

角动量投影 HF 方法中的电磁跃迁

廖继志

(四川大学, 成都)

摘 要

本文讨论了严格的角动量投影形变哈特里-福克 (PDHF) 波函数用于研究原子核性质的一般问题。给出了多粒子体系的单体张量算符在 PDHF 波函数中的矩阵元公式。计算了偶钛核低激发态间的 γ 跃迁 $B(E2)$ 值, 找到了带交叉的证据。

一、引 言

PDHF 方法是壳模型组态混合的一种近似, 我们曾用它计算过一些 fp 壳原子核的能谱^[1,2], 探讨了低激发能区存在内部结构跃变(带交叉)的可能性。为了进一步弄清这个问题和对 PDHF 波函数作更严格的检验, 必须计算核态间的电磁跃迁几率。Gunye 等人曾用未归一化的 PDHF 波函数计算过一些 Sd 壳原子核基态带内 4^+ 态以下的电磁跃迁^[3], 但该文中的某些公式有错。本文将推导多粒子体系的单体张量算符在严格的、归一化的 PDHF 波函数中的矩阵元公式。然后计算 ^{44}Ti 和 ^{46}Ti 核的基态带、扁椭圆激发带和 $2p-2h$ 激发带等带内和带间的电四极跃迁的 $B(E2)$ 值, 并与实验数据、壳模型和转动模型计算值进行比较。所得结果是相当好的。

二、单体张量算符矩阵元公式

轴对称形变 HF 单粒子态 $|\alpha, k\rangle$ 可用壳模型态 $|jm\rangle$ 来展开^[1]

$$\begin{aligned} |\alpha, k\rangle &= \sum_j C_{jm_\alpha} |j, m_\alpha = k\rangle, \\ |\alpha, -k\rangle &= \sum_j (-1)^{j-k} C_{jm_\alpha} |j, m_\alpha = -k\rangle, \end{aligned} \quad (1)$$

系数 C_{jm} 由变分过程确定。用 HF 单粒子态可以构造行列式内禀态 $|\Phi_K\rangle$, $K = \sum_{i=1}^A k_i$ 。归一化的好角动量投影态 $|\Phi'_{MK}\rangle$ 则由投影算符 P'_{MK} 作用于 $|\Phi_K\rangle$ 产生

$$|\Phi'_{MK}\rangle = P'_{MK} |\Phi_K\rangle / \sqrt{p'_{KK}},$$

$$p'_{kK} \equiv \langle \Phi_K | P'_{kK} | \Phi_K \rangle = \left(J + \frac{1}{2} \right) \int_0^\pi d'_{kK}(\theta) D^A(a_{\alpha\beta}(\theta)) \sin \theta d\theta, \quad (2)$$

式中各符号的意义与文献[1,2]中的相同.

A 核子体系的 λ 阶单体张量算符 $T_{\lambda\mu}$ 记为

$$T_{\lambda\mu} = \sum_{i=1}^A t_{\lambda\mu}(i), \quad (3)$$

它在投影态(2)中的矩阵元为

$$\langle \Phi'_{M'K'} | T_{\lambda\mu} | \Phi'_{MK} \rangle = (p'_{k'K'} p'_{kK})^{-1/2} \langle \Phi_{K'} | P'^{J'+}_{M'K'} T_{\lambda\mu} P'_{kK} | \Phi_K \rangle, \quad (4)$$

利用投影算符的定义、球张量在转动下的变换性质和三个 D 函数的积分公式可以求出

$$\begin{aligned} P'^{J'+}_{M'K'} T_{\lambda\mu} P'_{MK} &= (2J' + 1)/(8\pi^2) \sum_{\nu} T_{\lambda\nu} \int d\Omega D'^{J'+}_{M'K'}(\Omega) D^{\lambda*}_{\nu\nu}(\Omega) R^+(\Omega) P'_{MK} \\ &= (JM\lambda\mu | J'M') \sum_{\nu} (JK' - \nu\lambda\nu | J'K') T_{\lambda\nu} P'_{k'-\nu,K}, \end{aligned} \quad (5)$$

将(5)式代入(4)式得

$$\begin{aligned} \langle \Phi'_{M'K'} | T_{\lambda\mu} | \Phi'_{MK} \rangle &= (p'_{k'K'} p'_{kK})^{-1/2} (JM\lambda\mu | J'M') \\ &\times \sum_{\nu} (JK' - \nu\lambda\nu | J'K') \langle \Phi_{K'} | T_{\lambda\nu} P'_{k'-\nu,K} | \Phi_K \rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

(6)式右端的矩阵元可以利用投影算符和转动算符的定义、行列式波函数的性质以及角动量分量的可加性 $J_y = \sum_i j_y(i)$ 而直接计算,结果是

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{K'} | T_{\lambda\nu} P'_{k'-\nu,K} | \Phi_K \rangle &= \sum_{i,j=1}^A (-1)^{i+j} \sum_{iif} C'^{K'}_{ifk_f} C^K_{ik_i} (j_i k_i - \nu\lambda\nu | j_f k_f) \\ &\times (j_i \| t_{\lambda} \| j_i) \left(J + \frac{1}{2} \right) \int_0^\pi d'_{k'-\nu,K}(\theta) d''_{k_f-\nu,k_i}(\theta) D'^{A-1}_{f,i}(a_{\alpha\beta}^{K'K}(\theta)) \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (7)$$

式中

$$a_{\alpha\beta}^{K'K}(\theta) \equiv \sum_i C'^{K'}_{jm_{\alpha}} C^K_{jm_{\beta}} d^i_{m_{\alpha}m_{\beta}}(\vartheta), \quad (8)$$

$(j_i \| t_{\lambda} \| j_i) \equiv (n_i l_i j_i \| t_{\lambda} \| n_i l_i j_i)$ 是单粒子约化矩阵元, $D'^{A-1}_{f,i}(a_{\alpha\beta}^{K'K})$ 是由 $a_{\alpha\beta}^{K'K}$ 构成的 $A-1$ 阶行列式,而且满足 $\alpha \approx f, \beta \approx i$. 最后,由维格勒-莱卡定理

$$\langle \Phi'_{M'K'} | T_{\lambda\mu} | \Phi'_{MK} \rangle = (JM\lambda\mu | J'M') (J'K' \| T_{\lambda} \| JK),$$

以及(6)式(7)式即可求得单体张量算符 $T_{\lambda\mu}$ 在归一化的 PDHF 波函数中的约化矩阵元公式

$$\begin{aligned} (J'K' \| T_{\lambda} \| JK) &= (p'_{k'K'} p'_{kK})^{-1/2} \sum_{\nu} (JK' - \nu\lambda\nu | J'K') \\ &\times \sum_{ij} (-1)^{i+j} \sum_{iif} C'^{K'}_{ifk_f} C^K_{ik_i} (j_i k_i - \nu\lambda\nu | j_f k_f) (j_i \| t_{\lambda} \| j_i) \\ &\times \left(J + \frac{1}{2} \right) \int_0^\pi d'_{k'-\nu,K}(\theta) d''_{k_f-\nu,k_i}(\theta) D'^{A-1}_{f,i}(a_{\alpha\beta}^{K'K}(\theta)) \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (9)$$

此公式可用于计算磁矩、四极矩、电磁跃迁、 β 衰变、电子散射形状因子和核子转移反应的核谱因子等任何单体张量算符的矩阵元。

以电四极跃迁的 $B(E2)$ 值为例, 这时 $T_{2\mu}$ 为

$$B_{2\mu}(E) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A [(1 + \tau_{3i})e_p + (1 - \tau_{3i})e_n] r_i^2 Y_{2\mu}(\theta_i \varphi_i), \quad (10)$$

e_p 、 e_n 分别是质子和中子的有效电荷, 代入(9)可得

$$(J'K' \| B_2(E) \| JK) = (p_{k'k'}^l p_{kk}^l)^{-1/2} \sum_{\nu} (JK' - \nu 2\nu | J'K') (e_p B_P + e_n B_N), \quad (11)$$

$$B_P = \sum_{i,j=1}^P (-1)^{i+j} \sum_{ii'jj'} C_{ij'k_j}^{K'} C_{ii'k_i}^K (j_i k_j - \nu 2\nu | j_i' k_j') (n_i l_i j_i \| r^2 Y_2 \| n_i' l_i' j_i') \\ \times \left(J + \frac{1}{2} \right) \int_0^{\pi} d k_{j-\nu, k}^l(\theta) d k_{j'-\nu, k_i}^{l'}(\theta) D_{j_i, i}^{P, -1}(a_{\alpha\beta}^{K'K}(\theta)) \cdot D^N(a_{\alpha\beta}^{K'K}(\theta)) \sin \theta d\theta. \quad (12)$$

将(12)式中的 P 换成 N , N 换成 P 就得到 B_N 的表示式。这里 $A = P + N$, P 和 N 分别是满壳层外的质子数和中子数。最后, $B(E2)$ 值由下式计算

$$B(E2; J \rightarrow J') = [(2J' + 1)/(2J + 1)] |(J'K' \| B_2(E) \| JK)|^2, \quad (13)$$

这时需要的单粒子约化矩阵元为^[4]

$$(n'l'j' \| r^2 Y_2 \| nlj) = (-1)^{l+l'} \left[\frac{1 + (-1)^{l+l'}}{2} \right] \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(j' \frac{1}{2} 20 \left| j \frac{1}{2} \right. \right) (n'l' \| r^2 \| nl), \quad (14)$$

径向约化矩阵元可用谐振子波函数计算, 结果是

$$(n'l' \| r^2 \| nl) = \frac{\hbar}{M\omega} \left[\frac{1 + (-1)^{l+l'}}{2} \right] [(2l' + 2n' - 1)!! (2l + 2n - 1)!! \\ \times (n' - 1)! (n - 1)! / 2^{n+n'}]^{1/2} \\ \times \sum_{k=0}^{n'-1} \sum_{k'=0}^{n-1} \frac{(-1)^{k'+k} (l' + l + 2k' + 2k + 3)!!}{k'! k! (n - k' - 1)! (n - k - 1)! (2l' + 2k' + 1)!! (2l + 2k + 1)!!}. \quad (15)$$

三、 $B(E2)$ 值的计算结果和讨论

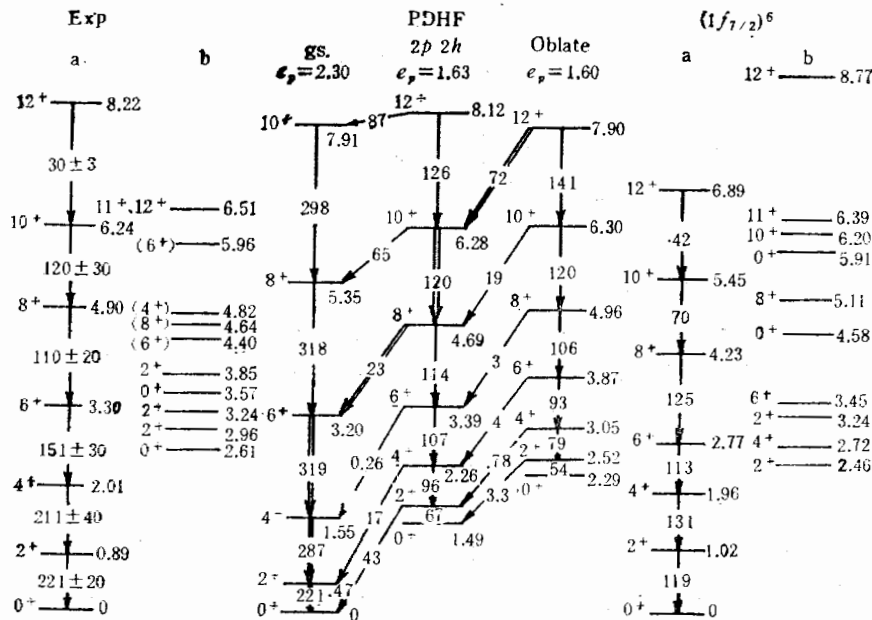
现在计算偶钛核的 $B(E2)$ 值。取 ^{40}Ca 为惰性核心, 活性核子限制在 fp 空间, 则只需三个径向矩阵元: $(1f \| r^2 \| 1f)$ 、 $(1f \| r^2 \| 2p)$ 和 $(2p \| r^2 \| 2p)$ 。令谐振子频率 $\hbar\omega = 41A^{-1/3}$ (这里 A 为质量数), 它们的值不难由(15)式算出。例如, $(1f \| r^2 \| 1f) = 4.56A^{1/3}(\text{fm})^2$ 。关于有效电荷, 通常令 $e_p - e_n = 1$, 而以 e_p 为可调参量 (整个计算中唯一的参量)。HF 单粒子波函数已在文献[1,2]中求出, 本文直接引用。

对 ^{44}Ti 核, 计算了长椭球基态带和最低的激发带 (由扁椭球内禀态投影产生^[2]) 带内和带间的 $E2$ 跃迁几率。得到的 $B(E2)$ 值列在表 1 中。表中还给出了实验值^[5] 和 $(1f_{7/2})^4$ 纯组态壳模型的计算值^[6] 以便比较。实验数据表明, $8^+ \rightarrow 6^+$ 跃迁的 $B(E2)$ 值出现异常, 它比 $6^+ \rightarrow 4^+$ 和 $10^+ \rightarrow 8^+$ 两个值都小。这个异常不能在 $(1f_{7/2})^4$ 模型中解释, 但在

表1 ^{46}Ti 的 $B(E2)$ 理论值与实验值的比较(单位: $\text{e}^2(\text{fm})^4$)

$J_i \rightarrow J_f$	Exp.	基态带带内	扁形带带内	扁带 \rightarrow 基带	$(1f_{7/2})^6$
2 \rightarrow 0	120 \pm 30	120.0	228.6	24.6	158
4 \rightarrow 2	280 \pm 60	156.5	297.7	17.8	201
6 \rightarrow 4	160 \pm 20	159.5	274.5	19.1	89
8 \rightarrow 6	>14	142.2	215.5	25.0	91
10 \rightarrow 8	140 \pm 30	116.0	140.0	38.2	104
12 \rightarrow 10	<60	88.2	65.7	44.8	55
e_p		1.79	2.54	1.79	2.20

PDHF 中得到了说明: 当核从 6^+ 态激发到 8^+ 态时发生了内部结构的变化, 即从长椭球态过渡到扁椭球态; 所以 $6^+ \rightarrow 4^+$ 和 $10^+ \rightarrow 8^+$ 分别是基态带带内和扁形带带内跃迁, 几率较大, 而 $8^+ \rightarrow 6^+$ 是带间跃迁, 自然几率较小. 这样, 可以认为, ^{46}Ti 的 yrast 带是由基态带和扁形带在 6^+ 到 8^+ 间交叉而构成的. 这一推测曾在文 [2] 中由能谱分析得出, $B(E2)$ 值的分析提供了进一步的证据. 计算表明, 基态带和扁椭球激发带的有效电荷 e_p 是不同的. 这一要求是合理的, 因为不同内禀态的形状不同, 电荷分布也不同. 带间跃迁的有效电荷该用初态的值还是末态的值难于断定, 本计算一律用末态的值.

图1 ^{46}Ti 的理论能谱和 $B(E2)$ 值与实验的比较

a—基态带, b—激发态,

现在讨论有关 ^{46}Ti 核的计算结果. 在图 1 上给出了 PDHF 和 $(1f_{7/2})^6$ 模型的理论计算和实验数据, 包括能谱和 $B(E2)$ 值. 向下的箭头表示跃迁, 箭头断开处的数字是以 $\text{e}^2(\text{fm})^4$ 为单位的 $B(E2)$ 值. 能量单位为 MeV. 实验数据表明^[7], ^{46}Ti 核 yrast 带的能级近似于等间隔分布, $8^+ \rightarrow 6^+$ 跃迁的 $B(E2)$ 值也有减小倾向, 只是不像 ^{44}Ti 核那样

明显. 从图 1 可以看出, 这种能级分布很接近于 $(1f_{7/2})^6$ 壳模型能谱, 但壳模型的 $8^+ \rightarrow 6^+$ 跃迁比上下两个跃迁都强而不是更弱. 用转动模型得到的 $B(E2)$ 值^[7], 按初态为 2^+ 、 4^+ 、…… 12^+ 的顺序分别是 221、311、352、362、372 和 382, 即初态自旋越高 $B(E2)$ 值越大, 与实验数据完全不符. 根据 PDHF 理论, ^{46}Ti 的最低三个内禀态分别是长椭球基态, 扁椭球态和 $2p-2h$ 态; 投影以后, $2p-2h$ 态降到了扁椭球态之下. 这三个内禀态的投影能级带分别在 8^+ 态和 12^+ 态处出现交叉 (见图 1), 显示了 yrast 带的复杂结构. 这样, $8^+ \rightarrow 6^+$ 和 $12^+ \rightarrow 10^+$ 两个跃迁都是带间跃迁, 故 $B(E2)$ 值比 $10^+ \rightarrow 8^+$ 的值小, 与实验趋势符合. 据此可以认为, ^{46}Ti 的 yrast 能级来自三个不同的内禀 HF 态, 见图 1 中用双线箭号联系起来的那些态. 不同内禀态的 $E2$ 有效电荷不同, 这与 ^{46}Ti 核中的情形一样. 本工作得到的 $E2$ 有效电荷值, 与邻近的偶偶核的对应值也是可以比较的, 如 ^{46}Ca 的 $e_p = 1.85e$, ^{42}Ca 的 $e_p = 2.09e$ 等^[8].

综上所述, 偶偶核的不同内部态具有不同的 $E2$ 有效电荷; 偶偶核 yrast 带中 $B(E2)$ 值的突然减小意味着内部结构的突变 (带交叉), 对 fp 壳层核, 出现带交叉的自旋约在 8 到 12 之间.

参 考 文 献

- [1] 廖继志, 原子核物理, 7(1985), 338; 9(1987), 220.
- [2] 廖继志, 高能物理与核物理, 11(1987), 682.
- [3] M. R. Gunye and C. S. Warke, *Phys. Rev.*, 159(1967), 885.
- [4] R. D. Lawson, *Theory of The Nuclear Shell Model*, Oxford University Press, 1980, p. 434.
- [5] J. J. Simpson et al., *Phys. Rev.*, C12(1975), 468.
- [6] 廖继志, 高能物理与核物理, 3(1979), 734.
- [7] N. R. F. Rammo et al., *J. Phys. G: Nucl. Phys.*, 8(1982), 101;
D. H. Kong-A-Siou et al., *Nucl. Phys.*, A197(1972), 568.
- [8] W. Kutschera et al., *Phys. Rev.*, C12(1975), 813.

ELECTROMAGNETIC TRANSITIONS OF NUCLEI IN ANGULAR MOMENTUM PROJECTION HARTREE-FOCK METHOD

LIAO JIZHI

(Sichuan University, Chengdu)

ABSTRACT

In this paper the formula for the matrix elements of an one-body tensor operator of the many-particle system between two PDHF states is given. The $B(E2)$ values of the electric quadruple Gamma transitions between the low-lying states of even-even titanium nuclei are calculated, and the evidences exhibiting the band intersection in the yeast states are found.