

# 双准自旋模型的严格好准自旋态能谱\*

廖继志<sup>1)</sup>

(四川大学物理系 成都 610064)

1993年1月4日收到

## 摘 要

提出了两种新形式的约束哈特里-福克方法,并在  $SU(2) \times SU(2)$  双准自旋模型中讨论了它们的解。研究了建立严格好准自旋态的对角化方法,并对好准自旋态能谱的特点和近似带结构的划分进行了探讨。两种 CHF 能谱与严格能谱的比较表明,它们都具有转动谱的特征;在相互作用不太强的体系中,新方案是获得好准自旋态的、能产生多带能谱结构的有效方法。

**关键词** 双准自旋模型,约束哈特里-福克方法,非轴对称性,  $K$ -结构,转动带结构。

## 1 引 言

约束哈特里-福克 (CHF) 方法已成功地用于研究原子核的形变能<sup>[1-3]</sup>。在转动能谱计算方面,角动量平方约束的 HF 方法也得到了初步的应用<sup>[4-6]</sup>,但表现出一些缺陷:对  $^{20}\text{Ne}$  核,  $K=0$  带的  $0^+, 2^+$  态具有非物理态性质<sup>[4]</sup>,或者具有不正确的能级顺序<sup>[5]</sup>。在可解模型的研究中<sup>[7]</sup>,也发现类似问题。本工作在双准自旋模型<sup>[8]</sup>中探讨能克服上述缺点的 CHF 新方案,并建立严格好准自旋态能谱以便对 CHF 能谱的有效性进行检验,发现可能存在的问题。为了后文讨论的方便,首先对双准自旋模型作简短介绍。

在我们的模型<sup>[8]</sup>中,  $N$  个费米子填充能量相差为  $\varepsilon$  (任意单位) 的两条简并能级。用量子数  $\sigma = +1$  和  $-1$  分别标记上能级和下能级,用  $a_{p\sigma}^+ (a_{p\sigma})$  表示费米子产生(湮没)算符。定义粒子数算符  $N$  和三套准自旋算符  $L_{\pm}, L_z, I_{\pm}, I_z$  和  $J_{\pm}, J_z$ :

$$N = \sum_{p\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} = \sum_p (a_{p+}^+ a_{p+} + a_{p-}^+ a_{p-}); \quad (1)$$

$$L_+ = \frac{1}{2} \sum_p a_{p+}^+ (a_{p-} + a_{-p-}), \quad L_- = L_+^\dagger, \quad L_z = \frac{1}{4} \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^+ (a_{p\sigma} + a_{-p\sigma}); \quad (2)$$

$$I_+ = \frac{1}{2} \sum_p a_{p+}^+ (a_{p-} - a_{-p-}), \quad I_- = I_+^\dagger, \quad I_z = \frac{1}{4} \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^+ (a_{p\sigma} - a_{-p\sigma}); \quad (3)$$

\* 国家自然科学基金资助项目。

1) 中国高等科学技术中心,北京100080。

$$J_{\pm} = L_{\pm} + I_{\pm}, J_z = L_z + I_z, a_{p\pm}^+ = a_{p\pm+1}^+, \quad (4)$$

这里  $p = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2$  区分同一能级上的简并态, 准自旋算符  $L_{\pm}, L_z$  和  $I_{\pm}, I_z$  构成乘积群  $SU(2) \times SU(2)$  的生成元, 而准自旋  $\hat{J}$  正好是  $\hat{L}$  和  $\hat{I}$  的矢量耦合. 借助于这些算符可将模型哈密顿量写成<sup>[8]</sup>

$$H = J_z + v(J^2 - I^2 - L^2) + w(I_+L_+ + I_-L_-), \quad (5)$$

这里以能量  $\varepsilon$  为单位, 因而  $H$  和相互作用强度参量  $v, w$  都变成无量纲的量.  $J^2, I^2$  和  $L^2$  都是准自旋平方算符:  $J^2 = J_+J_- + J_z^2 - J_z, I^2, L^2$  有类似表示式. 哈密顿(5)可以在  $I^2, I_z$  和  $L^2, L_z$  的共同本征态  $|IM_L M_L\rangle$ , 即  $SU(2) \times SU(2)$  基中严格对角化.

为了引入变分参量, 可对费米子算符  $a_{p\sigma}^+$  和  $a_{p\sigma}$  接连施行两次变换

$$\begin{pmatrix} a_{p-} \\ a_{p+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -i \sin \frac{\beta}{2} \\ -i \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{p-} \\ c_{p+} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$\begin{pmatrix} c_{p-} \\ c_{p+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} & -i \sin \frac{\alpha}{2} \\ -i \sin \frac{\alpha}{2} & \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{p-} \\ b_{p+} \end{pmatrix}.$$

将(6)用于(1)–(5)各式可将准自旋算符  $I, L, J$  和 Hamilton 量  $H$  变换到  $b$  表象(或称为自治表象). 例如, 准自旋  $J^2$  及其分量  $J_x, J_y$  和  $J_z$  分别为

$$J^2 = J_z^2 + \cos^2 \beta (J_y^2 + J_x^2) + \sin^2 \beta (S_y^2 + Q_y^2) + \sin \beta \cos \beta (J_x S_y - J_y S_x + S_y J_x - Q_y J_x), \quad (7a)$$

$$J_x = J_{xb}, J_y = (J_{yb} \cos \alpha - J_{xb} \sin \alpha) \cos \beta - (S_{yb} \sin \alpha + Q_y \cos \alpha) \sin \beta, \quad (7b)$$

$$J_z = (J_{yb} \sin \alpha + J_{xb} \cos \alpha) \cos \beta + (S_{yb} \cos \alpha - Q_y \sin \alpha) \sin \beta. \quad (7c)$$

其中

$$J_{yb} = \frac{1}{2i} \sum_p (b_{p+}^+ b_{p-} - b_{p-}^+ b_{p+}), J_{xb} = \frac{1}{2} \sum_{p\sigma} \sigma b_{p\sigma}^+ b_{p\sigma} \quad (8a)$$

$$S_{yb} = \frac{1}{2i} \sum_p (b_{p+}^+ b_{-p-} - b_{-p-}^+ b_{p+}), Q_y = \frac{1}{2} \sum_{p\sigma} b_{p\sigma}^+ b_{-p\sigma} \quad (8b)$$

$$p = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2, \sigma = \pm 1 \text{ (或简记为 } \pm), \quad (8c)$$

$N$  为粒子总数.  $b$  表象中的  $H$  表示式见文献[9].

## 2 $J^2, J_z$ 和 $J_y, J_x$ 约束 HF 理论

考虑一个  $N$  粒子体系, 且设  $N$  为偶数. 它的基态是  $N$  个粒子都处于  $\sigma = -1$  能级的态. 在自治表象中将基态试探波函数  $|\phi\rangle$  取为

$$|\phi\rangle = b_{1-}^+ b_{-1-}^+ b_{2-}^+ b_{-2-}^+ \cdots b_{\frac{N}{2}-}^+ b_{-\frac{N}{2}-}^+ |0\rangle, \quad (9)$$

$|0\rangle$  为真空态. 由此可求出 Hamilton 量在态  $|\phi\rangle$  中的期待值<sup>[9]</sup>

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = -\frac{N}{2} \cos \alpha \cos \beta + \frac{v}{4} N^2 \left( \cos^2 \beta - \frac{1}{2} \right) + \frac{w}{2} N (\cos^2 \alpha - \cos^2 \beta), \quad (10)$$

引入不同的约束条件即可得到不同的 CHF 理论。

$J^2$  约束 HF 理论, 简记为 CHF( $J^2$ ), 是得到好  $J$  态的简便方法<sup>[7,8]</sup>。但是 CHF( $J^2$ ) 不能产生  $J = 0$  附近的低  $J$  值态<sup>[7]</sup>, 而且得到的态没有好量子数  $K$  ( $J_z$  的本征值), 因而不能产生多带结构的能谱。为了克服这一缺点, 引入  $J^2$  和  $J_z$  同时约束的方案。CHF( $J^2, J_z$ ) 从下列 Hamilton 量和约束条件出发

$$H' = H - \lambda J^2 - \sigma J_z, \quad (11a)$$

$$\langle \phi | J^2 | \phi \rangle = J(J+1), \langle \phi | J_z | \phi \rangle = K, \quad (11b)$$

由(7-9)式不难求出  $J^2$  和  $J_z$  的期待值

$$\langle \phi | J^2 | \phi \rangle = \frac{N}{2} \left( 1 + \frac{N}{2} \cos^2 \beta \right), \quad (12a)$$

$$\langle \phi | J_z | \phi \rangle = -\frac{N}{2} \cos \alpha \cos \beta. \quad (12b)$$

于是由(10-12)式可以求出  $\langle \phi | H' | \phi \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \phi | H' | \phi \rangle = & -\frac{N}{2} \cos \alpha \cos \beta + \frac{\nu}{4} N^2 \left( \cos^2 \beta - \frac{1}{2} \right) + \frac{\omega}{2} N (\cos^2 \alpha - \cos^2 \beta) \\ & - \lambda \frac{N}{2} \left( 1 + \frac{N}{2} \cos^2 \beta \right) + \sigma \frac{N}{2} \cos \alpha \cos \beta. \end{aligned}$$

现在以  $\alpha$  和  $\beta$  为变分参量将上式极小化, 即要求  $\langle \phi | H' | \phi \rangle$  满足下列变分条件

$$\partial \langle \phi | H' | \phi \rangle / \partial \alpha = 0, \quad \partial \langle \phi | H' | \phi \rangle / \partial \beta = 0, \quad (13)$$

这样, 由(12,13)式可以建立  $\alpha, \beta, \lambda$  和  $\sigma$  满足的方程组, 从而求出 CHF( $J^2, J_z$ ) 问题的解:

$$\cos \beta = 2J_N/N, \quad \cos \alpha = -K/J_N, \quad J_N = \sqrt{J(J+1) - N/2}, \quad (14a)$$

$$\lambda = \nu N - \frac{1}{2} \omega (4 - NK^2/J_N^2), \quad \sigma = 1 + \omega NK/J_N^2, \quad (14b)$$

$$E_{\text{CHF}}(J^2, J_z) = K + \nu \left( J_N^2 - \frac{1}{8} N^2 \right) + \frac{1}{2} \omega N (K^2/J_N^2 - 4J_N^2/N^2). \quad (14c)$$

这里  $E_{\text{CHF}}(J^2, J_z)$  为  $H$  的能量本征值。(14a)表明, 当  $N$  一定时,  $J$  必须满足条件:  $J(J+1) \geq N/2$ 。这使  $J = 0$  附近的小  $J$  值不能出现。但是(14c)式表明, 能量本征值只依赖于  $J_N^2$ , 故可将其外延而求得  $J(J+1) < N/2$  的态的能量。不过这种“外延态”既不满足约束条件也不满足变分条件。

为了克服 CHF( $J^2, J_z$ ) 在  $J = 0$  附近的困难, 考虑能得到具有确定  $K$  值和  $J$  值的态的另一种方案, 即  $J_y$  约束 HF 近似。在此近似理论中, Hamilton 量和约束条件取成

$$H' = H - \omega J_y, \quad \langle \phi | J_y | \phi \rangle = \sqrt{J(J+1) - K^2}, \quad (15a)$$

由(7b)、(8,9)等式不难求出  $J_y$  的期待值

$$\langle \phi | J_y | \phi \rangle = \frac{1}{2} N \sin \alpha \cos \beta. \quad (15b)$$

用处理  $J^2, J_z$  约束的类似方法可得 CHF( $J_y$ ) 的解:

$$\beta = 0, \quad \sin \alpha = (2/N)\sqrt{J(J+1) - K^2}, \quad (16a)$$

$$\omega = \sqrt{J(J+1) - K^2} \{ [(N^2/4) + K^2 - J(J+1)]^{-1/2} - 4\omega/N \}, \quad (16b)$$

$$E_{\text{CHF}}(J_y) = -\sqrt{(N^2/4) + K^2 - J(J+1)} + \nu N^2/8 - 2\omega[J(J+1) - K^2]/N, \quad (16c)$$

解的存在条件是  $J(J+1) \leq K^2 + N^2/4$ 。显然,低  $J$  值态不受任何限制,这正是我们所希望的。

还可以引入  $J_y$  的高阶约束以改进与严格解的符合程度。例如,考虑  $J_y$  与  $J_y^2$  同时约束的 HF 问题:

$$H' = H - \omega J_y - \theta J_y^2, \quad \langle \phi | J_y | \phi \rangle = \sqrt{J(J+1) - K^2} \equiv x, \quad (17a)$$

$J_y^2$  的期待值可利用(7-9)式求出

$$\langle \phi | J_y^2 | \phi \rangle = (N/4)[1 - \cos^2 \alpha + (N-1)\cos^2 \beta - (N-2)\cos^2 \alpha \cos^2 \beta], \quad (17b)$$

由(17)式和变分条件(13)可求得  $\alpha, \beta$  的一组解

$$\beta = 0, \quad \sin \alpha = 2x/N. \quad (18)$$

Lagrange 乘子  $\omega$  和  $\theta$  可利用修正的 Nogami 程序<sup>[10]</sup>决定。现简述如下。由(17a)式,能量期待值为

$$E \equiv \langle \phi | H | \phi \rangle = \langle \phi | H' | \phi \rangle + \omega x + \theta x^2, \quad (19)$$

从而有

$$\theta = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2}, \quad \omega = \frac{\partial E}{\partial x} - 2x\theta, \quad (20)$$

由(17-19)式不难求出

$$E = \nu N^2/8 - \omega N/2 - \sqrt{N^2/4 - x^2} + (2\omega - \theta)(N^2/4 - x^2)/N. \quad (21)$$

现在用迭代法求 Lagrange 乘子  $\theta$ 。取初始值  $\theta^{(1)} = 0$ , 代入(21)式得能量初值  $E^{(1)}$ ; 将  $E^{(1)}$  代入(20)式得  $\theta^{(2)}$ , 再代入(21)式得  $E^{(2)}$ ..... 如此反复迭代  $i-1$  次后可得

$$\theta^{(i)} = \frac{2\omega}{N} \left[ 1 - \frac{1}{N} + \frac{1}{N^2} - \dots + (-1)^{i-2} \frac{1}{N^{i-2}} \right],$$

求上式当  $i \rightarrow \infty$  的极限就得到 Lagrange 乘子  $\theta$

$$\theta = \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{2\omega}{N} \left[ 1 - \frac{1}{N} + \dots + (-1)^{i-2} \frac{1}{N^{i-2}} \right] = \frac{2\omega}{N+1}. \quad (22)$$

将此  $\theta$  代回(21)和(20)式即得能量期待值和  $\omega$

$$E_{\text{CHF}}(J_y, J_y^2) = -\sqrt{\frac{N^2}{4} + K^2 - J(J+1)} + \frac{\nu}{8} N^2 - \frac{2\omega}{N+1} \left[ J(J+1) - K^2 + \frac{N}{4} \right], \quad (23a)$$

$$\omega = \sqrt{J(J+1) - K^2} \left\{ \left[ \frac{N^2}{4} + K^2 - J(J+1) \right]^{-1/2} - \frac{8\omega}{N+1} \right\}. \quad (23b)$$

(18)式表明,  $\sin^2 \alpha \leq 1$  的条件要求  $J(J+1) \leq K^2 + N^2/4$ 。对于确定的  $N, K$  的最

大值为  $N/2$ , 故若  $K < \sqrt{N/2}$ , 则  $J \leq N/2 - 1$ . 这时最大  $J$  值 ( $N/2$ ) 态不存在. 若  $K \geq \sqrt{N/2}$ , 则  $J$  可取全部可能值  $0, 1, \dots, N/2$ .  $J^2, J_z$  约束 HF 理论中关于低  $J$  值态的困难在这里已不复存在. 所以  $J_y, J^2$  同时约束可能是比  $J^2, J_z$  约束更好的获得好  $J, K$  态的方法.

### 3 耦合基 $|JK\rangle$ 与好 $|J\rangle$ 态函数的构造

不难证明,  $I^2, I_z$  和  $L^2, L_z$  的共同本征态  $|IM_L M_L\rangle$  不是  $J^2$  和  $J_z$  的本征态, 记为  $|JK\rangle$ , 但后者可以前者为基矢作如下展开

$$|JK\rangle = \sum_{M_I} B_{M_I}^{(JK)} |IM_L, K - M_I\rangle = \sum_{M_I M_L} B_{M_I M_L}^{(JK)} |IM_L M_L\rangle_K, \quad (24)$$

这里下标  $K$  表示只取  $M_I + M_L = K$  的那些基矢. 于是可以在所选基空间中将算符  $J^2$  对角化, 从而求出系数  $B_{M_I M_L}^{(JK)}$ , 以及满足条件  $|K| \leq J \leq N/2$  的全部  $J$  值, 即得到具有相同  $K$  值的所有  $|JK\rangle$  态. 这类似于大空间壳模型中决定态的总角动量的方法<sup>[1]</sup>. 利用  $J^2 = J_+ J_- + J_z^2 - J_z$  和 (4) 式可得矩阵元公式

$$\begin{aligned} \langle IM'_L M'_L | J^2 | IM_L M_L \rangle &= 2[I(I+1) + M_I M_L] \delta_{M'_I M_I} \delta_{M'_L M_L} \\ &+ [I(I+1) - M'_I M'_I]^{1/2} [L(L+1) - M'_L M'_L]^{1/2} \\ &\times (\delta_{M'_I, M_I+1} \delta_{M'_L, M_L-1} + \delta_{M'_I, M_I-1} \delta_{M'_L, M_L+1}). \end{aligned} \quad (25)$$

必须指出,  $J^2$  和  $J_z$  的共同本征态  $|JK\rangle$  并不是  $H$  的本征态, 因为  $H$  中含  $\omega$  的项 (见 (5) 式) 在  $|JK\rangle$  中不是对角的. 故  $|JK\rangle$  只是  $H(\omega = 0)$  的本征态, 对应能量为

$$\begin{aligned} E_{JK} &= \langle JK | H(\omega = 0) | JK \rangle = \sum_{M_I M_L} (B_{M_I M_L}^{(JK)})^2 (K + 2\nu M_I M_L) \delta_{M'_I M_I} \delta_{M'_L M_L} \\ &+ \sum_{M'_I M'_L M_L} B_{M'_I M'_L}^{(JK)} B_{M_I M_L}^{(JK)} \nu [I(I+1) - M'_I M'_I]^{1/2} [L(L+1) - M'_L M'_L]^{1/2} \\ &\times (\delta_{M'_I, M_I-1} \delta_{M'_L, M_L+1} + \delta_{M'_I, M_I+1} \delta_{M'_L, M_L-1}). \end{aligned} \quad (26)$$

在  $\omega \neq 0$  的情况下,  $|JK\rangle$  态可作为对角化  $H$  的基矢. 即将  $H$  的好  $J$  本征态  $|J\rangle$  按  $|JK\rangle$  基展开:

$$|J\rangle = \sum_K A_K |JK\rangle, \quad K = \begin{cases} 0, \pm 2, \pm 4, \dots, \pm N/2, & \text{对偶 } K \\ \pm 1, \pm 3, \dots, \pm(N/2 - 1), & \text{对奇 } K \end{cases}, \quad (27)$$

求和指标  $K$  只取偶数或只取奇数的原因在于  $\omega$  项相互作用只混合  $\Delta K = \pm 2$  的态<sup>[9]</sup>. 这样, 从  $J$  为定值的一组基  $|JK\rangle$  可以造出两种好  $J$  态, 一种属于偶  $K$  组, 另一种属于奇  $K$  组.  $|JK\rangle$  基中的能量矩阵的矩阵元由下式给出

$$\begin{aligned} \langle JK' | H | JK \rangle &= E_{JK} \delta_{K'K} + \omega \sum_{M'_I M'_L} \sum_{M_I M_L} B_{M'_I M'_L}^{(JK')} B_{M_I M_L}^{(JK)} [I(I+1) - M'_I M'_I]^{1/2} \\ &\times [L(L+1) - M'_L M'_L]^{1/2} (\delta_{M'_I, M_I-1} \delta_{M'_L, M_L-1} + \delta_{M'_I, M_I+1} \delta_{M'_L, M_L+1}), \end{aligned} \quad (28)$$

式中  $E_{JK}$  由(26)式给出。将  $H$  矩阵对角化即可求出具有确定  $J$  值的态的能量和对应波函数  $A_k^J$ 。

现在转向能谱的带结构问题。首先考虑  $\omega = 0$  的情形。这时的能谱由(26)式给出。可以证明(26)式能够改写成更为简洁的形式:

$$E_{JK} = \nu J(J+1) + K - \nu(N/2)(N/4 + 1), \quad (29)$$

上式表明,  $\omega = 0$  时体系的能谱与轴对称刚性转子的能谱有类似的结构。这充分显示了  $H(\omega = 0)$  在准自旋  $J$  空间中具有“轴对称性”。由于含  $\omega$  的相互作用代表一种配对相互作用,故可以说配对相互作用引起  $K$  混合,造成  $H$  的“非轴对称性”。这一点也可以从(27)式的本征态  $|J\rangle$  与非轴对称转子波函数<sup>[12]</sup>有类似结构的事实看出。

如上所述,好准自旋态  $|J\rangle$  没有确定的  $K$  值,因而没有带结构。但是可以用下面的方法划分近似的带结构以便于为具有带结构的 CHF 能谱提供进行比较的严格解。考虑重叠积分

$$\langle JK|J\rangle = \sum_K A_k^J \langle JK|JK\rangle = A_k^J, \quad (30)$$

在  $J$  值相同的所有态中取  $|A_k^J|$  最大的态为  $K$  带的成员。这样选出的、具有确定  $K$  值的一组态 ( $|K| \leq J \leq N/2$ ), 记为  $|J\rangle_K$ , 构成一个近似的能级带, 用近似带量子数  $K$  标记, 以区别于  $\omega = 0$  时的好量子数  $K$ 。必须指出, 这样选出的态在其自身的  $K$  结构中 ( $A_k^J$ )  $\equiv a_k^2$  不一定是最大值。所谓态  $|J\rangle$  的  $K$  结构是指该态的展开式中  $a_k^2$  对  $K$  的标绘。作为

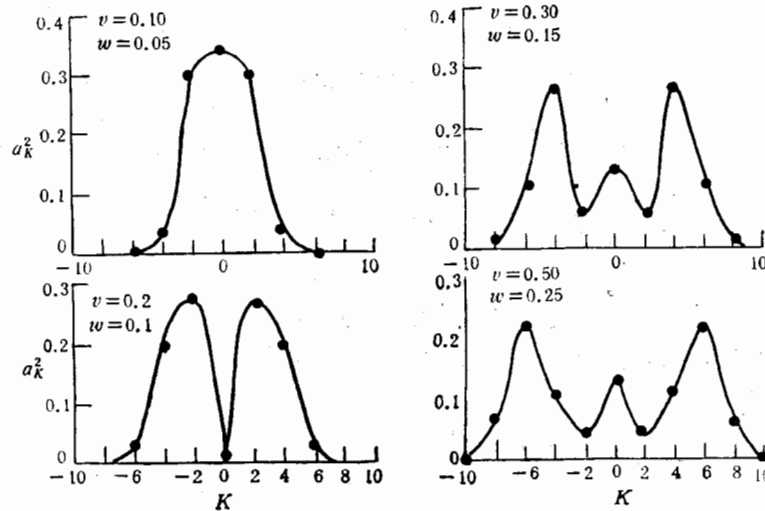


图1  $N = 20$  体系的  $K = 0, J = 10$  态的  $K$  结构随相互作用强度参数  $\nu (\omega = \nu/2)$  的变化

例子,图1给出了  $N = 20$  体系的  $K = 0, J = 10$  态的  $K$  结构随相互作用强度参数而改变的情形。显然,除单峰  $K$  结构外,在双峰和三峰  $K$  结构中,  $(A_0^{10})^2$  都不是  $K = 0, J = 10$  态自身展开式中的最大振幅。另一个重要现象,是不同  $K$  带中的  $J$  值相同的态随相互作用强度改变而发生“交叉换位”,如图2所示。该图显示了  $N = 20$  体系的  $K = 1$  和  $K = -1$  两带中的  $J = 3$  态的能量随强度参数  $\nu$  的变化。在图中的点和圈旁边还标出了  $K$  结

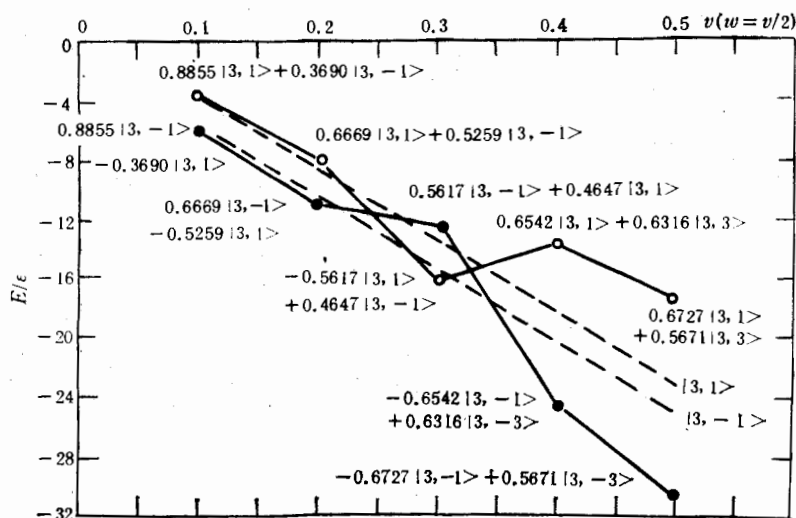


图 2  $N = 20$  体系的  $K = \pm 1$  带中  $J = 3$  态的能量和  $K$  结构中最大与次大振幅随  $\nu(\omega = \nu/2)$  的变化  
 $\bullet$   $K = -1$ ;  $\circ$   $K = +1$ .

构中的最大和次大振幅及其对应基矢  $|JK\rangle$ 。基矢  $|J = 3, K = \pm 1\rangle$  的能量随  $\nu(\omega = 0)$  的变化用虚线表示。可以看出, 两个态的第一次交叉换位是由  $K = \pm 1$  基矢的振幅交换引起的, 第二次换位则是因为  $K = \pm 3$  基矢的振幅增大所致。

#### 4 偶 $N$ 体系能谱的比较

建立了双准自旋模型的严格能谱以后, 就可以对各种近似方法计算的能谱的有效性进行讨论了。首先对严格能谱作进一步的描述。如前文所述, 在  $\omega = 0$  时  $|JK\rangle$  态的谱具有刚性转子能谱的特点。  $\omega$  不为零时,  $K$  混合破坏了能谱的带结构, 但可用前一节的方法作近似带结构的划分。对  $N = 20$ 、 $\nu = 0.10$  和  $0.30(\omega = \nu/2)$  的计算结果分别示于图 3 和图 4。当  $\omega$  较小时(图 3), 带结构变化不大,  $K = 0, 1, 2$  等带中各态顺序与  $\omega = 0$  时相同, 态间能级间距也差不多。随着  $\omega$  的逐渐增大, 带结构越来越模糊,  $K \neq 0$  各带内部能级的顺序越来越混乱。图 4 给出了  $\omega = 0.15$  时的  $|J\rangle_K$  谱, 可以看出  $K = 1$  和 2 带中各态顺序与  $\omega = 0$  谱中的很不相同, 间隔分布也大不一样。  $\omega$  相当大时按  $K$  划分带结构已失去意义。然而值得指出的是  $K = 0$  带的能量基本上不受  $\omega$  的影响, 在  $\omega$  相当大时仍保持很好的带结构, 尽管带中各态波函数的  $K$  结构有十分明显的改变(参看图 1 所示的例子)。

现在讨论 CHF( $J, J_2$ ) 和 CHF( $J^2, J_2$ ) 方法的有效性。根据第二节中的讨论, 这两种 CHF 方法都能提供具有确定  $K$  值和  $J$  值的能级, 因而能谱有多带结构。在图 3 和图 4 中分别给出了 CHF( $J, J_2$ ) 能谱和 CHF( $J^2, J_2$ ) 能谱, 以便与严格解的  $|JK\rangle$  谱和  $|J\rangle_K$  能谱进行比较。图 3 表明, 与严格能谱比较 CHF( $J, J_2$ ) 能谱有正确的能级顺序但整个能谱压得太低, 而且  $K \neq 0$  各带的带头能级的能量也过于接近基态 ( $J = K = 0$ ) 的

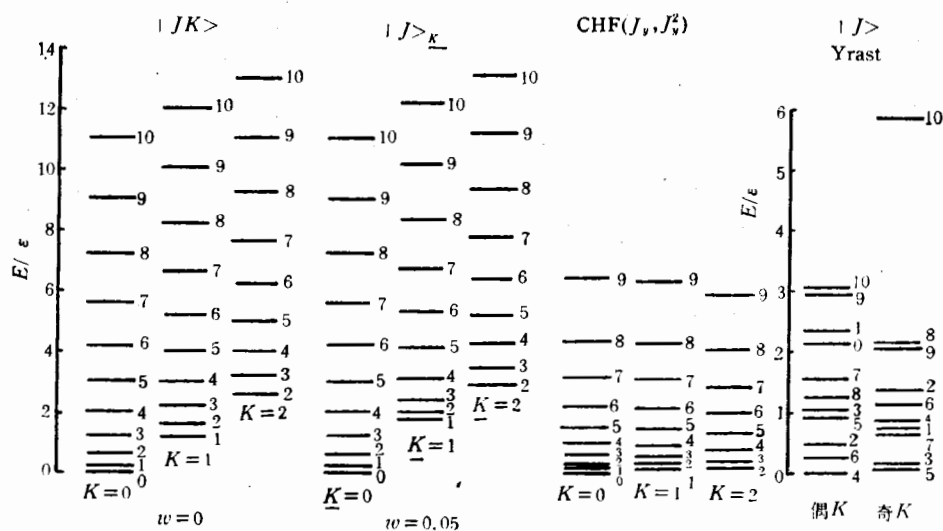


图3  $\nu = 0.1, \omega = 0$  和  $0.05$  时,  $N = 20$  体系的严格能谱及与  $\text{CHF}(J_y, J_y^2)$  能谱的比较

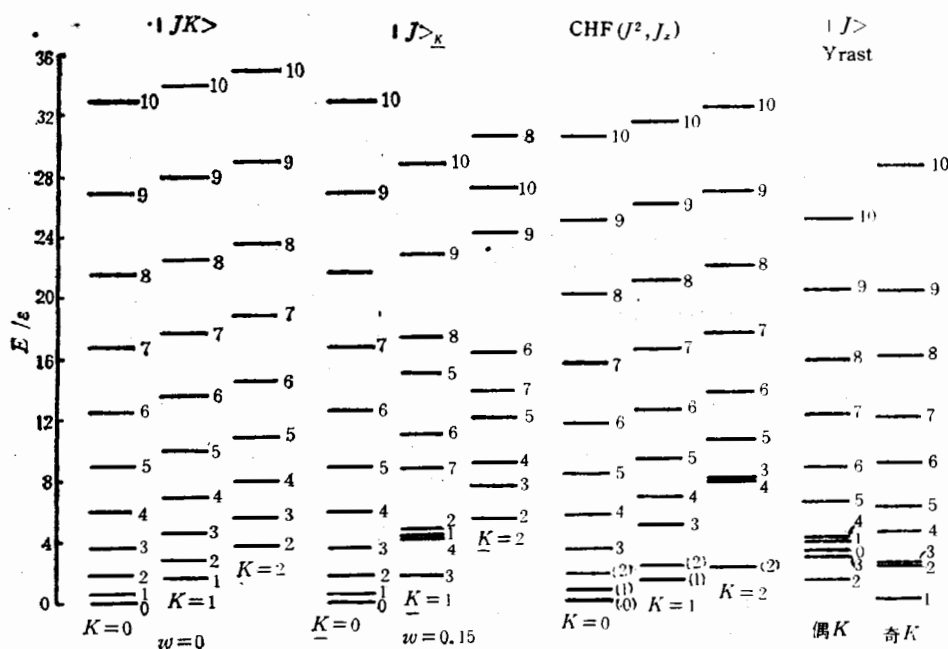


图4  $\nu = 0.3, \omega = 0$  和  $0.15$  时,  $N = 20$  体系的严格能谱及其与  $\text{CHF}(J^2, J_x)$  能谱的比较

能量。与此对照,  $\text{CHF}(J^2, J_x)$  能谱在  $J$  值较大的区域很接近于  $|JK\rangle$  谱(图4); 但在低  $J$  值区(即  $J = 0, 1$  和  $2$ ) 由于外延而造成能级间隔异常, 而且  $K = 2$  带中  $J = 3$  能级的顺序也不对。从图3和图4还可看出两种 CHF 能谱的另一重要差别: 在  $\text{CHF}(J^2, J_x)$  谱中  $J$  为定值的能级能量随  $K$  增大而增加, 但在  $\text{CHF}(J_y, J_y^2)$  谱中  $J$  能级随  $K$  增大而下降。



以上结果表明,当用  $J_y$ 、 $J_z^2$  约束 HF 方法计算实际核的能谱时,可能需要进行转动惯量重整化以展宽能级间距,并对  $K \neq 0$  带的带头能级的能量进行修正。而对  $J^2$ 、 $J_x$  约束 HF 方法,则需特别注意解决有关低自旋( $J = 0$  附近)能级的问题。

最后,对严格解中的 yrast 态作一些讨论。图 3 和图 4 中最右边的能谱是  $|J\rangle_K$  态中的 yrast 能级。为清楚起见,将它们分成偶  $K$  和奇  $K$  两组。结果表明, $\omega = 0$  时,基态带就是 yrast 带; $\omega \neq 0$  时, yrast 态不具有明确的带结构: 能级顺序混乱,能级间隔也不规则。实际上,每个 yrast 态都有确定的  $K$  值,不同  $J$  值的 yrast 态的  $K$  值并不完全相同,因而不构成一个“转动带”。这告诉我们,在实际核中应小心地处理“yrast 带”,注意带中各成员的内部结构<sup>[13]</sup>。

## 5 结 论

具有三轴对称性的双准自旋模型可以很方便地用于研究各种 CHF 方法及其能谱。本文提出的 CHF( $J^2$ 、 $J_x$ ) 和 CHF( $J_y$ 、 $J_z^2$ ) 两种方案,都能产生具有确定量子数  $J$  和  $K$  的能级,从而能提供多带结构的能谱。同时,两类能谱都具有集体转动谱的特征。

在  $SU(2) \times SU(2)$  基空间中准自旋平方 ( $J^2$ ) 矩阵分裂成具有不同  $K$  值的块对角矩阵。对角化这些矩阵可以造出具有确定  $J$  和  $K$  值的耦合态  $|JK\rangle$ , 它们是  $\omega = 0$  时的能量本征态,其能谱具有轴对称转子能谱的特点。在  $\omega \neq 0$  的情形下,可用  $|JK\rangle$  基对角化体系的哈密顿量,得到  $K$  混合的本征态  $|J\rangle$  及其能谱。在相互作用不太强时,可确定  $|J\rangle$  态的近似量子数  $K$ ,从而对能谱作近似的带结构划分。若  $\omega$  项相互作用较强,则只有  $K = 0$  的态保持带结构。另外,由于各个 yrast 态常常具有不同的  $K$ ,因而一般不形成好的“转动带”。

与严格能谱比较, CHF( $J_y$ 、 $J_z^2$ ) 谱压缩得太低,激发带带头能级过分靠近基态; CHF( $J^2$ 、 $J_x$ ) 能谱在高  $J$  区与严格解符合,但  $J = 0$  附近的态只能外延,且间隔分布不太正常。故实际应用时需作一些调整。

## 参 考 文 献

- [1] M. Brack, *Phys. Letters*, **71B**(1977) 239.
- [2] H. Flocard et al., *Nucl. Phys.*, **A231**(1974)176.
- [3] C.H. Ko et al., *Phys. Letters*, **45B**(1973)433; *Nucl. Phys.*, **A236**(1974) 269.
- [4] J.P. Elliott et al., *Nucl. Phys.*, **A324**(1979)12.
- [5] H.G. Miller et al., *Nucl. Phys.*, **A368**(1981) 237.
- [6] H.G. Miller et al., *Phys. Letters*, **150B**(1985)15.
- [7] M.C. Cambiaggio et al., *Nucl. Phys.*, **A344**(1980)233.
- [8] Liao Jizhi, *Chinese Phys. Letters*, **7**(1990)256.
- [9] Liao Jizhi, *Science in China (Series A)*, **34**(1991)1079.
- [10] Liao Jizhi, *Chinese J. of Nucl. Phys.*, **13**(1991)305.
- [11] R.R. Whitehead et al., in *Advances in Nuclear Physics*, Vol.9, Ed. by M. Baranger and E. Vogt, Plenum Press, New York-London, 1977, p. 123
- [12] J.M. Eisenberg and W. Greiner, *Nuclear Models*, North-Holland Pub. Com., Amsterdam-London, 1970, p. 170
- [13] M.J.A. de Voigt et al., *Rev. Mod. Phys.*, **55**(1983)949.

## The Exact Energy Spectra of States with Good Quasi-Spin in the Double-Quasi-Spin Model

Liao Jizhi

(Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610064)

Received on January 4, 1993

### Abstract

Two new forms of the constrained Hartree-Fock(CHF) methods are proposed, and their solutions are discussed in  $SU(2) \times SU(2)$  Double-quasi-spin model. The diagonalization methods for establishing the exact solutions  $|JK\rangle$  and  $|J\rangle$  are discussed. It is found that the two kinds of CHF spectra possess the characters of the rotational spectra, and that the new prescriptions are the effective methods to obtain the spectra with multi-band structure.

**Key words** double-quasi-spin model, constrained Hartree-Fock method, non-axial symmetry, K-structure, rotational band-structure.