第22卷 第10期　　高能物理与核物理　　Vol.22, No.10
1998 年10月　　HIGH ENERGY PHYSICS AND NUCLEAR PHYSICS　　Oct., 1998

只存在一个对称平面的原子核系统的描述*

罗文东[1]　　李训军[2,1]

1 (中南工业大学物理系　长沙　410083)

2 (湖南大学物理系　长沙　410082)

摘要　讨论了一般情况下原子核形状的描述以及具有不同形状的原子核系统的对称性质和相应的数值算法.

关键词　核形状　点群　平均场哈密顿矩阵　对称平面

在基于平均场概念的原子核结构研究中,人们通常引入动力学坐标.这是对复杂多体问题的一种相当有效的处理方法,特别适合于对原子核集体运动的研究.一种常见的选取集体坐标参量的方法是基于其几何形状.在这种情况下,原子核的表面 Σ 可以通过所谓的球谐函数展开来加以描述[1]:

$$\Sigma: R(\theta,\ \varphi) = R_0\left[1 + \sum_{\lambda}\sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \alpha_{\lambda\mu} Y^{*}_{\lambda\mu}(\theta,\ \varphi)\right], \tag{1}$$

其中 R_0是核平均半径,$R(\theta,\ \varphi)$标志从原点沿$(\theta,\ \varphi)$方向到核表面Σ的距离,$Y_{\lambda\mu}$为球谐函数,$\{\alpha_{\lambda\mu}\}$就是描述原子核形状的一组参量.在该方程中,对于一个给定的λ存在$(2\lambda+1)$个参数,即$\alpha_{\lambda\mu}(\mu=-\lambda,\ -\lambda+1,\ \cdots,\ \lambda)$.一般情况下,这$(2\lambda+1)$个参数为复数.由于球谐函数间存在如下的位相关系

$$Y^{*}_{\lambda\mu}(\theta,\varphi) = (-1)^{\mu}\, Y_{\lambda-\mu}(\theta,\ \varphi),$$

相应地对形变参量$\alpha_{\lambda\mu}$施加了如下的一个限制条件:

$$\alpha_{\lambda\mu} = (-1)^{\mu}\alpha^{*}_{\lambda-\mu}\ . \tag{2}$$

容易证明,如果存在着对称平面,$\alpha_{\lambda\mu}$会进一步受到限制.具体约束条件如下:

(1) 若 $yz(x=0)$平面是一对称平面,则有

$$\mathrm{Re}(\alpha_{\lambda\mu}) = 0,\ (\mu\text{为奇数时});\ \ \mathrm{Im}(\alpha_{\lambda\mu}) = 0,\ (\mu\text{为偶数时}) \tag{3}$$

1997-09-08收稿,1998-02-06收修改稿

* 国家自然科学基金(19705015)和中南工业大学科学研究基金(9709GZ19)资助

其中 $\mathrm{Re}(\alpha_{\lambda\mu})$、$\mathrm{Im}(\alpha_{\lambda\mu})$分别代表$\alpha_{\lambda\mu}$的实部和虚部.

(2) 若 $xz(y=0)$平面是一对称平面,则有

$$\mathrm{Im}(\alpha_{\lambda\mu}) = 0\ ; \tag{4}$$

(3) 若 $xy(z=0)$平面是一对称平面,则有

$$\alpha_{\lambda\mu} = 0\ (\lambda-\mu\text{为奇数时}).$$

综上所述,可以得出如下结论:

(1) 不存在任何对称平面的形状一般需要$(2\lambda+1)$个实参数$\alpha_{\lambda\mu}$满足方程(2);

(2) 存在一个对称平面的形状需要$(\lambda+1)$个独立的形状参数;

(3) 具有两个相互正交对称平面的几何形状需要$\frac{1}{2}(\lambda+1)$(λ为奇数时)或$\frac{1}{2}\lambda+1$(λ为偶数时)个参数.以 $x=0,y=0$ 平面为例,由方程(4)可知一般需要$\lambda+1$个独立实参数;另外由方程(3),独立参量的数目便分别减少为$\frac{1}{2}(\lambda+1)$(λ为奇数时)和$\frac{1}{2}\lambda+1$(λ为偶数时);

(4) 具有三个互相正交对称平面的系统,在λ为奇数时给出一个附加约束:$\alpha_{\lambda\mu}=0$(λ为奇数时).实际上,这是空间反演对称性的一个当然结论.

原子核作为一个具有强相互作用的系统,人们一般认为用很少的几个参数便足以描述其中的集体运动.事实上到目前为止,人们的研究主要还局限于两种情形:即具有轴对称形状的原子核和具有三个互相正交对称平面(即四极形变)的原子核.随着实验手段的改进,人们开始对原子核的各种奇异形状进行研究.这些奇异形状可能会在高角动量极端拉伸状态下表现出来,如不久前发现的超形变核的Staggering效应及其与原子核中四度转动对称轴的可能联系[2]就引起了人们极大的兴趣.在这些情况下,有必要引入更高阶的形变参量.

假设所研究的原子核系统至少具有一个对称平面.事实上,随着λ的增大,尽管彼此正交的对称平面不一定能找得到,但不难找出单独的一个对称平面.不失一般性,这个对称平面不妨取为 $xz(y=0)$平面.根据上述的讨论,这个系统的表面可以用最多$(\lambda+1)$个独立的实参数借助于球谐函数基得以完全描述.这时表面方程(1)可以表示为如下形式

$$R(\theta,\ \varphi) = R_0\left\{1+\sum_{\lambda}\left[\alpha_{\lambda\mu=0}(\theta)+\sum_{\mu=1}^{\lambda}\alpha_{\lambda\mu}(\mathrm{Y}_{\lambda\mu}(\theta,\ \varphi)+(-1)^{\mu}\mathrm{Y}_{\lambda-\mu}(\theta,\ \varphi))\right]\right\}, \tag{5}$$

其中所有的$\alpha_{\lambda\mu}$为实数.不同$\alpha_{\lambda\mu}$描述的原子核具有不同的形状,不同的形状具有不同的几何对称性质.根据对称性质的不同,一定的原子核形状可以与某一确定的点群相联系,如以分量α_{32}来描述的核形状具有相同高的几何对称性,存在24个对称元素:包括3个绕主轴的二度转动,6个绕主轴的四重转动反射操作,6个反射对称平面和8个三重转动.与平庸的全同变换操作一起,所有的24个对称操作构成了四面体群 T_{d}.表1列出了一些多极形变组合所对应的对称点群.

表1　相应不同原子核形状的对称点群

形变	点群	形变	点群
α_{20}	$\mathscr{D}_{\infty h}$	α_{40}; α_{20}与α_{40}	$\mathscr{D}_{\infty h}$
α_{20}与α_{22}	$\mathscr{D}_{2h}$	α_{41}; α_{20}与α_{41}	$\mathscr{C}_{2h}$
α_{30}; α_{20}与α_{30}	$\mathscr{C}_{\infty v}$	α_{42}; α_{20}与α_{42}	$\mathscr{D}_{2h}$
α_{31}; α_{20}与α_{31}	$\mathscr{C}_{2v}$	α_{43}; α_{20}与α_{43}	$\mathscr{C}_{3h}$
α_{32}	$\mathscr{T}_{d}$	α_{44}; α_{20}与α_{44}	$\mathscr{D}_{4h}$
α_{20}与α_{32}	$\mathscr{D}_{2d}$	α_{54}; α_{20}与α_{54}	$\mathscr{C}_{4v}$
α_{33}; α_{20}与α_{33}	$\mathscr{D}_{3h}$		

由于核力的短程性质，原子核形状确定了核内的平均场及其哈密顿量．一般地，原子核系统的哈密顿量可以表示为：

$$\hat{H} = \hat{t} + \hat{V} + \hat{V}_{\mathrm{so}} + \frac{1}{2}(1 + \hat{\tau}_3)\hat{V}_{\mathrm{Coul}}\ , \tag{6}$$

其中 $\hat{t}$ 表示核子动能，$\hat{\tau}_3$为同位旋算符的第三分量．$\hat{V}$为核平均场，$\hat{V}_{\mathrm{so}}$为自旋轨道相互作用．$\hat{V}_{\mathrm{Coul}}$为质子的库仑能．

原子核结构计算中的一个基本问题是求解上述方程的本征值．如果已知原子核的形变参数即平均场 $\hat{V}$，当然可以在其哈密顿量 $\hat{H}$相应点群的不可约表示空间中分别求解本征值．但原子核的形变往往正是我们所要获取的信息．在这种情况下，人们通常先假设原子核具有某一类对称性，如轴对称形状或具有三个互相正交对称平面．对于前者可以方便地在柱坐标系中选取基函数[3]，并根据总角动量在对称轴上投影的不同分别对角化；对于后者也可以按 Signature 和宇称分成四个小矩阵分别对角化．

在最一般的情况，可以假设原子核只存在一个对称平面．一般而言，这时宇称不再是一个守恒量．但不难证明，时间反演算符$\hat{T} = -i\hat{\sigma}_2\hat{K}$($\hat{\sigma}_2$为 Pauli 矩阵$\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$，$\hat{K}$为复共轭算符)与方程(6)对易．假设$\psi_n$是一个波函数，可以定义其时间反演态$\overline{\psi}_n \equiv \hat{T}\psi_n$．容易证明：

$$\langle \overline{\psi}_{n'} | \hat{H} | \overline{\psi}_n \rangle = +\langle \psi_{n'} | \hat{H} | \psi_n \rangle^* \ ,$$

$$\langle \overline{\psi}_{n'} | \hat{H} | \psi_n \rangle = -\langle \psi_{n'} | \hat{H} | \overline{\psi}_n \rangle^* .$$

在笛卡尔坐标系中引入三维谐振子基：

$$\psi_n \rightarrow | a \rangle \equiv | n_x n_y n_z;\ s_z \rangle = | n_x n_y n_z \rangle | s_z \rangle = | n_x \rangle | n_y \rangle n_z \rangle | s_z \rangle\ ,$$

其中$| n_i \rangle (i = x,\ y,\ z)$为厄密多项式，$s_z$表示核子自旋在 z 轴上的投影．相应的时间反演态为：

$$|\bar{a}\rangle \equiv \hat{T}|a\rangle = (-1)^{s+s_z}|n_x n_y n_z;\ -s_z\rangle\ .$$

如果将基矢量按如下顺序排列：

$$\{|a\rangle,\ |\bar{a}\rangle\} = \{|a_1\rangle,\ |a_2\rangle,\ \cdots,\ |a_N\rangle,\ |\bar{a}_1\rangle,\ |\bar{a}_2\rangle,\ \cdots,\ |\bar{a}_N\rangle\},$$

在这套基矢上得到的哈密顿矩阵元可以表示成如下形式：

$$H = \begin{bmatrix} \mathscr{H} & \bar{\mathscr{H}} \\ -\bar{\mathscr{H}}^* & \mathscr{H}^* \end{bmatrix}, \tag{7}$$

其中 $\mathscr{H} \equiv \langle a|\hat{H}|a'\rangle$，$\bar{\mathscr{H}} \equiv \langle a|\hat{H}|\bar{a}'\rangle$，且 $\mathscr{H}^+ = \mathscr{H}$，$\bar{\mathscr{H}}^+ = -\bar{\mathscr{H}}^*$．矩阵 H 一般有 $2N \times 2N = 4N^2$ 个复数元素．由于 H 的厄密性和时间反演不变性，其中有 N^2 个独立的复数矩阵元．

如果几何形状相对于 $xz(y=0)$ 平面具有对称性，那么可以利用平面反射算符

$$\hat{\sigma}_y \equiv \hat{R}_y(\pi)\hat{P} \equiv \mathrm{e}^{-i\pi\hat{j}_y}\hat{P}$$

的对称性质，将矩阵 H 进一步简化．上式中 $\hat{R}_y(\pi)$ 为绕 y 轴旋转 π 角的转动算符，$\hat{P}$ 为宇称算符．

在基矢 $|a\rangle$ 中引入一个相位 i^{n_y}，可以得一套新的基矢 $\{|b\rangle,\ |\bar{b}\rangle\}$：

$$|b\rangle \equiv i^{n_y}|n_x n_y n_z;\ s_z\rangle\ ,$$

$$|\bar{b}\rangle \equiv \hat{T}|b\rangle = i^{-n_y}(-1)^{s+s_z}|n_x n_y n_z;\ -s_z\rangle.$$

并且 $$\hat{\sigma}_y|b\rangle = -|\bar{b}\rangle,\ \hat{\sigma}_y|\bar{b}\rangle = |b\rangle.$$

利用算符 $\hat{\sigma}_y$ 与 $\hat{H}$ 的对易性，不难证明：

$$\langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle = \langle b'|\hat{H}|\bar{b}\rangle^*\ ,\quad \langle b'|\hat{H}|b\rangle = \langle b'|\hat{H}|b\rangle^*\ ,$$

即满足 $[\hat{H},\ \hat{\sigma}_y] = 0$ 的哈密顿量 $\hat{H}$ 的矩阵元在合适的基矢下都为实数．

更方便地，可以通过幺正变换定义平面反射算符 $\hat{\sigma}_y$ 的本征函数：

$$|t_+\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|b\rangle + \mathrm{i}|\bar{b}\rangle),\ |t_-\rangle \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{i}|b\rangle + |\bar{b}\rangle);$$

相应的本征值分别为 $+\mathrm{i}$ 和 $-\mathrm{i}$，即

$$\hat{\sigma}_y|t_+\rangle = +\mathrm{i}|t_+\rangle,\ \hat{\sigma}_y|t_-\rangle = -\mathrm{i}|t_-\rangle.$$

在新基矢 $\{|t_+\rangle,\ |t_-\rangle\}$ 下，矩阵 H 可以约化为准对角形式：

$$H = \begin{bmatrix} \mathscr{H} & 0 \\ 0 & \mathscr{H}^* \end{bmatrix}. \tag{8}$$

当然这时的矩阵元一般都为复数．表达式(8)的结构清晰地显示了哈密顿量中所谓的Kramers简并性．

这样我们就有两种选择：其一是一个 $2N\times 2N$ 的实矩阵的对角化问题；其二为一对 $N\times N$ 复矩阵的对角化问题．由于这时的两个复矩阵互为复数共轭，实际上我们只需对角化其中一个便可．由于一个典型的对角化过程中乘法运算数目与 n^3 成正比(n 为矩阵的维数)，而一次复数乘法等价于四次实数乘法，因此选择对角化一个 $N\times N$ 复矩阵比对角化一个等阶的 $2N\times 2N$ 实矩阵可以节省一半计算时间．

总之，本文研究了利用球谐函数展开对原子核形状的描述，特别是由于互相正交对称平面的存在对集体参量数目所施加的限制以及在一般情况下(即只存在一个对称平面)原子核形状的描述．这时的原子核具有丰富的几何对称性质，研究这些奇异形状的性质将是今后核结构物理中的重要课题．相应的哈密顿量在一套基矢上(N个)展开后为 $2N\times 2N$ 的复矩阵．利用时间反演对称性和相对某一平面的反射对称性质，该 $2N\times 2N$ 复矩阵可约化为一对 $N\times N$ 复矩阵或一个 $2N\times 2N$ 实矩阵，从而大大减少了运算工作量．在研究奇异形变时，形变 $\alpha_{\lambda\mu}$ 或角动量的增大对较大的基矢(N)提出了要求．并且 λ 本身的增大也意味着 N 的增大．而运算量随 N 的增加迅速增大，因此这时对角化工作量的减少意义尤为重要．

参　考　文　献

[1] Cwiok S, Dudek J, Nazarewicz W et al. Comp. Phys. Comm., 1987, **46**:379—399

[2] Hamamoto I, Mottelson B. Phys. Lett., 1994, **B333**:294—298

[3] Damgaard J, Pauli H C, Pashevich V V et al., Nucl. Phys., 1969, **A135**:432—444

Descriptions for Nuclear System with Only One Geometrical Symmetry Plane*

Luo Wendong[1]　　Li Xunjun[2]

1(*Department of Physics, Central South University of Technology, Changsha* 410083)

2(*Department of Physics, Hunan University, Changsha* 410082)

Abstract The descriptions for nuclear shapes in a general case are discussed, and the symmetry properties for nuclear systems of different shapes are presented. The corresponding numerical algorithms are constructed.

Key words nuclear shape, point group, mean field Hamiltonian matrix, symmetrical plane

Received 8 September 1997 Revised 6 February 1998

* Supported by the National Natural Science Foundation of China (19705015) and Science Research Foundation of Central South University of Technology 9709GZ19