，这是 multicoil 计算的一个优势。
- 将 multicoil 应用在  $^{10}\text{Be}$  的计算中，自动生成了具有不同空间组态和形变的 basis 态，包括  $^5\text{He} + ^5\text{He}$ ,  $^6\text{He} + \alpha$ ,  $^7\text{Li} + ^3\text{H}$ ,  $^8\text{Be} + 2n$ ,  $^9\text{Be} + n$  的团簇。这些组态是在没有先验知识的情况下产生的，并支持  $^{10}\text{Be}$  中两个价中子环绕两个  $\alpha$  粒子的分子轨道图像。
- 验证了能谱和电四极跃迁与实验和其他模型一致。
- 计划扩展方法到真实核力的从头算计算，如 TOAMD 和 HM-AMD，以确定最优变分参数。
- 探索结合复标度描述共振散射态，描述能量高于粒子阈值的共振散射态仍然是一个未解决的问题，可能通过将多重冷却与复标度相结合来解决。

Thank you for your attention!  
Q&A