

# <sup>40</sup>Ca 区域原子核的单粒子和单空穴谱

井孝功 李承祖<sup>1)</sup> 杨善德 吴式枢  
(吉林大学物理系)

## 摘要

应用由单粒子格林函数导出的本征方程,严格顾及  $G$  矩阵的偏离能壳性,得到的 <sup>39</sup>Ca 单空穴谱和 <sup>41</sup>Ca 单粒子谱与实验值符合颇好,其中 <sup>41</sup>Ca 的单粒子谱较以往的 RBHF 结果有明显改进。取含有能移的等效谐振子表象作为初始近似,计算了单粒位阱  $u_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}(\varepsilon_\beta)(M_{\alpha\beta}(\omega)$  表示质量算符)的本征解,亦得到颇好结果。此外,本文还考查了  $G$  矩阵中泡利算符的选取及谐振子能量零点的选取对能谱的影响。比较 Reid 软心势与 Paris 势的计算结果表明 Paris 势是一个较好的核力势。

## 一、引言

在 <sup>40</sup>Ca 区域已经有过不少 Brueckner-Hartree-Fock (BHF) 和重整化 BHF (RBHF) 计算,但算得的单粒子谱普遍与实验值符合得不好,特别是 <sup>40</sup>Ca 的基态  $7/2^-$  和第一激发态  $3/2^-$  在次序上与实验不符。Davies 等的结果<sup>[1]</sup>是以往的 RBHF 计算中所得到的比较好的结果,其  $7/2^-$ , 和  $3/2^-$ ,  $1/2^-$  的次序也是颠倒的。

我们在 [2] 中曾用解能量本征方程的方法对 <sup>16</sup>O 相邻核的单粒能谱与跃迁矩阵元作过计算,说明它较常用的 BHF 和 RBHF 方法更简单,而结果与实验值符合颇好。文献 [3] 中给出的结果表明,Paris 势是一个较好的核力势。本文将上述方法用于 <sup>40</sup>Ca 相邻核的单粒能谱与跃迁矩阵元的计算,所得结果亦与实验值符合颇好,<sup>41</sup>Ca 单粒子能谱较以往的 RBHF 结果有明显改进,  $7/2^-$  和  $3/2^-$ ,  $1/2^-$  的次序已与实验完全一致。比较 Reid 软心 (RSC) 势与 Paris 势的结果表明,在 <sup>40</sup>Ca 区域 Paris 势仍是一个较好的核力势。此外,我们还考查了  $G$  矩阵中泡利算符的选取及谐振子能量零点的选取对能谱的影响。

为解决由于只取质量算符一级近似使得计算结果与谐振子频率  $\Omega$  和能量零点  $B$  的选取有关的问题,我们应用作者之一提出的单粒位阱理论<sup>[4]</sup>,选用 Paris 势,严格顾及  $G$  矩阵的偏离能壳性和计及振幅修正因子,也得到了与实验值符合颇好的 <sup>39</sup>Ca 的单空穴谱和 <sup>41</sup>Ca 的单粒子谱,单空穴谱与单粒子谱的次序均与实验完全一致。

1) 现在国防科技大学工作  
本文 1985 年 2 月 8 日收到。

## 二、能量本征方程和 $G$ 矩阵的计算

由单粒子格林函数容易导得满壳相邻核的能量本征值所满足的方程是<sup>[5]</sup>

$$\sum_{\beta} [(\varepsilon_{\alpha} - \mathcal{E}_{\mu}) \delta_{\alpha, \beta} + M_{\alpha \beta} (\mathcal{E}_{\mu}) - u_{\alpha \beta}] C_{\beta}(\mu) = 0. \quad (1)$$

其中  $\varepsilon_{\alpha}$  是我们所选的单粒子表象哈密顿量  $h_0 = t + u$  的本征值  $h_0 |\alpha\rangle = \varepsilon_{\alpha} |\alpha\rangle$ . 本文选辅助量  $u_0$  为谐振子势  $u_0 = \frac{1}{2} m \Omega^2 r^2 + B$ .  $M_{\alpha \beta}$  表示质量算符,  $\mathcal{E}_{\mu}$  和  $C_{\beta}(\mu)$  是待求的本征值和本征向量, 它们的物理含意如下:

$$\mathcal{E}_{\mu}^+ \equiv E_{\mu}(A+1) - E_0(A), \quad C_{\beta}^+(\mu) \equiv \langle \phi_0(A) | \xi_{\beta} | \phi_{\mu}(A+U) \rangle \quad (2)$$

$$\mathcal{E}_{\mu}^- \equiv E_0(A) - E_{\mu}(A-1), \quad C_{\beta}^-(\mu) \equiv \langle \phi_{\mu}(A-1) | \xi_{\beta} | \phi_0(A) \rangle \quad (3)$$

这里的  $E_0(A), \phi_0(A)$  是满壳核(核子数为  $A$ )基态的严格能量本征值和本征函数,  $E_{\mu}(A \pm 1)$  和  $\phi_{\mu}(A \pm 1)$  是满壳相邻核态  $\mu$  的严格能量本征值和本征函数.

核力选定之后,  $u_0$  中的  $\Omega$  和  $B$  是计算所仅含的未定参数. 因为式(1)是严格的, 由式(1)求得的结果应与它们无关. 但实际计算时对  $\sum_{\beta}$  不可避免地要做截断近似, 同时对质量算符也必须做一定近似, 因此, 计算结果将会依赖于它们的选择. 作为第一步, 这里只取质量算符按  $G$  矩阵展开的一级近似, 即取

$$\begin{aligned} M_{\alpha \beta}^{(1)}(\omega) &= \sum_h G_B(\alpha h, \beta h; \omega + \varepsilon_h) \\ &= \delta_{l_{\alpha}, l_{\beta}} \delta_{j_{\alpha}, j_{\beta}} \delta_{m_{\alpha}, m_{\beta}} \delta_{r_{\alpha}, r_{\beta}} \frac{1}{2(2j_{\alpha} + 1)} \\ &\quad \sum_h \sum_{J, T} (2J + 1)(2T + 1) \sqrt{(1 + \delta_{\alpha, h})(1 + \delta_{\beta, h})} \\ &\quad \cdot G_B(\alpha h, \beta h; JT; \omega + \varepsilon_h), \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $\sum_h$  表示只对空穴态求和,  $G_B$  是反对称化了的 Brueckner  $G$  矩阵. 式(4)用图形表示如图 1. 计算  $G$  矩阵时所顾及的单粒子能级与 [2] 相同.

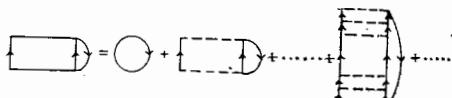
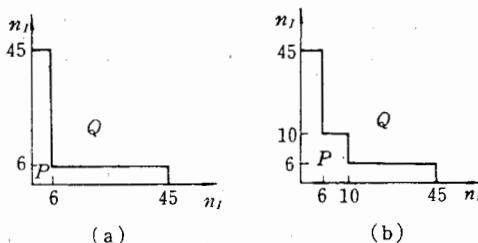


图 1 质量算符按  $G$  矩阵展开一级近似的图形表示

这里我们要特别讨论一下计算  $G$  矩阵时泡利算符的选择问题. 对  $^{40}\text{Ca}$  区域单粒子谱的计算来说, 当只取  $M^{(1)}$  近似时, 泡利算符本应该按图 2(a) 所示选取, 下面我们把按这种泡利算符算出的  $G$  矩阵记为  $G_{B1}$ . 需要指出的是, 如果除  $M^{(1)}$  外, 我们还想进一步顾及象  $2p-1h$  (2 粒子-1 空穴) 多重散射关联等高级图的贡献的话, 为了避免重复的计算, 再引用  $G_{B1}$  是不方便的; 此外,  $G_{B1}$  也不适用于计算开壳核二体等效相互作用的需要. 考虑到

图2  $G$  矩阵中泡利算符的选取

这些情况,计算  $G$  矩阵时最好把泡利算符选为图 2(b). 它和图 2(a) 的区别是把  $0f-1p$  壳从梯形图的中间态里去掉了,因此这部份作用需要另行考虑. 我们把按图 2(b) 算出的  $G$  矩阵记为  $G_{BII}$ . 如上所述,按式(4)计算  $M^{(1)}$  时,如应用  $G_{BII}$ ,则忽略了  $0f-1p$  中间态对梯形图的贡献. 容易证得  $G_{BI}$  和  $G_{BII}$  之间满足关系<sup>[6]</sup>:

$$G_{BI}(\alpha\beta, \gamma\delta; \omega) = G_{BII}(\alpha\beta, \gamma\delta; \omega) - \sum_{r < s} G_{BII}(\alpha\beta, rs; \omega) G_{rs}^0(\omega) G_{BI}(rs, \gamma\delta; \omega), \quad (5)$$

其中

$$G_{rs}^0(\omega) = - \left[ \frac{(1-n_r)(1-n_s)}{\omega - \varepsilon_r - \varepsilon_s + i\eta} \right]_{\eta \rightarrow 0^+},$$

$r$  与  $s$  至少有一个取  $0f-1p$  中的粒子态. 下面将以  $G_{BII}$  为基础, 分别应用  $G_{BII}$  和  $G_{BI}$  计算了<sup>39</sup>Ca 的单空穴态和<sup>41</sup>Ca 的单粒子态能谱.

熟知,由单粒谐振子波函数可以估算出<sup>40</sup>Ca 的均方根半径,通过与实验值比较可得谐振子频率  $\hbar\Omega \simeq 41A^{-\frac{1}{3}} \simeq 12$  MeV. 这和由<sup>39</sup>Ca 的  $0d \sim 1s$  空穴态与<sup>41</sup>Ca 的  $0f-1p$  粒子态能谱的实验值作壳平均后得到的这两个大壳之间的间距 12.39 MeV 是吻合的. 为了减少计算工作量,本文取单粒表象的谐振子频率  $\hbar\Omega$  为 12 MeV, 只考查了  $B$  对结果的影响. 关于  $G$  矩阵的计算我们采用 BHM<sup>[7]</sup> 方法, 单粒子态截断到  $4s - 0k$  壳, 即取了前 45 条单粒轨道. 与此相适应, 在求解本程方程(1)时,  $s$  态方程阶数选为五阶,  $p, d$  态的方程的阶数选为四阶, 此时空穴态的收敛性已足够好,  $f$  态方程的阶数选为三阶.

我们分别应用 RSC 势<sup>[8]</sup>和近年来提出的 Paris 势<sup>[9]</sup>计算了<sup>39</sup>Ca 的单空穴谱和<sup>41</sup>Ca 的单粒子谱. 由于  $G$  矩阵是能量相关的或者说具有偏离能壳性, 式(1)中的  $M_{\alpha\beta}^{(1)}$  与待求本征值  $\mathcal{E}_\mu$  有关. 我们采用自洽的办法求解, 严格顾及了  $G$  矩阵的偏离能壳性. 实际计算发现, 由于在待求的本征值附近,  $M_{\alpha\beta}^{(1)}$  随  $\omega$  的变化很平缓且接近于线性变化, 式(1)的自洽求解的收敛速度是相当快的, 这从表 1 可以看得很清楚.

实验值、以往的 RBHF 计算结果及我们的计算结果汇总列在表 2 和表 3 中.

首先, 比较由  $G_{BI}$  和  $G_{BII}$  求得的本征值可以看出,  $0f-1p$  中间态梯形图对<sup>39</sup>Ca 空穴谱约有 0.5 MeV 左右的贡献, 但对<sup>41</sup>Ca 单粒子谱的贡献不大, 而由  $G_{BI}$  和  $G_{BII}$  求得的这两个核的各自的能级间距则几乎是一样的, 差别很小.

其次, 我们讨论一下单粒表象谐振子势能量零点常数  $B$  的选择对计算结果的影响问题. 表 4 列出了部份能谱和  $B$  的关系. 从表 4 可以看出, 能量本征值对  $B$  是相当敏感的.

表 1 用 RSC 势的  $\mathbf{G}_{\text{BII}}$ , 自洽求解式(1)时的收敛情况

态	$0S_{1/2}$	$0p_{3/2}$	$0p_{1/2}$	$0d_{5/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{3/2}$	$0f_{7/2}$	$1p_{3/2}$	$1p_{1/2}$	$0f_{5/2}$
初 值	-65	-40	-37	-23	-21.5	-16.9	-7	-4	-3.5	-2
收 敛 值	-62.27	-40.95	-38.32	-22.98	-20.91	-19.08	-6.78	-5.36	-3.82	-2.13
迭代次数	3	4	3	2	3	4	3	3	3	3

表 2  $^{40}\text{Ca}$  相邻核能谱  $\hbar\Omega = 12\text{MeV}$   $B = 0$ 

势	$^{39}\text{Ca}$	$^{41}\text{Ca}$									
		$0s_{1/2}$	$0p_{3/2}$	$0p_{1/2}$	$0d_{5/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{3/2}$	$0f_{7/2}$	$1p_{3/2}$	$1p_{1/2}$	
RSC	$\Omega_{\text{BII}}$	43.19	21.87	19.24	3.90	1.83	(-19.08)	0 (-6.78)	1.42	2.96	4.65
	$\Omega_{\text{BII}}$	43.50	21.66	19.07	3.81	1.84	(-19.59)	0 (-6.90)	1.36	2.89	4.61
Paris	$\Omega_{\text{BII}}$	44.68	22.91	19.76	4.59	2.44	(-18.71)	0 (-6.74)	1.36	3.37	5.50
	$\Omega_{\text{BII}}$	44.70	22.63	19.50	4.51	2.45	(-19.27)	0 (-6.86)	1.28	3.08	5.44
RBHF <sup>[1]</sup>		41.40	21.71	18.99	4.08	2.41	(-13.41)	0 (3.14)	-1.26	-0.34	3.48
实验值 <sup>[10]</sup>					6.3	2.6	(-15.6)	0 (-8.4)	2.1	4.1	5.5

其中圆括号里的值是相对  $^{40}\text{Ca}$  基态的  $\delta$  值, MS 表模型空间。

表 3  $^{39}\text{Ca}$  和  $^{41}\text{Ca}$  按  $Q_{B1}$  算得的跃迁矩阵元  $C_\alpha(\mu)$  的相对比值

		RSC				Paris			
		$\mu$	$0d_{5/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{3/2}$	$0f_{7/2}$	$0f_{5/2}$	$0d_{3/2}$	$0f_{7/2}$
$\alpha$	$C_\alpha(\mu)$	0	1	0.1150	1	1	1	-0.1165	1
1	0.0929	1	0.0793	0.0380	0.0444	0.1153	1	0.0920	0.0635
2	0.0310	-0.1654	0.0395	0.0497	0.0824	0.0313	0.1158	0.0447	-0.0341
3	-0.0154	0.0737	0.0525			-0.0115	0.0527	-0.0071	0.0929
4		0.0853					-0.0120		

表 4  $^{40}\text{Ca}$  相邻核能谱与单粒子象谐振子势的能量零点常数  $B$  的关系

		RSC				Paris			
		$\mu$	$0d_{5/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{3/2}$	$0f_{7/2}$	$0d_{3/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{3/2}$
$B$	态	0	3.81	1.84	0	0	4.88	2.46	0
0		0	3.81	1.84	0	(-19.59)	(-6.90)	0	(-19.27)
-10		-10	3.75	1.83	0	(-21.72)	(-8.54)	4.62	(-21.19)
-25		-25	3.64	1.80	0	(-25.04)	(-11.15)	4.56	(-24.17)

能量单位 MeV

它随  $B$  近乎线性变化, 但  $^{39}\text{Ca}$  和  $^{41}\text{Ca}$  两个核自己的各能级的相对间隔却相当稳定, 对  $B$  很不敏感。这与我们在  $^{16}\text{O}$  区域得到的结果相似。本来, 严格的理论计算结果应该与所用表象的输入参数无关, 由于只取了质量算符的一级近似, 计算结果与所用表象的输入参数还有关是不奇怪的。值得强调的倒是: 我们求得的每个核的各能级的相对间距很稳定, 基本上与  $B$  无关, 因此将它们与实验值进行比较是有意义的。按我们采用的办法, 取  $B = 0$  时算得的基态能量在数值上与实验值和以往的 RBHF 计算结果比较接近, 我们将一般地取  $B = 0$ 。

最后, 从表 2 可以看出, 虽然由 RSC 势和 Paris 势求得的能谱一般差别不大, 但由 Paris 势算得的  $^{39}\text{Ca}$  的空穴谱与实验值符合得明显好些。综合我们在  $^{16}\text{O}$  区域得到的结果<sup>[3]</sup>, 我们认为, Paris 势是目前比较好的一种核力势, 它值得更广泛地应用于核的各种微观理论计算中。

总的看起来, 我们算得的能谱在能级的次序和间距上都与实验符合颇好。由于  $0s_{\frac{1}{2}}$ ,  $0p_{\frac{1}{2}}$ ,  $0p_{\frac{3}{2}}$  三个态能谱的实验值是通过  $(p, 2p)$  反应等分析估计出来的, 其可靠程度需要进一步验证, 故暂未列出。我们算得的  $^{39}\text{Ca}$  的其它三个单空穴能量与以往的 RBHF 计算结果比较接近。但以往的 RBHF 算得的  $^{41}\text{Ca}$  的基态  $7/2^-$  和第一激发态  $3/2^-$  在次序上普遍与实验不符, 表 2 中所列的 Davies 等的结果<sup>[11]</sup>是以往 RBHF 计算中所得到的比较好的结果, 其  $7/2^-$  和  $3/2^-$ ,  $1/2^-$  的次序也是颠倒的。我们的计算结果不但在能级的次序上与实验完全一致, 而且在数值上也与实验值符合较好。我们采用的解能量本征方程的方法较 BHF 和 RBHF 计算要简单得多, 得到的结果却明显地好于 RBHF 方法, 主要原因在于我们严格地顾及了  $G$  矩阵的偏离能壳性。

### 三、单粒子阱与振幅修正

单粒子阱可由质量算符  $M$  定义为<sup>[4]</sup>

$$u_{\alpha\beta} = \langle \alpha | M(\varepsilon_\beta) | \beta \rangle. \quad (6)$$

单粒子薛定格方程

$$\hat{h}|\alpha\rangle = (\varepsilon + u)|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle \quad (7)$$

的本征值  $\varepsilon_\alpha$  全是实的, 且严格满足

$$\varepsilon_\alpha = \pm [E_\alpha(A \pm 1) - E_0(A)]. \quad (8)$$

其中  $E_0(A)$ ,  $E_\alpha(A \pm 1)$  的意义同式(2)与式(3)。对于质量算符我们将选顾及振幅修正的一级近似, 它的表达式如下:

$$M_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega) = \delta_{l_\alpha, l_\beta} \delta_{j_\alpha, j_\beta} \delta_{m_\alpha, m_\beta} \delta_{\tau_\alpha, \tau_\beta} \frac{1}{2(2j_\alpha + 1)} \\ \sum_h \sum_{JT} (2J + 1)(2T + 1) \sqrt{(1 + \delta_{\alpha, h})(1 + \delta_{\beta, h})} G_B(\alpha h, \beta h; JT; \omega + \varepsilon_h) A_{hh}, \quad (9)$$

其中  $A_{hh}$  的近似表达式为<sup>[4]</sup>

$$A_{hh} \simeq [1 - M'_{hh}(\varepsilon_h)]^{-1}, \quad (10)$$

$$M'_{hh}(\varepsilon_h) = \left[ \frac{dM_{hh}(\omega)}{d\omega} \right]_{\omega=\varepsilon_h}.$$

式(7)可用自治方法求解,求解时需要做表象的逐次迭代<sup>[11]</sup>,显然,只要迭代收敛,由此求得的解将不依赖于所选的初始表象,虽然后者会影响迭代求解的收敛速度。<sup>40</sup>Ca 区域自治求解的工作量将比<sup>16</sup>O 区域的大得多。鉴于上述理由,本文没有对  $\hbar\Omega$  的选择再做考查,仍取  $\hbar\Omega = 12 \text{ MeV}$ 。在<sup>16</sup>O 区域的理论计算中<sup>[11]</sup>,我们发现  $B$  的不同选择只影响自治迭代的收敛速度,而对自治的结果基本上无影响,同时还发现自治波函数与谐振子波函数有很大的重叠,但能量差别很大。因此,只要合理地选择能移值,那么含能移的等效谐振子势将是轻核自治位阱的一个较好的近似。在<sup>40</sup>Ca 区域,为使没有参加自治的  $0f-1p$  大壳的平均能量与实验值一致,作为迭代的初始输入参数,我们选了  $B = -60 \text{ MeV}$ 。我们的计算采用 Paris 势,  $G$  矩阵中泡利算符按图 2(b) 选取,方程的阶数都选为 3 阶,计算结果列于表 5。

表 5 <sup>40</sup>Ca 相邻核的单粒子阱计算结果  
 $\hbar\Omega = 12 \text{ MeV} \quad B = -60 \text{ MeV}$

$n\alpha$		<sup>39</sup> Ca						<sup>41</sup> Ca		
		$0s_{1/2}$	$0p_{3/2}$	$0p_{1/2}$	$0d_{5/2}$	$1s_{1/2}$	$0d_{3/2}$	$0f_{7/2}$	$1p_{3/2}$	$1p_{1/2}$
$\varepsilon_{n\alpha}$		37.88	20.88	18.39	3.65	2.00	0 (-20.03)	0 (-8.82)	0.77	2.25
	$n$	0.9963	0.9929	0.9935	0.9899	0.9927	0.9919	0.9954	0.9900	0.9912
$\langle m\alpha   n\alpha \rangle$	$m$	0.0856	0.1181	0.1124	0.1356	0.1197	0.1160	0.0726	0.1368	0.1298
	$n+1$									-0.0035
	$n+2$	0.0048	0.0149	0.0161	0.0406	0.0133	0.0522	0.0628	0.0245	0.0244
										0.0785
$A_{hh}$		0.788	0.805	0.817	0.800	0.810	0.804			

由表 5 的结果可见:  $A_{hh}$  的值都在 0.8 左右,说明振幅修正的影响在 20% 左右,高级图的作用不容忽略。算得的能谱与实验值符合也颇好,粒子谱部份仍然明显好于 [1] 的结果,能级次序也与实验完全一致。如若采用[9]中逐次换表象的严格自治迭代,将会使计算结果得到进一步的改善。

#### 四、结语

最近,申庆彪等<sup>[12]</sup>在调试势参数的基础上计算了<sup>39</sup>Ca 的空穴谱和<sup>41</sup>Ca 的粒子谱,给出了不仅在能级次序上与实验一致,而且在数值上也与实验值比较接近的结果。需要指出的是:本文的全部理论计算是建立在原则上无可调参数的微观理论基础上的,所得到的结果明显地好于以往的 RBHF 的计算结果,特别是解决了单粒子谱的倒序问题,从而说明[4]给出的由质量算符所定义的单粒子阱的确是一种适用的单粒子阱的最佳选择。

## 参考文献

- [1] K. T. R. Davies et al., *Phys. Rev.*, **C4**(1971), 81.
- [2] 杨善德等, 高能物理与核物理, **6**(1982), 480.
- [3] 王克协等, 高能物理与核物理, **6**(1982), 525.
- [4] 吴式枢, 高能物理与核物理, **3**(1979), 469.
- [5] 吴式枢、姚玉洁, 原子核物理, **2**(1980), 193.
- [6] S. S. Wu, T. T. S. Kuo, *Nucl. Phys.*, **A430**(1984), 110.
- [7] B. R. Barrett et al., *Phys. Rev.*, **C3**(1971), 1137.
- [8] R. V. Reid, *Ann. of Phys.*, **50**(1968), 411.
- [9] M. Lacombe et al., *Phys. Rev.*, **C21**(1980), 861.
- [10] X. Campi, D. W. Sprung, *Nucl. Phys.*, **A194**(1972), 401.
- [11] Yang Shan-de et al., Proc. Int. Summer School on Nucleon-Nucleon Interaction and Nuclear many-body Problems, ed. S. S. Wu and T. T. S. Kuo (World Scientific, Singapore, 1984), p. 735.
- [12] 申庆彪等, 高能物理与核物理, **4**(1983), 473.

SINGLE-PARTICLE AND SINGLE-HOLE SPECTRA IN  $^{40}\text{Ca}$ 

JING XIAO-GONG LI CHENG-ZU YANG SHAN-DE WU SHI-SHU  
(Jilin University)

## ABSTRACT

The single-particle (sp) and single-hole spectra in  $^{40}\text{Ca}$  are calculated with the Paris potential by two methods: (1) the eigenvalue equation derived from the sp Green function and (2) the sp potential  $u_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}(\epsilon_\beta)$  defined in terms of the mass operator  $M_{\alpha\beta}(\omega)$ . The energy dependence of  $G$ -matrix is taken into account rigorously. Our results agree with the experimental values fairly well. It is found that the Paris potential yields a somewhat better result than the RSC potential.