

# 具有多极变形的尼尔逊势阱中的 单粒子能级和波函数的研究

馮仁發 吳錫真 楊倩君

建立一套具有多极变形的尼尔逊位阱中的单粒子能级和波函数, 以及探讨能级和波函数随原子核的各极变化的变化规律, 对于研究重核裂变和变形核的其他结构现象是很必要的。我们在改进的尼尔逊模型的基础上又考虑了  $P_3$  和  $P_6$  变形并导出了相应矩阵元的计算公式。由于包括了五个独立的形变参数 ( $\epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \epsilon_5, \epsilon_6$ ), 特别是包括了反射不对称变形 ( $P_3, P_6$  变形), 使这套能级和波函数对研究位能曲面、裂变动力学和计算鞍点上能级密度更为合适。

## 一、引言

很早以前, 人们就用变形壳模型来计算稀土核和锆系核的四极矩, 得到与实验符合的结果。后来随着实验上对裂变间质异能态的发现和计算原子核位能表面的宏观微观方法得到了广泛的发展<sup>[1]</sup>, 这个方法的主要内容包括两个部分。一是宏观液滴能的计算, 一是微观壳修正(以及对修正)的计算。后者就是建立在变形核壳模型的基础上的。近来, 广泛开展了带电粒子诱发核裂变的研究, 为了正确分析实验结果, 按照裂变的统计模型理论, 必须进行大变形核的双峰位垒曲线的理论计算以及鞍点上真实能级密度的计算。显然原有的尼尔逊<sup>[2]</sup>单粒子模型是不够用了。1969年 S·G·Nilsson<sup>[3]</sup>提出了改进的尼尔逊模型, 即在原来的  $P_2$  变形基础上又加上  $P_4$  和  $P_6$  变形。他们使用改进的模型计算了一系列核的基态质量、双峰位垒及其他性质, 得到很好的结果。但是不考虑反射不对称变形, 对研究裂变是一个很大的缺陷。因为裂变核的第二个位垒对反射不对称变形是不稳定的, 即包括了反射不对称变形可以使第二个位垒大约降低 2.5 MeV<sup>[4,5]</sup> 并且使第二鞍点上的能级密度也发生很大的改变。因此不对称自由度的引入是尼尔逊模型的一个很大的改进。

本文计算包括了  $P_2, P_3, P_4, P_5, P_6$  变形(即除了拉长变形还包括颈部变形、反射不对称变形, 这样能用来描述大变形形状。我们选取球形谐振子波函数作基, 推导了包括计算  $\rho^2 P_3, \rho^2 P_6$  等矩阵元的一般公式, 并计算了单粒子能级和波函数随  $\epsilon_2, \epsilon_4, \epsilon_3$  变形的变化关系。

## 二、位的选择和哈密尔顿量

我们首先回顾一下核在椭球变形下, 单个核子取椭球形谐振子位:

$$V = \frac{1}{2} [\omega_1^2 (x^2 + y^2) + \omega_2^2 z^2]. \quad (1)$$

当采用单一的形变参数  $\epsilon_2$  时,

$$\begin{aligned}\omega_1 &= \omega_0(\varepsilon_2) \left(1 + \frac{1}{3}\varepsilon_2\right), \\ \omega_2 &= \omega_0(\varepsilon_2) \left(1 - \frac{2}{3}\varepsilon_2\right).\end{aligned}\tag{2}$$

引入“压缩座标” $\xi, \eta, \zeta$ ，“压缩座标”与原座标的关系为

$$\begin{aligned}\xi &= x\sqrt{M\omega_z/\hbar}, \\ \eta &= y\sqrt{M\omega_y/\hbar}, \\ \zeta &= z\sqrt{M\omega_x/\hbar},\end{aligned}\tag{3}$$

此时公式(1)变为:

$$V = \frac{1}{2}\hbar\omega_0(\varepsilon_2)\rho^2 \left[1 - \frac{2}{3}\varepsilon_2 P_2(\cos\theta_1)\right].\tag{4}$$

这里,  $\rho^2 = \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2$ ;  $\cos\theta_1 = \frac{\xi}{\rho}$ ;

$P_n(\cos\theta_1)$  为  $n$  次勒让德多项式。

(4) 式为椭球变形 (即  $P_2$  变形) 时的形式, 若考虑其他变形 (包括反射不对称变形) 时, 我们可以写出位势形式为:

$$\begin{aligned}V &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0(\varepsilon_i)\rho^2 \left[1 - \frac{2}{3}\varepsilon_2 P_2(\cos\theta_1) + 2\varepsilon_1 P_1(\cos\theta_1) + 2\varepsilon_3 P_3(\cos\theta_1) + \right. \\ &\quad \left. + 2\varepsilon_4 P_4(\cos\theta_1) + 2\varepsilon_5 P_5(\cos\theta_1) + 2\varepsilon_6 P_6(\cos\theta_1)\right].\end{aligned}\tag{5}$$

其中  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$  为变形参数。当核无变形时 (即球形核时),  $\omega_0(\varepsilon_i) = \omega_0$ 。

在“压缩座标”下单粒子哈密顿量  $H$  表示为

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + H_5 + H_6 + H_{\text{corr}}.\tag{6}$$

其中各项分别为:

$$\begin{aligned}H_0 &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0(\varepsilon_i)[- \Delta + \rho^2], \\ H_2 &= \frac{1}{3}\hbar\omega_0(\varepsilon_i)\varepsilon_2 \left[ P_2\left(\frac{\partial}{\partial\xi}, \frac{\partial}{\partial\eta}, \frac{\partial}{\partial\zeta}\right) - \rho^2 P_2(\cos\theta_1) \right], \\ H_n &= \hbar\omega_0(\varepsilon_i)\varepsilon_n \rho^2 P_n(\cos\theta_1), \quad n=1, 3, 4, 5, 6. \\ H_{\text{corr}} &= -2K\hbar\omega_0(\vec{l}\cdot\vec{s} - \mu(\rho^4 - \langle\rho^4\rangle_N)).\end{aligned}$$

在液滴模型中, 认为核表面等位面的形状与核表面的形状相一致的, 并认为核在形变时, 体积是守恒的。由此可求出  $\omega_0(\varepsilon_i)/\omega_0$  这个比值为:

令  $x = \cos\theta_1$ ,

$$\begin{aligned}\frac{\omega_0(\varepsilon_i)}{\omega_0} &= \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{3}\varepsilon_2\right)\left(1 - \frac{2}{3}\varepsilon_2\right)^{1/2}} \int_{-1}^1 \frac{1}{2} dx \left[1 - \frac{2}{3}\varepsilon_2 P_2(x) + 2\varepsilon_1 P_1(x) + \right. \\ &\quad \left. + 2\varepsilon_3 P_3(x) + 2\varepsilon_4 P_4(x) + 2\varepsilon_5 P_5(x) + 2\varepsilon_6 P_6(x)\right]^{-3/2}.\end{aligned}\tag{7}$$

由核在形变过程中保持质心不动的条件, 可以得出形变参数  $\varepsilon_1$  所满足的方程:

$$\int_{-1}^1 \left[1 - \frac{2}{3}\varepsilon_2 P_2(x) + 2\varepsilon_1 P_1(x) + 2\varepsilon_3 P_3(x) + 2\varepsilon_4 P_4(x) + \right.$$

$$+ 2 \varepsilon_5 P_5(x) + 2 \varepsilon_6 P_6(x) \Big]^{-2} x dx = 0. \quad (8)$$

求解这个超越方程, 在独立参数  $\varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$  给定时可求出  $\varepsilon_1$  的值。

### 三、表象的选择

我们选取一组力学量的完全集合  $\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$ ; 其相应的量子数为  $N, L, A, \Sigma$ 。在这个表象中,  $H_0$  的本征方程为:

$$H_0 \varphi = E \varphi.$$

其本征函数  $\varphi$  和本征值  $E$  分别为:

$$\varphi \equiv |NLA\Sigma\rangle = (-1)^n \frac{2 \Gamma(n+l+3/2)}{n!} \Big]^{1/2} \cdot \frac{1}{\Gamma(l+3/2)} \cdot \rho^l \cdot e^{-1/2\rho^2} \cdot F(-n, l+3/2, \rho^2) \cdot Y_{lA} \cdot \chi_{s\Sigma}. \quad (9)$$

$$E \equiv \langle N'L'A'\Sigma' | H_0 | NLA\Sigma \rangle = \hbar c_0^2 \left( N + \frac{3}{2} \right) \delta_{N'N} \delta_{l'l} \delta_{A'A} \delta_{\Sigma'\Sigma}. \quad (10)$$

其中  $\Gamma(x)$  为伽玛函数;  $F(-n, l+3/2, \rho^2)$  为合流超几何函数。

球形谐振子波函数  $|NLA\Sigma\rangle$  作为我们的基函数, 在这组基函数下我们求变形核的单粒子本征能量及本征函数。

### 四、本征方程

在基  $|NLA\Sigma\rangle$  选定后, 我们求解系统的本征方程,

$$H \psi = E \psi. \quad (11)$$

单粒子波函数  $\psi$  可以按正交完全集  $|NLA\Sigma\rangle$  展开

$$\psi = \sum_{\alpha} a_{\alpha} |NLA\Sigma\rangle. \quad (12)$$

其中记号  $\alpha \equiv N, l, A, \Sigma$ 。

求解本征方程(11)实际上就是求解下列一个线性齐次代数方程组:

$$\sum_{\alpha} (H_{\alpha'\alpha} - E \delta_{\alpha'\alpha}) a_{\alpha} = 0. \quad (13)$$

$\alpha'$  取所有  $\alpha$  (即  $NLA\Sigma$ ) 所有可能取的值。

其中

$$H_{\alpha'\alpha} = \langle \alpha' | H | \alpha \rangle.$$

解这个线性方程组需要处理一个大矩阵, 给计算带来不少的困难。但是因为总哈密顿算符  $\hat{H}$  与总自旋角动量算符  $\hat{j}$  的  $z$  分量  $j_z$  是对易的, 所以  $j_z$  的量子数  $\Omega$  是好量子数。我们可以按  $\Omega$  分类; 上述大矩阵是一个分块的对角矩阵, 我们只要在不同的  $\Omega$  值下 ( $\pm \Omega$  是兼并的), 去解线性方程组 (13) 就可以了。

$$\Omega \text{ 可取值 } \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, \frac{2N_{\max}+1}{2},$$

而  $N_{\max}$  是我们需要计算的最大的大壳  $N$  的数值, 可由计算者选择。

对应于每一个  $\Omega$ , 相应的子矩阵的阶数:

为  $(2(N_{\max} - \Omega) + 5) \times (2(N_{\max} - \Omega) + 3) / 8$ .

例如  $N_{\max}$  取 11 个大壳, 对  $\Omega = \frac{1}{2}$  的子矩阵阶数为 78 阶, 这个 78 行 78 列的矩阵是在解 11 个大壳的问题中阶数最大的一个矩阵了. 这样在现有计算机的条件下可实现计算. 矩阵的行指标  $\alpha' = (N', l', A', \Sigma')$  和列指标  $\alpha = (N, l, A, \Sigma)$  的取值是一一对应的. 为了使取值有序和不遗漏、不重复. 我们规定如下取值规则:

- ①  $N = \Omega - \frac{1}{2}, \Omega + \frac{1}{2}, \Omega + \frac{3}{2}, \dots, N_{\max}$  取遍,  $N$  为大于零的整数.
- ② 对每一个  $N, l = N - 2n$ ; 其中  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , 但  $l$  需满足条件  $l \geq 0$ .
- ③ 对每一个  $l, A$  取  $A = \Omega \pm \frac{1}{2}$ , 但需满足条件  $0 \leq A \leq l$ .
- ④ 当  $A = \Omega - \frac{1}{2}$  时, 取  $\Sigma = \frac{1}{2}$ ; 当  $A = \Omega + \frac{1}{2}$  时, 取  $\Sigma = -\frac{1}{2}$ ;  $(N', l', A', \Sigma')$  取法同  $(N, l, A, \Sigma)$ .

令线性齐次方程组(13)的系数行列式等于零, 可解出一组本征值  $E$ ; 对应于每个本征值  $E$  可解出一组本征矢的系数  $a_\alpha$ .

归一化条件为 
$$\sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 = 1. \tag{14}$$

### 五、矩阵元的计算

要解线性方程组(13), 重要的一步是计算矩阵元  $H_{\alpha' \alpha}$ . 基本矩阵元表示式如下:

$$\langle \alpha' | H_0 | \alpha \rangle = \hbar \omega_0 \left( N + \frac{3}{2} \right) \delta_{N'N} \delta_{l'l} \delta_{A'A} \delta_{\Sigma'\Sigma}. \tag{15}$$

$$\langle \alpha' | H_2 | \alpha \rangle = -\frac{2}{3} \hbar \omega_0 \varepsilon_2 \langle N' l' A' \Sigma' | \rho^2 P_2 | N l A \Sigma \rangle \delta_{N'N} \delta_{l'l} \delta_{A'A} \delta_{\Sigma'\Sigma}. \tag{16}$$

$$\langle \alpha' | H_m | \alpha \rangle = \hbar \omega_0 \varepsilon_m \langle N' l' A' \Sigma' | \rho^2 P_m | N l A \Sigma \rangle \delta_{A'A} \delta_{\Sigma'\Sigma}. \tag{17}$$

其中矩阵元:

$$\langle N' l' A' \Sigma' | \rho^2 P_m | N l A \Sigma \rangle = \langle N' l' | \rho^2 | N l \rangle \langle l' A' | P_m | l A \rangle,$$

$$\langle l' A' | P_m | l A \rangle = \left[ \frac{2l+1}{2l'+1} \right]^{1/2} C(lm l'; l A 0) C(lm l'; 000),$$

$C(lm l'; l A 0), C(lm l'; 000)$  是角动量耦合系数.

$$\begin{aligned} & \left\langle N', l', A \pm 1, \mp \frac{1}{2} \mid \vec{l} \cdot \vec{S} \mid N, l, A, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} [(l \mp A)(l \pm A + 1)]^{1/2} \cdot \delta_{N'N} \delta_{l'l}, \\ & \left\langle N' l', A, \pm \frac{1}{2} \mid \vec{l} \cdot \vec{S} \mid N, l, A, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \frac{1}{2} A \delta_{N'N} \delta_{l'l}. \end{aligned}$$

其他情况的  $\vec{l} \cdot \vec{S}$  的矩阵元为 0.

$$\langle \alpha' | \rho^4 | \alpha \rangle = \langle N' l' | \rho^4 | N l \rangle \delta_{\alpha' \alpha},$$

$$\langle \alpha' | \langle \rho^4 \rangle_N | \alpha \rangle = \langle \rho^4 \rangle_N \delta_{\alpha' \alpha},$$

$$\langle \rho^4 \rangle_N = \frac{2}{(N+1)(N+2)} \sum_l (2l+1) \langle Nl | \rho^4 | Nl \rangle.$$

当  $N$  为偶数时,  $l$  取  $0, 2, 4, \dots, N$ ; 当  $N$  为奇数时,  $l$  取  $1, 3, 5, \dots, N$ .  
矩阵元  $\langle N'l' | \rho^2 | Nl \rangle$ ,  $\langle N'l' | \rho^4 | Nl \rangle$  均由普适公式  $\langle N'l' | \rho^\lambda | Nl \rangle$  计算.

$$\begin{aligned} \text{令} \quad n &= \frac{1}{2}(N-l), \quad n' = \frac{1}{2}(N'-l'), \\ P &= \frac{1}{2}(l+l'+\lambda+1), \\ \mu &= \frac{1}{2}(l'-l+\lambda), \quad \nu = \frac{1}{2}(l-l'+\lambda), \end{aligned}$$

则:

$$\begin{aligned} \langle N'l' | \rho^\lambda | Nl \rangle &= \left[ \frac{n'!n!}{\Gamma\left(n'+l'+\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(n+l+\frac{3}{2}\right)} \right]^{1/2} \\ &\cdot \sum_{K_{\text{初值}}}^{\min\left(\frac{n'}{n}\right)} \frac{\Gamma(P+K+1)}{K!} \binom{\mu}{n-K} \cdot \binom{\nu}{n'-K}. \end{aligned} \quad (18)$$

其中(1)  $\min\left(\frac{n'}{n}\right)$  表示从  $n', n$  中取小的一个数.

(2) 符号  $\binom{\mu}{n-K} = \mu(\mu-1)\cdots(\mu-n+K+1)/(n-K)!$ .

当  $\mu=0$  或  $n=K$  时,  $\binom{\mu}{n-K} = 1$ ,  $\binom{\nu}{n'-K}$  类同于  $\binom{\mu}{n-K}$ .

$$(3) K_{\text{初值}} = \begin{cases} 0 & \text{当 } \mu, \nu \text{ 为半整数时,} \\ \max\left(\frac{n-\mu}{n'-\nu}\right) & \text{当 } \mu, \nu \text{ 均为 } \geq 0 \text{ 的整数,} \\ n-\mu & \text{当 } \mu \geq 0, \nu < 0 \text{ 的整数} \\ n'-\nu & \text{当 } \nu \geq 0, \mu < 0 \text{ 的整数.} \end{cases}$$

## 六、结 果

利用上面公式, 选取适当的自旋轨道耦合常数, 计算了重核在大变形区域的单粒子能级。在图 1 中首先显示了在  $\varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = 0$  情况下, 中子单粒子能级随拉长变形的变化关系, 看到随变形的增加能级简并的消除, 以及在某些变形下形成壳结构的情况。在图 2 中, 给出了在  $\varepsilon_4 = -0.05$ , 而其他变形参数为 0 时, 部分中子能级随拉长变形的变化关系, 对  $\varepsilon_2$  变形我们计算到 0.75, 同样看到能级的剧烈交叉和大变形下有壳形成的现象。图 3 给出的是质子的单粒子能级。图 4 给出在  $\varepsilon_2 = 0.2$ , 其他变形参数为 0 时, 单中子能级随  $\varepsilon_4$  变形的变化关系, 从图中可以看出在某些  $\varepsilon_4$  变形下, 也会出现壳结构现象。图 5 是单中子能级随  $\varepsilon_3$  变形的变化关系。我们计算了质子和中子在各种变形下的单粒子能级和波函数, 以上给出了部分结果。我们还研究了参数对计算结果的影响, 选取了适合重核计算的位参数。

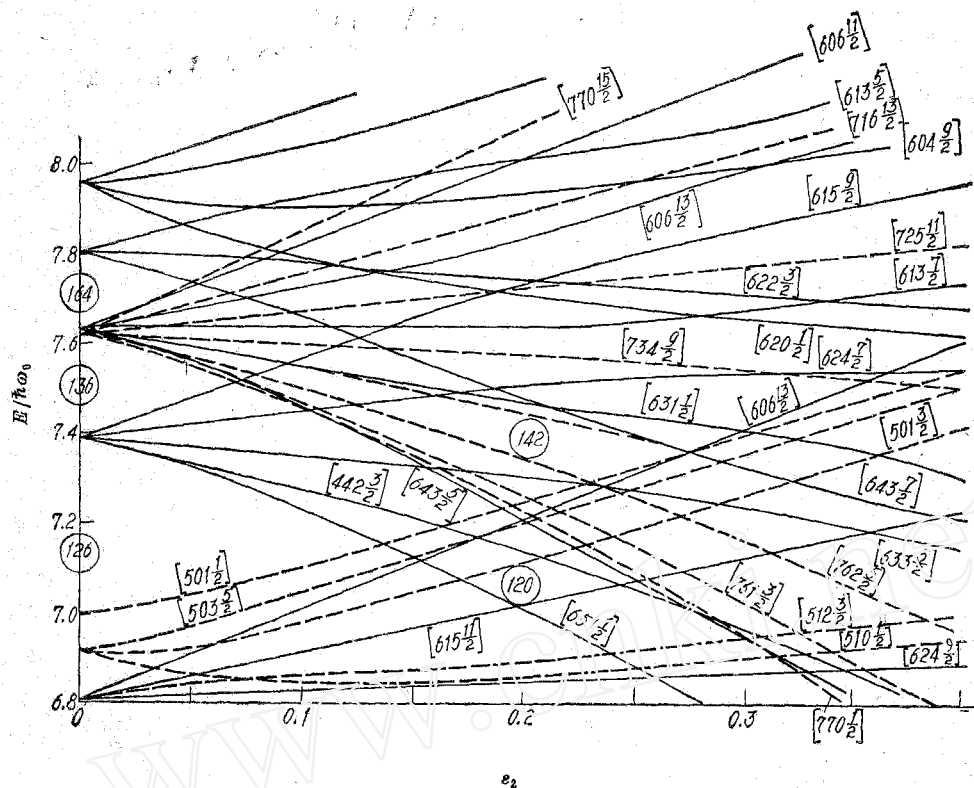


图 1 中子单粒子能级随拉长变形的变化关系  
 $K=0.0635; \mu=0.325; e_4=0.$

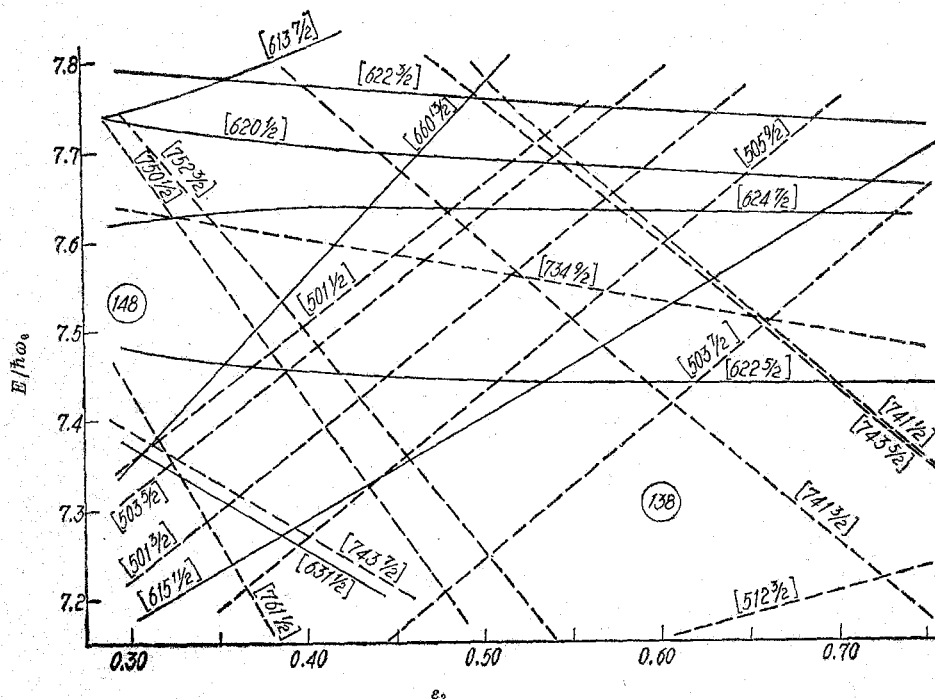


图 2 中子单粒子能级随拉长变形的变化关系  
 $K=0.0635; \mu=0.325; e_4=-0.05.$

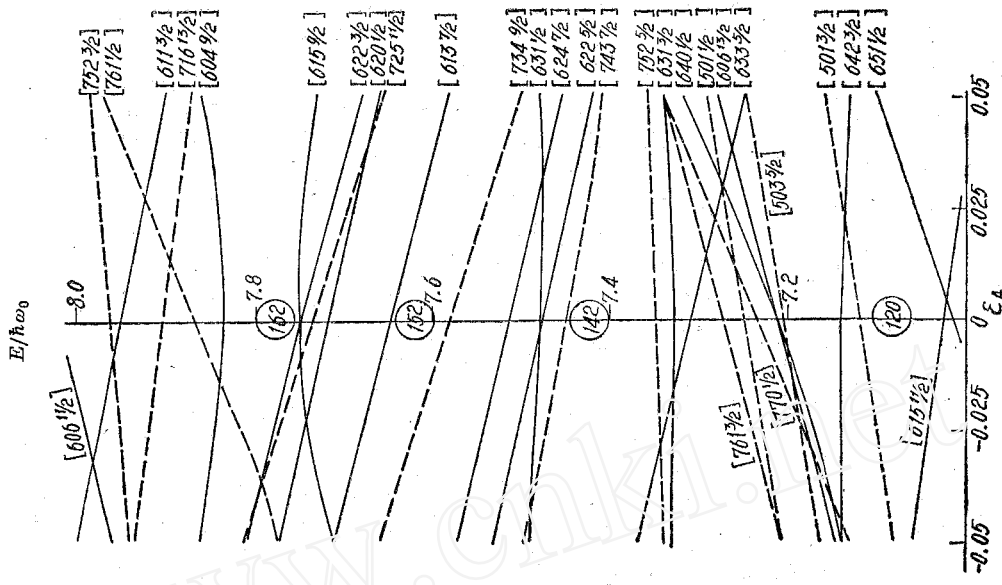


图 4 中子单粒子能级  
 $K=0.0635$ ;  $\mu=0.325$ ;  $\epsilon_4=0.2$ 。

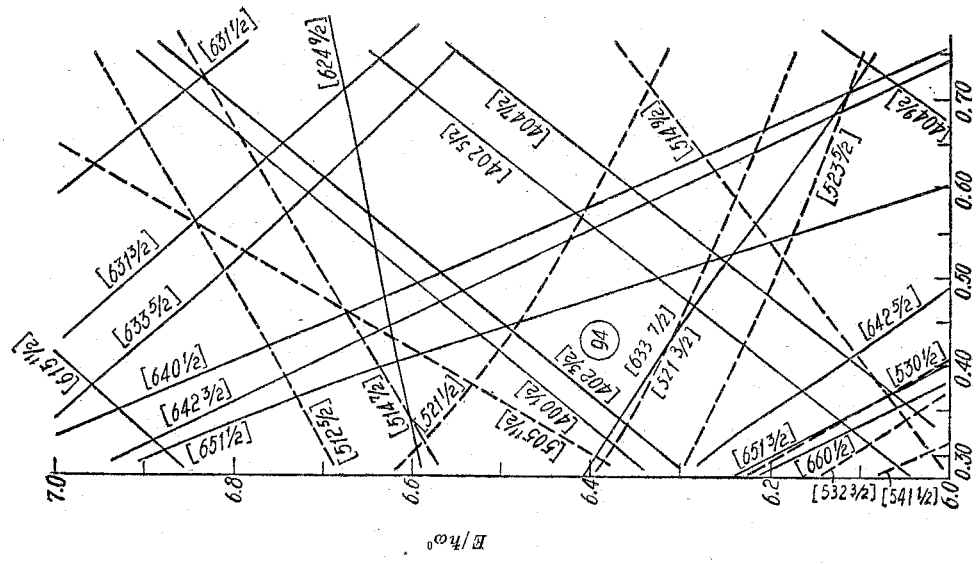


图 3 质子的单粒子能级  
 $K=0.0577$ ;  $\mu=0.325$ ;  $\epsilon_4=0.05$ 。

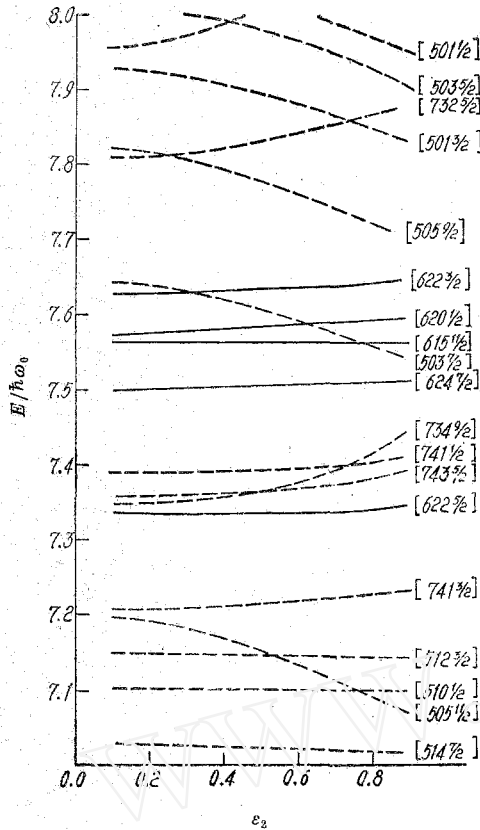


图 5 中子单粒子能级

$K=0.0635$ ;  $\mu=0.325$ ;  $\varepsilon_2=0.7$ ;  $\varepsilon_4=0.025$ .

### 参 考 文 献

- [1] V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys.*, **A 95**, 420 (1967).
- [2] S. G. Nilsson, *Kgl. Danske Videnkab. Selskab. Mat-Fys. Medd.*, No. 16, p. 29, 1955.
- [3] S. G. Nilsson, *Nucl. Phys.*, **A 131**, 1(1969).
- [4] H. C. Pauli, *Phys. Lett.*, **34 B**, 364 (1971).
- [5] P. Vogel, *Nucl. Phys.*, **A 112**, 583 (1968).

(上接第 750 页)

5. 测得的床高与真实床高的绝对偏差为 $\leq \pm 0.7$ 厘米。大量探测表明,  $H$ 在 5—70 厘米的范围内都可有这个偏差值存在。通常, 界面低于液体入口处(图 1 中 7)即  $H > 20$  厘米。为了比较, 由此算得相对偏差约为 $\pm 4\%$ , 比亨脱等<sup>[1]</sup>的结果( $\pm 5\%$ )稍好或相当。

本文部份资料由杨洪章同志提供, 特此致谢。

### 参 考 文 献

- [1] D. O. Hunter et al., HW-63632.
- [2] L. Bergmann 著, 曹大文等译, 超声, 国防工业出版社, 1963 年。
- [3] O. M. Бабилов 著, 查济璇等译, 超声波及其在工业上的应用, 北京科学出版社, 1962 年。
- [4] 第二设计院编, 耐高温、耐腐蚀、耐辐照材料筛选应用概况, 1968 年, 内部资料。
- [5] 上海树脂厂, 环氧树脂生产与应用, 燃化出版社, 1972 年。

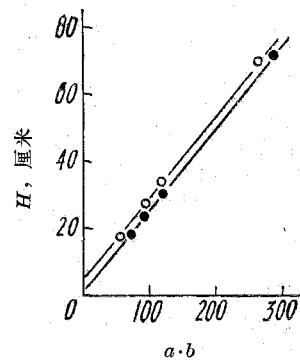


图 3 环氧树脂隔层的标准曲线  
蒸馏水温 22°C, 隔层厚度:  
○—4.5 厘米; ●—2.2 厘米。