第七章　配对关联

配对现象是自然界中很普遍的现象.

7.1　准自旋算符

当两个核子耦合为角动量为零时, 我们就说这两个核子是配对的. 对于单轨道情况, 根据式(5.139), 两个核子耦合为总自旋为零的归一化波函数为

$$\Psi_{J=0,M=0}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_j^\dagger\times a_j^\dagger\right)^{(0)}|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2(2j+1)}}\sum_m(-)^{j-m}a_{jm}^\dagger a_{j\ -m}^\dagger\,|0\rangle\ . \quad (7.1)$$

因为费米子产生算符的交换对称性以及m 为半整数, 显然我们有

$$\begin{aligned}&(-)^{j-1/2}a_{j\ 1/2}^\dagger a_{j\ -1/2}^\dagger\equiv(-)^{j-(-1/2)}a_{j\ -1/2}^\dagger a_{j\ 1/2}^\dagger\ ,\\&(-)^{j-3/2}a_{j\ 3/2}^\dagger a_{j\ -3/2}^\dagger\equiv(-)^{j-(-3/2)}a_{j\ -3/2}^\dagger a_{j\ 3/2}^\dagger\ ,\quad\cdots\ ,\end{aligned}$$

即对于任意m, 有

$$(-)^{j-m}a_{j\ m}^\dagger a_{j\ -m}^\dagger\equiv(-)^{j-(-m)}a_{j\ -m}^\dagger a_{jm}^\dagger\ ,$$

因此我们可以定义

$$S_+=\sum_{m>0}(-)^{j-m}a_{jm}^\dagger a_{j\ -m}^\dagger\equiv\sum_{m<0}(-)^{j-m}a_{jm}^\dagger a_{j\ -m}^\dagger=\frac{1}{2}\sum_m(-)^{j-m}a_{jm}^\dagger a_{j\ -m}^\dagger\ .$$

利用上式, 我们把式(7.1) 写为

$$\Psi_{J=0,M=0}=\sqrt{\frac{2}{2j+1}}S_+|0\rangle\ . \quad (7.2)$$

对于S_+ 取厄米共轭, 我们定义S_- 为

$$S_-=(S_+)^\dagger=\sum_{m>0}(-)^{j-m}a_{j\ -m}a_{jm}\ .$$

下面我们计算S_- 与S_+ 的对易式

$$
\begin{aligned}
& [S_-, S_+] = S_-S_+ - S_+S_- \\
= & \sum_{m>0,m'>0} (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a_{j\ -m'} a_{jm'} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} \\
& - \sum_{m>0,m'>0} (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} a_{j\ -m'} a_{jm'} \ . \qquad (7.3)
\end{aligned}
$$

为此我们利用费米子对易式(2.253)、(2.254)、(2.255)、(2.257), 处理上式中第一项

$$
\begin{aligned}
& (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a_{j\ -m'} a_{jm'} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} \\
= & (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a_{j\ -m'} (\delta_{mm'} - a^\dagger_{jm} a_{jm'}) a^\dagger_{j\ -m} \\
= & \delta_{mm'} a_{j\ -m'} a^\dagger_{j\ -m} - (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a_{j\ -m'} a^\dagger_{jm} a_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} \\
= & \delta_{mm'} - \delta_{mm'} a^\dagger_{j\ -m} a_{j\ -m'} - (-)^{j-m}(-)^{j-m'} (\delta_{-m'm} - a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'}) a_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} \\
= & \delta_{mm'} - \delta_{mm'} a^\dagger_{j\ -m} a_{j\ -m'} + \delta_{-m'm} a_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} \\
& + (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'} a_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} \\
= & \delta_{mm'} + \delta_{-m'm} - \delta_{mm'} a^\dagger_{j\ -m} a_{j\ -m'} - \delta_{-mm'} a^\dagger_{j\ -m} a_{jm'} \\
& + (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'} a_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} \ . \qquad (7.4)
\end{aligned}
$$

类似地处理上式中的最后一项

$$
\begin{aligned}
& (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'} a_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} \\
= & (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'} (\delta_{-m'm} - a^\dagger_{j\ -m} a_{jm'}) \\
= & -\delta_{-m'm} a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'} - (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'} a^\dagger_{j\ -m} a_{jm'} \\
= & -\delta_{-m'm} a^\dagger_{jm} a_{j\ -m'} - \delta_{mm'} a^\dagger_{jm} a_{jm'} + (-)^{j-m}(-)^{j-m'} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} a_{j\ -m'} a_{jm'} \qquad (7.5)
\end{aligned}
$$

整理以上两式, 代入式(7.3), 注意到式(7.3)中$m > 0, m' > 0$, 此时$\delta_{-mm'} = 0$. 我们由此得到

$$
\begin{aligned}
& [S_-, S_+] = S_-S_+ - S_+S_- \\
= & \sum_{m>0,m'>0} \left[\delta_{mm'} - \delta_{mm'} a^\dagger_{j\ -m} a_{j\ -m'} - \delta_{mm'} a^\dagger_{jm} a_{jm'} \right] \\
= & \frac{2j+1}{2} - \sum_m a^\dagger_{jm} a_{jm} = \Omega_j - N_j \ , \qquad (7.6)
\end{aligned}
$$

式中

$$\Omega_j = \frac{2j+1}{2}\ , \quad N_j = \sum_m a^\dagger_{jm} a_{jm'}\ .$$

我们定义算符

$$S_z = \frac{1}{2}\left[N_j - \Omega_j\right]\ .$$

我们有

$$[S_-, S_+] = -2S_z\ , \quad [S_+, S_-] = 2S_z\ . \tag{7.7}$$

下面我们计算下面的对易式

$$\begin{aligned}
&[S_z, S_+] = \left[\frac{1}{2}\left(-\Omega_j + \sum_{m'} a^\dagger_{jm'} a_{jm'}\right), \sum_{m>0} (-)^{j-m} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m}\right] \\
= &\ \frac{1}{2}\sum_{m'}\sum_{m>0}\left[a^\dagger_{jm'} a_{jm'}, (-)^{j-m} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m}\right] \\
= &\ \frac{1}{2}\sum_{m'}\sum_{m>0}\left((-)^{j-m} a^\dagger_{jm'} a_{jm'} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} - (-)^{j-m} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} a^\dagger_{jm'} a_{jm'}\right)\ .
\end{aligned} \tag{7.8}$$

我们处理上式括号中的第一项

$$\begin{aligned}
&(-)^{j-m} a^\dagger_{jm'} a_{jm'} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} = (-)^{j-m} a^\dagger_{jm'}(\delta_{mm'} - a^\dagger_{jm} a_{jm'}) a^\dagger_{j\ -m} \\
= &\ (-)^{j-m}\delta_{mm'} a^\dagger_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} - (-)^{j-m} a^\dagger_{jm'} a^\dagger_{jm}(\delta_{-mm'} - a^\dagger_{j\ -m} a_{jm'}) \\
= &\ (-)^{j-m}\left[\delta_{mm'} a^\dagger_{jm'} a^\dagger_{j\ -m} - \delta_{-mm'} a^\dagger_{jm'} a^\dagger_{jm} + a^\dagger_{jm'} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} a_{jm'}\right]\ .
\end{aligned}$$

把上式代入式(7.8) 得到

$$\begin{aligned}
[S_z, S_+] &= \frac{1}{2}\left[\sum_{m>0}(-)^{j-m} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} - \sum_{m>0}(-)^{j-m} a^\dagger_{j\ -m} a^\dagger_{jm}\right] \\
&= \sum_{m>0}(-)^{j-m} a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} = S_+\ .
\end{aligned} \tag{7.9}$$

类似地, 我们计算对易式

$$\begin{aligned}
&[S_z, S_-] = \left[\frac{1}{2}\left(-\Omega_j + \sum_{m'} a^\dagger_{jm'} a_{jm'}\right), \sum_{m>0}(-)^{j-m} a_{j\ -m} a_{jm}\right] \\
= &\ \frac{1}{2}\sum_{m'}\sum_{m>0}(-)^{j-m}\left(a^\dagger_{jm'} a_{jm'} a_{j\ -m} a_{jm} - a_{j\ -m} a_{jm} a^\dagger_{jm'} a_{jm'}\right)\ .
\end{aligned} \tag{7.10}$$

上式最后一步右边括号内第二项为

$$
\begin{aligned}
& a_{j\ -m}a_{jm}a^{\dagger}_{jm'}a_{jm'} = a_{j\ -m}(\delta_{mm'} - a^{\dagger}_{jm'}a_{jm})a_{jm'} \\
= & \ \delta_{mm'}a_{j\ -m}a_{jm'} - a_{j\ -m}a^{\dagger}_{jm'}a_{jm}a_{jm'} \\
= & \ \delta_{mm'}a_{j\ -m}a_{jm'} - (\delta_{-mm'} - a^{\dagger}_{jm'}a_{j\ -m})a_{jm}a_{jm'} \\
= & \ \delta_{mm'}a_{j\ -m}a_{jm'} - \delta_{-mm'}a_{j\ -m}a_{jm}a_{jm'} + a^{\dagger}_{jm'}a_{j\ -m}a_{jm}a_{jm'} \ .
\end{aligned}
$$

把上式代入式(7.10) 得到

$$
[S_z, S_-] = \frac{1}{2}\left[-\sum_{m>0}(-)^{j-m}a_{j\ -m}a_{jm} + \sum_{m>0}(-)^{j-m}a_{jm}a_{j\ -m}\right] = -S_- \tag{7.11}
$$

令$S_+ = S_x + \mathrm{i}S_y$, $S_- = S_x - \mathrm{i}S_y$, $\vec{S} = \vec{e}_x S_x + \vec{e}_y S_y + \vec{e}_z S_z$. 我们由式(7.7)、(7.9)、(7.11) 容易证明

$$
\vec{S} \times \vec{S} = \mathrm{i}\vec{S} \ , \tag{7.12}
$$

即$\vec{S}$ 满足角动量对易式. 例如我们有

$$
\begin{aligned}
[S_x, S_y] &= \frac{1}{4\mathrm{i}}[S_+ + S_-), (S_+ - S_-)] = \frac{1}{4\mathrm{i}}([S_+, -S_-] + [S_-, -S_+]) \\
&= \frac{1}{4\mathrm{i}}(-2S_z - 2S_z) = \mathrm{i}S_z \ .
\end{aligned} \tag{7.13}
$$

如前所述, S_z 作用到一个态上的本征值为$(N_j - \Omega_j)/2$, 是半整数或整数. 因为这些原因, 人们常把这样定义的$\vec{S}$ 称为准自旋算符. 我们有

$$
S_+S_- = (S_x + \mathrm{i}S_y)(S_x - \mathrm{i}S_y) = S_x^2 + S_y^2 - \mathrm{i}\,[S_x, S_y] = \vec{S}^2 - S_z^2 + S_z \ . \tag{7.14}
$$

S_z 是$\vec{S}$ 的一个分量, 本征值为$\frac{N_j - \Omega_j}{2}$, 一般情况我们考虑$N < \Omega_j$ (核子数填充前半壳) 情况, 而$N > \Omega_j$ 时作空穴处理, 因此$S_{\min}$ 取$\frac{\Omega_j - N_j}{2}$. 另一方面, 我们可以把$\vec{S}$ 写为

$$
\vec{S} = \sum_m \vec{S}^{(m)} \ , \quad \vec{S}^{(m)}_+ = (-)^{j-m}a^{\dagger}_{jm}a^{\dagger}_{j\ -m}, \quad \vec{S}^{(m)}_- = \left(\vec{S}^{(m)}_+\right)^{\dagger} \ .
$$

可以证明$\vec{S}^{(m)}$ 对应$\frac{1}{2}$ 自旋, 因此$S_{\max}$ 为$\frac{\Omega_j}{2}$. 基于这些讨论我们知道, S 的取值为

$$
S = \frac{\Omega_j - N_j}{2}, \frac{\Omega_j - N_j}{2} + 1, \frac{\Omega_j - N_j}{2} + 2, \cdots, \frac{\Omega_j}{2} \ .
$$

我们可以换一种标记方法

$$S=\frac{\Omega_j}{2},\frac{\Omega_j-2}{2},\frac{\Omega_j-4}{2},\cdots,\frac{\Omega_j-v}{2},\cdots,\frac{\Omega_j}{2}\ .$$

v 称为seniority 量子数. 下面我们将看到, v 对应非S 对的核子个数.

利用seniority 量子数, 我们得到关于S_+S_- 的本征方程

$$\begin{aligned}&S_+S_-\left(\left|S=\frac{\Omega-v}{2},S_z=\frac{\Omega-N}{2}\right\rangle\right)\\=&\frac{\Omega-v}{2}\left(\frac{\Omega-v}{2}+1\right)\\&-\frac{\Omega-N}{2}\left(\frac{\Omega-N}{2}+1\right)\left(\left|S=\frac{\Omega-v}{2},S_z=\frac{\Omega-N}{2}\right\rangle\right)\ .\end{aligned}\tag{7.15}$$

7.2　单轨道情形下对力哈密顿量和波函数

我们强调, 原子核内核子之间的相互作用主要是短程吸引, 所以常用δ 相互作用来近似. δ 势极好地表述核力的短程性, 给出的结果与真实相互作用的结果在许多情况下都很相似, 如图5.1 所示. 两同类核子处$J=0$ 最低, 在$J=$ 0-2 之间有一个很大的能隙后, $J=2,4,6\cdots$ 随着角动量增加, 能量依次增加, $J=4$、6、8 几个态基本上能量的绝对值很小, 即能量接近于零.

尽管δ 力已经比较简单, 然而实际计算也不容易. 因为两体矩阵元上面提到的这种性质, 沿着这个方面的一个简化是对力. 与δ 势类似的是, 对力是当两核子只有在波函数重叠特别大时才存在. 对力对应的组态能量为: 只有$J=0$ 的能量被降低, 其它态不受影响. 对力是模拟两个全同核子处于$|j^2,J=0\rangle$ 的组态时很强的吸引势, 可以看做δ 力一个粗略的近似. 我们定义

$$\langle j_1j_2J|V_{\rm pairing}|j_3j_3J'\rangle=-G\sqrt{(j_1+1/2)(j_2+1/2)}\delta_{j_1j_2}\delta_{j_3j_4}\delta_{J0}\delta_{J'0}\ ,\tag{7.16}$$

称为对力相互作用; 注意这个定义允许“非对角”作用, 即把一个轨道的$J=0$ 配对变成另外一个轨道的$J=0$ 配对. 这对于偶偶核$J=0$ 基态和第一个$J^{\rm parity}=2^+$ 态之间配对能隙以及对力关联是重要的. 对力取这种形式的理由是受到δ 相互作用的启发, 我们在两体相互作用的讨论中知道

$$\begin{aligned}&\langle j^2,J=0|-V_0\delta(\vec r_1-\vec r_2)|(j')^2,J=0\rangle\\=&-\left(\frac{V_0}{4\pi}(-)^{l+l'}\int R^2_{nlj}(r)R^2_{n'l'j'}(r)r^2{\rm d}r\right)\sqrt{(j+1/2)(j'+1/2)}\ .\end{aligned}$$

这里我们假定

$$G=\frac{V_0}{4\pi}(-)^{l+l'}\int R_{nlj}^2(r)R_{n'l'j'}^2(r)r^2\mathrm{d}r\ ,$$

与轨道无关; 除了相因子以外, 径向积分只要对于轨道不敏感上述假定就是很好的. 因此我们说, 对力可以看作为δ 力的近似. 在单轨道情况下下, 对力定义为

$$\langle j^2J|V_{\rm pairing}|j^2J'\rangle=-\frac{G}{2}(2j+1)\delta_{J0}\delta_{J'0}\ . \tag{7.17}$$

把上式代入壳模型哈密顿量式(5.143)中, 得到对力哈密顿量为

$$\begin{aligned}
H_{\rm pairing} &= \langle j^2J=0|V|j^2J=0\rangle A(jj)^{(0)\dagger}A(jj)^{(0)}\\
&= -\frac{G}{2}(2j+1)\delta_{J0}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_j^\dagger a_j^\dagger\right)^{(0)}(-)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_ja_j\right)^{(0)}\\
&= \frac{1}{4}G\sum_{mm'}(-)^{j-m}(-)^{j-m'}a_{jm}^\dagger a_{j\ -m}^\dagger a_{jm'}a_{j\ -m'}\\
&= -G\sum_{m>0,m'>0}(-)^{j-m}(-)^{j-m'}a_{jm}^\dagger a_{j\ -m}^\dagger a_{j\ -m'}a_{jm'}\\
&= -GS_+S_-\ .
\end{aligned}\tag{7.18}$$

这是在教科书中最常见的对力哈密顿量的形式(如Greiner 教科书、Lawson 教科书、Ring 教科书、Heyde 教科书、Casten 书). 其它形式于此有很小的差异, 例如Talmi fat book(相差2倍因子).

设$|0\rangle$ 为价核子真空态, 因为$H_{\rm pairing}|0\rangle=0$, 我们有

$$\begin{aligned}
H_{\rm pairing}(S_+)^n|0\rangle &= \left[H_{\rm pairing},(S_+)^n\right]|0\rangle+(S_+)^nH_{\rm pairing}|0\rangle\\
&= \left[H_{\rm pairing},(S_+)^n\right]|0\rangle\ .
\end{aligned}\tag{7.19}$$

我们计算对易式

$$\left[H_{\rm pairing},S_+\right]\ ,\ \left[H_{\rm pairing},(S_+)^2\right]\ ,\ \cdots\ ,\ \left[H_{\rm pairing},(S_+)^n\right]\ .$$

利用式(7.6) 我们得到

$$\left[H_{\rm pairing},S_+\right] = -GS_+\left[S_-,S_+\right]=-GS_+\left(\Omega_j-N_j\right)\ . \tag{7.20}$$

$$\begin{aligned}
\left[H_{\rm pairing},(S_+)^2\right] &= \left[H_{\rm pairing},S_+\right]S_++S_+\left[H_{\rm pairing},S_+\right]\\
&= -GS_+(\Omega_j-N_j)S_+-G(S_+)^2(\Omega_j-N_j)\ .
\end{aligned}\tag{7.21}$$

类似地,

$$\begin{aligned}
& [H_{\text{pairing}}, (S_+)^n] \\
= & [H_{\text{pairing}}, S_+] (S_+)^{n-1} + S_+ [H_{\text{pairing}}, S_+] (S_+)^{n-2} \\
& +(S_+)^2 [H_{\text{pairing}}, S_+] (S_+)^{n-3} + \cdots + (S_+)^{n-1} [H_{\text{pairing}}, S_+] \ . \quad (7.22)
\end{aligned}$$

由式(7.19) 和上式我们得到

$$\begin{aligned}
& H_{\text{pairing}}(S_+)^n|0\rangle \\
= & -GS_+ (\Omega_j - N_j) (S_+)^{n-1}|0\rangle - G(S_+)^2 (\Omega_j - N_j) (S_+)^{n-2}|0\rangle \\
& -G(S_+)^3 (\Omega_j - N_j) (S_+)^{n-3}|0\rangle - \cdots - G(S_+)^n (\Omega_j - N_j) |0\rangle \\
= & -G [(\Omega_j - 2(n-1)) + (\Omega_j - 2(n-2)) + (\Omega_j - 2(n-3)) \\
& + \cdots + (\Omega_j - 4) + (\Omega_j - 2) + (\Omega_j - 0)] (S_+)^n|0\rangle \\
= & -G [n\Omega_j + (n-1)n] (S_+)^n|0\rangle = -Gn(\Omega_j - n + 1)(S_+)^n|0\rangle \ . \quad (7.23)
\end{aligned}$$

在上式中我们利用了

$$N_j(S_+)^n|0\rangle = 2n(S_+)^n|0\rangle \ . \quad (7.24)$$

上式的结论是很明显的, 因为N_j 是粒子数算符, $(S_+)^n|0\rangle$ 态上有$2n$ 个粒子. 当然有些教科书(如Greiner 教科书)中还附带了一些练习, 如在Greiner 教科书中证明了$[S_+, N_j] = -2S_+$, 即$N_jS_+ = S_+(N_j+2)$, 也可以由此证明上式; 但没有带来更多的改进.

在$(S_+)^n|0\rangle$ 状态中, 所有核子都两两耦合角动量为零. 我们把这种状态称为seniority $v=0$ 的状态, 在中文教科书中把这个v 量子数按照英文意思称为先辈数、或按照发音翻译为辛弱数, 其原文vetek来自于希伯来语, 英文意思为seniority. 在l^n 组态的seniority 方法是Racah 在1943年引入的[51], 而在j^n 组态中的seniority 方法是Racah 在1952 年[55]、Flowers 在1952 年[56]独立引入的.

下面我们计算seniority $v=0$ 的状态$\left(S_+^\dagger\right)^n|0\rangle$ 的归一化系数, 即

$$|j^{2n}, v=0, I=0\rangle = \Lambda_n \left(S_+^\dagger\right)^n |0\rangle \ , \quad \Lambda_n^{-2} = \langle 0| \left(S_-^\dagger\right)^n \left(S_+^\dagger\right)^n |0\rangle \ .$$

利用式(7.6), 我们得到

$$
\begin{aligned}
& \langle 0|\left(S_{-}^{\dagger}\right)^{n}\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n}|0\rangle=\langle 0|\left(S_{-}^{\dagger}\right)^{n-1}\left[\Omega_{j}-\hat{N}_{j}+S_{+}S_{-}\right]\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n-1}|0\rangle \\
= & \langle 0|\left(S_{-}^{\dagger}\right)^{n-1}\left[\left(\Omega_{j}-(2n-2)\right)\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n-1}|0\rangle\right. \\
& \left.+\left(S_{+}(\Omega_{j}-\hat{N}_{j})+(S_{+})^{2}S_{-}\right)\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n-2}|0\rangle\right] \\
= & \langle 0|\left(S_{-}^{\dagger}\right)^{n-1}\left[\left(\Omega_{j}-(2n-2)\right)\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n-1}|0\rangle\right. \\
& \left.+\left((\Omega_{j}-2n+4)S_{+}+(S_{+})^{2}S_{-}\right)\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n-2}|0\rangle\right] \\
= & \langle 0|\left(S_{-}^{\dagger}\right)^{n-1}\left[\Omega_{j}-(2n-2)+\Omega_{j}-(2n-4)+\cdots+\Omega_{j}\right]\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n-1}|0\rangle \\
= & \langle 0|\left(S_{-}^{\dagger}\right)^{n-1} n\left[\Omega_{j}-(n-1)\right]\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n-1}|0\rangle\,.
\end{aligned}
$$

重复这个过程, 我们可得

$$
\begin{aligned}
& \langle 0|\left(S_{-}^{\dagger}\right)^{n}\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n}|0\rangle \\
= & n\left[\Omega_{j}-(n-1)\right]\cdot(n-1)\left[\Omega_{j}-(n-2)\right]\cdots 1\left[\Omega_{j}-0\right] \\
= & n!\frac{(2j+1)!!}{2^{n}(2j+1-2n)!!}\,.
\end{aligned}
$$

由此得到归一化的seniority $v=0$ 的波函数形式为

$$
|j^{2n},v=0,I=0\rangle=\sqrt{\frac{2^{n}(2j+1-2n)!!}{n!(2j+1)!!}}\left(S_{+}^{\dagger}\right)^{n}|0\rangle\,. \tag{7.25}
$$

我们定义

$$
B_{J}^{\dagger}=\frac{1}{2}\sum_{m}C_{jm,j\ -m}^{J0}a_{jm}^{\dagger}a_{j\ -m}^{\dagger}=\sum_{m>0}C_{jm,j\ -m}^{J0}a_{jm}^{\dagger}a_{j\ -m}^{\dagger}\,. \tag{7.26}
$$

$B_J^{\dagger}$ 把两个核子耦合为总角动量为J ($J\neq 0$) 的状态. 由$\left[S_{+},B_{J}^{\dagger}\right]=0$, 我们得到

$$
\left[H_{\text{pairing}},B_{J}^{\dagger}\right]=-GS_{+}\sum_{m>0}\sum_{m'>0}C_{jm',j\ -m'}^{00}C_{jm,j\ -m}^{J0}\left[a_{jm'}a_{j\ -m'},a_{jm}^{\dagger}a_{j\ -m}^{\dagger}\right]\,.
$$

由此我们有

$$
\begin{aligned}
&H_{\text{pairing}}B_J^\dagger|0\rangle = \left[H_{\text{pairing}}, B_J^\dagger\right]|0\rangle \\
= \; & -GS_+\left(\sum_{m>0}\sum_{m'>0} C^{00}_{jm',j\;-m'}C^{J0}_{jm,j\;-m}\delta_{mm'}(1-a^\dagger_{j\;-m}a_{j\;-m'}-a^\dagger_{jm}a_{jm'}\right)|0\rangle \\
= \; & -GS_+\sum_m C^{00}_{jm,j\;-m}C^{J0}_{jm,j\;-m}|0\rangle = -GS_+\delta_{0J}|0\rangle = 0\,, \qquad (7.27)
\end{aligned}
$$

上式第一步利用了$S_-|0\rangle = 0$, 第二步利用式(7.4)-(7.5) 的结果, 第三步利用了a_{jm} 作用于$|0\rangle$ 的结果为零, 第四步利用了Clebsch-Gordan 系数的正交性, 最后一步利用了$J\neq 0$. 上式其实可以这样理解, 对力算符仅对$J=0$ 的两个核子起作用, 如果$J\neq 0$ 则没有作用, 或者说能量为零.

由算符$B_J^\dagger$ 以及$(S_+)^n$ 我们可以构造出一系列seniority 量子数$v=2$ (有且只有两个核子耦合为$J\neq 0$) 的态,

$$
B_J^\dagger|0\rangle\,,\;\; S_+B_J^\dagger|0\rangle\,,\;\; (S_+)^2B_J^\dagger|0\rangle\,,\;\; (S_+)^3B_J^\dagger|0\rangle\,,\;\; \cdots\,,\;\; (S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle\,. \qquad (7.28)
$$

利用式(7.20)、(7.21)、(7.22), 我们得到对力哈密顿量H_{pairing} 作用在seniority 等于2 的状态上的结果为

$$
\begin{aligned}
&H_{\text{pairing}}B_J^\dagger|0\rangle = 0\,, \\
&H_{\text{pairing}}S_+B_J^\dagger|0\rangle = -GS_+(\Omega_j-N_j)B_J^\dagger|0\rangle = -G(\Omega_j-2)S_+B_J^\dagger|0\rangle\,, \\
&H_{\text{pairing}}(S_+)^2B_J^\dagger|0\rangle = \left[-GS_+(\Omega_j-N_j)S_+ - G(S_+)^2(\Omega_j-N_j)\right]B_J^\dagger|0\rangle \\
&\qquad\qquad = -G(\Omega_j-4+\Omega_j-2)B_J^\dagger(S_+)^2B_J^\dagger|0\rangle\,,
\end{aligned}
$$

与式(7.23)类似, 我们得到

$$
\begin{aligned}
&H_{\text{pairing}}(S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle = \left[H_{\text{pairing}}, (S_+)^{(n-1)}\right]B_J^\dagger|0\rangle \\
= \; & \left[H_{\text{pairing}}, (S_+)\right](S_+)^{(n-2)}B_J^\dagger|0\rangle + S_+\left[H_{\text{pairing}}, (S_+)\right](S_+)^{(n-3)}B_J^\dagger|0\rangle \\
& (S_+)^2\left[H_{\text{pairing}}, (S_+)\right](S_+)^{(n-4)}B_J^\dagger|0\rangle + \cdots + (S_+)^{(n-2)}\left[H_{\text{pairing}}, (S_+)\right]B_J^\dagger|0\rangle \\
= \; & -GS_+\left[(\Omega_j-N_j)(S_+)^{(n-2)} + S_+(\Omega_j-N_j)(S_+)^{(n-3)}\right. \\
& \left.(S_+)^2(\Omega_j-N_j)(S_+)^{(n-4)} + \cdots + (S_+)^{(n-2)}(\Omega_j-N_j)\right]B_J^\dagger|0\rangle \\
= \; & -G\left[\Omega_j-2(n-1)+\Omega_j-2(n-2)+\cdots+\Omega_j-2\right](S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle \\
= \; & -G(n-1)(\Omega_j-n)(S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle\,. \qquad (7.29)
\end{aligned}
$$

上式表明, $(S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle$ 也是对力哈密顿量的本征态, 这些态上seniority 量子数$v=2$.

类似于处理seniority $v=0$ 的情况, 我们求$v=2$ 波函数的归一化系数, 为此先求重叠

$$\langle 0|B_J(S_-)^{(n-1)}(S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle\ .$$

此时已经有了两个核子占据在m_1 和m_2 上, 因为S 对是由两个m 相反的核子给出, 因此核子只能占据$m\neq\pm|m_1|, m\neq\pm|m_2|$ 态上, 因此$2j+1$ 变为$2j+1-4$, n 变为$n-1$. 因此我们得到归一化的$v=2$ 波函数为

$$\sqrt{\frac{2^{n-1}(2j-1-n)!!}{(n-1)!(2j-3)!!}}(S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle\ .$$

采用seniority 量子数, 我们把粒子数等于$2n$, seniority 为v 的状态标记为$|N=2n,v,\alpha,J\rangle$, 这里α 为附加量子数. 对于$v=0,2$ 单轨道情况, 不需要附加量子数.

$$\begin{aligned}
v=0\,, &\qquad |N=2n,v=0,\alpha,J\rangle=(S_+)^n|0\rangle\,,\\
v=2\,, &\qquad |N=2n,v=2,\alpha,J\rangle=(S_+)^{(n-1)}B_J^\dagger|0\rangle\ .
\end{aligned}$$

我们重复上面过程, 构造$\left(B_J^\dagger B_{J'}^\dagger\right)'|0\rangle$. 这里我们在括号上打了一个撇号, 表示考虑了过完备(overcompleteness)、正交性等. 我们证明$\left[H_{\rm pairing},\left(B_J^\dagger B_{J'}^\dagger\right)'\right]|0\rangle=0$, 容易得到

$$\begin{aligned}
&H_{\rm pairing}B_{J_1}^\dagger B_{J_2}^\dagger|0\rangle=\left[H_{\rm pairing},B_{J_1}^\dagger B_{J_2}^\dagger\right]|0\rangle\\
=&\left[H_{\rm pairing},B_{J_1}^\dagger\right]B_{J_2}^\dagger|0\rangle+B_{J_1}^\dagger\left[H_{\rm pairing},B_{J_2}^\dagger\right]|0\rangle\\
=&-GS_+\left(\frac{1}{2}\sum_m C_{jm,j\ -m}^{00}C_{jm,j\ -m}^{J0}B_{J_2}^\dagger|0\rangle\right)\\
&-GS_+\left(\frac{1}{2}\sum_m C_{jm,j\ -m}^{00}C_{jm,j\ -m}^{J0}(-N_j)\right)B_{J_2}^\dagger|0\rangle+0=0\,,
\end{aligned}$$

上式第三步利用了式(7.27) 第二步的结果. 从这个过程可以知道

$$H_{\rm pairing}\left(B_{J_1}^\dagger B_{J_2}^\dagger\cdots B_{J_t}^\dagger\right)'|0\rangle\equiv 0\ . \tag{7.30}$$

这也是很容易理解的, 因为对力仅作用在$J=0$ 的核子配对上, $J\neq 0$ 时没有作用, 即本征值等于0.

重复式(7.29)的过程, 我们得到

$$H_{\text{pairing}}(S_+)^{(n-2)}\left(B^\dagger_{J_1}B^\dagger_{J_2}\right)'|0\rangle = -G(n-2)(\Omega-n-1)(S_+)^{(n-2)}B^\dagger_{J_1}B^\dagger_{J_2}|0\rangle\ , \tag{7.31}$$

更一帮情况, 对于$v=2t$时

$$\begin{aligned} & H_{\text{pairing}}(S_+)^{(n-t)}B^\dagger_{J_1}\cdots B^\dagger_{J_t}|0\rangle \\ = & -G(n-t)(\Omega-n-t+1)(S_+)^{(n-t)}B^\dagger_{J_1}\cdots B^\dagger_{J_t}|0\rangle\ , \end{aligned} \tag{7.32}$$

seniority 为v的态与$v=0$ 的态之间能量差为

$$E(v=2t)-E(v=0)=Gt(\Omega_j-t+1)\ .$$

注意同一个seniority 的所有状态是能量兼并的, 与J 和附加量子数无关. $v=2$ 时,

$$E(v=2)-E(v=0)=G\Omega_j\ .$$

如上面所述,

$$\begin{aligned} & S_z|N=v,v,\alpha,J\rangle=\frac{N_j-\Omega}{2}|N=v,v,\alpha,J\rangle\ ,\quad S_-|N=v,v,\alpha,J\rangle=0\ , \\ & \vec{S}^2|N=v,v,\alpha,J\rangle=[S_+S_-+S_z(S_z-1)]\,|N=v,v,\alpha,J\rangle \\ & \qquad =\frac{\Omega_j-v}{2}\left(\frac{\Omega_j-v}{2}+1\right)|N=v,v,\alpha,J\rangle=S_v^2|N=v,v,\alpha,J\rangle\ . \end{aligned}$$

下面为方便我们令$v=2t$, 这说明$|N=v,v,\alpha,J\rangle$ 是$\vec{S}^2$ 和S_z 的共同本征函数. 因为S_+ 与$\vec{S}^2$ 对易, 在上式中两边作用算符$(S_+)^{(n-t)}$, 我们有

$$\begin{aligned} & (S_+)^{(n-t)}\,\vec{S}^2|N=v,v,\alpha,J\rangle=\vec{S}^2\,(S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle \\ = & \ \frac{\Omega_j-v}{2}\left(\frac{\Omega_j-v}{2}+1\right)(S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle\ . \end{aligned}$$

即$(S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle$ 也是$\vec{S}^2$ 的本征态, 并且本征值不变. 当然S_z 作用在$(S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle$ 的本征值变化了; 其本征值由$\frac{2t-\Omega_j}{2}$ 变为$\frac{2n-\Omega_j}{2}$. 所以

我们得到

$$
\begin{aligned}
& H_{\text{pairing}}\,(S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle \\
= \;& -G\left[\vec{S}^2 - S_z(S_z-1)\right](S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle \\
= \;& -G\left[\frac{\Omega_j-2t}{2}\left(\frac{\Omega_j-2t}{2}+1\right)-\frac{2n-\Omega_j}{2}\left(\frac{2n-\Omega_j}{2}-1\right)\right] \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad \cdot (S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle \\
= \;& -G\left[\left(\frac{\Omega_j}{2}-t\right)\left(\frac{\Omega_j}{2}-t+1\right)-\left(\frac{\Omega_j}{2}-n\right)\left(\frac{\Omega_j}{2}-n+1\right)\right] \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad \cdot (S_+)^{(n-t)}\,|N=v,v,\alpha,J\rangle \\
= \;& -G(n-t)(\Omega-n-t+1)(S_+)^{(n-t)}B^\dagger_{J_1}\cdots B^\dagger_{J_t}|0\rangle\,,
\end{aligned}
$$

与式(7.15)、(7.32) 结果一致. 可见准自旋表象中的$v=2t$ 正是系统的未配对核子数, 或者称作非S 配对的核子数.

7.3 BCS 理论

前面讨论了单轨道的seniority 理论, 实际上seniority 方法的应用不限于j^N 组态. 如果满壳外有几个近似简并的单粒子j 轨道, seniority 方法可以推广. 不过对于远离满壳情况, 原子核存在稳定形变时, 单粒子能级差不多有点均匀分布, 这种方法就不再适用了. 多轨道配对一个最有名的实例是偶偶的Sn 同位素链, 从Sn-102 到Sn-130 的第一个2^+ 激发态能量近似一个常量(1.2 MeV). 人们发展了推广的seniority 方法、BCS 方法、broken pair 近似、配对理论等.

作为一个试探, $N=2n$ 个粒子配对基态为

$$
|S^n\rangle = \left(\sum_j \alpha_j S_j^\dagger\right)^n |0\rangle = \left(\sum_j \alpha_j (a_j^\dagger a_j^\dagger)^{(0)}\right)^n |0\rangle\,.
$$

然后做变分

$$
\delta\langle S^n|H|S^n\rangle = 0\,.
$$

从而得到系数α_j. 同样我们可以做

$$
|S^{n-1}J\rangle = \left(\sum_j \alpha_j S_j^\dagger\right)^{n-1} \sum_{j_1 j_2} \beta_{j_1 j_2}(a_j^\dagger a_j^\dagger)^{(J)}|0\rangle\,.
$$

然后做变分

$$\delta\langle S^n J|H|S^n J\rangle = 0\ .$$

这里的S 成分不象单粒子能级简并情形下那么容易得到, 变分无法得到解析结果; 而这种变分却是现在配对理论得到S 配对结构系数标准做法之一.

一个出路是凝聚态物理中关于超导体的BCS 理论. 当BCS 理论在1957 年提出后, A. Bohr, B. R. Mottelson 和D. Pines在1958 年、Soloviev 在1958年、Belyaev 在1959人提出可以用BCS 理论近似给出单满壳偶偶核基态. 这里试探波函数为

$$\psi = \prod_{j\ m>0} \left[u_j + (-)^{j-m} v_j a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m}\right] |0\rangle\ . \tag{7.33}$$

式中试探波函数不满足粒子数守恒, 这是这种方法的最大弱点. 在金属超导现象中因为电子库珀对(Cooper pair)很多, 这个不守恒带来的影响是可以忽略的, 正如正则系综在统计物理中一样. 然而在核物理中价核子数比较小, 粒子数不守恒带来的影响比较严重. 上式中的u_j、v_j 通过变分得到, 下面我们将看到这些系数的意义. 我们首先看看这个试探波函数的特点.

首先所有粒子都是S 配对. 为了看到这一点, 我们考虑一个j 轨道, 令$j = 3/2$, 我们有

$$\begin{aligned}
& \prod_{m>0} \left[u + (-)^{\frac{3}{2}-m} v a^\dagger_m a^\dagger_{-m}\right] |0\rangle \\
= & \left[u + (-)^{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} v a^\dagger_{\frac{3}{2}} a^\dagger_{-\frac{3}{2}}\right] \left[u + (-)^{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} v a^\dagger_{\frac{1}{2}} a^\dagger_{-\frac{1}{2}}\right] |0\rangle \\
= & \left[u^2 + uv(a^\dagger_{\frac{3}{2}} a^\dagger_{-\frac{3}{2}} - a^\dagger_{\frac{1}{2}} a^\dagger_{-\frac{1}{2}}) - v^2 a^\dagger_{\frac{3}{2}} a^\dagger_{-\frac{3}{2}} a^\dagger_{\frac{1}{2}} a^\dagger_{-\frac{1}{2}}\right] |0\rangle \\
= & \left[u^2 + uv S^\dagger_{\frac{3}{2}} + \frac{v^2}{2!}\left(S^\dagger_{\frac{3}{2}}\right)^2\right] |0\rangle\ .
\end{aligned} \tag{7.34}$$

上式中我们省略了$j = \frac{3}{2}$ 角标, 这里的$S^\dagger_{\frac{3}{2}}$ 定义与前面seniority 中形式相同. 注意我们处理的是费米子, 每个$|jm\rangle$ 态上最多可以容纳一个粒子. 从这个意义上确实BCS 波函数是seniority 为零的状态, 它对应这样的状态, u^4 几率没有任何核

子、$2u^2v^2$ 几率有两个核子、而v^4 几率占据四个核子. 对于任意j 我们类似有

$$
\begin{aligned}
&\prod_{m>0}\left[u_j+(-)^{j-m}v_j a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j\ -m}\right]^n|0\rangle \\
=&\sum_{n=0}^{\Omega_j}\frac{u_j^{\Omega_j-n}}{n!}\left(S_j^\dagger\right)^n|0\rangle=u_j^{\Omega_j}\exp\left(\frac{v_j}{u_j}S_j^\dagger\right)|0\rangle\,. \qquad (7.35)
\end{aligned}
$$

我们把式(7.33) 写为

$$
\psi=\prod_j\left[u_j^{\Omega_j}\exp\left(\frac{v_j}{u_j}S_j^\dagger\right)\right]|0\rangle=\left[\prod_j u_j^{\Omega_j}\right]\left[\exp\left(\sum_j\frac{v_j}{u_j}S_j^\dagger\right)\right]|0\rangle\,. \qquad (7.36)
$$

我们下面解释式(7.33) 中u_j 和v_j 的意义. 我们为了方面仍然以$j=3/2$ 壳为例, 由归一化条件

$$
\begin{aligned}
&1=\langle\psi|\psi\rangle\\
=&\langle 0|\left(u-va_{\frac12}a_{-\frac12}\right)\left(u+va_{\frac32}a_{-\frac32}\right)\left(u+va^\dagger_{\frac32}a^\dagger_{-\frac32}\right)\left(u-va^\dagger_{\frac12}a^\dagger_{-\frac12}\right)|0\rangle\\
=&\langle 0|\left(u-va_{\frac12}a_{-\frac12}\right)\left(u-va^\dagger_{\frac12}a^\dagger_{-\frac12}\right)|0\rangle\langle 0|\left(u+va_{\frac32}a_{-\frac32}\right)\left(u+va^\dagger_{\frac32}a^\dagger_{-\frac32}\right)|0\rangle\\
=&(u^2+v^2)^2\,. \qquad (7.37)
\end{aligned}
$$

可见, $u_j^2+v_j^2=1$ 是BCS 波函数归一化条件. 我们下面计算粒子数算符在BCS 基态上的期望值,

$$
\begin{aligned}
&a^\dagger_{j'm'}a_{j'm'}|\psi\rangle\\
=&\prod_{j\ m>0}{}^{'}\left(u_j+(-)^{j-m}v_j a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j-m}\right)a^\dagger_{j'm'}a_{j'm'}\left(u_{j'}+(-)^{j-m}v_{j'}a^\dagger_{j'm'}a^\dagger_{j'-m'}\right)|0\rangle\\
=&(-)^{j-m}v_{j'}a^\dagger_{j'm'}a^\dagger_{j'-m'}\prod_{j\ m>0}{}^{'}\left(u_j+(-)^{j-m}a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j-m}\right)|0\rangle\,,
\end{aligned}
$$

式中连乘号的撇号$\prod'$ 表示连乘中不包含$j'm'$. 我们由上式得到

$$
\langle\psi|a^\dagger_{j'm'}a_{j'm'}|\psi\rangle=v^2_{j.}\,. \qquad (7.38)
$$

由此可见, v_j^2 为j 轨道占据的几率, 而$u_j^2=1-v_j^2$ 自然而然就对应于j 轨道没有核子的几率.

下面我们利用变分方法求BCS 基态. 此时系统的哈密顿量形式为

$$H = \sum_{jm} \epsilon_j a^\dagger_{jm} a_{jm} - G \sum_{j_1 j_2} S^\dagger_{j_1} S_{j_2} \ .$$

为了求粒子数限定的哈密顿量能量极小, 我们引入拉格朗日乘子, 计算

$$\mathcal{H} = H - \lambda \sum_j N_j$$

的期望值. 办法是不断改变v_j 的值, 使得

$$\frac{\partial}{\partial v_j} \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle = 0 \ , \tag{7.39}$$

假如有k 个轨道, 那么就有k 个方程, 这加上粒子数条件

$$\langle \psi | \sum_j N_j | \psi \rangle = \sum_j v_j^2 = N \ , \tag{7.40}$$

共有$n+1$ 个方程, 决定n 个v_j 和拉格朗日乘子λ (化学势). 其中$\mathcal{H}$ 单体部分的计算很直接

$$\mathcal{H}_1 = \langle \psi | \sum_{jm} (\epsilon_j - \lambda) a^\dagger_{jm} a_{jm} | \psi \rangle = \sum_j (2j+1)(\epsilon_j - \lambda) v_j^2 \ . \tag{7.41}$$

为了计算$\mathcal{H}$ 两体部分, 我们先看

$$\begin{aligned} & a_{j_2\ -m_2} a_{j_2 m_2} \prod_{j\ m>0} \left[u_j + (-)^{j-m} v_j a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} \right] |0\rangle \\ = \quad & (-)^{j_2 - m_2} v_{j_2} {\prod_{j\ m>0}}' \left[u_j + (-)^{j-m} v_j a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} \right] |0\rangle \ , \end{aligned}$$

式中连乘号上的撇号是指连乘中不包含$j_2 m_2 > 0$. 两体部分计算结果为

$$\begin{aligned} & \langle \psi | - G \sum_{j_1 j_2} S^\dagger_{j_1} S_{j_2} | \psi \rangle \\ = \quad & -G \sum_{j_1 j_2} \sum_{m_1>0, m_2>0} v_{j_1} v_{j_2} \langle 0 | {\prod_{j'\ m'>0}}'' \left[u_{j'} + (-)^{j'-m'} v_{j'} a_{j'm'} a_{j'\ -m'} \right] \\ & \qquad {\prod_{j\ m>0}}' \left[u_j + (-)^{j-m} v_j a^\dagger_{jm} a^\dagger_{j\ -m} \right] |0\rangle \ . \end{aligned}$$

式中连乘号上双撇号指的是连乘中不包括j_2、$m_2 > 0$. 上式中因为S_{j_2} 和$S^\dagger_{j_1}$ 中分别自带了相因子$(-)^{j_2-m_2}$ 和$(-)^{j_1-m_1}$ 使得v_{j_1}、v_{j_2} 前的相因子消掉了. 上式的做法是S_{j_2} 作用于右边的$|\psi\rangle$, 而$S^\dagger_{j_1}$ 作用于左边的$\langle\psi|$. 正如式(7.37) 那样, 上式右边那些连乘号内的那些都变成$u^2+v^2=1$ 而消去：上式因为第二个连乘号内少了j_2m_2 的配对产生算符, 因此对应的$u_{j_1}+(-)^{j_1-m_1}v_{j_1}a_{j_1m_1}a_{j_1\ -m_1}$ 无法消去, 类似地, 第一个连乘号内少了j_1m_1 的配对产生算符, 对应的$u_{j_1}+(-)^{j_1-m_1}v_{j_1}a^\dagger_{j_1m_1}a^\dagger_{j_1\ -m_1}$ 也无法消去; 因此上式变为

$$\begin{aligned}
&\langle\psi|-G\sum_{j_1j_2}S^\dagger_{j_1}S_{j_2}|\psi\rangle \\
=&\ -G\sum_{j_1j_2}\sum_{m_1>0,m_2>0}v_{j_1}v_{j_2}\langle 0|\left(u_{j_2}+(-)^{j_2-m_2}v_{j_2}a_{j_2\ -m_2}a_{j_2m_2}\right) \\
&\qquad\left(u_{j_1}+(-)^{j_1-m_1}v_{j_1}a^\dagger_{j_1m_1}a^\dagger_{j_1\ -m_1}\right)|0\rangle\,.
\end{aligned}$$

上式容易化简为

$$\begin{aligned}
&\langle\psi|-G\sum_{j_1j_2}S^\dagger_{j_1}S_{j_2}|\psi\rangle \\
=&\ -G\sum_{j_1j_2}\sum_{m_1>0,m_2>0}v_{j_1}v_{j_2}u_{j_1}u_{j_2}-G\sum_j\sum_{m>0}v_j^4 \\
=&\ -G\left(\sum_j\Omega_jv_ju_j\right)^2-G\sum_j\Omega_jv_j^4\,.
\end{aligned}$$

定义$\Delta=\sum\limits_j\Omega_ju_jv_j$, 总结上面的结果, 我们有

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle &= \sum_j(2j+1)(\epsilon_j-\lambda)v_j^2-\frac{1}{G}\Delta^2-G\sum_j\sum_{m>0}v_j^4 \\
&= 2\sum_j\Omega_j(\epsilon_j-\lambda)v_j^2-\frac{1}{G}\Delta^2-G\sum_j\Omega v_j^4\,. \qquad (7.42)
\end{aligned}$$

下面我们看式(7.39), 首先由$u_j^2+v_j^2=1$ 我们得到

$$\frac{\partial u_j}{\partial v_j}=-\frac{v_j}{u_j}\,,$$

由Δ 的定义, 我们有

$$\frac{\partial\Delta}{\partial v_j}=G\Omega_j\left(u_j+\frac{\partial u_j}{\partial v_j}v_j\right)=G\Omega_j\frac{u_j^2-v_j^2}{u_j}=G\Omega_j\frac{1-2v_j^2}{u_j}\,.$$

因此式(7.39)变为

$$\frac{\partial}{\partial v_j}\langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle = 4\Omega_j(\epsilon_j-\lambda)v_j - 2\Delta\Omega_j\frac{1-2v_j^2}{u_j} - 4G\Omega_j v_j^3 = 0\,.$$

上式两边消去$2\Omega_j$, 并乘以u_j, 变为

$$2(\epsilon_j-\lambda)u_jv_j - \Delta(1-2v_j^2) - 2G\Omega_j u_j v_j^3 = 0\,. \tag{7.43}$$

因为$u_j^2+v_j^2=1$, 因此这是一个关于v_j 的一元方程. 如果有n 个能级, 那么就有n 个这样的一元方程. 在数值上求解时, 首先令v_j^3 项等于零; v_j^3 项的影响其实可以通过调整λ 的值补偿; 在此假定下, 上式两边平方, 得到

$$4(\epsilon_j-\lambda)^2v_j^2(1-v_j^2) = \Delta^2(1-4v_j^2+4v_j^4)\,. \tag{7.44}$$

把上式改写为

$$\left[(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2\right]\left(v_j^2\right)^2 - \left[\Delta^2+(\epsilon_j-\lambda)^2\right]\left(v_j^2\right) + \frac{\Delta^2}{4} = 0\,.$$

这个关于v_j^2 的一元二次方程,

$$\begin{aligned} v_j^2 &= \frac{\left[(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2\right] \pm \sqrt{\left[\Delta^2+(\epsilon_j-\lambda)^2\right]^2 - \left[\Delta^2+(\epsilon_j-\lambda)^2\right]\Delta^2}}{2\left[(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2\right]} \\ &= \frac{1}{2}\left(1\pm\frac{\epsilon_j-\lambda}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}}\right)\,. \end{aligned} \tag{7.45}$$

上式v_j 有两个解, 括号内分数前面的正负号有不确定性; 这种不确定性来源于我们在式(7.43)中忽略v_j^3后两边做了平方而导致的. 为了消除这个不确定性, 我们不妨把这两个解代入式(7.43) [忽略忽略v_j^3]. 当上式中$\pm$ 取正号时,

$$2(\epsilon_j-\lambda)u_jv_j = -\Delta\frac{\epsilon_j-\lambda}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}}\,.$$

两边消去$(\epsilon_j-\lambda)$, u_j、v_j 都取正数, 上式不成立, 因此我们在v_j^2 的解括号内只能取负号. 由此得到

$$v_j^2 = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\epsilon_j-\lambda}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}}\right)\,,\quad u_j^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\epsilon_j-\lambda}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}}\right)\,. \tag{7.46}$$

上式的解代入粒子数的定义, 得到

$$N = \sum_j \Omega_j \left(1 - \frac{\epsilon_j - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}} \right) . \tag{7.47}$$

把上面的u_j、v_j 代入到Δ 的定义中, 得到

$$\begin{aligned} \Delta &= G\sum_j \Omega_j \sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{\epsilon_j-\lambda}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}}\right)\cdot\frac{1}{2}\left(1+\frac{\epsilon_j-\lambda}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}}\right)} \\ &= \frac{G}{2}\sum_j \Omega_j \sqrt{1-\frac{(\epsilon_j-\lambda)^2}{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}} = \frac{G}{2}\sum_j \Omega_j \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}} . \end{aligned}$$

上式两边消去Δ, 得到

$$\frac{G}{2}\sum_j \frac{\Omega_j}{\sqrt{(\epsilon_j-\lambda)^2+\Delta^2}} = 1 . \tag{7.48}$$

从式(7.47) 和(7.48) 这两个二元方程求出Δ 和λ, 然后我们可以从(7.46) 得到u_j 和v_j. 式(7.43) 可以写为

$$2\left[\epsilon_j - \lambda'\right] u_j v_j - \Delta(1-2v_j^2) = 0 \,, \quad \lambda' = \lambda + G v_j^2 \,.$$

即(7.43)中被忽略的$-2G\Omega_j u_j v_j^3$ 项, 可以改变λ 来等效地考虑进来. 反正λ 是未知的, 把λ的值上加一项没有关系, 变成λ' 没有关系. 换句话说, 我们如果通过式(7.47) 和(7.48) 得到λ, 这个λ 的结果不是我们在式(7.43)中的λ, 而是$\lambda' = \lambda + G v_j^2$. 真正的化学势$\lambda$ 等于这样的λ 减去$G v_j^2$.

有了u_j 和v_j 以后, 就可以利用BCS 波函数计算基态的能量. 显然, 结果为

$$E_0 = \langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_j (2j+1)\epsilon_j v_j^2 - \Delta^2/G - G\sum_j \Omega_j v_j^4 \,. \tag{7.49}$$

7.3.1 BCS 理论可靠性

下面我们检验BCS 方法的近似程度. 我们处理一个简单系统, 令所有的单粒子能级简并, 此时可以得到对力哈密顿量的解, 然后与BCS 的结果进行比较. 单粒子能级简并的对力哈密顿量的形式为

$$H = \epsilon \sum_j N_j - G S_+ S_- \,, \quad S_\pm = \sum_j S_\pm(j) \,.$$

首先看严格的解. 这个对力方程在单粒子能级简并情形下seniority 理论适用. 可以直接用seniority 结果推广得到, 也就是说, 单轨道情况下seniority 方法的所有推导都可以直接用于单粒子能量简并的对力哈密顿量情况. 此时容易验证

$$[S_+S_-] = N - \Omega \, , \quad N = \sum_j N_j \, , \quad \Omega = \sum_j \Omega_j \, ,$$

式中$N = 2n$总的价核子数算符. 上式与式(7.6) 形式上完全一样. 因为对力只对于自旋为零的核子对(seniority 等于零)贡献一个负的能量, 系统基态seniority一定为零, 基态波函数为

$$\psi = \sqrt{\frac{2^N(2\Omega - N)!!}{N!!(2\Omega!!)}}(S_+)^n|0\rangle \, . \tag{7.50}$$

对应的基态能量为

$$E_0(\text{seniority}) = \langle\psi|H|\psi\rangle = N\epsilon - \frac{G}{4}N(2\Omega - N + 2) \, . \tag{7.51}$$

上面两式分别可以从式(7.25) 和(7.23) 得到; 当然也可以按照那里的套路再直接求解一遍.

下面看BCS 的结果. 根据式(7.46), v_j 是与j 无关的常量, 根据式(7.40), $v_j^2 = N_j/(2j+1) = \frac{N}{2\Omega}$, 因此$u_j = [(1 - N/(2\Omega)]$. 我们容易计算$\Delta$ 的值,

$$\begin{aligned}
\Delta^2 &= \left(G\sum_j\sqrt{\frac{N}{2j+1}\cdot\frac{(2j+1)-N}{2j+1}}\right)^2 = G^2\Omega^2\frac{N}{2\Omega}\left(1 - \frac{N}{2\Omega}\right) \\
&= \frac{G^2N\Omega}{2}\left(1 - \frac{N}{2\Omega}\right) \, .
\end{aligned} \tag{7.52}$$

把这些结果代入BCS 基态能量公式(7.49)中,

$$\begin{aligned}
E_0(\text{BCS}) &= \epsilon N - \frac{G^2N\Omega}{2}\left(1 - \frac{N}{2\Omega}\right)\cdot\frac{1}{G} - G\Omega\left(\sqrt{\frac{N}{2\Omega}}\right)^4 \\
&= \epsilon N - \frac{GN\Omega}{2}\left(1 - \frac{N}{2\Omega}\right) - G\Omega\left(\frac{\Omega}{2N}\right)^2 \\
&= \epsilon N - \frac{GN}{4}\left(2\Omega - N + \frac{N}{\Omega}\right) \, .
\end{aligned}$$

比较上式和式(7.51) 能量差异, 两体部分的相对偏离结果为

$$\frac{E_0(\mathrm{BCS})-E_0(\mathrm{seniority})}{\frac{G}{4}N(2\Omega-N+2)}=\frac{2-\frac{N}{\Omega}}{2\Omega-N+2}\,.$$

可以看出, 当N 小于半满壳时, 分母值比较大而分子上的值一直不大，所以这相对误差不大的. 上式中我们忽略了单粒子项, 因为单粒子项的对比根本没有什么意思, 该项的结果总归是完全一致的.

再看BCS 波函数, 式(7.35)的ψ 不满足粒子数守恒, 其中包含了0个核子、2个核子、4个核子$\cdots$、2Ω 个核子的成分, 其中粒子为$N=2n$ 的状态为

$$\begin{aligned}\psi &= \prod_j u_j^{\Omega_j}\exp\left(\sum_j\frac{v_j}{u_j}S_j^\dagger\right)|0\rangle\\ &\to \left(\sqrt{1-\frac{N}{2\Omega}}\right)^{\Omega}\left(\sqrt{\frac{N}{2\Omega-N}}S_+\right)^{n}|0\rangle\\ &= \left(\sqrt{1-\frac{N}{2\Omega}}\right)^{\frac{\Omega-n}{2}}\left(\frac{N}{2\Omega}\right)^{n/2}(S_+)^n|0\rangle\,. \end{aligned}\tag{7.53}$$

除了归一化系数差异外(上式右边没有归一化, 我们仅仅考虑了总波函数中N 个粒子成分) 完全一致. 换句话说, 我们计算能量时给出误差的唯一来源是因为粒子数不守恒造成的. Kerman 等人指出, 即使单粒子能量不简并, 这个结论也很好地成立. 对于一般情况下的G 参数, BCS 波函数对应的基态能量与精确结果的误差在500 keV 以内. **特别是如果我们考虑了确定的粒子数之后再计算基态能量, 那么得到的能量与精确结果非常接近**. 因此BCS 波函数是处理对力哈密顿量一个很好的方法.

我们需要说明的是, 在seniority 理论中, seniority 量子数v 相同的态具有相同的能量, 是简并的. 在实际问题中则并非如此, 其原因是对力哈密顿量太简单了, 下面我们将讨论, BCS 理论还是能用来处理这些比较真实的情况.

7.4 准粒子方法

BCS 波函数很好地给出单满壳的偶偶核基态, 我们可以把它看作准粒子的“真空态”. 准粒子消灭算符的定义为

$$\alpha_{jm}|\psi(\mathrm{BCS})\rangle=0\,.\tag{7.54}$$

准粒子算符是核子产生和消灭算符的一个线性组合,

$$\alpha_{jm} = Aa_{jm} + Ba^\dagger_{j\ -m} \,. \tag{7.55}$$

把上式代入式(7.54) 中,

$$\begin{aligned} 0 &= \alpha_{j_1m_1}|\psi(\mathrm{BCS})\rangle \\ &= \prod_{jm}{}' \left(u_j + (-)^{j-m}v_j a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j-m}\right) \alpha_{j_1m_1} \left(u_{j_1} + (-)^{j_1-m_1}v_{j_1} a^\dagger_{j_1m_1}a^\dagger_{j_1-m_1}\right)|0\rangle \\ &= \prod_{jm}{}' \left(u_j + (-)^{j-m}v_j a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j-m}\right) \left(Bu_{j_1} + (-)^{j_1-m_1}Av_{j_1}\right) a^\dagger_{j_1-m_1}|0\rangle \,, \end{aligned}$$

上式成立所需要的条件是

$$\left(Bu_{j_1} + (-)^{j_1-m_1}Av_{j_1}\right) a^\dagger_{j_1-m_1}|0\rangle = 0 \,.$$

上式中我们如果取$A = u_{j_1}$, $B = -(-)^{j_1-m_1}v_{j_1}$ 显然能满足这一条件. 我们就取这个A、B 值. 把这个结果代入式(7.56), 我们得到准粒子消灭算符形式为

$$\alpha_{jm} = u_j a_{jm} - (-)^{j-m} v_j a^\dagger_{j\ -m} \,. \tag{7.56}$$

上式的厄米共轭给出准粒子产生算符形式

$$\alpha^\dagger_{jm} = u_j a^\dagger_{jm} - (-)^{j-m} v_j a_{j\ -m} \,. \tag{7.57}$$

我们可以把这两个算符作逆变换, 即用准粒子算符表示粒子算符,

$$a^\dagger_{jm} = u_j\alpha_{jm} + (-)^{j-m}v_j\alpha_{j\ -m} \,, \tag{7.58}$$

$$a_{jm} = u_j\alpha_{jm} + (-)^{j-m}v_j\alpha^\dagger_{j\ -m} \,. \tag{7.59}$$

容易验证

$$\begin{aligned} &\alpha^\dagger_{jm}\alpha^\dagger_{j'm'} + \alpha^\dagger_{j'm'}\alpha^\dagger_{jm} = 0 \,, \\ &\alpha_{jm}\alpha_{j'm'} + \alpha_{j'm'}\alpha_{jm} = 0 \,, \\ &\alpha^\dagger_{jm}\alpha_{j'm'} + \alpha^\dagger_{jm}\alpha_{j'm'} = (u_j^2 + v_j^2)\delta_{jj'}\delta_{mm'} = \delta_{mm'} \,. \end{aligned}$$

可见, 准粒子的对易关系和一般费米子对易关系在形式上完全一致, 这正是其名称来源.

我们可以证明, 一个准粒子态对应seniority 量子数等于1 的本征态.

$$
\begin{aligned}
& \alpha_{j_1 m_1}^{\dagger}|\psi(\mathrm{BCS})\rangle \\
= & \prod_{jm}{}^{\prime}\left(u_j+(-)^{j-m} v_j a_{jm}^{\dagger} a_{j-m}^{\dagger}\right)\left(u_j \alpha_{jm}^{\dagger}-(-)^{j-m} v_j \alpha_{j\,-m}\right) \\
& \qquad \left(u_{j_1}+(-)^{j_1-m_1} v_{j_1} a_{j_1 m_1}^{\dagger} a_{j_1-m_1}^{\dagger}\right)|0\rangle \\
= & \prod_{jm}{}^{\prime}\left(u_j+(-)^{j-m} v_j a_{jm}^{\dagger} a_{j-m}^{\dagger}\right)\left(u_{j_1}^2+v_{j_1}^2\right) a_{j_1 m_1}^{\dagger}|0\rangle \\
= & \frac{1}{u_{j_1}} \prod_{jm}\left(u_j+(-)^{j-m} v_j a_{jm}^{\dagger} a_{j-m}^{\dagger}\right)|0\rangle,
\end{aligned} \tag{7.60}
$$

式中连乘号上撇号指的是连乘中不包括j_1、$m_1>0$, 上式倒数第二步利用了$a_{j-m}a_{j-m}^{\dagger}|0\rangle=|0\rangle$, 最后一步利用了Pauli 原理. 从上式看到, 一个准粒子态有一个未配对核子, seniority 量子数为1, 可以近似描写奇质量数原子核seniority 为1 的态.

类似地我们可以证明, 二个准粒子态当总角动量不为零时对应于seniority 量子数等于2 的态, 当角动量为零时对应于seniority 等于零的状态. 应用式(7.60)我们可得

$$
\begin{aligned}
& \alpha_{j_2 m_2}^{\dagger}\alpha_{j_1 m_1}^{\dagger}|\psi(\mathrm{BCS})\rangle \\
= & \prod_{jm}{}^{\prime\prime}\left(u_j+(-)^{j-m} v_j a_{jm}^{\dagger} a_{j-m}^{\dagger}\right) a_{j_2 m_2}^{\dagger} a_{j_1 m_1}^{\dagger}|0\rangle,
\end{aligned} \tag{7.61}
$$

式中连乘号上双撇号指的是连乘中不包括j_1、$m_1>0$ 和j_2、$m_2>0$, $(j_1m_1)\neq(j_2m_2)$. 上式为非耦合表象, 因为系统总角动量是好量子数, 因此上式结果为

$$
\begin{aligned}
& \alpha_{j_2 m_2}^{\dagger}\alpha_{j_1 m_1}^{\dagger}|\psi(\mathrm{BCS})\rangle \\
= & \sum_{IM} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{IM} \prod_{jm}{}^{\prime\prime}\left(u_j+(-)^{j-m} v_j a_{jm}^{\dagger} a_{j-m}^{\dagger}\right)\left(a_{j_2}^{\dagger} a_{j_1}^{\dagger}\right)_M^{(I)}|0\rangle .
\end{aligned} \tag{7.62}
$$

$I=0$ 时上式为seniority 量子数为零、$I\neq0$ 时为seniority 量子数等于2. 多j 轨道存在时, 直接做壳模型计算比较麻烦, 利用seniority 量子数为2 的方法构造基矢, 可以近似得到哈密顿量的本征态.