第5卷 第3期 高能物理与核物理 Vol. 5, No. 3
1981年5月 PHYSICA ENERGIAE FORTIS ET PHYSICA NUCLEARIS May, 1981

生成坐标方法与原子核集体运动（IV）TDGCM 和 ATDHF 的关系

徐躬耦
（兰州大学）

摘 要

考虑依赖于时间的生成坐标方法，给出了依赖于时间的集体运动的薛定谔方程. 再通过维格纳矩阵，作经典近似，给出了关于平均集体性质 $\bar{q}(t)$ 及 $\bar{p}(t)$ 的变分表达式，在绝热近似下，它正是 Villars 导出 ATDHF 结果的出发点.

近年来，由于裂变与重离子反应的研究的进展，引起了人们对于大振幅集体运动微观理论的重视. 这种理论研究的主导思想是企图从复杂的原子核多体系统中，选出与问题直接有关的中肯自由度来进行研究. 在特定情况下，可以近似地假定除某些集体自由度外，其他自由度均被冻结，不参与运动，并把整个系统的运动仅仅考虑为这些集体自由度的运动. 生成坐标方法（以后简称为 GCM）[1-4] 与绝热的依赖于时间的哈特里福克方法（以后简称为 ATDHF）[5,6] 都是从这样的基本精神出发去研究原子核集体运动的.

原子核体系的薛定谔方程可以由下述变分原理给出，

$$I_{12}=\int_{t_1}^{t_2} dt\langle\Psi(t)|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H|\Psi(t)\rangle, \tag{1}$$

$$\delta I_{12}=0,\ \delta|\Psi(t_1)\rangle=\delta|\Psi(t_2)\rangle=0. \tag{2}$$

在变分原理中，试探波函数的形式的选定，是一个关键性问题. 前述原子核集体运动微观理论的主导思想，也正是从这里注入的.

Villars[1)] 在导出 ATDHF 时，具体选定了下述形式的试探波函数，

$$|\Psi(t)\rangle=\exp\left(\frac{i}{\hbar}pQ\right)|\phi(q)\rangle, \tag{3}$$

$$|\phi(q)\rangle=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}qP\right)|\phi(0)\rangle,\ i\hbar\frac{\partial}{\partial q}|\phi(q)\rangle=P|\phi(q)\rangle. \tag{4}$$

这里算子 Q, P 是相应于所考虑的集体运动形态的那一对共轭量的算子，它们的共轭性质表现为

$$\langle\phi(q)|[Q,\ P]|\phi(q)\rangle=i\hbar. \tag{5}$$

q, p 是相应于算子 Q, P 的一对量，它们是时间 t 的函数. 将这样的试探波函数代入 (1)

本文 1980 年 8 月 23 日收到.

1) 为了便于比较，这里引述了 Villars 关于 ATDHF 的推导方式.

(2) 式，对 q，p 变分，得到

$$\dot{q}=\frac{\partial\mathscr{H}_c}{\partial p},\quad \dot{p}=-\frac{\partial\mathscr{H}_c}{\partial q}. \tag{6}$$

其中

$$\begin{aligned}\mathscr{H}_c(q,p)&=\langle\phi(q)\left|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}pQ\right)H\exp\left(\frac{i}{\hbar}pQ\right)\right|\phi(q)\rangle\\&=V(q)+\frac{p^2}{2M(q)}+\cdots,\end{aligned} \tag{7}$$

$$V(q)=\langle\phi(q)|H|\phi(q)\rangle, \tag{7a}$$

$$\frac{1}{M(q)}=\langle\phi(q)\left|\left[\left[H,i\frac{Q}{\hbar}\right],\frac{iQ}{\hbar}\right]\right|\phi(q)\rangle. \tag{7b}$$

若要求 q，p 满足正则方程，对 $|\phi(q)\rangle$ 变分，则得到

$$\langle\delta\phi(q)\left|H-\frac{dV(q)}{dq}Q\right|\phi(q)\rangle=0, \tag{8}$$

$$\langle\delta\phi(q)\left|\left[H,\frac{iQ}{\hbar}\right]-\frac{1}{M(q)}P\right|\phi(q)\rangle=0. \tag{9}$$

这里在试探波函数中假定了 $q(t)$ 和 $p(t)$ 是可以互易的量，因此也就只能得到如 (6) 式所示的经典的正则方程，集体运动完全取经典描述．如果要考虑集体运动的量子效应，还得进一步引入量子化．本来变分原理是量子的，只是由于在试探波函数中一开始就把 $q(t)$ 及 $p(t)$ 看作可以互易的量，所以才得到经典的运动方程．那末，自然要提出这样的问题，是否可以在开始时不作经典近似以避免后来人为地引入了的量子化呢？

为要阐明这一点，必须从更基本的观点出发去进行探讨．考虑依赖于时间的生成坐标方法 (TDGCM)．假定所考虑的集体运动态可表为

$$|\Psi(t)\rangle=\int dqf(q,t)|\phi(q)\rangle,\quad |\phi(q)\rangle=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}qP\right)|\phi(0)\rangle. \tag{10}$$

这里 $|\phi(0)\rangle$ 是填满费密能 ε_F 以下诸能级的态，P 是产生或消灭粒子空穴对的集体算子，对时间反演变号，$|\phi(q)\rangle$ 则是集体性质为 q 的状态，$|\Psi(t)\rangle$ 是按态叠加原理构成的集体性质 q 具有一定分布的状态，分布情况由依赖于时间的函数 $f(q,t)$ 确定．(10) 式所示的波函数未破坏测不准关系，是量子的，把它代入 (1)、(2) 式，所得到的结果自然应是量子的．(10) 式所表示的是薛定谔表象中的态，q 因而 $|\phi(q)\rangle$ 与时间 t 无关，与时间 t 的依赖关系表现在 $f(q,t)$ 中．因为 $f(q,t)$ 是任意的，$|\Psi(t)\rangle$ 是 $|\phi(q)\rangle$ 的任意的线性叠加，所以没有对 $|\Psi(t)\rangle$ 的具体形式作任何规定．由此可见，TDGCM 中所选取的试探波函数的形式是普遍的，是合乎量子力学要求的，不存在 ATDHF 中所遇到的问题．

把 (10) 式所示的试探波函数代入 (1)、(2) 式，求得[1)]

$$\begin{aligned}I_{12}=\int_{t_1}^{t_2}dt\int dq'\int dq''\,f^*(q',t)\Big\langle\phi(0)\Big|&\exp\left(\frac{i}{\hbar}q'P\right)\\\times\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)&\exp\left(-\frac{i}{\hbar}q''P\right)\Big|\phi(0)\Big\rangle\end{aligned}$$

1) 从 (11)—(20) 式的推导参阅[3c]．

$$
= \int_{t_1}^{t_2} dt \int dq' \int dq'' f^*(q', t) \left\langle \phi(0) \middle| \exp\left(\frac{i}{\hbar} q'P\right) \right.
$$

$$
\times \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2}(q'-q'')^2\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} q''P\right) \left| \phi(0) \right\rangle_{W}. \tag{11}
$$

这里已用了归一化条件

$$
\langle \phi(0) | P^2 | \phi(0) \rangle = 1. \tag{12}
$$

(11)式中 $\exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2}(q'-q'')^2\right)$ 是两个 P 直接收缩所贡献的因子，故 $\langle\ \ \rangle_W$ 中不再包括两个 P 直接收缩所给出的贡献。

注意到下述关系式

$$
\exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2}(q'-q'')^2\right) = \hbar \int dq \delta(q-q') \exp\left[\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\right] \delta(q-q''), \tag{13}
$$

(11)式可以化为

$$
\frac{1}{\hbar} I_{12} = \int_{t_1}^{t_2} dt \int dq \int dq' \int dq'' \delta(q-q') f^*(q,t) \langle \phi(0) | \exp\left(\frac{i}{\hbar} q'P\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)
$$

$$
\times \exp\left(\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} q''P\right) \Big| \phi(0) \rangle_W f(q'', t) \delta(q-q'')
$$

$$
= \int_{t_1}^{t_2} dt \int dq f^*(q,t) \left\langle \phi(0) \middle| \exp\left(\frac{i}{\hbar} qP\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) \right.
$$

$$
\cdot \exp\left(\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} qP\right) \left| \phi(0) \right\rangle_W f(q, t)
$$

$$
= \int_{t_1}^{t_2} dt \int dq f^*(q,t) \exp\left(\frac{\hbar^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\right) \left\langle \phi(0) \middle| \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(q - \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right]\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) \right.
$$

$$
\times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(q + \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right] \left| \phi(0) \right\rangle_W \exp\left(\frac{\hbar^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\right) f(q, t), \tag{14}
$$

其中

$$
\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}. \tag{15}
$$

对 $f^*(q, t)$ 变分，得到

$$
\left\langle \phi(0) \middle| \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(q - \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right] \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(q + \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right] \middle| \phi(0) \right\rangle_W
$$

$$
\cdot \exp\left(\frac{\hbar^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\right) f(q, t) = 0. \tag{16}
$$

使

$$
\hat{\mathscr{N}} = \left\langle \phi(0) \middle| \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(q - \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(q + \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right] \middle| \phi(0) \right\rangle_W, \tag{17}
$$

$$
\hat{\mathscr{H}} = \left\langle \phi(0) \middle| \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(q - \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right] H \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(q + \frac{i\hbar}{2}\hat{p}\right)P\right] \middle| \phi(0) \right\rangle_W, \tag{18}
$$

$$
F(q,t) = \hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{\hbar^2}{4}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\right) f(q, t), \tag{19}
$$

则(16)式化为

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\hat{\mathscr{H}}^{\frac{1}{2}}\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\right)F(q,t)=0. \tag{20}$$

这是量子形式的依赖于时间的集体运动的薛定谔方程。

利用 $F(q,t)$ 的定义(19)式及 $F(q,t)$ 所满足的方程(20)式，可将(14)式化为

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}I_{12}=&\int_{t_1}^{t_2}dt\int dq\,F^*(q,t)\left\langle\phi(0)\left|\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(q-\frac{i\hbar}{2}p\right)P\right]\right.\right.\\&\times\left\{\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\hat{\mathscr{H}}\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}-H\right\}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(q+\frac{i\hbar}{2}p\right)P\right]\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\left|\phi(0)\right\rangle_W F(q,t)\\&+\int_{t_1}^{t_2}dt\int dq\,F^*(q,t)\left\langle\phi(0)\left|\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(q-\frac{i\hbar}{2}p\right)P\right]\right.\right.\\&\times\left[\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(q+\frac{i\hbar}{2}p\right)P\right]\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}},\ \hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\hat{\mathscr{H}}\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\right]\left|\phi(0)\right\rangle_W F(q,t).\end{aligned} \tag{21}$$

为了取经典近似，先把对于 $F(q,t)$ 的平均化到维格纳矩阵的表述形式[7]，再用 $\delta(q-\bar{q}(t))\delta(p-\bar{p}(t))$ 代入计算，所得结果为

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}I_{12}=&\int_{t_1}^{t_2}dt\left\langle\phi(0)\left|\overline{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\left\{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}\mathscr{H}\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}-H\right\}}\right.\right.\\&\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}+\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\overline{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}}\left|\phi(0)\right\rangle_W\\&+\int_{t_1}^{t_2}dt\left\langle\phi(0)\left|\overline{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\right.\right.\\&\overline{\times\left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(q+\frac{i\hbar}{2}p\right)P\right)\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}},\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\hat{\mathscr{H}}\hat{\mathscr{N}}^{-\frac{1}{2}}\right]}\left|\phi(0)\right\rangle_W\\=&\int_{t_1}^{t_2}dt\left\langle\phi(0)\left|\overline{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(q-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]i\hbar\frac{d}{dt}\right.\right.\\&\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}+\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\overline{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}}\left|\phi(0)\right\rangle_W\\=&\int_{t_1}^{t_2}dt\left\{\left\langle\phi(0)\left|\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]i\hbar\frac{d}{dt}\right.\right.\right.\\&\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}+\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\left|\phi(0)\right\rangle_L-\frac{i\hbar}{2}\frac{d}{dt}\ln\overline{\mathscr{N}}\right\}\end{aligned} \tag{22}$$

这里已利用了对任意算子 G 都适用的关系

$$\begin{aligned}&\overline{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}}\left\langle\phi(0)\left|\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]G\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}+\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\right|\phi(0)\right\rangle_W\overline{\mathscr{N}^{-\frac{1}{2}}}\\&=\left\langle\phi(0)\left|\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]G\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}+\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\right|\phi(0)\right\rangle_L.\end{aligned} \tag{23}$$

在绝热近似下，变分原理化为

$$\begin{aligned}O=\delta\int_{t_1}^{t_2}dt&\left\langle\phi(0)\left|\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]i\hbar\frac{d}{dt}\right.\right.\\&\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}+\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\left|\phi(0)\right\rangle_L\approx\delta\int_{t_1}^{t_2}dt\,\bar{p}\dot{\bar{q}}.\end{aligned} \tag{24}$$

因为从(20)式有

$$\frac{d}{dt}\overline{\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}}\mathscr{H}\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}}}=0, \tag{25}$$

故在经典近似有

$$\left\langle\phi(0)\left|\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}-\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]H\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\bar{q}+\frac{i\hbar}{2}\bar{p}\right)P\right]\right|\phi(0)\right\rangle_L=E. \tag{26}$$

故(24)式对 $\bar{q}$, $\bar{p}$ 变分时须同时考虑(26)式所示的限制条件[8]. 这种有限制条件的变分可化为

$$0=\delta\int_{t_1}^{t_2}dt\left\{\bar{p}\dot{\bar{q}}-\overline{\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}}\mathscr{H}\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}}}\right\}, \tag{27}$$

利用(24)式及(26)式,得到

$$\begin{aligned}O=\delta\int_{t_1}^{t_2}dt\left\langle\phi(0)\right|&\exp\left(\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)\exp\left(\frac{1}{2}\bar{p}P\right)\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right\}\\&\cdot\exp\left(\frac{1}{2}\bar{p}P\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)\left|\phi(0)\right\rangle_L.\end{aligned} \tag{28}$$

为了与 Villars 对于 ATDHF 的推导进行更直接的比较,从下式定义算子 Q,

$$\left\langle\phi(0)\left|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)[Q,P]\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)\right|\phi(0)\right\rangle=i\hbar. \tag{29}$$

因算子 P 为产生和消灭粒子空穴对的集体算子,

$$P=\sum_{ni}(c_{ni}a_n^+a_i+c_{ni}^*a_i^+a_n), \tag{30}$$

故求得

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)Q\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)=\frac{-i\hbar}{2}\sum_{ni}(c_{ni}a_n^+a_i-c_{ni}^*a_i^+a_n). \tag{31}$$

于是有

$$\left(Q+\frac{i\hbar}{2}P\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)\left|\phi(0)\right\rangle=0, \tag{32}$$

相应于前述近似,(28)式还可化为

$$\begin{aligned}\delta\int_{t_1}^{t_2}dt\left\langle\phi(0)\right|&\exp\left(\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\bar{p}Q\right)\left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right\}\\&\times\exp\left(\frac{i}{\hbar}\bar{p}Q\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)\left|\phi(0)\right\rangle.\end{aligned} \tag{33}$$

(33)式连同(29)式正好是 Villars 导出 ATDHF 结果的出发点,我们在这里则从 TDGCM 得出了这些公式.

从以上的结果,我们可以看出:

(i) ATDHF 是 TDGCM 的经典极限结果. 如果在 TDGCM 中,对集体运动取经典近似,将 q, p 换成 $\bar{q}(t)$, $\bar{p}(t)$, 再取绝热近似,就得到 ATDHF 的结果.

(ii) 虽则从形式上看起来

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\bar{p}Q\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\bar{q}P\right)\left|\phi(0)\right\rangle,$$

似乎是薛定谔表象中的态 $|\phi(t)\rangle$，但上面的推导过程指明不能这样去直接理解.(28)式是对集体运动采取平均和经典近似以后的结果.

(iii) 根据测不准关系，p 是和 q 的不确定性紧密地联系在一起的，因此(33)式的具体形式是由试探波函数(10)式唯一地确定了的．还应该指出，虽则(22)式只用到经典近似，但在得到(28)及(33)式时已进一步用了绝热近似.

总之，通过上面的分析，阐明了 ATDHF 与 TDGCM 之间的关系以及 ATDHF 赖以出发的变分表达式的涵义.

参　考　文　献

[1a] D. L. Hill and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.*, **89**(1953), 1102.

[1b] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.*, **108**(1957), 311.

[2] C. W. Wong, *Phys. Rep.*, **15C**(1975), 283.

[3a] 徐躬耦，中国科学，(1974)，567.

[3b] 徐躬耦、王顺金、刘敦桓、杨亚天、毛铭德，物理学报，**25**(1976)，226.

[3c] 徐躬耦、杨亚天、王顺金，中国科学，1981年第 4 期.

[4] P. G. Reinhard and K. Goeke, *Phys. Rev.*, **C20**(1979), 1546.

[5] F. Villars, *Nucl. Phys.*, **A285**(1977), 269.

[6] K. Goeke and P. G. Reinhard, *Ann. Phys.* (N. Y.), **112**(1978), 328.

[7] 徐躬耦，原子核物理，**2**(1980)，115.

[8] H. Goldstein, Classical Mechanics, Addison-Wesley (1953).

THE GENERATOR COORDINATE METHOD AND NUCLEAR COLLECTIVE MOTIONS (IV) TDGCM VERSUS ATDHF

Xu Gong-ou

(*Lanzhou University*)

Abstract

Considering the time-dependent generator coordinate method, the time-dependent Schrödinger equation for nuclear collective motions is obtained. It is then possible to obtain through Wigner matrix a variational expression for mean collective properties $\bar{q}(t)$ and $\bar{p}(t)$ in classical limits. Under adiabatic approximation this is just the expression by which Villars has obtained the ATDHF results.