

# A=15 和 17 原子核单粒能谱的理论计算

杨善德 井孝功 王克协 吴式枢

(吉林大学物理系)

## 摘 要

根据由格林函数方法导得的满壳层相邻核能谱所满足的方程,在取质量算符(按G矩阵展开)的一级近似下,应用 Hamada-Johnston 势,计算了 A=15 核的  $0s_{1/2}$ 、 $0p_{3/2}$ 、 $0p_{1/2}$  空穴态和 A=17 核的  $0d_{5/2}$ 、 $1s_{1/2}$ 、 $0d_{3/2}$  粒子态能谱与相应的跃迁振幅比,计算中严格顾及了G矩阵的能量相关性。文中对能谱方程自洽求解的收敛速度以及截断近似和选作表象的单粒谐振子势参数对计算结果的影响进行了考察。本文还讨论了质心伪态的消除问题,给出了引入质心谐振子势后计算G矩阵的具体公式。除  $0s_{1/2}$  态外,本文算得的能谱均消除了质心伪态的影响。与以往重整化的 Brueckner-Hartree-Fock (RBHF) 计算相比,本文采用的方法计算简单,结果与实验符合颇好。

## 一、引 言

双满壳层相邻核的单粒能谱是个基本的物理量,在核结构研究中有重要地位,它可以从现在核力出发进行研究,这方面已经进行了大量工作[参看例如 [1] 及其中所引的文献]。本文作者之一也曾应用格林函数方法系统地讨论过这个问题<sup>[2]</sup>,指出可以有两种途径来求单粒能谱。让我们记所选的单粒表象为

$$h|\alpha\rangle = (t + u)|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle, \quad (1)$$

这里  $t$  是单体动能算符,  $u$  是作为辅助量引进来的单粒子势。以  $E_0(A_0)$ 、 $\Psi_0(A_0)$  和  $E_n(A_0 \pm 1)$ 、 $\Psi_n(A_0 \pm 1)$  分别代表满壳层核(核子数为  $A_0$ ) 基态和其相邻核  $n$  态的严格能量本征值和本征函数,即

$$H(A_0)|\psi_0(A_0)\rangle = E_0(A_0)|\psi_0(A_0)\rangle, \quad (2)$$

$$H(A_0 \pm 1)|\psi_n(A_0 \pm 1)\rangle = E_n(A_0 \pm 1)|\psi_n(A_0 \pm 1)\rangle, \quad (3)$$

这里的

$$H(A) = \sum_{i=1}^A h_i + \sum_{i>j=1}^A v_{ij} - \sum_{i=1}^A u_i, \quad (4)$$

$v_{ij}$  是二体核力势。应用格林函数方法,由单粒格林函数的谱分解即它的 Lehmann 表示可以导得满壳层相邻核能谱所满足的方程是:

$$\sum_{\gamma} [(\varepsilon_{\alpha} - \mathcal{E}_{\mu}^{\pm})\delta_{\alpha\gamma} + M_{\alpha\gamma}(\mathcal{E}_{\mu}^{\pm}) - u_{\alpha\gamma}] C_{\gamma}^{\pm}(\mu) = 0, \quad (5)$$

式中的  $M(\omega)$  是质量算符, 它可以通过 Bruecker  $G$  矩阵作为展开基底得出来:

$$\mathcal{E}_{\mu}^{\pm} = \pm [E_{\mu}(A_0 \pm 1) - E_0(A_0)], \quad (6)$$

是满壳层相邻核的态  $\mu$  相对满壳层核基态的能量, 也就是习惯上所说的满壳层相邻核的能谱, 而

$$\begin{cases} C_{\gamma}^{+}(\mu) = \langle \psi_0(A_0) | \xi_{\gamma} | \psi_{\mu}(A_0 + 1) \rangle \\ C_{\gamma}^{-}(\mu) = \langle \psi_{\mu}(A_0 - 1) | \xi_{\gamma} | \psi_0(A_0) \rangle \end{cases} \quad (7)$$

是跃迁振幅, 它们正与  $(A_0 \pm 1) \rightleftharpoons A_0$  核的转移反应矩阵元相对应. 式 (5) 形式简单, 求解方便, 虽然式 (5) 中的  $M_{\alpha\gamma}$  与待求的能量值  $\mathcal{E}_{\mu}^{\pm}$  有关, 如采用自洽方法求解, 则应对  $\mathcal{E}_{\mu}^{\pm}$  做自洽, 不过下面将会看到, 对求低位置的单粒能谱来说, 所需的  $M(\omega)$  处于随  $\omega$  变化平缓的区域, 对式 (5) 作自洽求解的收敛速度是相当快的.

文献 [2] 还指出了求单粒能谱的另一个途径: 对于通过质量算符  $M$  来定义的单粒位阱  $U$

$$U_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}(\varepsilon_{\beta}) \quad [\text{或 } M_{\alpha\beta}(\varepsilon_{\alpha})], \quad (8)$$

[3] 证明了由单粒本征方程

$$(t + U)|\beta\rangle = \varepsilon_{\beta}|\beta\rangle, \quad (9)$$

确定的本征值  $\varepsilon_{\beta}$  恒严格满足以下关系:

$$\varepsilon_{\beta} = \pm [E_{\beta}(A_0 \pm 1) - E_0(A_0)], \quad (10)$$

因此, 通过求解式 (9) 就可以得到单粒能谱和相应的单粒态波函数, 即可以得到单粒位阱. 当对质量算符采取一定近似时, 对空穴态这个办法可化简为通常的 BHF 或 RBHF. 由于  $G$  矩阵的能量相关性, 在以往的 BHF 或 RBHF 计算中, 对  $U$  的粒子-粒子矩阵元的选取, 并没有严格的理论依据, 而我们按式 (8) 的选择却是明确的.

显然, 由式 (5) 求得的本征值不仅可包含  $(A_0 \pm 1)$  核的单粒子(空穴)谱, 而且也可包含它们的复杂运动态能谱. 但是, 由式 (9) 求得的却一定是  $(A_0 \pm 1)$  核的单粒子(空穴)谱. 因此, 就求单粒能谱而言, 采取求解式 (9) 应该是个更为理想的途径. 不过求解式 (9) 要比求解式 (5) 麻烦得多, 这是因为式 (8) 的  $U$  是在  $(t + u)$  表象中定义的, 将 (8) 代入 (9) 去求解时, 其中的  $U$  不仅依赖于待求的本征值, 而且依赖于待求的本征函数. 若用自洽方法求解, 则除了要求本征值自洽外, 还要求本征函数自洽.

我们对上述两种办法都进行了实际计算与考查. 作为第一步, 我们首先求解了式 (5), 这也可为进一步求解式 (9) 提供有益的参考. 本文将给出由式 (5) 得到的  $^{16}\text{O}$  相邻核的单粒能谱, 关于求解式 (9) 的结果将另行报道.

## 二、包含质心谐振子势时 $G$ 矩阵的计算公式

以往许多工作表明, 质心运动伪态对单粒能谱的影响有时是不能忽略的. 目前采用的消除质心运动伪态的一种办法是引进一个质心谐振子势, 它不影响我们所求解的内部运动状态, 但却使我们可以通过恰当选取质心谐振子势频率来达到消除质心伪态影响

的目的。对于满壳层附近核子数为  $(A_0 + a)$  [ $a$  可取正、负整数和零] 的原子核, 我们引进下述质心谐振子势:

$$u_{cm}(A_0 + a, \Omega_c) = \frac{m}{2} (A_0 + a) \Omega_c^2 R_s^2, \quad (11)$$

其中

$$R_s = \frac{1}{A_0 + a} \sum_{i=1}^{A_0+a} r_i, \quad \Omega_s = \Omega_c \sqrt{1 + \frac{a}{A_0}}, \quad (12)$$

$R_s$  是  $(A_0 + a)$  核的质心径向量,  $\Omega_c$  为对满壳层核  $A_0$  所引进的质心谐振子势的频率。(11) 可改写为:

$$u_{cm}(A_0 + a, \Omega_c) = \frac{m}{2} \left( \frac{\Omega_c}{\sqrt{A_0}} \right)^2 \sum_{i=1}^{A_0+a} r_i^2 + \sum_{i>j=i}^{A_0+a} m \left( \frac{\Omega_c}{\sqrt{A_0}} \right)^2 r_i \cdot r_j, \quad (11)'$$

就是说, 按 (11) 式引进的质心谐振子势等价于给体系的每个核子施加了一频率为  $\frac{\Omega_c}{\sqrt{A_0}}$  的单体谐振子势, 给体系的每一对核子施加了一个大小为  $m \left( \frac{\Omega_c}{\sqrt{A_0}} \right)^2 r_i \cdot r_j$  的二体相互作用。对于这样的作用势, 可以应用二次量子化方法用同一哈密顿量对  $A_0$  周围所有核作统一处理, 按 (11) 式引进质心谐振子势的好处就在这里。

引进质心谐振子势 (11) 之后,  $(A_0 + a)$  核的哈密顿量变为 (为了讨论方便, 这里先暂取在上节里作为辅助量引进的单粒子势  $u = 0$ , 取  $u \neq 0$  时完全不影响我们下面的讨论):

$$H(A_0 + a, \Omega_c) = H(A_0 + a) + u_{cm}(A_0 + a, \Omega_c) = \sum_{i=1}^{A_0+a} \hat{h}_i(\Omega_c) + \sum_{i>j=1}^{A_0+a} V_{ij}(\Omega_c) \quad (13)$$

$$\hat{h}_i(\Omega_c) = t_i + \frac{m}{2} \frac{\Omega_c^2}{A_0} r_i^2 \quad V_{ij}(\Omega_c) = v_{ij} + m \frac{\Omega_c^2}{A_0} r_i \cdot r_j \quad (14)$$

这里  $H(A_0 + a)$  是核  $(A_0 + a)$  的真正哈密顿量。众所周知,  $H(A_0 + a, \Omega_c)$  和  $H(A_0 + a)$  有相同的内部运动状态, 而  $H(A_0 + a, \Omega_c)$  又可严格分离质心运动与内部运动, 其质心运动部分就是谐振子态, 因此,  $H(A_0 + a, \Omega_c)$  的本征值可以写为

$$E_{n,N}(A_0 + a, \Omega_c) = E_n^{\text{int}}(A_0 + a) + \left( N + \frac{3}{2} \right) \hbar \Omega_c, \quad (15)$$

由此得

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{n,N}^{\pm}(\Omega_c) &= \pm [E_{n,N}(A_0 \pm 1, \Omega_c) - E_{n=0, N=0}(A_0, \Omega_c)] \\ &= \pm [E_n^{\text{int}}(A_0 \pm 1) - E_0^{\text{int}}(A_0)] \pm \left[ \left( N + \frac{3}{2} \right) \hbar \Omega_{\pm} - \frac{3}{2} \hbar \Omega_c \right], \quad (17) \end{aligned}$$

其中

$$\Omega_{\pm} = \Omega_{A_0 \pm 1} = \Omega_c \sqrt{1 \pm \frac{1}{A_0}} \quad (18)$$

由能谱方程直接解得的是  $\mathcal{E}_{n,N}^{\pm}(\Omega_c)$ , 而我们真正要求的单粒能谱应是其内部运动部分, 即

$$\mathcal{E}_n^{\pm} = \pm [E_n^{\text{int}}(A_0 \pm 1) - E_0^{\text{int}}(A_0)] = \mathcal{E}_{n,N}^{\pm}(\Omega_c) \mp \left[ \left( N + \frac{3}{2} \right) \hbar \Omega_{\pm} - \frac{3}{2} \hbar \Omega_c \right] \quad (19)$$

虽然对于  $H(A_0 + a, \Omega_c)$  的严格解来说, 质心运动可以严格分离出来,  $\mathcal{E}_n^{\pm}$  应与质心谐振子势频率  $\Omega_c$  无关, 但在  $N$  不知道时, 我们仍无法由直接解得的  $\mathcal{E}_{n,N}^{\pm}(\Omega_c)$  抽出所要求的  $\mathcal{E}_n^{\pm}$  来。不过我们可以考查下面的量:

$$\Delta \mathcal{E}_{\pm}^{\pm}(\Omega_c) = \mathcal{E}_{\pm, N}^{\pm}(\Omega_c) \mp \frac{3}{2} (\hbar \Omega_{\pm} - \hbar \Omega_c) = \pm [E_{\pm}^{\text{int}}(A_0 \pm 1) - E_0^{\text{int}}(A_0)] \pm N \hbar \Omega_{\pm} \quad (20)$$

随  $\Omega_c$  的变化, 通过计算, 如果能够找到  $\Omega_c$  的一个区间  $(\Omega_{c_1}, \Omega_{c_2})$  使  $\Delta \mathcal{E}_{\pm}^{\pm}$  不随  $\Omega_c$  而变的话, 就说明这时必有  $N=0$ , 即没有质心激发, 所得的能谱没有质心伪态的影响, 这时的  $\Delta \mathcal{E}_{\pm}^{\pm}$  就是我们所要求的能谱了。

下面我们来讨论引进质心谐振子势 (11) 后  $G$  矩阵的计算问题。我们采用 BHM 方法<sup>[4]</sup> 计算  $G$  矩阵:

$$G(\omega) = v + v \frac{Q}{\omega - H_0(2)} G(\omega), \quad (21)$$

式中的  $Q$  为泡利算符, 若记二体问题的本征解为

$$H_0(2)\phi_{\alpha}(2) = \varepsilon_{\alpha}(2)\phi_{\alpha}(2), \quad (22)$$

$$H(2)\psi_i(2) = [H_0(2) + v_{12}]\psi_i(2) = \varepsilon_i(2)\psi_i(2), \quad (23)$$

则在  $H_0(2)$  表象中  $G$  矩阵所满足的非齐次线性方程组是

$$\sum_{\mu} \left[ \delta_{\beta\mu} + G_{\beta\mu}^R(\omega) \frac{1 - Q_{\mu}}{\omega - \varepsilon_{\mu}(2)} \right] G_{\mu\alpha}(\omega) = G_{\beta\alpha}^R(\omega) \quad (24)$$

其中的参考  $G$  矩阵  $G^R$  可按下式算出

$$G_{\beta\alpha}^R(\omega) = [\varepsilon_{\alpha}(2) - \omega] \left[ \delta_{\beta\alpha} - (\varepsilon_{\beta}(2) - \omega) \sum_i \frac{b_{\beta i} b_{i\alpha}}{\varepsilon_i(2) - \omega} \right] \quad (25)$$

$$b_{i\alpha} = \langle \psi_i(2) | \phi_{\alpha}(2) \rangle \quad (26)$$

式 (24) 和 (25) 是一般的, 不依赖于  $H_0(2)$  的具体选择。若选  $H_0(2)$  为谐振子哈密顿量, 则  $H(2)$  可分离质心运动与相对运动, 从而使 (23) 式便于求解, 文献 [4] 给出了这时计算重叠积分  $b_{i\alpha}$  的具体公式为:

$$b_{i\alpha} = \sum_{n(l)} C_{\alpha}(nl, \mathcal{J}NL; JT) \langle m(l), \mathcal{J}T | nl \rangle \quad (27)$$

这里的  $C_{\alpha}$  是双粒子的谐振子波函数  $\phi_{\alpha}(2)$  变换到质心与相对坐标系时的变换系数,  $\langle m(l), \mathcal{J}T | nl \rangle$  是  $H(2)$  的相对运动径向波函数  $|m(l), \mathcal{J}T\rangle$  与谐振子径向波函数  $|nl\rangle$  间的重叠积分。

本文在实际计算时取第一节提到的单粒子势  $u$  为谐振子势:

$$u(Q) = \frac{m}{2} \Omega^2 r^2, \quad (28)$$

这样一来, 加上引进的质心谐振子势 (11), 我们选作表象的单粒哈密顿量就成为

$$h(Q, \Omega_c) = t + \frac{m}{2} \left( \frac{\Omega_c}{\sqrt{A_0}} \right)^2 r^2 + \frac{m}{2} \Omega^2 r^2 = t + \frac{m}{2} \Omega_0^2 r^2, \quad (29)$$

$$\Omega_0 = \sqrt{\Omega^2 + \frac{\Omega_c^2}{A_0}}, \quad (30)$$

它仍是谐振子哈密顿量, 只是频率为  $\Omega_0$  了, 与此相应, 现在的二体哈密顿量成为

$$H_0(2, Q, \Omega_c) = \sum_{i=1}^2 h_i(Q, \Omega_c) = T_R + \frac{M}{2} \Omega_0^2 R^2 + T_r + \frac{\mu}{2} \Omega_0^2 r^2, \quad (31)$$

$$H(2, Q, \Omega_c) = H_0(2, Q, \Omega_c) + v_{12} + m \left( \frac{\Omega_c}{\sqrt{A_0}} \right)^2 \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$$

$$= T_R + \frac{M}{2} \Omega_R^2 R^2 + T_r + \frac{\mu}{2} \Omega^2 r^2 + v_{12}, \quad (32)$$

$$\Omega_R = \sqrt{\Omega^2 + 2 \frac{\Omega_c^2}{A_0}}, \quad M = 2m, \quad \mu = \frac{m}{2} \quad (33)$$

就是说,包含核力的二体哈密顿  $H(2)$  的相对运动部分与没有引进质心谐振子势时完全一样,但其质心部分已是频率为  $\Omega_R$  的谐振子哈密顿了。由于  $H_0(2, \Omega, \Omega_c)$  仍是谐振子哈密顿,故仍可按文献 [4] 的办法在  $H_0(2, \Omega, \Omega_c)$  表象中计算  $G$  矩阵,只是现在由于  $H_0(2, \Omega, \Omega_c)$  和  $H(2, \Omega, \Omega_c)$  的质心部分的谐振频率不同,在计算  $b_{ia}$  时其质心波函数部分不再有在  $\Omega_R = \Omega_0$  时存在的正交归一性,因而现在应将计算  $b_{ia}$  的 (27) 式修改为

$$b_{ia} = \sum_{n(l)N} C_n(nl s \mathcal{J} \mathcal{N} L; JT) \langle m(l) s \mathcal{J} T | nl[\Omega_0] \rangle \langle NL[\Omega_R] | \mathcal{N} L[\Omega_0] \rangle \quad (34)$$

这里我们特意在方括号里把谐振子波函数的谐振频率标了出来,目的是为了提起注意。显然,当  $\Omega_c = 0$  即  $\Omega_R = \Omega_0 = \Omega$  时,有

$$\langle NL[\Omega_R = \Omega] | \mathcal{N} L[\Omega_0 = \Omega] \rangle = \delta_{N, \mathcal{N}}$$

这时 (34) 式自然简化成 (27) 式。顾及到式 (34) 与 (27) 的差别之后,包含有质心谐振子势 (11) 时的  $G$  矩阵就可以和没有质心谐振子势时同样的办法计算了。至于频率不同的两个谐振子波函数间的重叠积分  $\langle NL[\Omega_R] | \mathcal{N} L[\Omega_0] \rangle$  不难解析地积出来,因其表达式比较冗长,这里就不具体的写出来了。

### 三、 $A=15$ 和 17 原子核的单粒子能谱

本文应用 Hamada-Johnston 势<sup>[5]</sup>具体计算了  $A=15$  核的  $0d_{3/2}$ 、 $0p_{3/2}$ 、 $0p_{1/2}$  空穴态和  $A=17$  核的  $0d_{3/2}$ 、 $1s_{1/2}$ 、 $0d_{3/2}$  粒子态的能谱。式 (5) 本身是严格的,但在做实际计算时总要取些近似。首先,本文对质量算符只取了一级近似:

$$M_{\alpha, \beta}^{(1)}(\omega) = \sum_h G_B(\alpha h, \beta h; \omega + \epsilon_h) \quad (35)$$

这里  $h$  代表空穴态,  $G_B$  为 Brueckner  $G$  矩阵, (35) 式用图形来表示就是



图 (a)

实际计算时需要将式 (35) 由非耦合表象变换到总角动量  $J$  和总同位旋  $T$  取确定值的耦合表象去,其结果是

$$M_{\alpha, \beta}^{(1)}(\omega) = \delta_{l_\alpha, l_\beta} \delta_{i_\alpha, i_\beta} \delta_{m_\alpha, m_\beta} \delta_{r_\alpha, r_\beta} [2(2j_\alpha + 1)]^{-1} \sum_h \sum_{JT} \sqrt{(1 + \delta_{\alpha h})(1 + \delta_{\beta h})} (2J + 1) \\ \times (2T + 1) G_B(\alpha h, \beta h [JT]; \omega + \epsilon_h) \quad (35)'$$

这里的  $G_B(\alpha h, \beta h [JT]; \omega + \epsilon_h)$  是  $[JT]$  取确定值的反对称并归一化了的  $G$  矩阵元。我们应用的  $G$  矩阵是按 BHM 方法用自编程序在 CYBER-172 机上计算的,计算中顾及了  $(2n + 1) \leq 8$  的全部 45 条单粒能级,模型空间的选择如图 1 所示

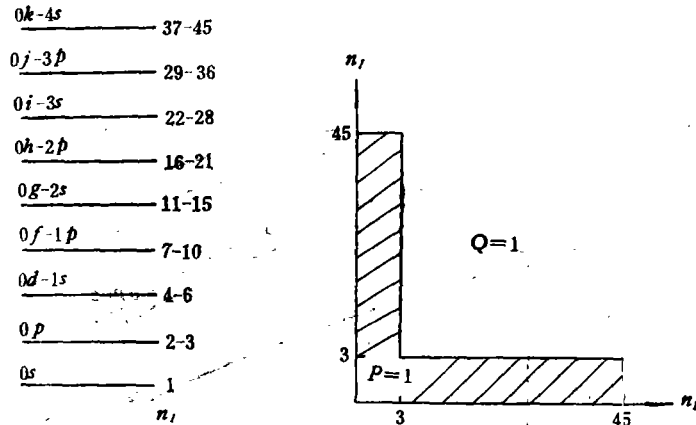


图 1 本文计算  $G$  矩阵时所顾及的单粒能级和所选的模型空间

能谱方程 (5) 中的单粒谐振子势  $u(Q)$  在  $h(Q, Q_c)$  表象中的矩阵元是

$$u_{\alpha, \beta} = \left\langle \alpha \left| \frac{mQ^2}{2} \gamma^2 \right| \beta \right\rangle = \delta_{l_{\alpha}, l_{\beta}} \delta_{i_{\alpha}, i_{\beta}} \delta_{m_{\alpha}, m_{\beta}} \delta_{r_{\alpha}, r_{\beta}} \frac{(\hbar Q)^2}{2\hbar Q_0} \left[ -\delta_{n_{\alpha}, n_{\beta}-1} \times \sqrt{n_{\alpha} \left( n_{\alpha} + l_{\alpha} + \frac{1}{2} \right) + \delta_{n_{\alpha}, n_{\beta}} \left( 2n_{\alpha} + l_{\alpha} + \frac{3}{2} \right) - \delta_{n_{\alpha}, n_{\beta}-1} \sqrt{(n_{\alpha} + 1) \left( n_{\alpha} + l_{\alpha} + \frac{3}{2} \right)} \right] \quad (36)$$

下面就能谱方程 (5) 求解中的有关问题和结果分别讨论如下:

(一) 式 (5) 自治求解的收敛速度

由于  $G$  矩阵是能量相关的, 能谱方程 (5) 中的质量算符与待求的能量  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm}$  有关, 可通过自治办法求解。具体步骤是: 先给定一个初值  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm(0)}$ , 由 (35)' 算出  $M_{\alpha, \tau}(\mathcal{E}_{\pm}^{\pm(0)})$  后代入 (5) 从中解出  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm}$ , 记它为  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm(1)}$ , 若  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm(1)} = \mathcal{E}_{\pm}^{\pm(0)}$ , 它就是所要的解了, 若  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm(1)} \neq \mathcal{E}_{\pm}^{\pm(0)}$ , 可将  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm(1)}$  再代入 (35)', 重复上述步骤, 直到自治 (即  $\mathcal{E}_{\pm}^{\pm(n)} = \mathcal{E}_{\pm}^{\pm(n-1)}$ ) 时就得到了所要的解。熟知,  $G$  矩阵的能量相关性是不能忽视的, 然而对空穴态和低位置的单粒态, 求解式 (5) 所需的  $G$  矩阵离  $G$  矩阵的奇异区较远, 其质量算符  $M^{(1)}$  随  $\omega$  的变化相当平缓。图 2 画出了  $0s_{1/2}, 0p_{1/2}, 0p_{3/2}, 0d_{3/2}, 1s_{1/2}$  和  $0d_{5/2}$  态的对角矩阵元  $M_{\alpha, \alpha}^{(1)}(\omega) \sim \omega$  曲线, 它们在各自的单粒能量值附近随  $\omega$  的变化几乎是线性的。正是  $M_{\alpha, \alpha}^{(1)}$  随  $\omega$  变化的平稳性, 保证了式 (5) 的自治解是稳定的, 而且收敛速度相当快, 一般迭代 3—4 次就自治了, 因此按式 (5) 计算单粒能谱是简单方便的。

(二) 截断近似

实际计算时还要对式 (5) 中的求和  $\sum$  取截断近似。为了考察截断近似的收敛性, 我们在  $\hbar Q_c = 0$ 、 $\hbar Q = 14\text{MeV}$  和  $\hbar Q = 16\text{MeV}$  两种情况下, 取不同的截断近似做了计算, 结果列在表 1 和表 2 ( $\hbar Q = 14\text{MeV}$  的与  $16\text{MeV}$  的相似, 故没有列出), 发现空穴态都相当纯, 收敛很快, 对截断阶数要求不高, 这与以往 BHF 和 RBHF 计算发现谐振子波函数是空穴态波函数的很好近似的结论是一致的。但粒子态却不然,  $d$  态截断到四阶、 $s$  态截断到五阶时看来都还没有收敛。进一步提高截断阶数对求解式 (5) 并不增加什么困难, 但是由于我们在计算  $G$  矩阵时最高的单粒子态只取到  $3d-4s$  壳 (图 1), 这就限制了  $s$  和  $d$  态的最高截断阶数只能取到五阶和四阶。进一步提高截断阶数要求在计算  $G$  矩阵时

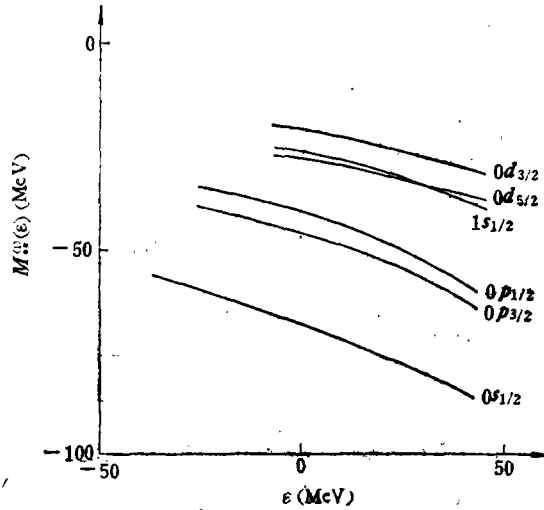


图2 质量算符矩阵元随能量的变化

顾及更多的单粒子态,这虽然没有原则性困难,但计算机时将显著增加.从表1和2的数据,可以预计现在最高截断阶数所得到的粒子态能谱与收敛解不会有多大的差别了,因此我们没有再做进一步提高截断阶数的计算.

表1  $\hbar\Omega = 16\text{MeV}$ ,  $\hbar\Omega_c = 0$  时在不同截断近似下算得的单粒能谱

态 $0s_{1/2}$ 截断阶数	$0s_{1/2}$	$0p_{3/2}$	$0p_{1/2}$	$0d_{3/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{5/2}$
三阶		-20.86	-16.79	-0.78		3.64
四阶	-42.59	-20.87	-16.80	-0.97	-0.42	3.30
五阶	-42.59				-0.82	

表2、 $\hbar\Omega = 16\text{MeV}$ ,  $\hbar\Omega_c = 0$  时各单粒子(空穴)态的跃迁振幅比

$C_{ij}^{(r)}$ $0s_{1/2}$	$n$	0	1	2	3	4
-42.59(MeV), $0s_{1/2}$		0.9999	-0.0075	0.0002	-0.0084	0.0037
-20.87(MeV), $0p_{3/2}$		0.9991	-0.0170	0.0312	-0.0198	
-16.80(MeV), $0p_{1/2}$		0.9947	-0.0504	0.0507	-0.0120	
-0.97(MeV), $0d_{3/2}$		0.9740	-0.1759	0.1289	-0.0615	
-0.82(MeV), $1s_{1/2}$		-0.0638	0.9213	-0.3112	0.2042	-0.0891
3.30(MeV), $0d_{5/2}$		0.9235	-0.3179	0.1969	-0.0861	

(三) 质心伪态消除问题

为了考查质心伪态的消除情况,我们在  $s$  态截断到五阶、 $p$  和  $d$  态截断到四阶,  $\hbar\Omega =$

表 3  $s$  态截断到五阶,  $p$  和  $d$  态截断到四阶, 取不同  $\hbar\Omega$  和  $\hbar\Omega_c$  值求得的单粒能谱 (MeV)

态	$\hbar\Omega, \hbar\Omega_c$	$\hbar\Omega = 16\text{MeV}$			
		$\hbar\Omega_c = 0$		$\hbar\Omega_c = 7\text{MeV}$	
		$\mathcal{E}^\pm = \Delta\mathcal{E}^\pm$	$\mathcal{E}^\pm = \Delta\mathcal{E}^\pm$	$\mathcal{E}^\pm$	$\Delta\mathcal{E}^\pm[\%]$
$0s_{1/2}$	$\hbar\Omega = 14\text{MeV}, \hbar\Omega_c = 0$	-39.86	-42.59	-42.75	-43.08(-42.72)
$0p_{3/2}$		-20.00	-20.87	-20.66	-20.99(-20.91)
$0p_{1/2}$		-16.94	-16.80	-16.54	-16.87(-16.79)
$0d_{3/2}$		-1.634	-0.97	-0.62	-0.94(-0.91)
$1s_{1/2}$		-1.63	-0.82	-0.40	-0.72(-0.78)
$0d_{5/2}$		1.80	3.30	3.77	3.45(3.37)

[注]: 关于括号内的值的说明见正文.

16MeV 条件下, 取  $\hbar\Omega_c = 0$  和 7MeV 两种情况做了计算, 结果列在表 3. 表中  $\mathcal{E}^\pm(\Omega, \Omega_c)$  是在给定的  $\hbar\Omega$  和  $\hbar\Omega_c$  下由式 (5) 得到的能量自洽解, 而

$$\Delta\mathcal{E}^\pm(\Omega, \Omega_c) = \mathcal{E}^\pm(\Omega, \Omega_c) \mp \frac{3}{2} \hbar(\Omega_\pm - \Omega_c)$$

是从  $\mathcal{E}^\pm(\Omega, \Omega_c)$  中扣除了质心运动零点能量后得到的. 从表中的数据看出, 除了  $^{15}\text{O}$  的  $0s_{1/2}$  空穴态外, 其他态的  $\Delta\mathcal{E}^\pm$  值在  $\hbar\Omega_c = 0$  和 7MeV 时十分接近(注意,  $\hbar\Omega_c = 0$  和 7MeV 的  $\Delta\mathcal{E}^\pm$  值的差别有部分实际来自所用表象的谐振频率有微小差别, 比较表中  $\hbar\Omega = 14$  MeV 和 16MeV 的数据看出, 我们的计算结果与表象的  $\hbar\Omega$  值相关,  $\hbar\Omega = 16\text{MeV}$  和  $\hbar\Omega_c = 7\text{MeV}$  时对应于表象的  $\hbar\Omega_0 = 16.1\text{MeV}$ , 表中方括号里列的就是由  $\hbar\Omega_0 = 14\text{MeV}$  和  $\hbar\Omega_0 = 16\text{MeV}$  的结果按线性外推得到的对应  $\hbar\Omega_0 = 16.1\text{MeV}$  时的  $\Delta\mathcal{E}^\pm$  值, 用这些值去与  $\hbar\Omega_c = 7\text{MeV}$  时的  $\Delta\mathcal{E}^\pm$  值相比较显然是更为合理的), 说明在  $\hbar\Omega_c = 0$  附近, 我们得到的这些单粒谱都没有质心伪态的影响, 或者说影响很小, 这无疑是个比较理想的结果. 至于  $^{15}\text{O}$  的  $0s_{1/2}$  空穴态能谱, 存在着质心伪态的影响, 这可能是由于  $0s_{1/2}$  态的激发能高, 质心伪态可以激发的缘故, 我们可以尝试进一步提高  $\hbar\Omega_c$  的取值, 看看能否消除它的质心伪态, 这个问题还有待于进一步研究.

#### (四) 计算结果与单粒谐振子势 $u$ 的相关性

严格的理论计算结果应与所选表象的单粒谐振子势  $u$  无关, 但由于实际计算时作了近似, 这个要求不一定能满足. 本文除在计算  $G$  矩阵和求解能谱方程时做了截断近似外, 另一个主要近似是只取了质量算符的一级近似. 从表 3 看出, 本文算出的能谱明显地与  $\hbar\Omega$  相关, 能级间隔随  $\hbar\Omega$  而增大, 而  $0p_{1/2}$  空穴态似乎对  $\hbar\Omega$  不大敏感, 比较稳定. 这里我们想着重讨论一下计算结果与单粒谐振子势  $u$  的能量零点选择的关系, 代替式 (28) 可以

$$\text{更一般的选} \quad \tilde{u}(\Omega, B) = \frac{m}{2} \Omega^2 r^2 + B \quad (28)'$$

这里  $B$  是能量零点常数. 在  $\hbar = \epsilon + u$  和  $\tilde{\hbar} = \epsilon + \tilde{u}$  表象中的能谱方程分别为

$$\sum_{\gamma} [(\epsilon_{\alpha} - \epsilon_{\beta}^{\pm})\delta_{\alpha\gamma} + M_{\alpha\gamma}(\mathcal{E}^{\pm}) - u_{\alpha\gamma}] C_{\beta}^{\pm}(\mu) = 0$$

和



$$\sum_{\nu} [(\tilde{\epsilon}_{\alpha} - \tilde{\mathcal{E}}_{\alpha}^{\pm})\delta_{\alpha\nu} + \tilde{M}_{\alpha\nu}(\tilde{\mathcal{E}}_{\alpha}^{\pm}) - \tilde{u}_{\alpha\nu}] \tilde{C}_{\nu}^{\pm}(\mu) = 0$$

注意到  $\tilde{\epsilon}_{\alpha} = \epsilon_{\alpha} + B$ ,  $\tilde{u}_{\alpha\nu} = u_{\alpha\nu} + B\delta_{\alpha\nu}$ , 即  $\tilde{\epsilon}_{\alpha}\delta_{\alpha\nu} - \tilde{u}_{\alpha\nu} = \epsilon_{\alpha}\delta_{\alpha\nu} - u_{\alpha\nu}$   
 但是由于本文只取了质量算符的一级近似, 若记

$$\tilde{H}_0(2)\phi_{\alpha}(2) = \left[ \sum_{i=1}^2 (t_i + \tilde{u}_i) \right] \phi_{\alpha}(2) = \tilde{\epsilon}_{\alpha}(2)\phi_{\alpha}(2)$$

$$\tilde{H}(2)\phi_i(2) = [\tilde{H}_0(2) + \nu_{\alpha}] \phi_i(2) = \tilde{\epsilon}_i(2)\phi_i(2)$$

显然  $\tilde{\epsilon}_{\alpha}(2) = \epsilon_{\alpha}(2) + 2B$ ,  $\tilde{\epsilon}_i(2) = \epsilon_i(2) + 2B$ , 而本征函数  $\phi_{\alpha}(2)$  和  $\phi_i(2)$  与  $B=0$  时是一样的。据此由(24)–(26)容易证明,  $H_0(2)$  表象的  $G(\omega)$  与  $\tilde{H}_0(2)$  表象的  $\tilde{G}(\omega)$  之间恒满足  $\tilde{G}(\omega) = G(\omega - 2B)$ , 相应地有  $\tilde{M}^{(\omega)}(\omega) = M^{(\omega)}(\omega - B)$ , 由于  $G$  因而  $M^{(\omega)}$  是能量相关的, 不同  $B$  值时的  $M^{(\omega)}(\omega)$  与  $\tilde{M}^{(\omega)}(\omega)$  不一样, 因此由它们求得的能谱也会不一样, 这说明本文的计算结果与  $B$  相关是只取了质量算符一级近似的结果。表4和图3、图4给出了不同  $B$  值下的计算结果, 可以看出它的特点是: 能谱的数值和  $B$  关系甚大, 随  $B$  近乎线性的变化, 但比满壳层少(多)一个粒子的空穴(粒子)核的各能级间的相对间隔对  $B$  却不大敏感, 比较稳定, 尤其是  $l$  相同的两条能级间的劈裂甚至是相当稳定的。以往所有

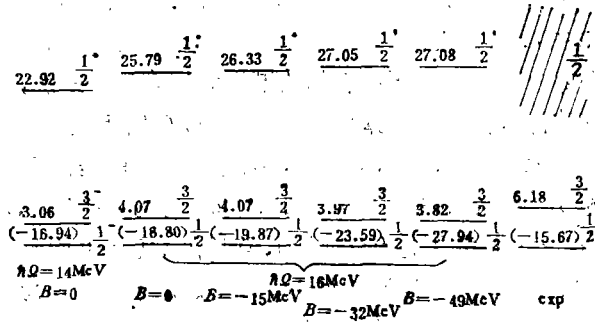


图3  $^{16}\text{O}$  空穴态能谱与所用表象谐振子势参数  $\hbar\Omega$  和  $B$  的关系。图中基态圆括号里的值是与  $^{16}\text{O}$  基态的能量差  $\mathcal{E}_0^{\pm} = E_0(^{16}\text{O}) - E_0(^{15}\text{O})$ 。

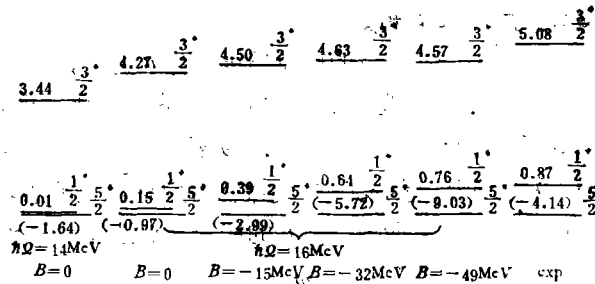


图4  $^{16}\text{O}$  粒子态能谱与所用表象的谐振子势参数  $\hbar\Omega$  和  $B$  的关系。图中基态圆括号里的值是与  $^{16}\text{O}$  的能量差  $\mathcal{E}_0^{\pm} = E_0(^{17}\text{O}) - E_0(^{16}\text{O})$ 。

BHF 和 RBHF 计算都没有顾及  $G$  矩阵中传播子  $\frac{Q}{\omega - H_0(2)}$  的自洽问题, 存在着对  $H_0(2)$  谱能量零点常数选择的不确定性, 发现计算结果都和  $B$  的选择关系甚大, 例如可参

看 [6], 其原因就是我们上面所讨论的. 究竟需要顾及到质量算符的那些高级图形后才能得到与  $\mu$  的选择无关的结果, 以及在给定近似下, 究竟那些计算结果是与  $\mu$  的选择无关的, 这些无疑都是值得进一步研究的很有兴趣的问题. 这方面的工作也正在继续进行.

### (五) 与以往 RBHF 计算及实验值的比较

由于计算结果与  $\hbar\Omega$  和  $B$  的选择有关, 这给理论与实验值的对比带来了不确定因素, 从这个意义上看, 它们实际上起着可调参数的作用. 不过大家知道, 由单粒谐振子波函数可以估算出  $^{16}\text{O}$  的均方半径, 与实验值比较要求取  $\hbar\Omega \approx 41A^{-1/3} = 16.27(\text{MeV})$ , 此外, 由  $0p$  和  $0d-1s$  单粒能谱实验值作壳平均后得到的这两个大壳的能级间隔值为  $16.5 \text{ MeV}$ , 因此, 我们认为对  $^{16}\text{O}$  附近核, 取  $\hbar\Omega = 16\text{MeV}$  是合理的. 至于能量零点常数  $B$  的选取, 在现在的单粒谱计算中, 原则上没有特殊限制, 不过如前所述, 每个核的各能级的相对间隔对  $B$  是不敏感的. 通过实际计算, 我们发现取  $B = -49\text{MeV}$  时按 (5) 和 (35) 算得的单粒谱与按 (9) 求得的 BHF 计算结果相近, 而取  $B = 0$  时按 (5) 和 (35) 算得的单粒谱与按 (9) 求得的 RBHF 结果相近. 也就是说, 由 (5) 和 (36) 算得的单粒谱, 在取  $B = 0$  时相当于等效的顾及了部分高级图的影响. 根据这个情况, 我们取了  $B = 0$  的计算结果来和实验值作比较.

表 5 及图 3、4 列出了我们的计算结果与以往用 H-J 势所做的 RBHF 计算及实验值的比较(由于轨道重排效应显著, 由 BHF 算出的单粒能谱不能直接与实验值作比较), 无论是能谱的数值或是能级的间隔, 本文的结果总的看来比以往 RBHF 的稍好一点, 与实验值符合得是不错的, 尤其是粒子谱. 存在的一个共同的问题是,  $p$  态和  $d$  态的自旋轨道劈裂都比实验值小, 粒子态能谱普遍比实验值高, 这除了截断近似有些影响, 某些高级图

表 4.  $\hbar\Omega = 16\text{MeV}$ ,  $\hbar\Omega_c = 0$  时, 在不同  $B$  值下算得的单粒能谱 (MeV)

$\sigma^{\pi}$ 态	$B = 0$	$B = -15\text{MeV}$	$B = -32\text{MeV}$	$B = -49\text{MeV}$
$0s_{1/2}$	-42.59	-46.20	-50.64	-55.02
$0p_{3/2}$	-20.87	-23.94	-27.56	-31.76
$0p_{1/2}$	-16.80	-19.87	-23.59	-27.94
$0d_{5/2}$	-0.97	-2.99	-5.72	-9.03
$1s_{1/2}$	-0.82	-2.60	-5.08	-8.27
$0d_{3/2}$	3.30	1.51	-1.09	-4.46

表 5. 本文算得的单粒谱 ( $\hbar\Omega = 16\text{MeV}$ ,  $\hbar\Omega_c = 0$ ,  $B = 0$  时) 与以往 RBHF 计算及实验值的比较

$\sigma^{\pi}$ 来源	$0s_{1/2}$	$0p_{3/2}$	$0p_{1/2}$	$0d_{5/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{3/2}$
Bec1 <sup>[1]</sup>	-41.6	-21.6	-18.3	-0.3	0.8	4.8
BDP <sup>[2]</sup>	-41.4	-21.3	-17.7	-0.21	0	4.03
本文	-42.59	-20.87	-16.80	-0.97	-0.82	3.30
exp		-21.86	-15.68	-4.14	-3.27	0.94

型的影响也还需进一步考虑外,很可能也反映了所用核力势存在的问题。事实上,我们用 Reid 势和 Paris 势算得的结果<sup>[7]</sup>的确比 H-J 势的要好。

综上所述,应用由格林函数导得的满壳相邻核能谱所满足的方程(5)计算核的单粒能谱,是简单可行的。本文对与此有关的问题进行了比较细致的讨论。实际计算表明:在质量算符一级近似下取  $B = 0$  算得的单粒谱与通常的 RBHF 结果相当,与实验符合颇好。

### 参 考 文 献

- [1] J. P. Svenne, *Advances in Nuclear Physics*, Vol. 11, p. 179 (Plenum press, New York, 1979).
- [2] 吴式枢等, *原子核物理*, 2(1980), 193.
- [3] 吴式枢, *物理学报*, 25(1976), 433.
- [4] B. R. Barrett et al., *Phys. Rev.*, C3(1971), 1137.
- [5] T. Hamada et al., *Nucl. Phys.*, 34(1962), 382.
- [6] K. T. R. Davies et al., *Phys. Rev.*, C4(1971), 81; R. K. Tripathi et al., *Phys. Rev.*, C10(1974), 2080.
- [7] 王克协等,  $A=15$  和  $17$  原子核的单粒能谱与核力势, *高能物理与核物理*, 见本期。
- [8] R. L. Becker et al., *Phys. Rev. Lett.*, 24(1970), 400; *Phys. Rev.*, C9(1974), 1221.

## SINGLE PARTICLE AND SINGLE HOLE ENERGIES IN THE $^{16}\text{O}$ REGION

YANG SHAN-DE, JING XIAO-GONG, WANG KE-XIE, WU SHI-SHU

(Department of Physics, Jilin University)

### ABSTRACT

Using the eigenvalue equation derived from the single particle (sp) Green's function and the reaction (G) matrix based on the Hamada-Johnston potential, we have calculated the sp energies of  $^{16}\text{O}$  and the sh (hole) energies of  $^{16}\text{O}$  as well as the relative magnitude of the corresponding transfer matrix elements. As a first step, we have only considered an approximation for the mass operator up to the first-order in G, however the energy dependence of G has been taken into account properly. The eigenvalue equation is solved by a self-consistent procedure (SCP). We have specifically investigated the rate of convergence of this SCP and that of the truncation approximation. Further, the effect of the spurious center of mass motion and the dependence of our results on the input values of parameters of the harmonic oscillator potential which is used as the initial approximation of our SCP have also been studied. The calculated results fit the experimental values quite well, though the method used is much simpler than the renormalized Brueckner-Hartree-Fock method.