

# 轴对称变形核结构的微观描述\*

刘树新, 雷奕安, 曾谨言  
(北京大学物理学院)

一 引言.....	1
二 原子核单粒子能级	
2.1 Mayer-Jensen 的强自旋-轨道耦合壳模型.....	3
2.2 轴对称变形核的单粒子能级 Nilsson 能级系.....	4
三 推转壳模型	
3.1 Inglis 推转壳模型.....	13
3.2 推转 Nilsson 能级.....	16
四 原子核的对关联	
4.1 原子核对关联的实验证据.....	21
4.2 轴对称变形核对关联的 BCS 方法.....	22
4.3 原子核对关联的 BCS 方法的严重困难.....	24
五 原子核对关联的粒子数守恒方法	
5.1 单粒子能级截断与多粒子组态截断.....	27
5.2 原子核对关联的粒子数守恒方法.....	29
参考文献.....	36

---

\*本讲义可作为原子核结构实验和理论领域的研究生的基础读物, 主要介绍此领域的重要的实验结果的分析以及现有理论和实验结果的比较和有待解决的关键问题。学员可先进行自学, 然后提出问题进行讨论。希望学员通过这阶段学习, 能较快进入前沿领域的研究。

# 一 引言

原子核是由有强相互作用的若干质子和中子组成的复杂的多粒子体系，相应的Schrödinger方程的严格求解是不可能的，所以任何微观的理论分析都必须采用某种近似模型和近似计算方法<sup>[1]</sup>。事实上，现有的有关核结构的所有微观理论的出发点几乎都离不开独立粒子模型。作为一个最粗糙（简单）的近似，独立粒子模型把原子核看成若干质子和中子在某种平均场中运动，但忽略彼此的相互作用。此平均场来源于粒子之间相互作用的长程力部分<sup>[2]</sup>。在平均场中运动的单粒子的能级系，由于某种对称性，往往存在集束（bundling）现象，即能级的分布不均匀，出现某种壳结构。由于核子之间的短程强相互作用不同于原子中的电子之间的长程Coulomb排斥力，原子核内的平均场和壳结构不同于原子中电子的平均场与壳结构。原子核由两种不同的Fermi（质子和中子）组成，各自遵守Pauli原理，所以原子核中分别存在质子壳和中子壳。M. G. Mayer和J. H. D. Jensen（1949）提出的自旋-轨道壳模型对此作了很成功的概括<sup>[3]</sup>。研究表明，对于不太重的原子核，质子之间的Coulomb排斥力的影响比强作用小得多，质子壳和中子壳结构差别还不太显著。但对于重核，质子壳和中子壳就有很大差异。

作为初步的近似，原子内的电子的平均场（屏蔽Coulomb场）以及原子核内质子和中子的平均场，都被视为中心力场。中心力场的满壳结构的多粒子体系的空间分布是球对称的，即满壳核，特别是双满壳核（如 $^{16}_8\text{O}$ ， $^{40}_{20}\text{Ca}$ ， $^{48}_{20}\text{Ca}$ ， $^{208}_{82}\text{Pb}$ 等），是球形核。在满壳之外有少数核子的原子核，可能围绕球形做小振动，表现为低激发振动能级。而在满壳之外有较多核子的原子核，可能存在稳定变形，而且当形变度不太小时，稳定变形核呈轴对称变形。除了几个较小的轻变形核区外，在稀土区（ $A \sim 150-190$ ）和锕系区（ $A > 225$ ），系统观测到大量的具有稳定轴对称变形的原子核（包括四极和十六极轴对称形变）。S. G. Nilsson对于轴对称变形势中的单粒子能级的分布和能级结构作了系统的研究<sup>[4]</sup>。现今任何一个研究变形核的实验工作者，手边必定离不开这一套Nilsson能级系。对轴对称变形核的任何微观理论描述，也无不以之作为出发点。

对于一个球对称的量子力学体系，谈不上转动。对于轴对称变形原子核（取对称轴为 $z$ 轴），则可以绕垂直于对称轴的任何一轴（通常取为 $x$ 轴）转动。在稳定轴对称变形核中，已观测到大量的转动谱，与双原子分子的转动谱类似。在二十世纪50年代初，A. Bohr与B. R. Mottelson对此做了系统的研究工作<sup>[5]</sup>。表征原子核转动谱的一个基本的力学量，即转动惯量 $J$ 。D. R. Inglis（1954）提出了推转模型，并用微扰论计算了轴对称变形核的转动惯量<sup>[6]</sup>。如不计及核子之间的剩余相互作用（独立粒子模型），并采用推转轴对称变形谐振子势，则计算出的转动惯量值近似为刚体值 $J_{\text{计}} \approx J_{\text{刚}}$ 。计及强自旋-轨道作用的推转Nilsson势的计算结果，也与刚体值接近（这将在第三节中介绍）。但实验结果却显示，原子核转动惯量远小于

刚体值， $J_{\text{实}} \sim \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4}\right) J_{\text{刚}}$ ，这是一个很尖锐的矛盾。Bohr, Mottelson & Pines对原子核的

各种实验资料进行了全面分析后提出<sup>[7]</sup>：原子核内核子之间（特别是中子-中子，质子-质子之间）存在很强的对关联，而这种对相互作用来源于二体力中的极端短程力部分。在他们工作的启发下，一些人相继把当时刚提出不久的处理金属超导性的BCS理论和Bogoliubov-Valatin的准粒子-粒子变换移植到核结构理论中来<sup>[8]</sup>。特别是，在计及核子之间的强对关联后，用Inglis推转模型计算出的轴对称变形核的转动惯量，与刚体值相比，有大

幅度减小。一般说来,  $J_{\text{计}} \sim J_{\text{实}}^{[9]}$ 。这个重要成果是原子核内核子之间存在强对关联的一个重要证据。从物理上讲, 这是由于核子之间强对关联导致原子核低内部激发谱中存在一个较大的能隙 ( $\sim 1\text{MeV}$ )。

在原子核对关联的 BCS 方法取得重要成果的同时, 从二十世纪 60 年代起, 就相继有人对于原子核对关联的 BCS 处理方法存在的严重缺陷以及与某些实验结果的尖锐矛盾, 进行了系统的研究, 这将在第四节中介绍。在第五节中介绍处理原子核对关联的粒子数守恒方法。

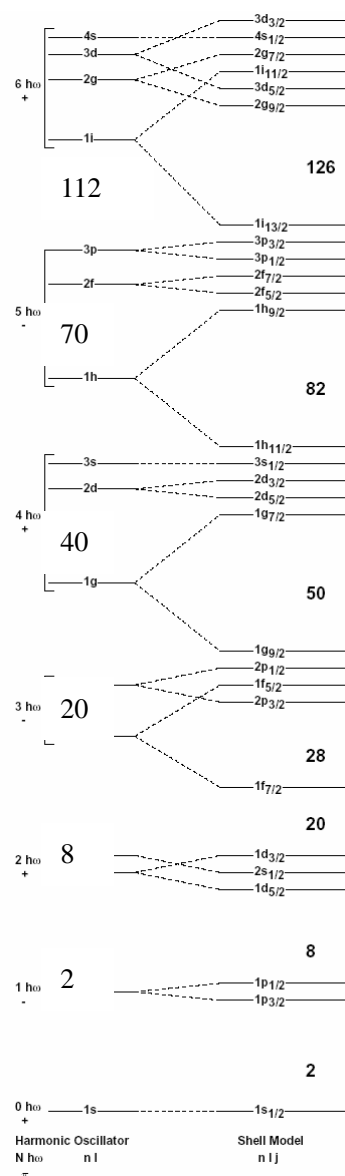
## 二 原子核单粒子能级

### 2.1 Mayer-Jensen 的强自旋-轨道耦合壳模型

40 年代末, Mayer & Jensen 提出了强自旋-轨道耦合壳模型<sup>[3]</sup>, 即在球形谐振子势中加上一项强自旋轨道耦合  $-C\vec{s} \cdot \vec{l}$  ( $C > 0$ )。此模型对实验观测到的原子核幻数给出了很满意的说明 (见图 2.1)。强自旋-轨道耦合作用, 对高轨道角动量  $l$  能级产生较大影响, 使  $j = l + 1/2$  能级有很大下降, 从而改变了原来球形谐振子势的壳层结构。由于高  $j$  ( $= l + 1/2 = N + 1/2, N \geq 3$ ) 能级 ( $f_{7/2}, g_{9/2}, h_{11/2}, i_{13/2}, j_{15/2}$ , 后来被称为高  $j$  闯入态)

的大幅度下降, 使幻数结构相对于球形谐振子势而言, 发生了较大变化<sup>[10]</sup> (见图 2.1), 即壳结构相应的幻数变化如下:

球形谐振子势	2, 8, 20, 40, 70, 112, ...
强自旋轨道耦合壳模型	2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, ...



## 2.2 轴对称变形核的单粒子能级 Nilsson 能级系

50 年代后, 原子核的形变被人们观测到<sup>[5]</sup>。人们发现, 幻数附近的原子核近似呈球形。离开幻数稍远的原子核就开始发生变形, 但并不稳定, 表现为在低激发谱中出现振动的特征。离开幻数较远的原子核则具有稳定变形, 而且它们中的大多数都具有轴对称性, 具有较大的内禀电四极矩  $Q_0$ 。这现象意味着, 原子核壳结构已发生了较大改变。人们不难理解, 轴对称变形谐振子势的能级结构, 将不同于球形谐振子势。Nilsson 能级系就是具有强自旋轨道耦合的轴对称变形谐振子势中的能级系<sup>[4]</sup>。现在我们就来研究 Nilsson 能级, 它是研究稳定变形核微观结构的基础。首先分析一下轴对称谐振子势中的单粒子能级。

轴对称谐振子势的单粒子能级

取对称轴为  $z$  轴, Hamilton 量为

$$\begin{aligned} h &= h_{xy} + h_z \\ h_z &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} M \omega_z^2 z^2 \\ h_{xy} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} M \omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) \quad (\text{直角坐标系}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{1}{2} M \omega_{\perp}^2 \rho^2 \quad (\text{平面极坐标系}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$h_{xy}$  就是二维各向同性谐振子的哈密顿量。当  $\omega_{\perp} = \omega_z$  时,  $h$  还原为球形谐振子。

波函数可取为力学量完全集  $(h, h_z, l_z)$  的共同本征态。本征态记为  $|N n_z \Lambda\rangle$ , 其中  $|N \Lambda\rangle$  是二维各向同性谐振子 ( $h_{xy}$ ) 的能量本征态,  $N = n + n_z$ ,  $n = n_x + n_y$  (直角坐标系), 或  $n = 2n_{\rho} + |\Lambda|$  (平面极坐标系)。  $n_x, n_y, n_z, n_{\rho}, n = 0, 1, 2, \dots$ , 而对给定的  $n$ ,  $|\Lambda| = n, n-2, \dots, 1$  ( $n$  为奇数) 或 ( $n$  为偶数)。在给定  $N$  时,  $n = N - n_z = N, N-1, \dots, 1, 0$ 。

以上未计及核子的自旋自由度。当计及自旋时, 守恒量完全集可选为  $(h, h_z, l_z, s_z)$ , 相应的本征态记为  $|N n_z \Lambda \Sigma\rangle$ ,  $\Sigma = \pm 1/2$  表示核子自旋沿  $z$  轴的分量。单核子总角动量的  $z$  分量  $j_z = l_z + s_z$  的本征值记为  $\Omega = \Lambda + \Sigma$ 。在计及自旋轨道耦合之后, 只有  $j_z$  才是守恒量,  $\Omega$  为好量子数。

Nilsson 能级

Nilsson 哈密顿量取为

$$h_{Nil} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla'^2 + \frac{1}{2}M[\omega_\perp^2(x'^2 + y'^2) + \omega_z^2 z'^2] - C\vec{s} \cdot \vec{l} - D\vec{l}^2 \quad (2.2)$$

式中  $C, D > 0$ 。  $-C\vec{s} \cdot \vec{l}$  描述核子的强自旋-轨道耦合，  $-D\vec{l}^2$  是对球形谐振子势的一个修改，它使得角动量量子数  $l$  愈大的能级下降得愈厉害，使球形谐振子势（具有  $SU_3$  对称性）的能级的  $l$  简并解除，这样得出的单粒子能级分布更接近无限深球方势阱的单粒子能级分布（参见文献[10]，p318）。对于 Nilsson 哈密顿量，  $l_z$  和  $s_z$  不再为守恒量，但  $j_z = l_z + s_z$  和宇称仍为守恒量。但当形变很大（  $\omega_\perp \gg \omega_z$  或  $\omega_z \gg \omega_\perp$  ）时，可以忽略式（2.2）右边最后两项，Nilsson 势还原为轴对称谐振子势，仍可以用  $(h, h_z, l_z, s_z)j_z$  的量子数  $(Nn_z\Lambda\Sigma)\Omega$ ，或  $(Nn_z\Lambda)\Omega$  来标记量子态，其中  $\Sigma = \Omega - \Lambda$ 。这种标记称为大变形极限下的量子态标记。由于 Nilsson 能级都是二重简并，习惯上取  $\Omega > 0$ ，二重简并态分别用  $\pm\Omega$  标记。在有限形变的情况下，只有  $\Omega$  和宇称  $\pi$  是好量子数，而宇称  $\pi = (-)^N$ 。最低的几条 Nilsson 能级的标记见表 2.1。图 2.2 右侧给出了 Nilsson 能级  $\Omega(Nn_z\Lambda)$  的分布示意图。

表 2.1 最低几条 Nilsson 能级的大形变极限标记

$N$	对应球形核的能级	$n_z$	$(Nn_z\Lambda\Sigma)\Omega$
0	$0s_{1/2}$	0	$(000\uparrow)1/2$
1	$0p_{3/2}$	1	$(110\uparrow)1/2$
		0	$(101\uparrow)3/2$
	$0p_{1/2}$	0	$(101\downarrow)1/2$
2	$0d_{5/2}$	2	$(220\uparrow)1/2$
		1	$(211\uparrow)3/2$
		0	$(202\uparrow)5/2$
	$1s_{1/2}$	1	$(211\downarrow)1/2$
	$0d_{3/2}$	0	$(200\uparrow)1/2$
		0	$(202\downarrow)3/2$

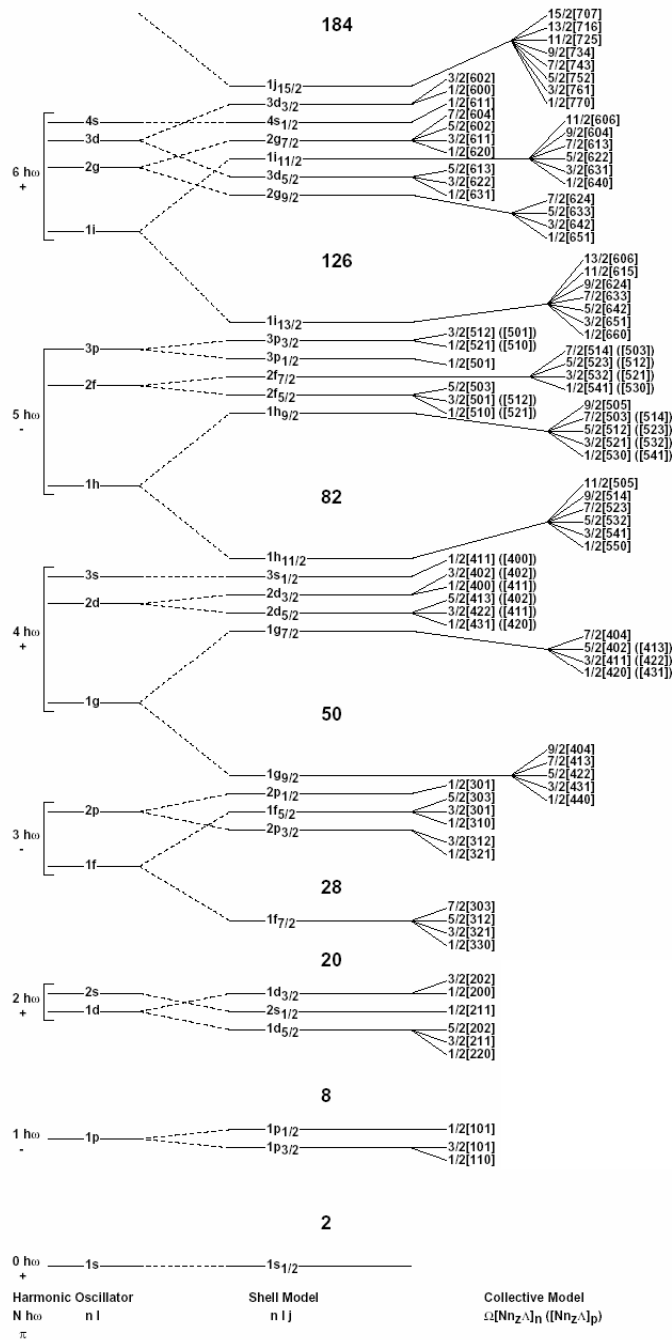


图 2.2 Nilsson 能级  $\Omega(Nn_z\Lambda)$  的分布示意图 (取自文献[11])

Nilsson 能级和波函数的求解，要采用合适的表象，使  $h_{Nil}$  对角化。通常选用  $(h_0, \bar{l}^2, l_z, s_z)$  的共同本征态为基矢的表象， $h_0$  是球形谐振子的哈密顿量。其目的是便于参数  $C$  和  $D$  的选择，并要求在形变  $\rightarrow 0$  时，所得出的能级与球形核的壳模型 (Mayer & Jensen) 能级一致。

为了描述具有轴对称形变的原子核，Nilsson 最初引进了形变参数  $\delta$  和谐振子势参数  $\omega_0$

(代替  $\omega_{\perp}$  和  $\omega_z$ )

$$\omega_{\perp}^2 = \omega_0^2 \left(1 + \frac{2}{3} \delta\right), \quad \omega_z^2 = \omega_0^2 \left(1 - \frac{4}{3} \delta\right) \quad (2.3)$$

原子核发生形变时，原子核的体积仍然保持不变（忽略  $-C\vec{s} \cdot \vec{l}$  和  $-D\vec{l}^2$  两个修正项的影响），这就要求  $\omega_x \omega_y \omega_z = \text{常数}$ ，因而  $\omega_0$  与  $\delta$  有如下关系<sup>[4]</sup>

$$\omega_0(\delta) = \omega_0 \left(1 - \frac{4}{3} \delta^2 - \frac{16}{27} \delta^3\right)^{-1/6} \quad (2.4)$$

其中  $\omega_0$  对应  $\omega_0(\delta)$  形变为零时的值。这样定义的  $\delta$  与 Bohr & Mottelson 的书<sup>[5]</sup>中定义的四极形变参数  $\beta$ ，在一阶近似下，有下列关系

$$\delta \approx \frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \approx 0.95 \beta \quad (2.5)$$

引入新坐标

$$x = \sqrt{\frac{M\omega_0}{\hbar}} x', \quad y = \sqrt{\frac{M\omega_0}{\hbar}} y', \quad z = \sqrt{\frac{M\omega_0}{\hbar}} z', \quad (2.6)$$

Nilsson 哈密顿量可以分解成球对称的项  $h_0$  和描述形变的项  $h_{\delta}$

$$\begin{aligned} h_{Nil} &= h_0 + h_{\delta} \\ h_0 &= \frac{1}{2} \hbar \omega_0 (-\nabla^2 + r^2) \\ h_{\delta} &= -\delta \hbar \omega_0 \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{5}} r^2 Y_{20} \end{aligned} \quad (2.7)$$

更为常用的另一种形变参数是  $\varepsilon$  和  $\omega_0(\varepsilon)$

$$\omega_{\perp} = \omega_0(\varepsilon) \left(1 + \frac{1}{3} \varepsilon\right), \quad \omega_z = \omega_0(\varepsilon) \left(1 - \frac{2}{3} \varepsilon\right) \quad (2.8)$$

两种形变参数  $\varepsilon$  和  $\delta$  存在如下关系： $\varepsilon = \delta + \frac{1}{6} \delta^2 + O(\delta^3)$ 。引进拉伸坐标系（stretched coordinates），

$$\xi = \sqrt{\frac{M\omega_{\perp}}{\hbar}} x', \quad \eta = \sqrt{\frac{M\omega_{\perp}}{\hbar}} y', \quad \zeta = \sqrt{\frac{M\omega_z}{\hbar}} z', \quad (2.9)$$

准确到形变参数  $\varepsilon$  的一阶近似，Nilsson 谐振子势可表示成四极形变的形式



$$V_{osc} = \frac{1}{2} \hbar \omega \left( \rho^2 - \frac{2}{3} \varepsilon \rho^2 P_2(\cos \theta_t) \right) \quad (2.10)$$

其中  $\theta_t$  代表拉伸坐标系中的角变量，而  $\rho^2 = \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2$ 。这样，我们就可以方便地引进更高阶的形变：例如十六极形变  $\varepsilon_4 \rho^2 P_4(\cos \theta_t)$ ，六十四极形变  $\varepsilon_6 \rho^2 P_6(\cos \theta_t)$ ，八极形变  $\varepsilon_3 \rho^2 P_3(\cos \theta_t)$  等。形变项包含  $\rho^2$  是为了更容易地写出原子核体积守恒的条件。包含四极和十六极形变的 Nilsson 哈密顿量可表示为

$$h_{Nil} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0(\varepsilon, \varepsilon_4) \left[ -\nabla^2 + \frac{1}{3} \varepsilon \left( \frac{2\partial^2}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) + \rho^2 - \frac{2}{3} \varepsilon \rho^2 P_2(\cos \theta_t) + 2\varepsilon_4 \rho^2 P_4(\cos \theta_t) \right] - 2\kappa \hbar \omega_0 \left( \vec{l}_t \cdot \vec{s} - \mu(\rho^4 - \langle \rho^4 \rangle_N) \right) \quad (2.11)$$

对于只包含四极形变以及还包含十六极形变的 Nilsson 哈密顿量，我们都可以选取球形谐振子势的力学量完备集  $(\hbar_0 \vec{l}^2 l_z s_z)$  的共同本征态  $|N\Lambda\Sigma\rangle$  为表象，计算出与形变和修正项有关的矩阵元，然后把 Nilsson 哈密顿量对角化以求出它的本征值和本征态。图 2.3 和 2.4 展示了稀土区中子和质子 Nilsson 能级位置随四极和十六极形变参数变化的情况



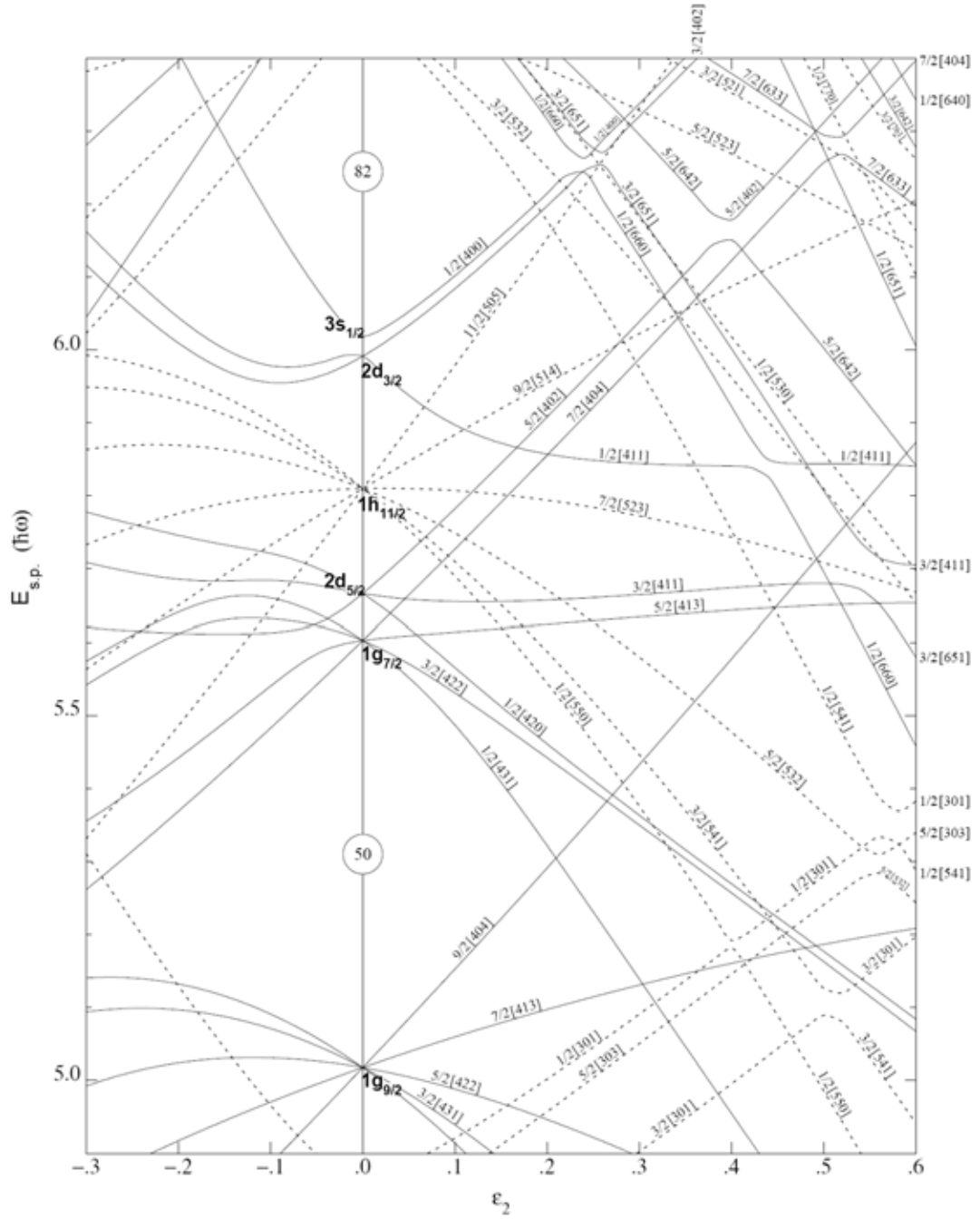


图 2.4  $Z=66$  附近质子能级位置随形变参数变化的情况 (取  $\varepsilon_4 = \varepsilon_2^2 / 6$ ,  $\varepsilon_2$  即四极形变  $\varepsilon$ ), 取自文献[11]。

#### Lund 系统学

为了研究实际的轴对称变形原子核, 需要确定 Nilsson 哈密顿量中的几组重要的参数: 与原子核体积有关的参数  $\omega_0$ , 与形变有关的四极形变和十六极形变参数 ( $\varepsilon_2, \varepsilon_4$ ), 以及修正谐振子势的 ( $\kappa, \mu$ )。目前实验上已经积累了关于轴对称变形核能级的大量数据, 特别是  $\beta$  稳定线附近的核素。通过对这些实验数据的系统分析, 人们已经找到了, 对于不同的质

量区 A，比较合适的参数值，习惯上称为 Lund 系统学。

质量数为 A 的原子核对应的谐振子频率  $\omega_0$ ，通常选取为与同位旋  $T_z = (N - Z)/2$  有关的下列公式

$$\hbar\omega_0 = 41A^{-1/3} \left[ 1 \pm \frac{N - Z}{3A} \right] \text{MeV} \quad (2.12)$$

这里负号用于质子，正号用于中子。此式可以用核电荷半径  $R_c$  的  $Z^{1/3}$  律给予说明。

$$R_c = r_{0p} Z^{1/3}, \quad r_{0p} = 1.634 \times 10^{-13} \text{cm} \quad (2.13)$$

Nilsson哈密顿量中两个壳参数  $(\kappa, \mu)$  的选取是为了能够重现稀土区 ( $A \approx 165$ ) 和铜系区 ( $A \approx 242$ ) 的实验能级图<sup>[4]</sup>，其它核素  $(\kappa, \mu)$  的取值用线性内插法确定。

$$\text{中子} \begin{cases} \mu_n = 0.624 - 1.234 \frac{A}{1000} \\ \kappa_n = 0.0641 - 0.0026 \frac{A}{1000} \end{cases} \quad (2.14)$$

$$\text{质子} \begin{cases} \mu_p = 0.493 + 0.649 \frac{A}{1000} \\ \kappa_p = 0.0766 - 0.0779 \frac{A}{1000} \end{cases} \quad (2.15)$$

形变参数  $(\varepsilon_2, \varepsilon_4)$  代表了原子核基态的平衡形变，其具体取值则要求更好地符合实验能谱。稀土区正常形变核的  $(\varepsilon_2, \varepsilon_4)$  系统学，参见图 2.5。

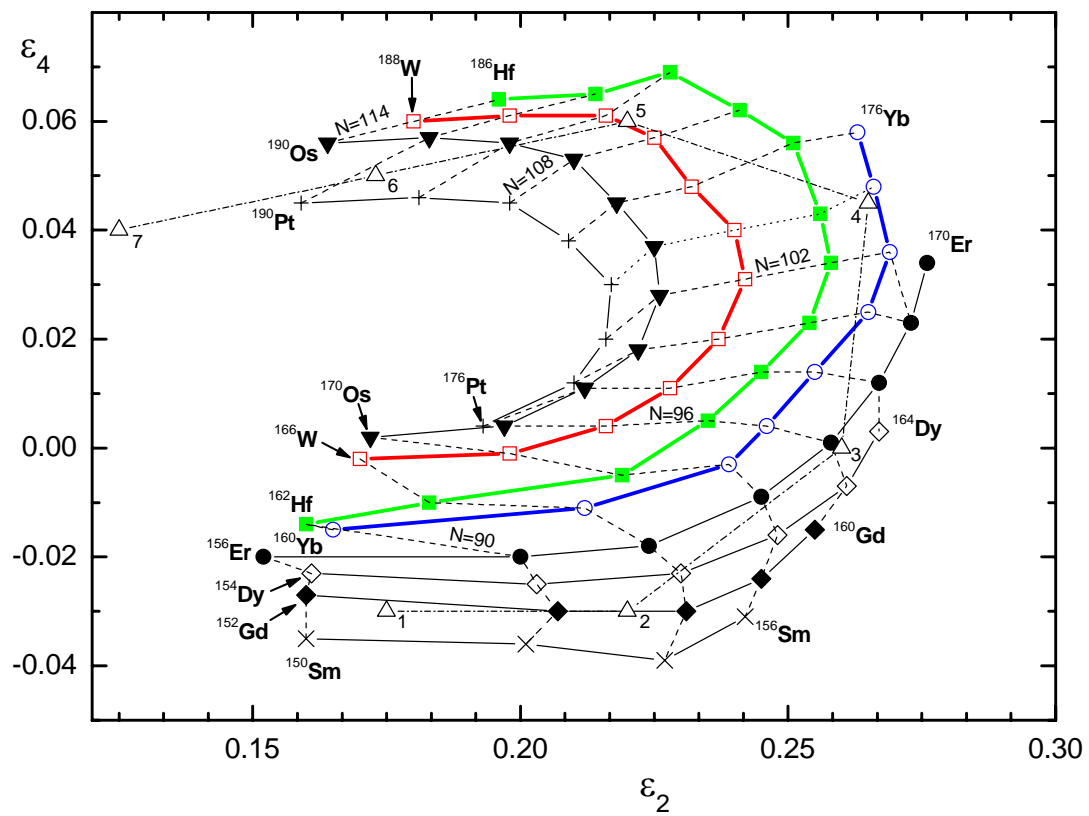


图 2.5 稀土区正常形变核的  $(\epsilon_2, \epsilon_4)$  Lund 系统学, 参见文献[12]。

### 三 推转壳模型

#### 3.1 Inglis 推转壳模型

推转壳模型CSM (Cranked shell model) 是D. R. Inglis于 1954 年引进的<sup>[6]</sup>, 用来分析原子核的转动惯量, 现简介如下。

为确切起见, 考虑一个轴对称变形核, 对称轴取为  $z$  轴, 先不考虑原子核的转动。在独立粒子模型中, 诸粒子各自在一个静势场中运动, 单粒子 Hamilton 量表示为

$$h_0 = T + V(x, y, z) \quad (3.1)$$

$T$  为动能算符,  $V(x, y, z)$  不显含  $t$ , 例如取为 Nilsson 势, 即修正了的谐振子势

$$h_{Nil} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + \frac{1}{2} M [\omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2] - C \vec{s} \cdot \vec{l} - D \vec{l}^2 \quad (3.2)$$

设原子核被推转, 以常角频率  $\omega$  绕  $x$  轴旋转 (见图 3.1)。

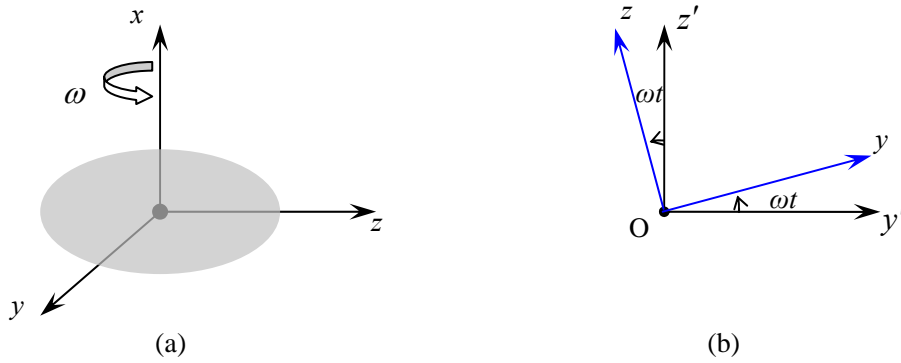


图 3.1

设随原子核一起旋转的参考系为  $\Sigma$ , 称为本体坐标系 (body-fixed frame), 也称为转动参考系 (rotating frame)。设实验室参考系为  $\tilde{\Sigma}$ , 在  $\tilde{\Sigma}$  中, 原子核势场在不断旋转, 它显含时间  $t$ , 是一个非静势, Hamilton 量显含  $t$ , 相应的 Schrödinger 方程的求解比较麻烦。与此相反, 在  $\Sigma$  参考系中, 原子核势场不随时间  $t$  变化, 相应的 Hamilton 量不显含  $t$ , 求解其能量本征方程比较容易。

设在实验室参考系  $\tilde{\Sigma}$  中单粒子态为  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ , 单粒子 Hamilton 量记为  $\tilde{h}(t)$ , 显含  $t$ 。Schrödinger 方程表示为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{h}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (3.3)$$

设在本体坐标系  $\Sigma$  中, 单粒子态记为  $|\psi(t)\rangle$ , 令<sup>[13]</sup>

$$|\tilde{\psi}\rangle = e^{-i\omega \mathbf{j}_x / \hbar} |\psi\rangle \quad (3.4)$$

代入式 (3.3), 得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \{e^{-i\omega j_x / \hbar} |\psi\rangle\} = e^{-i\omega j_x / \hbar} \left\{ \omega j_x |\psi\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \right\} = \tilde{h} e^{-i\omega j_x / \hbar} |\psi\rangle$$

所以

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle + \omega j_x |\psi\rangle = e^{i\omega j_x / \hbar} \tilde{h} e^{-i\omega j_x / \hbar} |\psi\rangle = h |\psi\rangle \quad (3.5)$$

式中

$$h = e^{i\omega j_x / \hbar} \tilde{h} e^{-i\omega j_x / \hbar} \quad (3.6)$$

式 (3.5) 可改写成

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = (h - \omega j_x) |\psi\rangle = h(\omega) |\psi\rangle \quad (3.7)$$

$$h(\omega) = h - \omega j_x \quad (3.8)$$

$h(\omega)$  即本体参考系 (转动参考系) 中的单粒子 Hamilton 量, 称为推转 Hamilton 量, 或称为 Routhian。 $h(\omega)$  不显含  $t$ , 依赖于角频率  $\omega$  ( $\omega$  作为一个参量), 求解能量本征方程

$$h(\omega) |\mu\rangle = e_\mu |\mu\rangle \quad (3.9)$$

即可求出能量本征值  $e_\mu$  和本征态  $|\mu\rangle$ , 它们都依赖于参量  $\omega$ 。当  $h$  中的单粒子势取为 Nilsson 势时,  $h(\omega) = h_{Nil} - \omega j_x$ ,  $e_\mu$  和  $|\mu\rangle$  就是推转的 Nilsson 能级和 Nilsson 态。考虑到

$$e_\mu = \langle \mu | h(\omega) | \mu \rangle = \langle \mu | h_{Nil} | \mu \rangle - \omega \langle \mu | j_x | \mu \rangle \quad (3.10)$$

按照 Hellmann-Feynman 定理 (参阅文献[10], 6.5 节),

$$\frac{de_\mu}{d\omega} = \langle \mu | \frac{\partial h(\omega)}{\partial \omega} | \mu \rangle = -\langle \mu | j_x | \mu \rangle \quad (3.11)$$

$\langle \mu | j_x | \mu \rangle$  称为单粒子角动量沿转动轴 ( $x$  轴) 方向的顺排 (alignment) 角动量, 其值为  $-\frac{de_\mu}{d\omega}$ 。

设有  $N$  个全同 Fermi 子 (中子, 或质子) 组成的多粒子系, 在不计及粒子之间的相互作用时, 多粒子体系的 Hamilton 量为

$$H(\omega) = \sum_i^N h(i) - \omega \sum_i^N j_x(i) = H_0 - \omega J_x \quad (3.12)$$

$$H_0 = \sum_i^N h(i), \quad J_x = \sum_i^N j_x(i)$$

其本征方程表示为

$$H(\omega) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (3.13)$$

能量本征值为

$$E = \sum_{\mu(occ.)} e_{\mu} \quad (3.14)$$

是对被粒子占据的推转单粒子态 $|\mu\rangle$  (Pauli 原理允许下) 的能量 $e_{\mu}$  求和。

在实验室参考系 $\tilde{\Sigma}$  中, 能量记为 $\tilde{E}$  [13],

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \langle \tilde{\psi} | \tilde{H}(t) | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | e^{i\omega J_x / \hbar} \tilde{H} e^{-i\omega J_x / \hbar} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | H(\omega) | \psi \rangle + \omega \langle \psi | J_x | \psi \rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

即

$$\tilde{E} = E + \omega \langle J_x \rangle \quad (3.16)$$

$$\langle J_x \rangle = \langle \psi | J_x | \psi \rangle = \sum_{\mu(occ.)} \langle \mu | j_x | \mu \rangle \quad (3.17)$$

称为原子核总角动量沿转动轴 $x$  方向的“顺排”(alignment)。

在分析原子核转动谱时, 常引进两类转动惯量。第一类转动惯量 $J^{(1)}$ , 也称为运动学(kinematic)转动惯量, 定义为 $\langle J_x \rangle = J^{(1)} \omega$ , 即

$$J^{(1)} = \langle J_x \rangle / \omega \quad (3.18)$$

在独立粒子模型中

$$J^{(1)} = \frac{1}{\omega} \sum_{\mu(occ.)} \langle \mu | j_x | \mu \rangle \quad (3.19)$$

第二类转动惯量 $J^{(2)}$ , 也称为动力学(dynamic)转动惯量, 定义为

$$J^{(2)} = \frac{d}{d\omega} \langle J_x \rangle = \frac{d}{d\omega} (\omega J^{(1)}) \quad (3.20)$$

$J^{(2)}$  常用于分析超变形(SD, superdeformed)转动带。因为很多 SD 转动带的角动量尚未直接测定, 而从实验转动谱提取 $J^{(2)}$  并不需要转动能级的角动量信息。

D. R. Inglis 在推转轴对称谐振子模型(不计及粒子自旋和粒子间的相互作用)中, 求解方程(3.13) (式中 $j_x$  代之为粒子轨道角动量 $l_x$ ), 将 $-\omega l_x$  视为微扰, 在微扰二级近似下, 求出微扰 $-\omega l_x$  对基态能量 $E$  的修正, 再利用式(3.15) 求出 $\tilde{E}$  的二级微扰修正, 并将此能量记为 $\frac{1}{2} J_0 \omega^2$ ,  $J_0$  称为基态带的转动惯量,

$$J_0 = 2\hbar^2 \sum_n \frac{|\langle n | L_x | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0}, \quad L_x = \sum_i l_x(i) \quad (3.21)$$

可以证明, 这样计算出的转动惯量等于刚体值 $J_0 = J_{\text{刚体值}}$  (也可参见文献[9], p153-155)。



如采用推转 Nilsson 势（代替轴对称谐振子势）来计算  $J_0$ ，所得结果略有不同，但  $J_0 \sim J_{\text{刚}}$  的结论仍然不变。

当计及粒子之间的剩余相互作用时，推转 Hamilton 量  $H(\omega)$  中，除了  $H_0$  和  $-\omega J_x$  外，还包含  $H_{\text{int}}$ （粒子之间的剩余相互作用）项（含二体算符），推转能量本征方程（3.13）的求解就十分复杂。即使对于对关联  $H_p$  这样较简单的相互作用，也很难精确求解，国际文献中通常采用粒子-准粒子变换（BCS或HFB）近似方法来处理<sup>[8]</sup>。

### 3.2 推转 Nilsson 能级

在本体（转动）参考系  $\Sigma$  中，单粒子的推转 Nilsson 哈密顿量为

$$h(\omega) = h_{\text{Nil}} - \omega j_x \quad (3.22)$$

$h_{\text{Nil}}$  为 Nilsson 哈密顿量，变形核对称轴取为  $z$  轴，转动轴为  $x$  轴。针对 Nilsson 哈密顿量的轴对称性，我们需要选一个合适的表象，将  $h(\omega)$  对角化。

为求解  $h_{\text{Nil}}$  的本征值和本征函数，Nilsson 选取了球形谐振子基  $|N\Lambda\Sigma\rangle$  表象<sup>[4]</sup>。 $|N\Lambda\Sigma\rangle$  是  $(h_{\text{osc}}, \bar{l}^2, l_z, s_z)$  的共同本征态， $h_{\text{osc}}$  是球形谐振子哈密顿量。 $|N\Lambda\Sigma\rangle$  当然也是  $j_z = l_z + s_z$  的本征态，本征值为  $\Omega = \Lambda + \Sigma$ 。对于 Nilsson 哈密顿量， $j_z$  为守恒量，Nilsson 能级为二重简并，相当于  $\pm\Omega$  简并（约定  $\Omega > 0$ ）。在  $|N\Lambda\Sigma\rangle$  表象中将  $h_{\text{Nil}}$  对角化后， $h_{\text{Nil}}$  的本征态记为

$$\begin{aligned} h_{\text{Nil}}|\chi_\Omega\rangle &= \varepsilon_\Omega|\chi_\Omega\rangle \text{ (二重简并)} \\ |\chi_\Omega\rangle &= \sum_{l\Lambda} a_{l\Lambda}|Nl\Lambda\Sigma\rangle, \quad |\chi_{-\Omega}\rangle = \sum_{l\Lambda} a_{l\Lambda}|Nl-\Lambda-\Sigma\rangle \end{aligned} \quad (3.23)$$

即  $|\chi_\Omega\rangle$  和  $|\chi_{-\Omega}\rangle$  同属于能级  $\varepsilon_\Omega$ 。在上式右边求和中， $\Sigma = \Omega - \Lambda$  并不独立。

对于推转 Nilsson 哈密顿量，由于  $[j_z, h(\omega)] = -\omega[j_z, j_x] \neq 0$ ， $\Omega$  不再是好量子数，二重简并的 Nilsson 能级将发生分裂。设  $h_{\text{Nil}}$  只包含四极形变（ $Y_{20}$ ）和十六极形变（ $Y_{40}$ ），分别用  $(\varepsilon_2, \varepsilon_4)$  参数描述，则绕  $x$  轴（垂直于对称轴  $z$ ）旋转  $180^\circ$  的运算

$$R_x(\pi) = e^{-i\pi j_x / \hbar} \quad (3.24)$$

是守恒量,  $[R_x(\pi), h(\omega)] = 0$ 。对于 Fermi 子,  $R_x(\pi)^2 = R_x(2\pi) = -1$ 。设  $R_x(\pi)$  的本征值为  $r$ , 则  $r^2 = -1$ , 所以  $R_x(\pi)$  的本征值为  $r = \pm i$ 。令  $r = e^{-i\pi\alpha}$ , 则  $r = \pm i \sim \alpha = \mp 1/2$ 。 $r$  称为旋称 (signature),  $\alpha$  称为旋称指数 (signature exponent), 也简称为旋称。除旋称外, 推转 Nilsson 哈密顿量还具有空间反射对称性, 宇称  $\pi = (-)^N$  也是守恒量。

尽管  $j_z$  非守恒量 ( $\Omega$  非好量子数), 但是,  $[j_z^2, h(\omega)] = 0$ , 且  $[R_x(\pi), j_z^2] = 0$ 。因此可以选择  $(j_z^2, R_x(\pi))$  的共同本征态作为表象的基矢, 来把  $h(\omega)$  对角化是方便的。将未推转的一对二重简并单粒子态记为  $|\chi_{\Omega_\xi}\rangle \equiv |\xi\rangle$ ,  $|\chi_{-\Omega_\xi}\rangle \equiv |-\xi\rangle$

$$\begin{aligned} |\xi\rangle &\equiv |N_\xi n_{z\xi} \Lambda_\xi \Sigma_\xi\rangle, \quad \Omega_\xi = \Lambda_\xi + \Sigma_\xi > 0 \\ |-\xi\rangle &\equiv |N_\xi n_{z\xi} - \Lambda_\xi - \Sigma_\xi\rangle \end{aligned} \quad (3.25)$$

它们都是  $j_z$  的本征态, 本征值为  $\pm \Omega_\xi$ 。利用  $|\xi\rangle$  和  $|-\xi\rangle$  的线性叠加可以构造  $R_x(\pi)$  和  $j_z^2$  的共同本征态  $|\xi\alpha\rangle$ :

$$|\xi\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 - e^{-i\pi\alpha} R_x(\pi)] |\xi\rangle, \quad \alpha = \pm \frac{1}{2} \quad (3.26)$$

容易验证<sup>†</sup>

$$\begin{aligned} j_z^2 |\xi\alpha\rangle &= \Omega_\xi^2 |\xi\alpha\rangle \\ R_x(\pi) |\xi\alpha\rangle &= e^{-i\pi\alpha} |\xi\alpha\rangle = r |\xi\alpha\rangle \end{aligned} \quad (3.27)$$

利用关系式<sup>‡</sup>

---

<sup>†</sup>利用  $R_x(\pi)^2 = -1$ ,  $r^2 = -1$ , 可知

$$R_x(\pi) |\xi\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [R_x(\pi) |\xi\rangle + r |\xi\rangle] = \frac{r}{\sqrt{2}} [-r R_x(\pi) |\xi\rangle + |\xi\rangle] = \frac{r}{\sqrt{2}} [1 - r R_x(\pi)] |\xi\rangle = r |\xi\alpha\rangle$$

<sup>‡</sup>利用描述有限转动算符  $D(\alpha, \beta, \gamma)$  的矩阵表示来表示  $R_x(\pi)$  的运算,  $(\alpha, \beta, \gamma)$  为 Euler 角,

$$R_x(\pi) = D(-\pi/2, \pi, \pi/2)$$

$$\begin{aligned} R_x(\pi) Y_{l\Lambda} &= \sum_{\Lambda'} Y_{l\Lambda'} D_{\Lambda'\Lambda}^l(-\pi/2, \pi, \pi/2) = \sum_{\Lambda'} e^{i\Lambda'\pi/2} d_{\Lambda'\Lambda}^l(\pi) e^{-i\Lambda\pi/2} Y_{l\Lambda'} \\ &= \sum_{\Lambda'} e^{i(\Lambda'-\Lambda)\pi/2} (-)^{l+\Lambda'} \delta_{\Lambda', -\Lambda} Y_{l\Lambda'} = e^{-i\pi\Lambda} (-)^{l-\Lambda} Y_{l-\Lambda}, (e^{-i\pi} = -1) \end{aligned}$$

$$R_x(\pi)|\xi\rangle = (-)^{N_\xi+1/2}|- \xi\rangle \quad (3.28)$$

$|\xi\alpha\rangle$  可以表示成

$$\begin{aligned} |\xi\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 - e^{-i\pi\alpha} R_x(\pi) \right] |\xi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |\xi\rangle + 2\alpha(-)^{N_\xi} |- \xi\rangle \right] \quad \alpha = \pm \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.29)$$

往下就是在  $|\xi\alpha\rangle$  表象中，将  $h(\omega) = h_{Nil} - \omega j_x$  对角化。由于旋称  $\alpha$  是好量子数，可以在给定  $\alpha$  ( $\alpha = \pm \frac{1}{2}$ ) 的两个子空间中分别将  $h(\omega)$  对角化。为此，需要计算在  $|\xi\alpha\rangle$  表象中  $h(\omega)$  各项的矩阵元。

首先， $h_{Nil}$  中任何一项  $F$  都与  $R_x(\pi)$  对易， $\langle \xi\alpha | F | \xi'\alpha' \rangle = \langle \xi | F | \xi \rangle \delta_{\alpha\alpha'}$ ，所以  $h_{Nil}$  的矩阵元是对角的，

$$\langle \xi\alpha | h_{Nil} | \xi'\alpha' \rangle = \langle \xi\alpha | h_{Nil} | \xi'\alpha' \rangle \delta_{\alpha\alpha'} = \langle \xi | h_{Nil} | \xi \rangle \delta_{\alpha\alpha'} \quad (3.30)$$

对自旋波函数  $\chi_{\frac{1}{2}\Sigma}$ ，类似有  $R_x(\pi)\chi_{\frac{1}{2}\Sigma} = (-)^{1/2}\chi_{\frac{1}{2},-\Sigma}$

所以  $R_x(\pi)Y_{l\Lambda}\chi_{\frac{1}{2}\Sigma} = (-)^{l+1/2}Y_{l,-\Lambda}\chi_{\frac{1}{2},-\Sigma}$

记  $|l\Lambda\Sigma\rangle = Y_{l\Lambda}\chi_{\frac{1}{2}\Sigma}$ ， $|l-\Lambda-\Sigma\rangle = Y_{l,-\Lambda}\chi_{\frac{1}{2},-\Sigma}$

则  $R_x(\pi)|l\Lambda\Sigma\rangle = (-)^{l+1/2}|l-\Lambda-\Sigma\rangle$

Nilsson 波函数  $|\chi_\Omega\rangle = \sum_{l\Lambda} a_{l\Lambda} |Nl\Lambda\Sigma\rangle$ ，在  $(r, \theta, \varphi, s_z)$  表象中，

$$|Nl\Lambda\Sigma\rangle = R_{nl}(r)Y_{l\Lambda}(\theta, \varphi)\chi_{\frac{1}{2}\Sigma}(s_z),$$

谐振子波函数有确定宇称  $\pi$ ， $\pi = (-)^l = (-)^N$ ，所以

$$R_x(\pi)|Nl\Lambda\Sigma\rangle = (-)^{N+1/2}|Nl-\Lambda-\Sigma\rangle$$

因而

$$\begin{aligned} R_x(\pi)|\chi_\Omega\rangle &= (-)^{N+1/2} \sum_{l\Lambda} a_{l\Lambda} |Nl-\Lambda-\Sigma\rangle \\ &= (-)^{N+1/2} |\chi_{-\Omega}\rangle, \quad (\Omega > 0) \end{aligned}$$

$|\chi_{\Omega_\xi}\rangle$  记为  $|\xi\rangle$ ， $|\chi_{-\Omega_\xi}\rangle$  记为  $|- \xi\rangle$

其次，对于  $-\omega j_x$  项，需要区分  $\Omega_\xi \neq \frac{1}{2}$  和  $\Omega_\xi = \frac{1}{2}$  的情况，可以证明<sup>§</sup>

$$\langle \xi \alpha | j_x | \xi' \alpha' \rangle = \begin{cases} \langle \xi | j_x | \xi' \rangle \delta_{\alpha\alpha'}, & \Omega_\xi \neq \frac{1}{2} \text{ or } \Omega_{\xi'} \neq \frac{1}{2} \\ (-)^{N_\xi + \frac{1}{2} - \alpha} \langle \xi | j_x | -\xi \rangle \delta_{\alpha\alpha'}, & \Omega_\xi = \Omega_{\xi'} = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.31)$$

对于  $h_{Nil}$  来讲， $|\pm \xi\rangle$  是简并的。在计及推转项  $-\omega j_x$  后，或者说，在 Coriolis 力的作用下，

原来是二重简并的 Nilsson 能级的简并将被解除，可以按旋称分解成  $\alpha = \pm \frac{1}{2}$  两个子空间。

利用  $h_{Nil}$  的矩阵元公式  $\langle \xi | h_{Nil} | \xi' \rangle$  以及上列  $j_x$  的矩阵元公式，即可求出  $h(\omega)$  在  $|\xi \alpha\rangle$  空间的矩阵元，把  $h(\omega)$  对角化之后，即可得到推转单粒子态  $|\mu \alpha\rangle$  和推转 Nilsson 能级  $\varepsilon_{\mu\alpha}$ ，它们都依赖于参量  $\omega$

$$\begin{aligned} h(\omega) |\mu \alpha\rangle &= \varepsilon_{\mu\alpha} |\mu \alpha\rangle \\ |\mu \alpha\rangle &= \sum_{\xi} C_{\mu\xi}(\alpha) |\xi \alpha\rangle \end{aligned} \quad (3.32)$$

图 3.2 给出了稀土区质量数为  $A=170$  的 Yb 质子和中子费米面附近的推转 Nilsson 能级图，从图中可以看出高  $j$  闯入轨道的能量随推转频率有明显的变化，并且有较大的旋称分裂。

---

<sup>§</sup>  $\Omega_\xi = \Omega_{\xi'} = 1/2$  情况

$$\begin{aligned} \langle \xi \alpha | j_x | \xi' \alpha' \rangle &= \delta_{\alpha\alpha'} \langle \xi \alpha | j_x | \xi' \alpha \rangle \\ \langle \xi \alpha | j_x | \xi' \alpha \rangle &= \frac{1}{2} \left[ \langle \xi | -(-)^{N_\xi} e^{i\pi(\alpha+1/2)} \langle -\xi | j_x | \xi' \rangle - (-)^{N_{\xi'}} e^{-i\pi(\alpha+1/2)} \langle -\xi' | \rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[ (-)^{N_{\xi'}} e^{-i\pi(\alpha+1/2)} \langle \xi | j_x | -\xi' \rangle - (-)^{N_\xi} e^{i\pi(\alpha+1/2)} \langle -\xi | j_x | \xi' \rangle \right] \end{aligned}$$

上式中只保留了不为 0 的交叉项。

利用宇称守恒，只有相同宇称态之间  $j_x$  矩阵元才可能不为 0，所以  $(-)^{N_\xi} = (-)^{N_{\xi'}}$ ，又因

$\alpha + 1/2$  为整数， $e^{-i\pi(\alpha+1/2)} = e^{i\pi(\alpha+1/2)}$ ，以及  $j_x$  为厄米算符，所以

$$\begin{aligned} \langle \xi \alpha | j_x | \xi' \alpha \rangle &= \frac{1}{2} (-)^{N_\xi+1} e^{-i\pi(\alpha+1/2)} \left[ \langle \xi | j_x | -\xi' \rangle + \langle -\xi | j_x | \xi' \rangle \right] \\ &= (-)^{N_\xi+1} (-)^{\alpha+1/2} \langle \xi | j_x | -\xi' \rangle, \quad (\alpha + 1/2 \text{ 为整数}) \\ &= (-)^{N_\xi+\alpha-1/2} \langle \xi | j_x | -\xi' \rangle = (-)^{N_\xi+1/2-\alpha} \langle \xi | j_x | -\xi' \rangle \end{aligned}$$

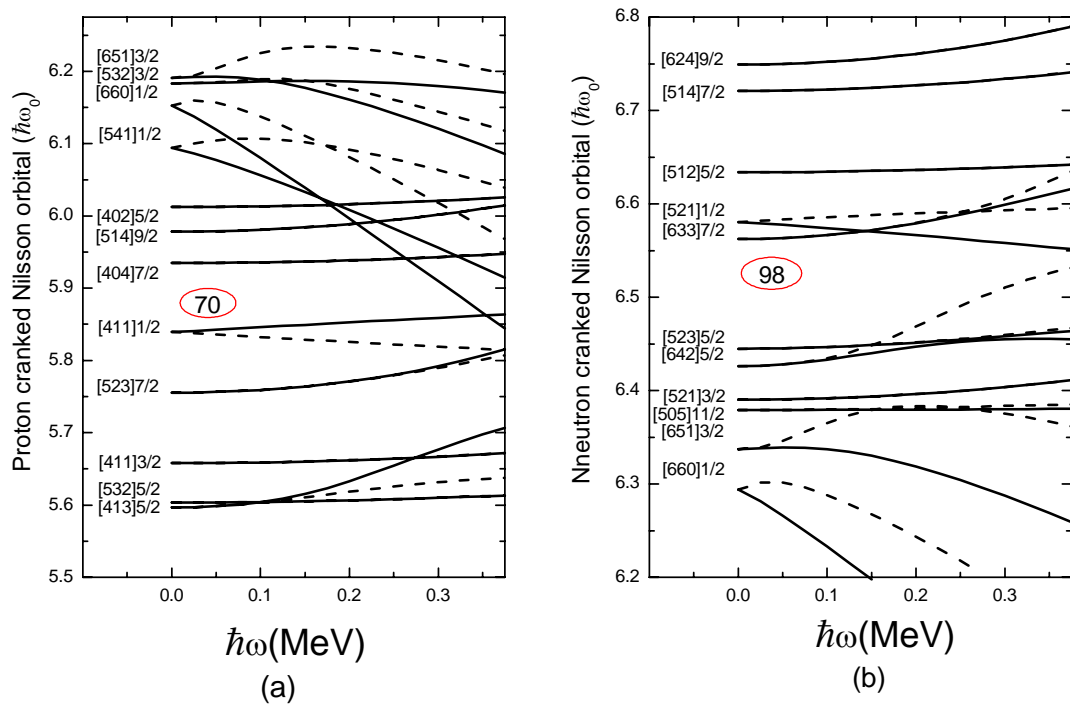


图 3.2 稀土变形核 $^{170}\text{Yb}$ 质子和中子费米面附近的推转Nilsson能级图。

## 四 原子核的对关联

### 4.1 原子核对关联的实验证据

上世纪 50 年代末, Bohr, Mottelson & Pines 在系统分析了大量实验资料的基础上指出: 原子核内核子之间存在很强的对关联, 它导致原子核的超导性<sup>[7]</sup>。原子核的对关联表现为原子核的一系列基本性质表现出明显的奇偶差。其中最主要的奇偶差为:

#### (a) 结合能的奇偶差

这是早在 20 世纪 30 年代已发现的现象, 即相邻原子核中, 偶偶核最稳定, 奇偶核次之, 奇奇核最不稳定, 往往通过 $\beta$ 衰变而转化为偶偶核。自然界中, 只有 4 个稳定的奇奇核, 即  ${}^2_1\text{H}_1$ ,  ${}^6_3\text{Li}_3$ ,  ${}^{10}_5\text{B}_5$  和  ${}^{14}_7\text{N}_7$ 。这表现在结合能半经验公式中有一项对能项  $P$ ,

$$P = \begin{cases} +\Delta & , \text{ (偶偶核)} \\ 0 & , \text{ (奇偶核)} \\ -\Delta & , \text{ (奇奇核)} \end{cases} \quad \Delta \sim 12/\sqrt{A} \text{ MeV}$$

#### (b) 低内部激发谱型的奇偶差

实验资料系统分析表明, 奇偶核的低内部激发谱的能级密度, 可以用壳模型 (球形, 或变形) 的粒子 (空穴) 激发大致说明, 而偶偶核的低内部激发谱则出现一个明显的“能隙”, 即基态与第一内部激发态之间存在一个明显的能隙  $\sim 1\text{MeV}$ , 它比壳模型能级系的单粒子能级平均间距大得多, 与低温超导金属激发谱中的能隙相似。

#### (c) 转动惯量值及奇偶差

实验资料表明: (1) 奇偶变形核的低激发转动带的转动惯量, 系统大于相邻偶偶核基态带的转动惯量。(2) 偶偶变形核基态带的转动惯量观测值,  $J_{\text{实}} \sim (\frac{1}{2} - \frac{1}{4})J_{\text{刚}}$ ,  $J_{\text{刚}}$  为刚体计算值。而按 D. R. Inglis 的推转模型 (不计及核子之间相互作用), 则转动惯量计算值  $J_{\text{计}} \approx J_{\text{刚}}$  (在计及核子之间的对关联后,  $J_{\text{计}}$  将大幅度减小而与  $J_{\text{实}}$  接近)。

20 世纪 50 年代中期, 正值金属超导性的 BCS 理论提出, 根据 Bohr, Mottelson & Pines 的思想<sup>[7]</sup>, S. T. Belyaev, L. S. Kisslinger & R. A. Sorensen, S. G. Nilsson & O. Prior 等随即把 BCS 方法以及准粒子概念移植到核结构理论中来, 较好地阐明了原子核一些性质的奇偶差现象<sup>[8]</sup>。

## 4.2 轴对称变形核对关联的 BCS 方法

设原子核具有轴对称变形，可采用 Nilsson 势来描述其单粒子运动（质子和中子分别处理），单粒子能级是二重简并的。在计及核子之间的对相互作用后，Hamilton 量可表示为

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_p \\ H_0 &= \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} (a_{\mu}^+ a_{\mu} + a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\mu}}) \\ H_p &= -G \sum_{\mu\nu} a_{\mu}^+ a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\nu}} a_{\nu}, \quad G > 0 \end{aligned} \quad (4.1)$$

$\varepsilon_{\mu}$  表示 Nilsson 单粒子能级（二重简并）， $a_{\mu}^+$  和  $a_{\bar{\mu}}^+$  分别是单粒子态  $\mu$  及其时间反演态  $\bar{\mu}$  的粒子产生算符， $a_{\mu}$  和  $a_{\bar{\mu}}$  则为相应的湮灭算符。 $H_0$  描述单粒子运动， $H_p$  描述粒子之间的对相互作用， $G$  为对力强度参量。

下面介绍 BCS 的准粒子处理方法。引进粒子-准粒子变换（Bogolubov-Valatin）变换（参见文献[10]，卷 II）

$$\begin{aligned} \alpha_{\nu}^+ &= U_{\nu} a_{\nu}^+ - V_{\nu} a_{\bar{\nu}} \\ \alpha_{\bar{\nu}} &= U_{\nu} a_{\bar{\nu}} + V_{\nu} a_{\nu}^+ \\ U_{\nu}^2 + V_{\nu}^2 &= 1, \quad (U_{\nu}, V_{\nu} \text{ 为实数}) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$\alpha_{\nu}$  ( $\alpha_{\bar{\nu}}$ ) 为准粒子湮灭算符， $\alpha_{\nu}^+$  ( $\alpha_{\bar{\nu}}^+$ ) 则为准粒子产生算符。逆变换为

$$\begin{aligned} a_{\nu}^+ &= U_{\nu} \alpha_{\nu}^+ + V_{\nu} \alpha_{\bar{\nu}} \\ a_{\bar{\nu}} &= U_{\nu} \alpha_{\bar{\nu}} - V_{\nu} \alpha_{\nu}^+ \end{aligned} \quad (4.3)$$

利用 Fermi 子算符  $a_{\nu}$ ,  $a_{\nu}^+$  ( $a_{\bar{\nu}}$ ,  $a_{\bar{\nu}}^+$ ) 的反对易式，容易证明准粒子算符  $\alpha_{\nu}$ ,  $\alpha_{\nu}^+$  ( $\alpha_{\bar{\nu}}$ ,  $\alpha_{\bar{\nu}}^+$ ) 也满足完全相同的反对易式，即

$$\begin{aligned} [\alpha_{\nu}, \alpha_{\nu'}^+]_{+} &= \delta_{\nu\nu'}, [\alpha_{\nu}, \alpha_{\nu'}]_{+} = 0, [\alpha_{\nu}^+, \alpha_{\nu'}^+]_{+} = 0 \\ [\alpha_{\bar{\nu}}, \alpha_{\bar{\nu}'}^+]_{+} &= \delta_{\nu\nu'}, [\alpha_{\bar{\nu}}, \alpha_{\bar{\nu}'}]_{+} = 0, [\alpha_{\bar{\nu}}^+, \alpha_{\bar{\nu}'}^+]_{+} = 0 \end{aligned} \quad (4.4)$$

即变换（4.2）是一个正则变换。但在此变换下，粒子数和准粒子数不能同时都守恒。引进此正则变换的目的是希望把具有对相互作用的一个体系近似简化为一个无相互作用的准粒子体系，从而可以用准粒子激发来方便地描述体系的激发态。但在具有确定准粒子数的状态下，粒子数是不确定的。为弥补此缺陷，可引入一个 Lagrange 乘子  $\lambda$ ，令

$$\begin{aligned} H' &= H - \lambda N \\ N &= \sum_{\nu} (a_{\nu}^+ a_{\nu} + a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

$N$  为粒子数算符，要求在准粒子真空态下，粒子数平均值等于体系的确切粒子数（见式（4.13））。用式（4.3）代入式（4.5）和（4.1），并利用式（4.4），可以把  $H'$  表示成准粒子算符的正规乘积形式（参见文献[10]，卷 II）

$$H' = U' + H'_{11} + H'_{20} + H'_{\text{int}} \quad (4.6)$$

其中  $U'$  是不含准粒子产生和湮灭算符的常数项，不影响准粒子的激发谱， $H'_{11}$  是含有一个产生和一个湮灭算符的项， $H'_{20}$  是含有两个产生或两个湮灭算符的项， $H'_{\text{int}}$  则为含有 4 个准粒子算符的项，表示准粒子之间的相互作用。（详细推导参见文献[9]，274-282 页，或文献[10]。） $H'_{11}$  和  $H'_{20}$  可表示成

$$\begin{aligned} H'_{11} &= \sum_{\nu} \left\{ (\varepsilon_{\nu} - \lambda)(U_{\nu}^2 - V_{\nu}^2) + 2GU_{\nu}V_{\nu} \sum_{\mu} (U_{\mu}V_{\mu}) - GV_{\nu}^2(U_{\nu}^2 - V_{\nu}^2) \right\} (\alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\nu} + \alpha_{\bar{\nu}}^{+}\alpha_{\bar{\nu}}) \\ H'_{20} &= \sum_{\nu} \left\{ (\varepsilon_{\nu} - \lambda)2U_{\nu}V_{\nu} - G(U_{\nu}^2 - V_{\nu}^2) \sum_{\mu} (U_{\mu}V_{\mu}) - 2GU_{\nu}V_{\nu}^3 \right\} (\alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\bar{\nu}}^{+} + \alpha_{\bar{\nu}}\alpha_{\nu}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

略去  $H'_{\text{int}}$  (准粒子相互作用)，并要求  $H'_{20} = 0$  (略去  $H'_{20}$  中很不重要的一项<sup>[8]</sup>， $-2GU_{\nu}V_{\nu}^3$ )，则得

$$(\varepsilon_{\nu} - \lambda)2U_{\nu}V_{\nu} - G(U_{\nu}^2 - V_{\nu}^2) \sum_{\mu} (U_{\mu}V_{\mu}) = 0 \quad (4.8)$$

此时，式 (4.6) 化为

$$H' \approx U' + H'_{11} \quad (4.9)$$

所描述的是一个无相互作用的准粒子体系，其基态是准粒子真空态，记为  $|0\rangle\rangle$ 。可以证明，

$$|0\rangle\rangle = \prod_{\mu} (U_{\mu} + V_{\mu}S_{\mu}^{+})|0\rangle, \quad S_{\mu}^{+} = a_{\mu}^{+}a_{\bar{\mu}}^{+} \quad (4.10)$$

就是准粒子真空态，满足

$$\alpha_{\mu}|0\rangle\rangle = 0, \quad \alpha_{\bar{\mu}}|0\rangle\rangle = 0 \quad (4.11)$$

$|0\rangle\rangle$  即有名的 BCS 波函数。 $H'$  中的常数项  $U'$  取为 0，则准粒子真空态  $|0\rangle\rangle$  的能量  $E_0$  就为

0。要求在准粒子真空态  $|0\rangle\rangle$  下，粒子数的平均值  $\langle\langle 0|N|0\rangle\rangle$  等于体系的实际的核子数  $N_0$ ，

$$\langle\langle 0|N|0\rangle\rangle = N_0 \quad (4.12)$$

式中  $N$  是粒子数算符。利用式 (4.3) 和 (4.4)，可以证明

$$\langle\langle 0|N|0\rangle\rangle = 2 \sum_{\mu} V_{\mu}^2 = N_0 \quad (4.13)$$

联立式 (4.8) 和 (4.13)，可求解出 Bogoliubov-Valatin 变换 (4.2) 中的系数  $U_{\mu}$  或  $V_{\mu}$



$$U_{\mu}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\varepsilon_{\mu} - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_{\mu} - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right]$$

$$V_{\mu}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon_{\mu} - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_{\mu} - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right]$$
(4.14)

式中

$$\Delta = G \sum_{\mu} (U_{\mu} V_{\mu})$$
(4.15)

称为能隙参量。利用所求得  $U_{\mu}$  或  $V_{\mu}$ ， $H'_{11}$  可以表示为

$$H' = H'_{11} = \sum_{\nu} E_{\nu} (\alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\nu} + \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\bar{\nu}})$$
(4.16)

式中

$$E_{\nu} = \sqrt{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2}$$
(4.17)

一准粒子态  $\alpha_{\nu_0}^{+} |0\rangle\rangle$ 、二准粒子态  $\alpha_{\nu_0}^{+} \alpha_{\bar{\nu}_0}^{+} |0\rangle\rangle$  和  $\alpha_{\mu_0}^{+} \alpha_{\nu_0}^{+} |0\rangle\rangle$  可分别表示为

$$\alpha_{\nu_0}^{+} |0\rangle\rangle = \alpha_{\nu_0}^{+} \prod_{\nu \neq \nu_0} (U_{\nu} + V_{\nu} S_{\nu}^{+} |0\rangle)$$

$$\alpha_{\nu_0}^{+} \alpha_{\bar{\nu}_0}^{+} |0\rangle\rangle = (U_{\nu_0} S_{\nu_0}^{+} - V_{\nu_0}) \prod_{\nu \neq \nu_0} (U_{\nu} + V_{\nu} S_{\nu}^{+} |0\rangle)$$

$$\alpha_{\mu_0}^{+} \alpha_{\nu_0}^{+} |0\rangle\rangle = a_{\mu_0}^{+} a_{\nu_0}^{+} \prod_{\nu \neq \mu_0, \nu_0} (U_{\nu} + V_{\nu} S_{\nu}^{+} |0\rangle)$$
(4.18)

相应的能量分别为  $E_{\nu_0}$ 、 $2E_{\nu_0}$  和  $E_{\mu_0} + E_{\nu_0}$ 。从这里可以看到，不同的堵塞将使  $\Delta$  不同，准粒子基也随之改变。

关于用 BCS 或 HFB 方法处理轴对称变形核的详细论述，可参阅文献[12, 13]，以及该文所引有关文献。

### 4.3 原子核对关联的 BCS 方法的严重困难

尽管 BCS 或 HFB (Hartree-Fock-Bogoliubov) 方法，连同用 RPA (无规相近似，Random-phase approximation) 计算修正项的理论工作，在处理核结构，特别是高自旋态和奇特核取得很多成果，但这类工作存在的严重缺陷，已陆续为人们发现。早在上世纪 60-80 年代，在国内北京大学物理系核结构理论组就有一系列工作（发表在《物理学报》、《高能物理与核物理》上）。在国外，R. W. Richardson (1966) 对于含单极对力的模型，进行 BCS 计算和严格计算的比较<sup>[15]</sup>，发现 BCS 计算所得某些 2-准粒子激发能级，以及更多准粒子的激发能级与精确计算结果严重不符。D. J. Rowe<sup>[16]</sup>着重指出：“While the blocking effects are straightforward, it is very difficult to treat them exactly because they introduce different quasiparticle bases for different blocked levels。”

在我国进行改革开放政策以后，北京大学核结构理论组先后在国际期刊 (Nucl. Phys. A, Phys. Rev. C, Phys. Rev. Lett. 等) 发表了数十篇有关的论文，详细分析了 BCS 方法存在的严重缺陷和与实验的尖锐矛盾，提出了处理原子核对关联的粒子数守恒 (PNC, particle-number

conserving) 方法, 并提出了多粒子组态 (MPC, many-particle configuration) 截断概念, 代替壳模型计算中惯用的单粒子能级 (SPL, single-particle level) 截断概念, 使壳模型计算和 PNC 计算成为切实可行, 并可与实验观测进行比较, 对于用 BCS 方法处理核结构碰到的严重困难, 给出了清楚的说明。法国核理论物理学家 J. Dudek 等<sup>[17]</sup> (1997) 的论文中系统引用和详述了我们在 80 年代到 90 年代中期的 12 篇有关 PNC 方法的论文, 他们把 MPC 截断称为多体 Fock 空间 (Many-body Fock space) 截断, 并充分利用了推转 Woods-Saxon 模型 Hamilton 量的对称性, 进行了详细计算, 论证了 PNC 方法的可行性。我们将在下节中介绍处理原子核对关联的 PNC 方法。在此之前, 我们对用 BCS 方法处理核结构存在的严重缺陷和困难做一个简要回顾。

### (1) 粒子数不守恒

BCS 方法中的准粒子真空态以及各种准粒子激发态, 分别具有确定的准粒子数, 但并不具有确定的粒子数, 而实际原子核态都具有确定的核子数。原子核中的核子数 ( $\sim 10^2$ ), 特别是影响原子核低激发态的价核子数 ( $\sim 10$ ) 是很有限的, 因此用 BCS 或 HFB 方法处理原子核低激发态时, 应该认真考虑粒子数不守恒问题。有人提出用粒子数投影技巧来弥补此缺陷<sup>[17]</sup>。但这将使计算工作变得十分复杂, 使 BCS 方法的优越性都丢失了, 而且也无助于更好描述多准粒子激发谱<sup>[16]</sup>, 所以并不是一个理想的改进方案。

值得一提的是与此有关的几个重要问题。(a) 一个是有关“对关联相变”, 即所有对推转 HFB 方程进行自洽的 HFB 计算所得出的解都出现“对崩溃” (pairing collapse) 现象, 而在变分前进行了粒子数投影处理的计算显示出: 能隙参量  $\Delta(\omega)$  随推转角频率  $\omega$  增大而非常缓慢地减小, 并无明显的相变<sup>[19]</sup>。(b) 另一个问题是“假态” (spurious states), 即 BCS 计算所得激发态中存在大量“假态”, 而在保持粒子数不变的计算中, 并不出现这些假态, 在 Richardson 的计算中以及我们的 PNC 计算中都发现了此现象 (参阅文献[9], 286 页)。(c) 此外, 基于 BCS 或 HFB 得出的某些重要论断是不正确的。例如 Bengtsson, Hamamoto & Mottelson 对于单  $j$  推转壳模型所进行的 HFB 计算得出<sup>[20]</sup>: 晕带-次晕带相互作用 (yrast-yrare interaction)  $V$  随体系的 Fermi 面移动而周期振荡。而用 PNC 严格计算表明<sup>[21]</sup>,  $V$  总是很强, 并无振荡现象。

当然, 对于与粒子数不敏感的物理量, 例如核基态的结合能、核大小等粗块性质的计算, BCS 或 HFB 方法仍不失为一个很方便的处理方法。

### (2) 堵塞效应 (blocking effect)

应该着重强调, 用 BCS 或 HFB 方法处理核结构的最严重的缺陷, 是无法认真处理不成对粒子的 Pauli 堵塞效应。D. J. Rowe 很早 (1970) 就着重指出此理论问题<sup>[15]</sup>。用 PNC 方法计算表明, BCS 或 HFB 方法中所定义的能隙参量  $\Delta$ , 灵敏依赖于被不配对粒子堵塞的单粒子能级  $\nu_0$  所在的位置<sup>[22]</sup>。当被堵塞的能级  $\nu_0$  很靠近 Fermi 面时,  $\Delta(\nu_0)$  比无堵塞情况下的能隙参量  $\Delta$  小得多。只当能级  $\nu_0$  远离 Fermi 面时,  $\Delta(\nu_0)$  才接近于  $\Delta$ 。

更为重要的是, 与堵塞效应密切相关的大量实验现象, BCS 或 HFB 处理都完全无能为力。最突出的两类实验现象是:

#### (a) 原子核转动惯量奇偶差的大幅度涨落

用 BCS 方法不能很好说明实验观测到的转动惯量奇偶差的大幅度涨落 (见图 4.1)。可以看出, 当奇中子所处轨道为高  $j$  闯入态 [642]5/2, [633]7/2 和 [624]9/2 时,  $\delta J/J$  达到极大。奇质子核也有类似情况。铜系变形核的转动惯量的奇偶差也存在类似的大幅度涨落。

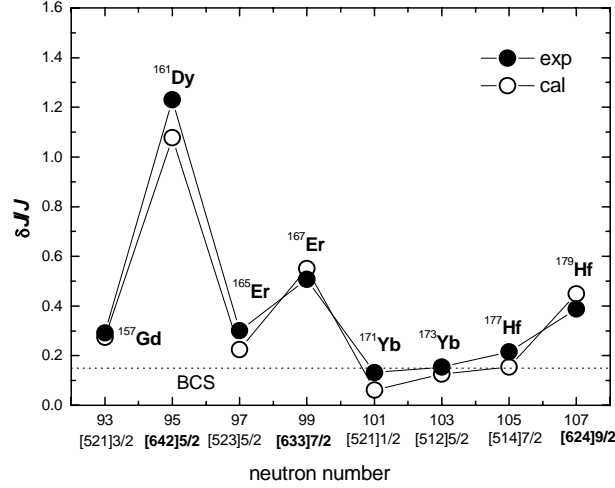


图 4.1 原子核转动惯量奇偶差的大幅度涨落，取自文献[23]

(b) 转动惯量的非相加性

设处于准粒子真空态  $|0\rangle\rangle$  的原子核（偶偶变核基态）的转动惯量为  $J_0$ ，处于一准粒子态  $\alpha_\mu^+|0\rangle\rangle$ ， $\alpha_\nu^+|0\rangle\rangle$  和二准粒子态  $\alpha_\mu^+\alpha_\nu^+|0\rangle\rangle$  的原子核转动惯量分别为  $J(\mu)$ ， $J(\nu)$  和  $J(\mu\nu)$ ，按BCS理论，可得出如下转动惯量相加性<sup>[24]</sup>

$$R = \frac{[J(\mu) - J_0] + [J(\nu) - J_0]}{[J(\mu\nu) - J_0]} = 1$$

而实验观测表明， $R$  系统大于 1（见图 4.2）。按照处理原子核对关联的粒子数守恒（PNC）方法，或称为多粒子组态截断的壳模型计算方法，上述困难都可以较好解决。

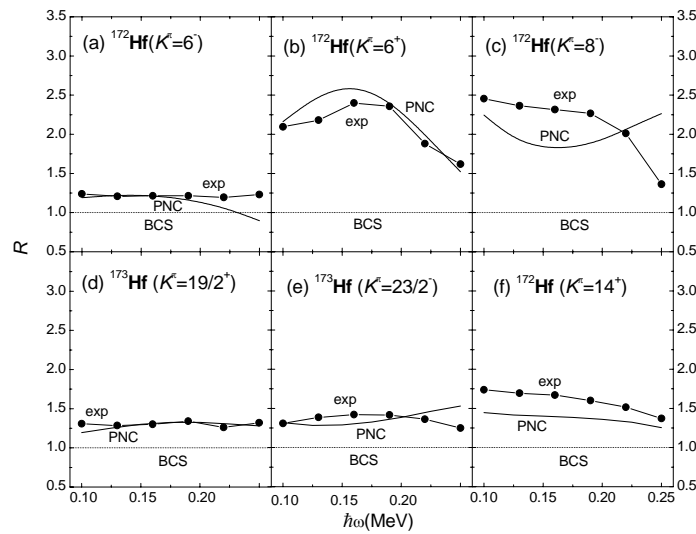


图 4.2 原子核转动惯量的非相加性，取自文献[25]

## 五 原子核对关联的粒子数守恒方法

### 5.1 单粒子能级截断与多粒子组态截断

在原子核壳模型计算中，BCS或HFB方法习惯上都采用单粒子能级（SPL, single-particle levels）截断。下面用一个简单模型来阐明其概念（图 5.1）<sup>[22]</sup>，即假设原子核的单粒子能级是二重简并的且均匀分布，相邻单粒子能级的间距  $d = 1$ （取为能量单位）。假设核子之间存在单极对力（参见式（4.1））。

$$H = \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} (a_{\mu}^+ a_{\mu} + a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\mu}}) - G \sum_{\mu\nu} a_{\mu}^+ a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\nu}} a_{\nu} \quad (5.1)$$

设  $\varepsilon_F$  表示 Fermi 面位置。按 SPL 截断，凡满足

$$|\varepsilon_{\mu} - \varepsilon_F| \leq \varepsilon_C \quad (5.2)$$

的单粒子能级  $\varepsilon_{\mu}$  都应加以考虑，而  $|\varepsilon_{\mu} - \varepsilon_F| > \varepsilon_C$  的

单粒子能级  $\varepsilon_{\mu}$  则不予考虑， $\varepsilon_C$  即 SPL 截断能量。 $\varepsilon_C$

越大，则计算结果愈精确。可以证明，在所取定的  $\varepsilon_C$

下，粒子对激发（pair excitation）所形成的多粒子组态空间的维数是

$$D(\varepsilon_C) = (2\varepsilon_C)! / (\varepsilon_C!)^2 \quad (5.3)$$

可以看出，随  $\varepsilon_C$  增大， $D(\varepsilon_C)$  急剧增大（例如，

$2\varepsilon_C = 20$ ， $D(\varepsilon_C) = 184756$ ），计算将非常困难。

仔细分析发现，用 SPL 截断来处理多粒子体系问题，在理论上有严重缺陷。按照微扰论精神，在求解一个多粒子体系的基态或低激发态时，它所含每一个组态的权重依赖于该组态能量的高低以及微扰作用在该组态与核基组态之间的矩阵元。因此，我们建议采用多粒子组态（MPC, many-particle configuration）截断方案来处理多粒子体系的基态和低激发态，即在计算中，只考虑满足下列条件的多粒子组态（能量为  $E$ ）

$$|E - E_0| \leq E_C \quad (5.4)$$

这里  $E_0$  是最低 MPC 的能量， $E_C$  为所取定的 MPC 截断能量（参量）。

我们曾经作过如下两种计算<sup>[26]</sup>

SPL 截断， $2\varepsilon_C = 10$ ， $D(\varepsilon_C) = 252$ ， $G = 0.5$

MPC 截断， $E_C = 24$ ， $D(E_C) = 272$ ， $G' = 0.3936$

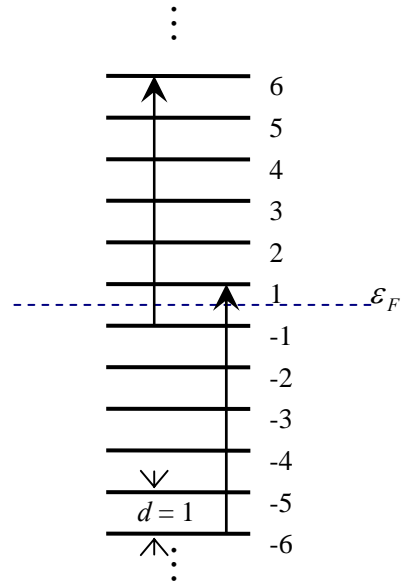


图 5.1

这里  $G'$  的选择是使得 MPC 计算出的第一激发能级与 SPL 计算结果 ( $G = 0.5$ ) 相同。两种截断下的计算工作量接近, 计算结果的比较见图 5.2。可以看出, 在 SPL 截断方案中, 一方面把在基态或低激发态中很不重要的许多组态能量很高的组态收罗了进去, 使计算变得很繁, 另一方面又忽略了一些比较重要的组态能量并不很高的组态。图 5.2 (b) 中所示, 有 126 个组态是两种截断下都共有的, 而有 126 个组态是 SPL 截断下被保留, 但在 MPC 截断下被丢弃, 它们在基态波函数中的权重仅占 0.13%。此外, 有 146 个组态在 MPC 截断下被保留, 但在 SPL 截断下被丢弃, 它们在基态波函数中的权重高达 6.01%。可以看出, MPC 截断优于 SPL 截断。计算出的各单粒子能级上的填布几率见图 5.3。MPC 截断下,  $V_v^2$  变化比较平滑, 可以看出, SPL 截断下得出的  $V_v^2$  的分布随  $\varepsilon_c$  的选择而跳跃变化, 是不合理的。所以 SPL 截断是不可取的。

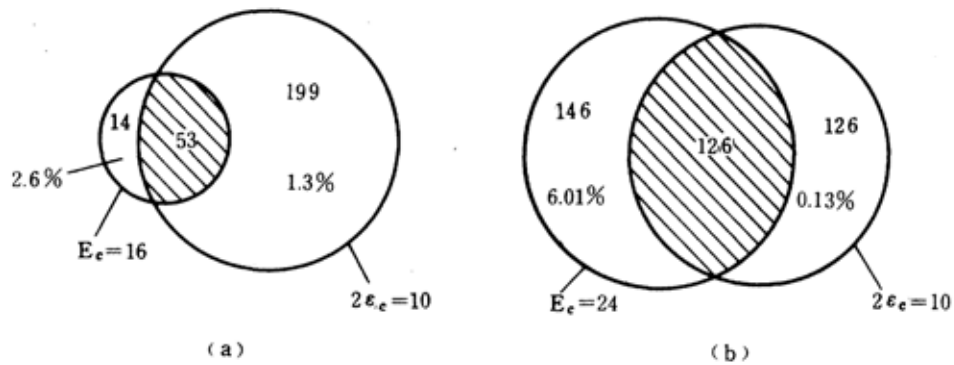


图 5.2 两种截断下计算结果的比较<sup>[22]</sup>

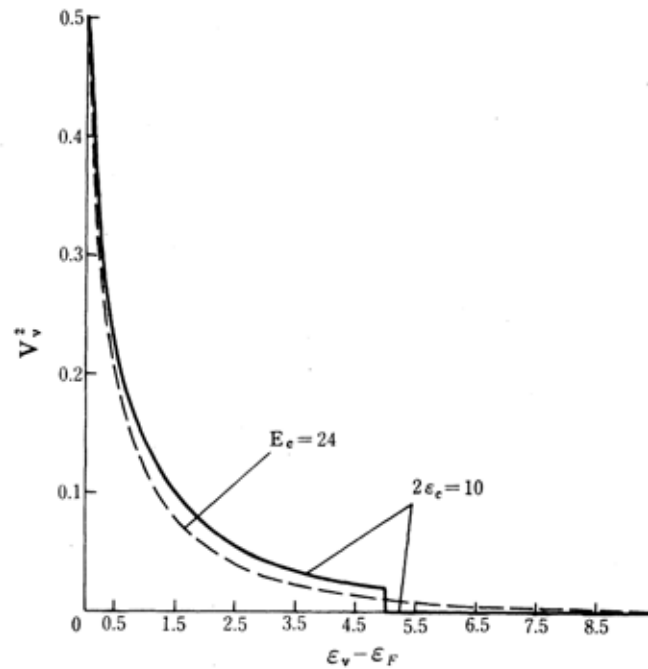


图 5.3 一对粒子在Fermi面上的填布几率<sup>[22]</sup>

## 5.2 原子核对关联的粒子数守恒方法

推转单粒子态

设  $h_{osc}$  是球形谐振子哈密顿量，令  $|N\Lambda\Sigma\rangle$  是  $(h_{osc}, \bar{l}^2, l_z, s_z)$  的共同本征态，记为  $|\xi\rangle \equiv |N_\xi l_\xi \Lambda_\xi \Sigma_\xi\rangle$  ( $\Omega_\xi = \Lambda_\xi + \Sigma_\xi > 0$ )， $|\bar{\xi}\rangle \equiv |N_\xi l_\xi - \Lambda_\xi - \Sigma_\xi\rangle$ 。在二次量子化形式下，它们表示为：

$$|\xi\rangle = |N_\xi l_\xi \Lambda_\xi \Sigma_\xi\rangle = a_\xi^+ |0\rangle \quad (5.5)$$

$$|\bar{\xi}\rangle = |N_\xi l_\xi - \Lambda_\xi - \Sigma_\xi\rangle = a_{-\xi}^+ |0\rangle \quad (5.6)$$

它们也是  $j_z$  的本征态，本征值分别为  $\pm \Omega_\xi$ 。 $a_\xi^+$  和  $a_{-\xi}^+$  分别是它们的产生算符。利用  $|\xi\rangle$  和  $|\bar{\xi}\rangle$  的线性叠加可以构造  $(R_x(\pi), j_z^2)$  的共同本征态  $|\xi\alpha\rangle$ ：

$$\begin{aligned} |\xi\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [1 - e^{-i\pi\alpha} R_x(\pi)] |\xi\rangle, \quad (\alpha = \pm \frac{1}{2}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\xi\rangle \pm (-)^{N_\xi} |\bar{\xi}\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [a_\xi^+ \pm (-)^{N_\xi} a_{-\xi}^+ |0\rangle] = b_{\xi\alpha}^+ |0\rangle \end{aligned} \quad (5.7)$$

$b_{\xi\alpha}^+$  是  $|\xi\alpha\rangle$  的产生算符。

单个粒子的推转哈密顿量记为  $h_0(\omega)$ ：

$$h_0(\omega) = h_{Nil} - \omega j_x \quad (5.8)$$

在 3.2 节中已经证明：

$$\langle \xi\alpha | h_{Nil} | \xi'\alpha' \rangle = \langle \xi | h_{Nil} | \xi \rangle \delta_{\alpha\alpha'} \quad (5.9)$$

$$\langle \xi\alpha | j_x | \xi'\alpha' \rangle = \begin{cases} \langle \xi | j_x | \xi' \rangle \delta_{\alpha\alpha'}, & \Omega_\xi \neq \frac{1}{2} \text{ or } \Omega_{\xi'} \neq \frac{1}{2} \\ (-)^{N_\xi + \frac{1}{2} - \alpha} \langle \xi | j_x | -\xi \rangle \delta_{\alpha\alpha'}, & \Omega_\xi = \Omega_{\xi'} = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.10)$$

在  $|\xi\alpha\rangle$  表象中将  $h_0(\omega)$  对角化，即可得到推转单粒子态  $|\mu\alpha\rangle$ ：

$$|\mu\alpha\rangle = \sum_{\xi} C_{\mu\xi}(\alpha) |\xi\alpha\rangle = \beta_{\mu\alpha}^+ |0\rangle \quad (5.11)$$

$\beta_{\mu\alpha}^+$  是  $|\mu\alpha\rangle$  态上的粒子产生算符,  $|\mu\alpha\rangle$  态相应的能级记为  $\varepsilon_{\mu}(\alpha)$ 。这样, 原来是二重简并的 Nilsson 态, 在 Coriolis 力的作用下简并将被解除。推转的 Nilsson 态所张开的空间, 可以按旋称分成  $\alpha = \pm \frac{1}{2}$  两个子空间,  $\left\{ \left| \mu, \frac{1}{2} \right\rangle \right\}$  和  $\left\{ \left| \mu, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$ 。设每个子空间维数为  $M$ 。

#### 推转的多粒子组态 (CMPC)

对于一个  $n$  粒子系统,  $n$  个粒子在  $2M$  个推转的单粒子态上的任何一种可能的填布方式, 都构成这个多粒子系统的一个组态 (记为  $|i\rangle$ ) :

$$|i\rangle = |\mu_{1i} \mu_{2i} \cdots \mu_{ni}\rangle = \beta_{\mu_{1i}}^+ \beta_{\mu_{2i}}^+ \cdots \beta_{\mu_{ni}}^+ |0\rangle, \quad (5.12)$$

每一个组态都有确定的能量  $E_i$ 、宇称  $\pi_i$  和旋称  $\alpha_i$ ,

$$\begin{aligned} E_i &= \sum_{\mu_i(\text{occupied})} \varepsilon_{\mu_i} \\ \pi_i &= \prod_{\mu_i(\text{occupied})} \pi_{\mu_i} \\ \alpha_i &= \sum_{\mu_i(\text{occupied})} \alpha_{\mu_i} \end{aligned} \quad (5.13)$$

$\mu_i$  (occupied) 是指被粒子占据的推转的 Nilsson 态,  $\varepsilon_{\mu_i}$ 、 $\pi_{\mu_i}$  和  $\alpha_{\mu_i}$  分别是该推转 Nilsson 态的能量, 宇称和旋称。如前所述, 对一个实际核来说, 这样的多粒子组态空间是巨大的, 所以需要进行截断。注意, 在我们的 PNC 方法中是对 CMPC 采取截断, 而不是对 SPL 采取截断。

考虑到有效对力强度  $G$  比单粒子能级平均间距  $d$  要小, 变形核的晕带和低激发带中由于对力而混合的组态数目并不太大。从后面的计算可以看出, 在原子核基态和低激发态中重要的 (成分大于 1%) 的 CMPC 数目通常在  $\sim 10^1$  量级。因此有可能在一个足够大的 CMPC (例如维数  $\sim 10^3$ ) 空间中, 把  $H_{CSM}$  对角化, 以求出核基态或低激发态的足够精确的解。在这个空间中, 组态具有确定的粒子数  $N$ 、宇称  $\pi$  和旋称  $\alpha$ 。在我们的计算中, 堵塞效应是自动而且严格考虑的。

人们已经知道, 高  $j(N)$  低  $\Omega$  的单粒子态对转动惯量的贡献最重要。为此, 我们引入了内截断  $E_c^{in}$  和外截断  $E_c^{out}$  的概念 ( $E_c^{out} \geq E_c^{in}$ )。对于只包含正常单粒子能态的组态, 截断

能量限制在内截断之内。而对于包含高  $j(N)$  低  $\Omega$  的单粒子态的组态，截断能量限制在外截断之内。这样可以适当减小对角化的空间维数，但能保证转动惯量的计算精度。

对力的处理<sup>[23-25]</sup>

推转以后，对力的表述形式比较复杂，但堵塞效应及 Coriolis 力影响，已自动考虑在内。

在球形谐振子基  $|N\Lambda\Sigma\rangle$  表象中，对力哈密顿量可以表示为：

$$H_P = -G \sum_{\xi, \eta > 0} a_{\xi}^{+} a_{\bar{\xi}}^{+} a_{\eta}^{-} a_{\eta}^{-} \quad (5.14)$$

$|\xi\rangle = a_{\xi}^{+}|0\rangle$ ,  $|\bar{\xi}\rangle = a_{\bar{\xi}}^{+}|0\rangle$  是  $|\xi\rangle$  的时间反演态。可以证明\*\*

$$|\bar{\xi}\rangle = T|\xi\rangle = (-)^{\Omega_{\xi}-1/2} |-\xi\rangle \quad (5.15)$$

在  $|\xi\alpha\rangle$  表象中， $b_{\xi\pm}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}[a_{\xi}^{+} \pm (-)^{N_{\xi}} a_{-\xi}^{+}]$ （见式（5.7）），对力哈密顿量改写为：

$$H_P = -G \sum_{\xi, \eta > 0} (-)^{\Omega_{\xi}-\Omega_{\eta}} b_{\xi+}^{+} b_{\xi-}^{+} b_{\eta-} b_{\eta+} \quad (5.16)$$

在推转的 Nilsson 态  $|\mu\alpha\rangle$  表象中，按式（3.32）和（5.11），

$$\beta_{\mu\alpha}^{+} = \sum_{\xi} C_{\mu\xi}(\alpha) b_{\xi\alpha}^{+} \quad (5.17)$$

注意  $\langle\mu\alpha|\mu'\alpha'\rangle$  的正交归一性：

$$\sum_{\xi} C_{\mu\xi}(\alpha) C_{\mu'\xi}(\alpha') = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (5.18)$$

---

\*\*时间反演算符为  $T = -i\sigma_y K$ （参见文献[10]，卷II，第9章，时间反演）， $\sigma_y$  为Pauli算符， $K$  为取

复共轭。不难证明

$$TY_{l\Lambda} = (-)^{\Lambda} Y_{l,-\Lambda}$$

$$T\chi_{\Sigma} = (-)^{\Sigma-1/2} \chi_{-\Omega}$$

$$TY_{l\Lambda}\chi_{\Sigma} = (-)^{\Omega-1/2} Y_{l,-\Lambda}\chi_{-\Omega}$$

$$\text{即 } T|N\Lambda\Sigma\rangle = (-)^{\Omega-1/2} |N, -\Lambda, -\Sigma\rangle$$

$$\text{记 } |\xi\rangle = |N_{\xi} l_{\xi} \Lambda_{\xi} \Sigma_{\xi}\rangle, \quad |-\xi\rangle \equiv |N_{\xi} l_{\xi}, -\Lambda_{\xi}, -\Sigma_{\xi}\rangle$$

$$\text{得 } |\bar{\xi}\rangle = T|\xi\rangle = (-)^{\Omega_{\xi}-1/2} |-\xi\rangle$$



而且表象变换是么正变换,  $C^{-1} = C^+$ 。在我们的计算中,  $C$  矩阵取为实矩阵, 所以  $C^+ = \tilde{C}$  (转置), 式 (3.32) 或 (5.17) 的逆变换为

$$|\xi\alpha\rangle = \sum_{\mu} C_{\xi\mu}(\alpha) |\mu\alpha\rangle, \text{ 或 } b_{\xi\alpha}^+ = \sum_{\mu} C_{\mu\xi}(\alpha) \beta_{\mu\alpha}^+ \quad (5.19)$$

$$\sum_{\mu} C_{\xi\mu}(\alpha) C_{\xi'\mu}(\alpha') = \delta_{\xi\xi'} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (5.20)$$

把公式 (5.19) 代入 (5.16) 就可以得到

$$H_P = -G \sum_{\mu\mu' \nu\nu'} f_{\mu\mu'}^* f_{\nu\nu'} \beta_{\mu+}^+ \beta_{\mu-}^+ \beta_{\nu-} \beta_{\nu+} \quad (5.21)$$

$$f_{\mu\mu'}^* = \sum_{\xi} (-)^{\Omega_{\xi}} C_{\mu\xi}(+) C_{\mu'\xi}(-) \quad (5.22)$$

$$f_{\nu\nu'} = \sum_{\eta} (-)^{-\Omega_{\eta}} C_{\nu\eta}(+) C_{\nu'\eta}(-)$$

由于  $\Omega_{\xi}$  是半奇数,  $f_{\mu\mu'}^*$  和  $f_{\nu\nu'}$  都是复数, 可以令  $F_{\mu\mu'} = (-1)^{1/2} f_{\mu\mu'}^*$ , 因此

$$f_{\mu\mu'}^* f_{\nu\nu'} = f_{\mu\mu'}^* (-f_{\nu\nu'}^*) = F_{\mu\mu'} F_{\nu\nu'} \quad (5.23)$$

这样,  $H_P$  可以表示为

$$H_P = -G \sum_{\mu\mu' \nu\nu'} F_{\mu\mu'} F_{\nu\nu'} \beta_{\mu+}^+ \beta_{\mu-}^+ \beta_{\nu-} \beta_{\nu+} \quad (5.24)$$

$$F_{\mu\mu'} = \sum_{\xi} (-)^{\Omega_{\xi}+1/2} C_{\mu\xi}(+) C_{\mu'\xi}(-)$$

在  $|\mu\alpha\rangle$  表象中推转壳模型哈密顿量可以表示为

$$H_{CSM} = H_0 + H_P \quad (5.25)$$

$$H_0 = \sum_{u\alpha} \varepsilon_{u\alpha} \beta_{u\alpha}^+ \beta_{u\alpha}$$

再次强调一下, 由于宇称和旋称是守恒的, 矩阵只需在具有确定宇称  $\pi$  和旋称  $\alpha$  的 CMPC 子空间内进行。需要注意的是, 在计算对力的非对角矩阵元时, 要注意费米子的反对易关系, 并注意对力是一个二体算符, 所以只有当两个组态的单粒子填布相差不超过两个粒子时, 矩阵元才不为 0。

下面我们分别来讨论  $H_P$  的矩阵元。

(1) 两个组态相差两个单粒子态, 对力矩阵元为

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mu\mu'vv'} \langle \cdots 1_l \cdots 1_k \cdots 0_j \cdots 0_i \cdots | F_{\mu\mu'} F_{v'v} \beta_{\mu+}^+ \beta_{\mu-}^+ \beta_{v-} \beta_{v'+} | \cdots 1_i \cdots 1_j \cdots 0_k \cdots 0_l \cdots \rangle \\
& = \begin{cases} 0, & \text{当}(i, j) \text{或}(l, k) \text{的旋称为}(+, +) \text{或}(-, -) \\ F_{kl} F_{ij} (-)^{\sum_{v=1}^{k-1} n_v + \sum_{v=1}^{l-1} n_v + \sum_{v=1}^{i-1} n_v + \sum_{v=1}^{j-1} n_v}, & (i, j) \text{与}(l, k) \text{的旋称都为}(+, -) \text{或都为}(-, +) \\ -F_{kl} F_{ji} (-)^{\sum_{v=1}^{k-1} n_v + \sum_{v=1}^{l-1} n_v + \sum_{v=1}^{i-1} n_v + \sum_{v=1}^{j-1} n_v}, & (i, j) = (+, -), (l, k) = (-, +) \\ -F_{lk} F_{ij} (-)^{\sum_{v=1}^{k-1} n_v + \sum_{v=1}^{l-1} n_v + \sum_{v=1}^{i-1} n_v + \sum_{v=1}^{j-1} n_v}, & (i, j) = (-, +), (l, k) = (+, -) \end{cases} \quad (5.26)
\end{aligned}$$

(2) 当两个组态相差一个单粒子态时，对力矩阵元为

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mu\mu'vv'} \langle \cdots 1_k \cdots 0_i \cdots | F_{\mu\mu'} F_{v'v} \beta_{\mu+}^+ \beta_{\mu-}^+ \beta_{v-} \beta_{v'+} | \cdots 1_i \cdots 0_k \cdots \rangle \\
& = \sum_l F_{kl} F_{il} (-)^{\sum_{v=1}^{k-1} n_v + \sum_{v=1}^{i-1} n_v} \quad (5.27)
\end{aligned}$$

(3) 在同一个组态  $|i\rangle$  下， $H_p$  的平均值（对角元）为

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mu\mu'vv'} \langle i | F_{\mu\mu'} F_{v'v} \beta_{\mu+}^+ \beta_{\mu-}^+ \beta_{v-} \beta_{v'+} | i \rangle \\
& = \sum_{i,j} F_{ij} F_{ij} \quad (5.28)
\end{aligned}$$

四极对力的处理和单极对力类似。在球形谐振子基  $|NI\Lambda\Sigma\rangle$  表象中，四极对力哈密顿量为

$$\begin{aligned}
H_p(2) &= - \sum_{\lambda} G_{2\lambda} \sum_{\xi\eta} q_{2\lambda}(\xi) q_{2\lambda}(\eta) a_{\xi}^+ a_{\xi}^+ a_{\eta}^- a_{\eta}^- \\
q_{2\lambda}(\xi) &= \sqrt{\frac{16\pi}{5(1+\delta_{0\lambda})}} \langle \xi | r^2 (Y_{2\lambda} + Y_{2-\lambda}) | \xi \rangle \quad (5.29)
\end{aligned}$$

在推转的 Nilsson 态  $|\mu\alpha\rangle$  表象中， $H_p(2)$  表示为

$$\begin{aligned}
H_p(2) &= - \sum_{\lambda} G_{2\lambda} \sum_{\mu\mu'vv'} g_{\mu\mu'}^{\lambda*} g_{v'v}^{\lambda} \beta_{\mu+}^+ \beta_{\mu-}^+ \beta_{v-} \beta_{v'+} \\
g_{\mu\mu'}^{\lambda*} &= \sum_{\xi} (-)^{\Omega_{\xi}} C_{\mu\xi}^{\lambda} (+) C_{\mu'\xi}^{\lambda} (-) q_{2\lambda}(\xi) \\
g_{v'v}^{\lambda} &= \sum_{\eta} (-)^{\Omega_{\eta}} C_{v'\eta}^{\lambda} (+) C_{v\eta}^{\lambda} (-) q_{2\lambda}(\eta) \quad (5.30)
\end{aligned}$$

可以采取和单极对力类似的方法，把  $g_{\mu\mu'}^{\lambda*}$  与  $g_{v'v}^{\lambda}$  实数化。

这样，我们可以在一个足够大的 CMPC 空间中将  $H_{CSM}$  对角化，即可得到 CSM 哈密顿量的晕带和低激发带的足够精确的解。这些解可以表示为

$$|\varphi\rangle = \sum_i D_i |i\rangle \quad (5.31)$$

其中  $D_i$  取为实数。

转动惯量的计算

在  $|\varphi\rangle$  态下，角动量顺排为：

$$\langle\varphi|J_x|\varphi\rangle = \sum_i D_i^2 \langle i|J_x|i\rangle + 2 \sum_{i<j} D_i D_j \langle i|J_x|j\rangle \quad (5.32)$$

其中：

$$\begin{aligned} \langle i|J_x|i\rangle &= \sum_{\mu\alpha} \langle \mu\alpha|J_x|\mu\alpha\rangle P_{\mu\alpha}^i \\ P_{\mu\alpha}^i &= \begin{cases} 1, & |i\rangle \text{中} |\mu\alpha\rangle \text{态被粒子占据} \\ 0, & |i\rangle \text{中} |\mu\alpha\rangle \text{态无粒子占据} \end{cases} \end{aligned} \quad (5.33)$$

$\langle i|J_x|j\rangle$  的计算略微复杂一些。由于  $J_x$  是单体算符， $i \neq j$  时，只有当  $|i\rangle$  和  $|j\rangle$  相差一个粒子时才有矩阵元。设  $|i\rangle$  和  $|j\rangle$  相差的单核子态为  $\mu$  和  $\nu$ ，其它粒子态的填布都相同：

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |\cdots \mu \cdots\rangle \\ |j\rangle &= |\cdots \nu \cdots\rangle \end{aligned} \quad (5.34)$$

经过重排后化为

$$\begin{aligned} |i\rangle &= (-)^{M_{i\mu}} |\mu \cdots\rangle \\ |j\rangle &= (-)^{M_{j\nu}} |\nu \cdots\rangle \end{aligned} \quad (5.35)$$

其中  $M_{i\mu}$  和  $M_{j\nu}$  是重排的费米子交换的次数，由此可得出：

$$\langle i|J_x|j\rangle = \sum_{\mu\alpha, \nu\alpha'} (-)^{M_{i\mu}+M_{j\nu}} P_{\mu\alpha}^i P_{\nu\alpha'}^j \langle \mu\alpha|J_x|\nu\alpha'\rangle \delta_{\alpha\alpha'} \quad (5.36)$$

在求得角动量顺排后，原子核的运动学和动力学转动惯量  $J^{(1)}, J^{(2)}$  可如下求出：

$$\begin{aligned} J^{(1)} &= \frac{\langle\varphi|J_x|\varphi\rangle}{\omega} \\ J^{(2)} &= \frac{d\langle\varphi|J_x|\varphi\rangle}{d\omega} \end{aligned} \quad (5.37)$$

其中  $\omega$  为推转角频率。

更细致一些，还可以考虑处于各个推转单粒子轨道上的粒子分别对  $J^{(1)}$  和  $J^{(2)}$  的贡献：

$$\begin{aligned}\langle \phi | J_x | \phi \rangle &= \sum_{\mu\alpha} j^\alpha(\mu) + \sum_{\mu < \nu, \alpha} j^\alpha(\mu\nu) \\ j^\alpha(\mu) &= \langle \mu\alpha | j_x | \mu\alpha \rangle \sum_i D_i^2 P_{\mu\alpha}^i = \langle \mu\alpha | j_x | \mu\alpha \rangle n_{\mu\alpha}\end{aligned}\quad (5.38)$$

$$\begin{aligned}j^\alpha(\mu\nu) &= 2 \langle \mu\alpha | j_x | \nu\alpha \rangle \sum_{i < j} (-)^{M_{i\mu} + M_{j\nu}} P_{\mu\alpha}^i P_{\nu\alpha}^j D_i D_j, (\mu \neq \nu) \\ n_{\mu\alpha} &= \sum_i D_i^2 P_{\mu\alpha}^i\end{aligned}\quad (5.39)$$

$\langle \mu\alpha | j_x | \mu\alpha \rangle$  是  $|\mu\alpha\rangle$  态上单粒子的角动量顺排,  $n_{\mu\alpha}$  代表了推转的单粒子能级  $|\mu\alpha\rangle$  上粒子的填布几率。各个单粒子能级上的粒子分别对  $\langle \phi | J_x | \phi \rangle$  的贡献还可以表示为:

$$\begin{aligned}\langle \phi | J_x | \phi \rangle &= \sum_{\mu} j(\mu) + \sum_{\mu < \nu} j(\mu\nu) \\ j(\mu) &= j^+(\mu) + j^-(\mu) \\ j(\mu\nu) &= j^+(\mu\nu) + j^-(\mu\nu), (\mu \neq \nu)\end{aligned}\quad (5.40)$$

这里的  $\pm$  号分别指旋称  $\alpha = \pm 1/2$ , 这样单粒子态  $|\mu\rangle$  (包含  $\alpha = \pm 1/2$  两条能级) 对于转动惯量  $j^{(1)}, j^{(2)}$  的贡献可以表示为:

$$\begin{aligned}j^{(1)}(\mu) &= j(\mu) / \omega \\ j^{(1)}(\mu\nu) &= j(\mu\nu) / \omega \\ j^{(2)}(\mu) &= \frac{d}{d\omega} j(\mu) \\ j^{(2)}(\mu\nu) &= \frac{d}{d\omega} j(\mu\nu)\end{aligned}\quad (5.41)$$

PNC 方法的优势就在于处理对粒子数敏感的物理量, 特别是和堵塞效应有关的物理量, 例如各种类型的奇偶差。更进一步, 它可以提供与单粒子有关的详细信息, 如单粒子的填布几率, 单粒子对转动惯量的贡献等等, 对研究核结构中各种物理现象的微观机制很有价值。

## 参考文献

- [1] 例如参阅: A. de Shalit and H. Feshbach, *Theoretical Nuclear Physics*, vol. I. *Nuclear Structure* (John Wiley & sons, 1974);  
P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problems* (Springer, 1980).
- [2] B. R. Mottelson, in *The Many-Body Problems* (Lectures at Houches Summer School), p. 259.
- [3] 系统总结见 M. G. Mayer and J. H. D. Jensen, *Elementary Theory of Nuclear Shell Structure* (Wiley, New York, 1955).
- [4] S. G. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **29**, No. 16 (1955);  
S. G. Nilsson, et al., Nucl. Phys. **A131**, 1 (1969).
- [5] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, vol. I *Single-particle Motion* (Benjamin, 1969), vol. II *Nuclear Deformation* (Benjamin, 1975).
- [6] D. R. Inglis, Phys. Rev. **96** (1954), 1059.
- [7] Bohr A, Mottelson B R, Pines D, Phys. Rev, 1958, **10**:936.
- [8] 例如, 见, S. G. Nilsson and O. Prior, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **32**, No. 16 (1960).
- [9] 例如, 参见, 曾谨言, 孙洪洲, 《原子核结构理论》(上海科学技术出版社, 1987)。
- [10] 参见, 曾谨言, 《量子力学》第四版, 卷 I, 9.6 节 (科学出版社, 2007)。
- [11] Table of Isotopes CD-ROM, 8<sup>th</sup>.
- [12] R. Bengtsson, S. Frauendorf and F.-R. May, Atomic Data and Nuclear Data Tables, **35** (1986) 15.
- [13] R. Bengtsson, J. D. Garrett, Int. Rev. of Nucl. Phys., **2** (1984) 193.
- [14] S. M. Harris, Phys. Rev. Lett. **13** (1964), 663; Phys. Rev. **138** (1965), B509.
- [15] R. W. Richardson, Phys. Rev. **141** (1966) 949.
- [16] Rowe D J, *Nuclear Collective Motion* (Methuen, London, 1970).
- [17] H. Moligue and J. Dudek, Phys. Rev. **C 56**, 1795(1997).
- [18] H. J. Lipkin, Ann. Phys. (New York) **31** (1960), 525;  
Y. Nogami, Phys. Rev. **134** (1964), B313.
- [19] 例如, 参见 A. Goodman, Nucl. Phys. **A256** (1976) 113.
- [20] R. Bengtsson, I. Hamamoto and B. R. Mottelson, Phys. Lett. **73B** (1978), 259.
- [21] Wu C S, Zeng J Y, Phys. Rev. Lett. 1991, **66**: 1022.
- [22] Wu C S, Zeng J Y, Phys. Rev. **C40**, 998 (1989).
- [23] Zeng J Y, Jin T H, Zhao Z J, Phys. Rev., , **C50** (1994)1338
- [24] X. B. Xin, S. X. Liu, Y. A. Lei, J.Y. Zeng, Phys. Rev. **C62** (2000) 067303.
- [25] S. X. Liu and J. Y. Zeng, Phys. Rev., **C66** (2002) 067301
- [26] Zeng J Y , Cheng T S, Nucl. Phys., 1983, **A405**: 1
- [27] 金太浩, 北京大学博士学位论文, 1995 年 6 月。
- [28] 辛晓滨, 北京大学博士学位论文, 1999 年 7 月。
- [29] 刘树新, 北京大学博士学位论文, 2000 年 11 月。