

# PDHF 方法应用于 $fp$ 奇 $A$ 核 $^{47}\text{Ti}$ 、 $^{47}\text{V}$ 、 $^{47}\text{Cr}$ 、 $^{49}\text{Cr}$ 的能谱研究\*

韩 勇 廖继志

(四川大学物理系 成都 610064)

1996-04-19 收稿

## 摘要

将近似的角动量投影形变 Hartree-Fock (PDHF) 方法用于  $fp$  壳层区的奇  $A$  核:  $^{47}\text{Ti}$ 、 $^{47}\text{V}$ 、 $^{47}\text{Cr}$ 、 $^{49}\text{Cr}$ 。计算了它们的能谱，并与实验能谱作了比较，结果是令人满意的。同时，对涉及到的核谱特性结合粒子加转子模型进行了分析，发现这些核的能谱具有无排列极限能谱的特征。

**关键词** 形变 HF 态, 投影积分的 Gauss 近似, Coriolis 相互作用, 无排列极限。

## 1 引言

在以前的工作中，把角动量投影形变 Hartree-Fock (PDHF) 方法应用于一些  $fp$  偶偶核的能谱和核性质的研究<sup>[1]</sup>，发现投影能谱及核性质与实验数据符合较好。因此，我们继续用此方法来研究  $fp$  壳层区其他类型的核。本文主要讨论  $^{47}\text{Ti}$ 、 $^{47}\text{V}$ 、 $^{47}\text{Cr}$  和  $^{49}\text{Cr}$  等奇  $A$  核，首先计算了它们的一些 HF 内禀态，然后对这些态进行角动量投影。结果表明，对这些奇  $A$  核计算出的能谱与实验能谱的符合情况与对偶偶核的符合情况大体相同，而且还能再现这些奇  $A$  核中的无排列极限效应。计算中仍然采用修正的表面  $\delta$  相互作用 (MSDI)<sup>[1]</sup>，对  $^{40}\text{Ca}$  核核心外面的价核子进行 HF 计算，然后利用投影积分的 Gauss 近似方法对计算出的 HF 态进行角动量投影<sup>[2]</sup>以产生基态带和一些激发带的能谱。

## 2 投影积分的 Gauss 近似方法及讨论

PDHF 方法的细节已在文献 [1, 2] 中给出，但为了讨论方便，有必要对此方法的主要计算步骤作简短回顾：

归一化的投影态及其能量分别是

\*国家自然科学基金资助。

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

$$p'_{KK} \equiv \langle \Phi_{\sigma K} | P'_{KK} | \Phi_{\sigma K} \rangle; \quad (1)$$

$$E_{IK} = h'_{KK} / p'_{KK},$$

$$h'_{KK} \equiv \langle \Phi_{\sigma K} | H P'_{KK} | \Phi_{\sigma K} \rangle, \quad (2)$$

其中  $H$  是 Hamilton 量,  $P'_{KK}$  是投影算符,  $|\Phi_{\sigma K}\rangle$  是轴对称形变 HF 内禀态,  $K$  是角动量在对称轴上的投影量子数,  $\sigma$  是代表组态的符号(以下被略去). 利用投影算符及 d 函数的定义, 得

$$p'_{KK} = (I + 0.5) \int_0^\pi \sin \theta d'_{KK}(\theta) \langle \Phi_K | \exp(-i\theta I_y) | \Phi_K \rangle d\theta, \quad (3)$$

$$h'_{KK} = (I + 0.5) \int_0^\pi \sin \theta d'_{KK}(\theta) \langle \Phi_K | H \exp(-i\theta I_y) | \Phi_K \rangle d\theta, \quad (4)$$

其中

$$I_y = \sum_{i=1}^p j_y(i) + \sum_{i=1}^n j_y(i), \quad (5)$$

$j_y$  是第  $i$  个核子的角动量的  $y$  分量,  $p$  和  $n$  分别是价质子数和价中子数. 令

$$p(\theta) \equiv \langle \Phi_K | \exp(-i\theta I_y) | \Phi_K \rangle, \quad (6)$$

$$h(\theta) \equiv \langle \Phi_K | H \exp(-i\theta I_y) | \Phi_K \rangle / \langle \Phi_K | H | \Phi_K \rangle, \quad (7)$$

对  $p(\theta)$  进行指数展开

$$p(\theta) = \sum_{\text{偶 } n} \langle \Phi_K | (-i\theta I_y)^n / n! | \Phi_K \rangle, \quad (8)$$

这时再令

$$p(\theta) = \exp(-\theta^2 / \Gamma_p) = \sum_{n=0}^{\infty} (-\theta^2 / \Gamma_p)^n / n!, \quad (9)$$

这里  $\theta$  在  $[0, \pi/2]$  上定义, 当  $\pi/2 < \theta \leq \pi$  时,  $\theta^2$  应换成  $(\pi - \theta)^2$ . 令

$$A_n \equiv \langle \Phi_K | (I_y)^n | \Phi_K \rangle, n = 1, 2, 3, \dots. \quad (10)$$

再结合(8)、(9)式, 可以得到

$$\begin{aligned} \Gamma_p &= 2 / A_2 - \theta^2 / (A_2 \Gamma_p) + \theta^4 / (3A_2 \Gamma_p^2) - \theta^6 / (12A_2 \Gamma_p^3) + \dots \\ &\quad + A_4 \theta^2 \Gamma_p / (12A_2) - A_6 \theta^4 \times \Gamma_p / (360A_2) + A^8 \theta^6 \Gamma_p / (20160A_2) - \dots \end{aligned} \quad (11)$$

如果略去  $2 / A_2$  后的所有项, 则

$$\Gamma_p = 2 / A_2 = 2 / \langle \Phi_K | (I_y)^2 | \Phi_K \rangle. \quad (12)$$

同样,

$$\begin{aligned} \Gamma_h &= 2 E_{HF} / \langle \Phi_K | H (I_y)^2 | \Phi_K \rangle, \\ E_{HF} &= \langle \Phi_K | H | \Phi_K \rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

这样, 由(3)、(4)式, 并利用 d 函数的性质, 可得

$$p'_{KK} = (I + 0.5) \int_0^{\pi/2} [d'_{KK}(\theta) + (-1)^{I-K} d'_{K,-K}(\theta)] \exp(-\theta^2 / \Gamma_p) \sin \theta d\theta, \quad (14)$$

$$h_{KK}^I = (I + 0.5) \int_0^{\pi/2} E_{\text{HF}} [d_{KK}^I(\theta) + (-1)^{I-K} d_{K,-K}^I(\theta)] \exp(-\theta^2 / \Gamma_h) \sin \theta d\theta. \quad (15)$$

用(12)式严格计算  $\Gamma_p$ , 将  $\Gamma_h$  作为可调参量<sup>[2]</sup>,  $E_{\text{HF}}$  已通过 HF 计算得出。将这些量代入(14)、(15)式, 即可得到投影能量, 从而得到计算能谱。对同一带在不同  $\Gamma_p$

表1  $E_{\text{HF}}$ 、 $\Gamma_p$ 、 $\Gamma_h$  数值表(能量单位: MeV)。

核 素	$K$	$E_{\text{HF}}$	$\Gamma_p$	$\Gamma_h$
<sup>48</sup> Cr	0	-34.7958	0.1520	0.1604
<sup>62</sup> Zn	0	-138.4197	0.0750	0.0781
	2	-137.9517	0.0650	0.0671
<sup>66</sup> Ge	0	-162.2819	0.0450	0.0475
	2	-161.1834	0.0330	0.0347
<sup>47</sup> Ti	5/2	-52.4759	0.0330	0.0355
	7/2	-52.2742	0.0250	0.0269
	9/2	-52.1660	0.0490	0.0516
	11/2	-51.9458	0.1570	0.1611
	13/2	-51.4455	0.1720	0.1762
<sup>47</sup> V	3/2	-45.3840	0.0330	0.0349
	5/2	-44.7019	0.0323	0.0340
<sup>47</sup> Cr	3/2	-37.2540	0.0355	0.0375
	5/2	-36.5717	0.0379	0.0400
<sup>49</sup> Cr	5/2	-57.5944	0.0401	0.0423
	7/2	-57.2068	0.0302	0.0319

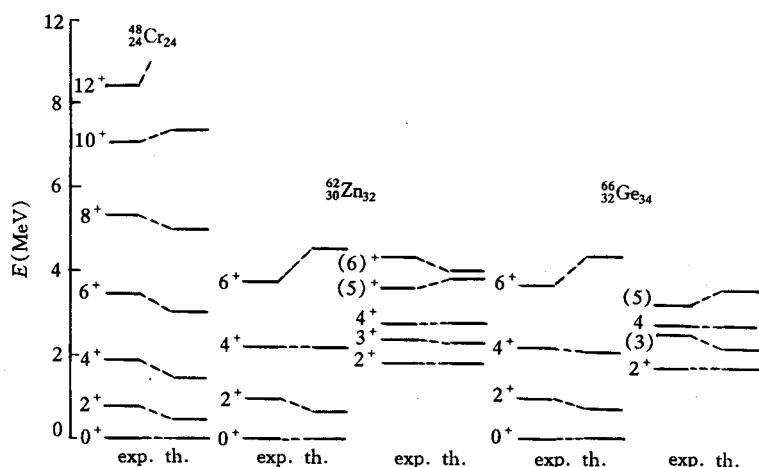


图1 3种偶偶核的计算能谱与实验能谱的比较

值下计算出的结果有所不同，因为由(12)式算出的  $\Gamma_p$  值是将其看成与  $\theta$  无关的参量代入(14)式进行计算的(作了 Gauss 近似)，但如果考虑  $2/A_2$  后面那些与  $\theta$  有关的项，从(11)式可看出，它们的和可能为正，也可能为负。因此对  $\Gamma_p$  值进行些调整是允许的。但由(11)式看到，对小  $\theta$ ， $\Gamma_p \approx 2/A_2$ ，而影响计算结果的  $\theta$  值基本上是在小  $\theta$  部分<sup>[2]</sup>，所以对  $\Gamma_p$  值的调整只应是小范围的。实际计算表明，在计算不同原子核的不同带时，能级受  $\Gamma_p$  值影响的敏感程度也是不一样的。为了便于讨论以及与奇  $A$  核进行比较，首先看几个偶偶核的情况。图 1 给出了<sup>48</sup>Cr、<sup>62</sup>Zn 和<sup>66</sup>Ge 的实验能谱<sup>[3-5]</sup>和计算能谱。投影能谱的参量  $E_{HF}$ 、 $\Gamma_p$ 、 $\Gamma_h$  列在表 1 中(下同)。由图可知，偶偶核的计算能谱与实验值的符合情况是较好的。

### 3 奇 $A$ 核能谱计算结果和讨论

由于多出一个奇质子或奇中子，从实验能谱中明显地看到，就平均的能级密度来说，奇  $A$  核与偶偶核情况很不一样：奇  $A$  核能级分布比较复杂，密而且不规则，不像偶偶核那样较容易地划分出一些规则的转动带。 $fp$  壳层区过渡核就更是如此。我们从最近的文献中选取了一些奇  $A$  核的实验能谱，对这些核进行了 PDHF 计算，其实验及计算能谱如图 2 和图 3 所示。其中<sup>47</sup>Ti、<sup>47</sup>V 和<sup>47</sup>Cr 的实验能谱取自文献[3]，<sup>49</sup>Cr 的实验能谱取自文献[6]。

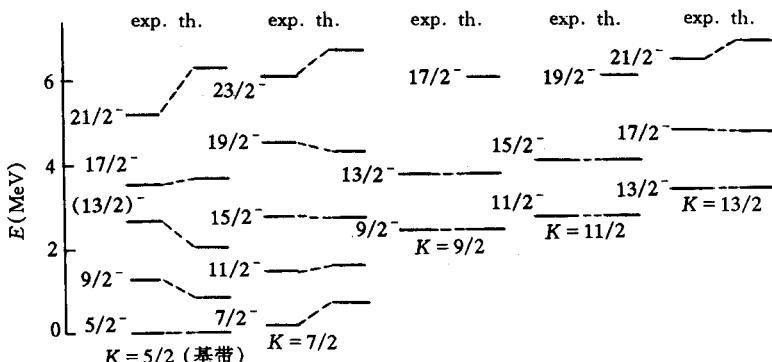


图 2 <sup>47</sup>Ti 的计算能谱与实验能谱的比较

当把<sup>47</sup>Ti 的能级按  $\Delta I = 1$  来划分转动带进行投影计算时，发现计算结果与实验值极不相符。但当把能级按  $\Delta I = 2$  来划分时，计算结果却与实验值相一致(如图 2 所示)。对这一现象，我们利用粒子加转子模型作一尝试性讨论：在不同的物理情况下，粒子加转子模型中的 Hamilton 量所包含的各项相对重要性是不同的，因而会出现 3 种不同的极限情况，即强耦合极限，转动排列极限和无排列极限。

强耦合极限的粒子与形变的耦合比 Coriolis 相互作用对粒子运动的影响大的多，产生  $\Delta I = 1$  的转动带。从对<sup>47</sup>Ti 的计算结果来看，显然不属于这种情况。

总 Hamilton 量中的 Coriolis 相互作用项为

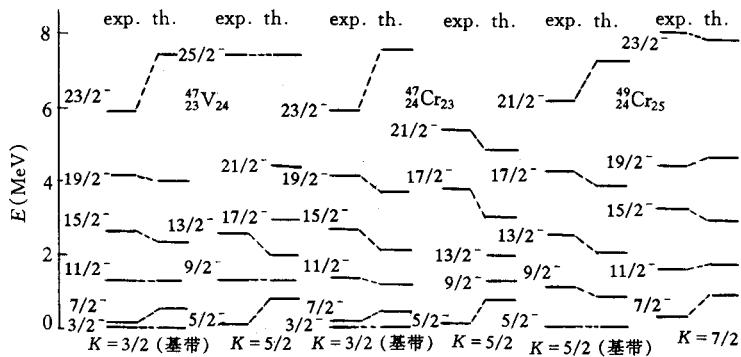


图 3 3 种奇 A 核的计算能谱与实验能谱的比较

$$H_c = -(\hbar^2 / g_0) \mathbf{I} \cdot \mathbf{j}, \quad (16)$$

$g_0$  是转动惯量. 容易证明,  $H_c$  就是推转壳模型中的推转项  $-\hbar\omega j_x$ , 即

$$H_c = -\hbar\omega j_x. \quad (17)$$

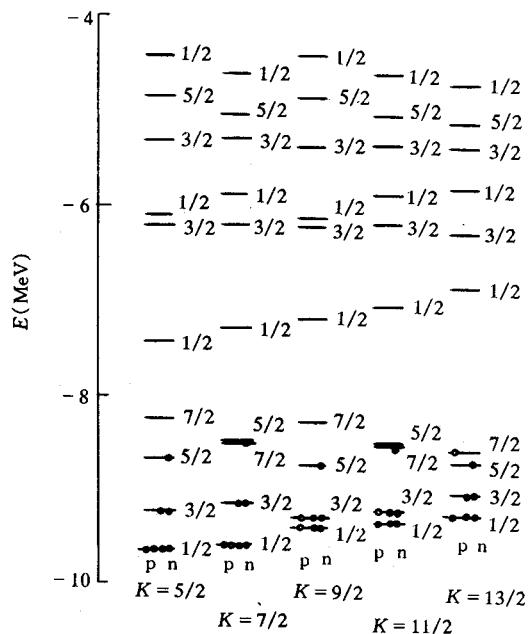
$j_x$  是势场以角速度  $\omega$  绕本体坐标系 (对称轴为  $z$  轴) 的  $x$  轴转动时, 单粒子角动量  $j$  在转动轴  $x$  轴上的分量. 显然, 当粒子处于高  $j$  低  $\Omega$  轨道时,  $H_c$  较大, 以致使  $j_x$  较大. 质量数  $A$  在 100 以上的许多奇  $A$  核就属于这种情况, 即转动排列极限, 产生  $\Delta I = 2$  的转动带. 计算的<sup>47</sup>Ti 的形变 HF 态的单粒子能级和填充情况示于图 4. 在基态组态中, 不配对核子占据的轨道是  $j = 7/2$ ,  $\Omega = 5/2$ , 不满足  $j \gg |\Omega|$  这样的转动排列极限条件. 因此<sup>47</sup>Ti 不属于转动排列极限的情况.

无排列极限的 Coriolis 相互作用跟粒子与形变的耦合强度差不多, 单粒子角动量  $j$  既不绕对称轴进动也不绕转动轴进动. 这时, 单粒子态的  $\Omega$  分裂可以忽略<sup>[7]</sup>, 从而产生  $\Delta I = 2$  的转动带. 虽然<sup>47</sup>Ti 不满足  $j \gg |\Omega|$  的条件, 但如果将其实验能谱与质量数  $A$  在 100 以上的一些核的实验能谱比较一下就会发现, 对于相同角动量  $I$  下的  $E_I - E_{I-2}$  值, 前者要比后者大许多, 且由近似公式

$$(\hbar\omega)^2 = (I^2 - I + 1)[(E_I - E_{I-2}) / (2I - 1)]^2 \quad (18)$$

可知, 前者的  $\omega$  相对来说就大许多. 这样, 由(19)式可看出,  $H_c$  仍然较大, 足以抵消粒子与形变的耦合.

下面分析<sup>47</sup>Ti 的形变情况. 相邻偶偶核<sup>46</sup>Ti 和<sup>48</sup>Ti 的形变参量  $\beta$  分别为

图 4 <sup>47</sup>Ti 的形变 HF 单粒子态

0.317 和 0.269<sup>[8]</sup>,  $^{47}\text{Ti}$  的  $\beta$  值应大体在此范围之内, 基本上满足无排列极限所要求的小形变条件  $|\beta A^{2/3}| < 4^{[7]}$ , 故其单粒子与形变的耦合强度就不会太大. 所以  $^{47}\text{Ti}$  能够较好地满足无排列极限的条件, 于是便产生了  $\Delta I = 2$  的转动带.

无排列极限的主要特征是 Yrast 态处于一条抛物线上, 抛物线的极小值在  $I \approx j$  处, 形成两个分支:

$$I = j + 2, j + 4, \dots \text{ (右分支);}$$

$$I = j - 2, j - 4, \dots, 3/2 \text{ 或 } 1/2 \text{ (左分支).}$$

$^{47}\text{Ti}$  的  $I = 5/2^-$  为基态, 估计应有属于左分支的  $I = 1/2^-$  态, 它在右分支的  $I = 9/2^-$  态附近, 在实验能谱中果然找到了这样一个  $1/2^-$  态, 其激发能为 1794 keV<sup>[3]</sup>.

从实验能谱中可明显发现  $\Delta I = 2$  的跃迁系列, 但也应看到,  $I = 15/2^-$  以上各态  $\Delta I = 2$  的跃迁系列要比  $\Delta I = 1$  的跃迁系列较弱. 对此, 目前只能作不肯定的推测:  $I = 15/2^-$  以上, 核的内部结构发生了某种变化, 例如核形变突然增大, 由此导致能谱向强耦合极限接近, 但  $\Delta I = 2$  的跃迁系列仍然存在.

与  $^{47}\text{Ti}$  相比,  $^{47}\text{V}$ 、 $^{47}\text{Cr}$ 、 $^{49}\text{Cr}$  等  $fp$  壳层区过渡核, 无论从计算结果, 还是从实验能谱的跃迁系列中, 都能更加明显地看到  $\Delta I = 2$  的转动带. 图 3 分别给出了它们的基态带和一个激发带的实验能谱和计算能谱, 无排列极限效应非常明显.

## 4 结 论

从以上分析及其讨论中知道, 应用 PDHF 方法对一些  $fp$  壳层区奇  $A$  核的能谱计算得到的结果是比较令人满意的. 但有些带的计算能级间隔与实验能谱存在一定的差异, 例如:  $^{47}\text{Ti}$  的实验能谱中,  $K = 5/2$  和  $7/2$  两个带中  $I^\pi = 5/2^-$  和  $7/2^-$ 、 $9/2^-$  和  $11/2^-$  以及  $(13/2)^-$  和  $15/2^-$  都分别靠得比较近, 而在计算能谱中却是  $7/2^-$  和  $9/2^-$ ,  $11/2^-$  和  $13/2^-$  靠得较近;  $^{47}\text{V}$  的实验能谱中,  $5/2^-$  和  $7/2^-$ ,  $9/2^-$  和  $11/2^-$ ,  $13/2^-$  和  $15/2^-$  近似简并, PDHF 能谱基本上反映了这一特点, 只是  $5/2^-$  态与  $7/2^-$  态顺序与实验不符, 其它态间隔也略有差异, 这都在预料之中, 因为计算中没有考虑多带混合等因素. 有人曾对  $^{47}\text{Ti}$  做过形变壳组态混合 (DCM)<sup>[2]</sup> 计算, 得到的 DCM 谱有了显著改善,  $5/2^-$  和  $7/2^-$ ,  $9/2^-$  和  $11/2^-$ ,  $13/2^-$  和  $15/2^-$  的确都靠得近了些, 但与实验能谱仍有差别. 也许可以利用推转壳模型中的 Signature 分裂来解释这种现象. 总之, 过渡奇  $A$  核结构是相当复杂的, 有待于更加深入地从理论和实验两方面去进行研究.

## 参 考 文 献

- [1] 廖继志, 高能物理与核物理, 11(1987)682; 13(1989)357, 837.
- [2] 郑仁蓉、廖继志, 原子核对称性投影自治场方法, 四川大学出版社, 1993 年, 51 页; 90 页.
- [3] J. A. Cameron et al., Phys. Rev., C49(1994)1347; T. W. Burrows, Nucl. Data Sheets, 48(1986)1.
- [4] M. M. King, Nucl. Data Sheets, 60(1990)337.
- [5] M. R. Bhat, Nucl. Data Sheets, 61(1990)461.
- [6] A. A. Pakou et al., Phys. Rev., C48(1993)1573.
- [7] 廖继志, 近代原子核模型, 四川大学出版社, 1990 年, 199 页; 201 页.
- [8] S. Raman et al., Atomic Data and Nucl. Data Tables, 36(1987)1.

## Study on the Energy Spectra of *fp* Odd *A* Nuclei $^{47}\text{Ti}$ , $^{47}\text{V}$ , $^{47}\text{Cr}$ , $^{49}\text{Cr}$ With PDHF Method

Han Yong Liao Jizhi

(Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610064)

Received 19 April 1996

### Abstract

The approximate angular momentum projected Hartree-Fock(PDHF) method is used to some odd-*A* nuclei in the *fp* shell:  $^{47}\text{Ti}$ ,  $^{47}\text{V}$ ,  $^{47}\text{Cr}$ ,  $^{49}\text{Cr}$ . Their energy spectra are calculated and compared with the experimental data. The results are fairly satisfactory. In addition, the characteristics of those spectra are analyzed with the particle-rotor model. It is found that those spectra possess the properties of the no alignment limit spectra.

**Key words** deformed HF states, Gauss approximation of the projected integral, Coriolis interaction, no alignment limit.