申请上海交通大学博士学位论文

扩展的投影壳模型的发展与应用

论文作	者	吴新义
学	号	0120729016
指导教	师	孙扬 教授
专	业	物理学
答辩日	期	2018年3月

Typeset by LATEX 2ε at February 28, 2018 With package CASthesis v0.1 of CTEX.ORG A Dissertation Submitted to Shanghai Jiao Tong University for the Degree of Doctor

Development and Application of the extended Projected Shell Model

XIN-YI WU

Supervisor:

Prof. YANG SUN

School of Physics and Astronomy Shanghai Jiao Tong University Shanghai, P.R.China

march, 2018

上海交通大学

学位论文原创性声明

本人郑重声明:所呈交的学位论文,是本人在导师的指导下,独立进行研 究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外,本论文不包含任何其他 个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人 和集体,均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本 人承担。

学位论文作者签名: _____

日 期: ______年____月____日

上海交通大学

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定,同意学校 保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版,允许论文被查阅和 借阅。本人授权上海交通大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关 数据库进行检索,可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论 文。

保 密□,在_____年解密后适用本授权书。

本学位论文属于

不保密 □。

(请在以上方框内打"√")

学位	立论文作者等	签名: _			_	指导	异教师签名 :			
日	期:	年	_月	_日		日	期:	年	_月_	_日

扩展的投影壳模型的发展与应用

摘 要

近年来,随着放射性核束装置和γ-探测装置的发展,对极端环境中(如角动量极限等)原子核的反应性质和结构的探索已成为现今核天体物理和核结构的前沿课题。原子核的激发模式主要有两种形式:集体激发和单粒子激发。对于形变的原子核,单粒子激发的表现形式是准粒子激发,其中存在着一种寿命较长K值较大的准粒子激发态,称为高K同核异能态。这种高K同核异能态可被用于能源和武器方面的研究,因而成为核物理学中的热门课题之一。

投影壳模型从形变的Nilsson+BCS 单粒子基矢出发,通过角动量投影来修 复被形变平均场打破的转动对称性。然后在投影基矢中对角化原子核体系的哈 密顿量,并进行组态混合。最后可得到原子核的波函数、能谱和电磁跃迁几率 等信息。最近,我们进一步发展和改进了投影壳模型方法,并应用于原子核结 构的研究中。我们通过运用一种叫作pfaffian的算法提高了转动矩阵元的计算效 率,并将组态空间扩展到十准粒子态。这大范围地拓展了我们能够研究的物理 现象,如原子核在高自旋态的集体性减弱现象以及高自旋态的结构演化规律 等。研究结果显示,高阶准粒子态在其中扮演着十分重要的角色。

我们用扩展的投影壳模型研究了质量区域为A = 70 – 80 的缺中子Kr 同位 素的微观结构。我们尤其对这些核的高自旋态结构进行了着重分析。随着原子 核体系转速增加,固定长椭形状的壳模型基矢在高自旋态是一个有效的近似。 从一些我们计算的结果与实验观测数据的符合可以印证这一点。随着自旋的增 大,晕带和晕带附近的边带的结构演化被两准粒子、四准粒子、六准粒子和八 准粒子组态连续的带交叉描述。我们认为,包含六准粒子和八准粒子组态的基 矢对高自旋态的结构细节的描述是必需的。另外,我们还计算了电四极跃迁几 率并与实验值进行了对比。理论计算的*B*(*E*2) 与实验值定性上符合。

我们还系统性地分析了偶偶的¹⁷⁴⁻¹⁸⁶W 同位素高自旋态和高K 同核异能态的微观结构。利用多准粒子激发分析了晕带高自旋能级的结构。除了晕带,我们还研究了同核异能态和基于这个同核异能态之上的转动带,并预言了这些同核异能态的占据主要权重的多准粒子结构。我们对K 同核异能态的电磁属性(如*B*(*E*2), *B*(*M*1), *g* 因子)也进行了研究,并与实验数据进行了对比。目

前,大部分K 同核异能态的属性仍然没有实验数据。我们的结果只是预言。 关键词:投影壳模型,高K同核异能态,多准粒子,高自旋

Development and Application of the extended Projected Shell Model

ABSTRACT

Recently, with the development of radioactive-beam facilities and γ detecting devices, it has been a frontier for nuclear astrophysics and nuclear structure to study decays and structures of nuclei at extreme conditions, for instance, extremes of angular momentum etc. The nuclei excitation modes have two kinds: the collective excitation and the single particle excitation. The single particle excitation of deformed nuclei are quasiparticle excitations, and those with high K are called high K isomers due to their long lifetime. High K isomers have possible applications in energy sources and weapons, for which they have developed into one of the popular subject in nuclear physics.

The projected shell model (PSM) begin with a deformed Nilsson+BCS quasiparticle states, and then recovers the broken rotation symmetries by angular momentum projection and mixes different quasiparticle configurations by diagonalizing the nuclear system Hamiltonian, wave functions, energy spectra, electro magnetic transitions probability(etc.)of nuclear system could be obtained.recently, we developed the PSM and applied the developments on nuclear structure.by efficiently calculating the rotated matrix elements by the so called Pfaffian algorithm, the configuration of the PSM is expanded to include up to 10 quasiparticle states. This expanded the physics field that the model can study, such as loss of collectivity and the structural changes etc. of nuclei at high spins state. It is shown that the higher order quasiparticle states play very important roles in describing these phenomenons.

the structure of neutron-deficient Kr isotopes in A = 70 - 80 mass region have been investigated within extended PSM formalism with special interest on high-spin structure of these nuclei.the prolate deformation in the shell-model basis seems to be a well valid approximation for these high-spin regions. This is also supported by some observed cases and our results are consistent with those. The structural evolutions of the yrast and near-yrast side-bands as functions of spin are described by successive band-crossings among 2-qp, 4-qp, 6-qp and 8-qp states. We have shown that, the inclusion of 6-qp and 8-qp states in the basis are necessary for the detail description of very-high spin states. Moreover, the electric quadrupole transition probabilities have been calculated and compared with available experimental data. The observed variations in B(E2) are qualitatively described in the calculations.

we have systematically analyzed the structure of the high-spin regime as well as multi-qp high-K isomers of even-even $^{174-186}$ W isotopes. The structure of yrast high-spin levels is analyzed for multi-quasiparticle excitations. Apart from the yrast band, K-isomers and rotational bands based on those are described and their dominant multi-quasiparticle structures are predicted. The electromagnetic properties (e.g. B(E2), B(M1), g-factor) of the K-isomers are also studied and compared with available experimental data. For most of the K-isomers, the experimental properties are unknown and our results remain as predictions.

KEY WORDS: Projected Shell Model, High K-isomers, Multi-quasiparticle, High spin,

目 录

摘要		i
ABSTI	RACT	iii
目录		\mathbf{v}
插图索引	31	xii
表格索	31	xii
第一章	引言	1
1.1	原子核量子体系	1
1.2	核结构研究的热点问题和理论模型	1
1.3	本文选题和结构	5
第二章	投影壳模型的基本理论介绍	7
2.1	形变的准粒子基矢	7
2.2	角动量与粒子数投影	14
2.3	本征方程与Pfaffian算法	18
2.4	电磁跃迁	23
第三章	Kr同位素中高自旋转动带的研究	27
3.1	引言	27
3.2	沿着晕带的带图	28
3.3	晕带的转动惯量	31
3.4	计算的能级和组态结构以及边带转动惯量	32
	3.4.1 ⁷² Kr	32
	3.4.2 ⁷⁴ Kr	34
	3.4.3 ⁷⁶ Kr	37

	3.4.4 78 Kr	39
	$3.4.5 {}^{80}\mathrm{Kr}$	40
3.5	电磁跃迁B(E2) 的变化	42
3.6	本章小结	44
体而立	取同位本中名准约了及同校员化林市共的研究	45
弗四早	W 问位素中多准粒于 K 问核异能转动带的研究	45
4.1		45
4.2	沿着晕带的带图	46
4.3	晕带的转动惯量	49
4.4	计算的能级和组态结构	50
	4.4.1 174 W	50
	4.4.2 ^{176}W	52
	4.4.3 ¹⁷⁸ W	53
	4.4.4 ¹⁸⁰ W	54
	4.4.5 ^{182}W	56
	4.4.6 184 W	57
	4.4.7 186 W	58
4.5	晕带和K 同核异能带的电磁属性	59
	4.5.1 晕带的B(E2)和g因子	60
	4.5.2 K同核异能带的B(E2)和B(M1)以及g因子	61
4.6	本章小结	64
第五章	总结和展望	67
附录 A	Pfaffian算法介绍	69
A.1	Balian-Brezin分解	69
A.2	费米相干态和Grassmann积分	70
A.3	利用Grassmann积分表示矩阵元	72
A.4	Grassmann积分的计算	73
附录 B	d-函数的数值精度	77

参考文献	81
攻读学位期间发表的学术论文目录	93
致谢	95

录

目

表格索引

3.1	本章采用的形变基矢的四极和十六极形变参数	29
3.2	⁷² Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态	32
3.3	⁷⁴ Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态	34
3.4	⁷⁶ Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态	37
3.5	⁷⁸ Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态	39
3.6	⁸⁰ Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态	42
4.1	本章采用的形变基矢的四极和十六极形变参数	48
4.2	计算的准粒子真空态的中子和质子对隙参数(单位为MeV)	49
4.3	¹⁷⁴ W 晕带在不同自旋区间的主要组态,第一列的自旋表示对应	
	的组态近似在这个自旋值开始成为晕态的主要组态	50
4.4	¹⁷⁴ W 边带带头的主要组态	51
4.5	¹⁷⁶ W 边带带头的主要组态	53
4.6	¹⁷⁸ W 边带带头的主要组态	54
4.7	¹⁸⁰ W 边带带头的主要组态	55
4.8	¹⁸² W 边带带头的主要组态	57
4.9	¹⁸⁴ W 边带带头的主要组态	58
4.10	¹⁸⁶ W 边带带头的主要组态	58
4.11	计算的W同位素同核异能态的B(E2)和B(M1)值(单位为W.u.)	
	与实验数据的比较	64
4.12	K同核异能态转动带的带头能量(BHE)和g因子	65
B.1	公式(B.8)中ν _{min} 的取值	78

插图索引

1.1	核素图	2
1.2	壳模型组态空间示意图	4
2.1	原子核的球型单粒子能级图	8
3.1	理论计算的 ⁷² Kr, ⁷⁴ Kr, ⁷⁶ Kr, ⁷⁸ Kr, 和 ⁸⁰ Kr 正宇称晕带带图	28
3.2	计算的Kr同位素晕带转动惯量和实验数据的比较	31
3.3	计算的 ⁷² Kr转动带能谱和实验数据的比较	33
3.4	计算的 ⁷² Kr的3 ⁻ 带、4 ⁻ 带的转动惯量与实验数据的比较	33
3.5	计算的 ⁷⁴ Kr 转动带能谱和实验数据的比较	35
3.6	计算的 ⁷⁴ Kr的第一个4 ⁻ 带、第一个5 ⁻ 带、第二个5 ⁻ 带和第二	
	个4⁻带的转动惯量与实验数据的比较	35
3.7	计算的 ⁷⁶ Kr转动带能谱和实验数据的比较	37
3.8	计算的 ⁷⁶ Kr 的2 ⁻ 带、3 ⁻ 带、4 ⁻ 带和5 ⁻ 带的转动惯量与实验数	
	据的比较	38
3.9	计算的 ⁷⁸ Kr 转动带能谱和实验数据的比较	39
3.10	计算的 ⁷⁸ Kr的3 ⁻ 带、第一个4 ⁻ 带、第二个4 ⁻ 带、第一个5 ⁻ 带	
	和第二个5-带的转动惯量与实验数据的比较	40
3.11	计算的 ⁷² Kr转动带能谱和实验数据的比较	41
3.12	计算的 ⁸⁰ Kr的3 ⁻ 带、4 ⁻ 带、6 ⁻ 带和7 ⁻ 带的转动惯量与实验数	
	据的比较	41
3.13	计算的Kr 同位素B(E2)(单位为W.u.)值和实验数据的比较。	
	(a) 72 Kr 晕带B(E2), (b) 74 Kr 晕带B(E2), (c) 74 Kr 第一个5 ⁻	
	带B(E2), (d) ⁷⁶ Kr 晕带B(E2), (e) ⁷⁸ Kr 晕带B(E2), 和(f) ⁸⁰ Kr	
	晕带B(E2)	43
4.1	实验测得的W同位素链的第一个4+和2+态能量比值。两条位	
	于3.33和2.5的水平虚线作为引导,分别代表轴对称形变转子和三	
	轴转子	46

4.2	理论计算的 ¹⁷⁴ W, ¹⁷⁶ W, ¹⁷⁸ W, ¹⁸⁰ W, ¹⁸² W, ¹⁸⁴ W,和 ¹⁸⁶ W正宇称晕带	
	带图	47
4.3	计算的W 同位素晕带转动惯量和实验数据的比较	51
4.4	计算的 ¹⁷⁴ W 转动带能谱和实验数据的比较	52
4.5	计算的 ¹⁷⁶ W 转动带能谱和实验数据的比较	52
4.6	计算的 ¹⁷⁸ W 转动带能谱和实验数据的比较	53
4.7	计算的 ¹⁸⁰ W 转动带能谱和实验数据的比较	55
4.8	计算的 ¹⁸² W 转动带能谱和实验数据的比较	56
4.9	计算的 ¹⁸⁴ W 转动带能谱和实验数据的比较	57
4.10	计算的 ¹⁸⁶ W 转动带能谱和实验数据的比较	59
4.11	计算的W 同位素晕带B(E2)(单位为W.u.)值和实验数据的比	
	较。 (a) 174 W, (b) 176 W, (c) 178 W, (d) 180 W, (e) 182 W, (f) 184 W	
	和(g) 186 W	61
4.12	计算的W同位素晕带g因子和实验数据的比较	62
4.13	计算的图4.5 中 ¹⁷⁶ W side band 1 的B(M1)/B(E2) 比值和实验数	
	据的比较	62
B 1	Wigner公式所计算的d-函数的数值结果与解析结果之间误差的分	
2.1	布图, 自旋 $i = 40\hbar$, 角度 $\theta = 60^{\circ}$	78

-xii-

第一章 引言

1.1 原子核量子体系

1896年,法国物理学家贝克勒尔发现了自发的放射线,这是物理学史上最 有名的发现之一。因此,人们打开了核物理学的大门。上世纪初,英国物理学 家卢瑟福做的α粒子散射实验证实了原子核的存在。1932年,英国物理学家查 德威克发现中子。自此,人们才认识到原子核是由中子和质子构成的量子体 系。中子和质子统称为核子。一个原子核由若干个核子通过强相互作用连结而 成。实际上,原子核内部是一个十分复杂的量子多体体系。人们对原子核的结 构进行了长期不懈的研究,直到现在,还未出现一个统一的原子核结构理论。 然而,经过长时间的努力,人们发展出多种原子核结构模型并取得大量积极的 研究成果。

目前,人们发现的自然产生的稳定原子核大概有300种,其余的都属于不 稳定原子核素。实验室里人工合成的不稳定原子核约3000种,理论预言能够合 成的原子核约8000种。如核素图1.1所示,稳定核素分布于一条狭长的黑色区 域。沿着这片黑色区域的中心画出的一条线(大致为全图的对角线)称为β稳 定线。人工合成的不稳定核素分布于图中的黄色区域。理论预言能够合成的核 素分布在图中的绿色区域。

1.2 核结构研究的热点问题和理论模型

核物理研究主要分为原子核结构和核反应两大方向。目前,核结构研究的 前沿热点主要是对极限情况下的原子核特性的研究:

- 电荷和质量极限,即对超重原子核的研究 [1]。主要是对重核壳结构、核的形变效应、核合成和α衰变的研究等。
- 同位旋极限,即对奇特核的研究 [2]。主要是对奇特核晕结构(质子晕 [3]、中子晕 [4]以及巨晕 [5]等)和丰中子区壳结构演化的研究(如幻数的演化等)。
- 角动量极限,即对形变原子核处在高自旋态时产生的现象的研究。如快速转动时,形变核内禀自由度与集体自由度相互影响所带来的新奇现象。



图 1.1 核素图

这些现象主要有:超形变带 [6]、回弯效应、量子混沌 [7]和带终止 [8]等 等。

目前,世界各国在核物理实验设施的建设上取得了一系列重大成果,如兰州的HIRFL-CSR、美国的MSU、俄罗斯的Dubda、法国的GANIL、德国的GSI、日本的RIKEN以及EUROBALL、GRETINA、Gammasphere等。在理论核物理方面,经过一个多世纪的发展,人们已构建出若干成熟的理论模型。接下来便简要的介绍一些与投影壳模型(Projected Shell Model, PSM)相关的模型。

壳模型:常见的壳模型有大规模球型壳模型(简称壳模型)、ab inito 壳模型、Monte Carlo 壳模型、配对壳模型、投影壳模型等等。虽然原子核中的势场和原子中的有心力场不同,但我们可以认为原子核内各个核子是在一个平均场内相互独立地运动。相对某个特定的核子来说,其感受到的平均场是其他全部核子对它作用的总和。

对于A个相互作用的核子所构成的体系,它的非相对论哈密顿量为 [9]

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i < j=1}^{A} V(r_i, r_j)$$
(1.1)

-2-

通过变换可将上式表示为单体项与剩余相互作用项之和

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A} \left[\frac{\hat{p}_{i}^{2}}{2m_{i}} + V(r_{i}) \right] + \left[\sum_{i< j=1}^{A} V(r_{i}, r_{j}) - \sum_{i=1}^{A} V(r_{i}) \right]$$
$$= \sum_{i=1}^{A} \left[\frac{\hat{p}_{i}^{2}}{2m_{i}} + V(r_{i}) \right] + \hat{H}_{res}$$
$$= \sum_{i=1}^{A} \hat{h}_{i} + \hat{H}_{res}$$
$$= \hat{H}_{0} + \hat{H}_{res}$$
(1.2)

我们希望能够找到一个适当的势场V(r_i),使Ĥ_{res}尽量的小或等于零。这样,我 们能就把一个复杂的多体问题变成为一个简单的单体问题。然而,这极其困 难。为了解决这个问题,壳模型理论采用了以下思路(详细讨论见文献 [10]):

(1) 在一个适当的基矢中(如球谐振子基矢)求解本征方程

$$\hat{h}_i \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \tag{1.3}$$

(2)根据上式的解我们可得到一个Slater 行列式(即 \hat{H}_0 的本征波函数,用于描述A个无相互作用核子所构建的体系的状态)

$$\Phi(r_1, r_2, \dots r_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_1(r_2) & \cdots & \phi_1(r_A) \\ \phi_2(r_1) & \phi_2(r_2) & \cdots & \phi_2(r_A) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_A(r_1) & \phi_A(r_2) & \cdots & \phi_A(r_A) \end{vmatrix}$$
(1.4)

上式的Slater 行列式通过角动量耦合(如角动量投影、*J*-scheme、*M*-scheme、 母分系数等)可得出角动量本征波函数,并伴随着一种组态结构(即A个核子 在一系列单粒子能级上的一种填充状态,不同组态结构表示不同的激发态。如 图1.2 所示)。

(3)我们用这些组态构建一组基矢,并在这组基矢中求解哈密顿量Ĥ的本征方程,进而获得体系的波函数和能级能量。在考虑重核时,由于其组态数量呈现发散的特性,我们无法采用整个完备基矢,只能进行组态截断并选取一个有效的组态空间(即价核子组态空间)。

壳模型可以同时描述原子核的集体运动和单粒子运动。然而该模型不能描述比较重的形变原子核,主要原因是随着原子核质量数的增大其组态空间呈现 出发散的性质,并且人们很难选择一个极大组态空间下的有效哈密顿量。



图 1.2 壳模型组态空间示意图

平均场理论:利用自洽迭代法找出(1.2)式中最适当的单粒子势V(r_i),包括 非相对论的Hartree-Fock-Bogoliubov 理论和相对论的Hartree-Fock 理论。它是 利用能量密度泛函理论研究原子核基态的一种方法。接下来我们简要的介绍一 下这种方法(详细讨论见文献 [11] 和文献 [12])。

首先,原子核的能量可表示为

$$E[\hat{\rho}] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \tag{1.5}$$

我们将多体波函数|Ψ〉近似表示为一个Slater行列式。然后选取一个有效哈密顿 量,用其在Slater行列式上的期待值近似等于原子核体系的能量

$$E[\hat{\rho}] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \approx \langle \Phi | \hat{H}_{\text{eff}}(\hat{\rho}) | \Phi \rangle \tag{1.6}$$

其中*p*表示密度矩阵:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = |\phi_i(\boldsymbol{r})\rangle \langle \phi_i(\boldsymbol{r}')|$$
(1.7)

将能量密度泛函(1.5)式对密度矩阵进行变分,可得原子核体系的单粒子哈密顿量:

$$\hat{h} = \delta E / \delta \hat{\rho} \tag{1.8}$$

-4-

进一步求解本征方程

$$\hat{h}_i |\phi_i\rangle = \varepsilon_i |\phi_i\rangle \tag{1.9}$$

通过上式我们可以解出原子核体系的单粒子波函数和能级能量。

这就是自治平均场方法的基本概念。平均场理论能够微观地描述核素图上 所有核素的性质,且能够考虑相对论效应。然而,该理论也只能研究原子核基 态的特性,研究激发态就要用到超越平均场方法,如生成坐标方法和无规相近 似等。

生成坐标方法: 其主要操作就是将一个原子核体系的多体波函数 $|\Psi\rangle$ 用一组非正交的生成函数 $|\Phi(q)\rangle$ 进行展开

$$|\Phi_{\alpha}\rangle = \int dq f_{\alpha}(q) |\Phi(q)\rangle \tag{1.10}$$

其中 $q = q_1, q_2, \cdots$ 是生成坐标。f(q) 是权重函数,可通过变分解出

$$\delta \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \tag{1.11}$$

对f(q) 变分可得方程

$$\int dq' \langle \Phi(q) | \hat{H} | \Phi(q') \rangle f(q') = E \int dq' \langle \Phi(q) | \Phi(q') \rangle f(q')$$
(1.12)

上式即所谓的Hill-Wheeler 方程 [13]。若将欧拉角选为生成坐标(即 $q = \Omega$),则此方法就是角动量投影方法 [14–16],并常被用于描述原子核体系的转动特性。若将形变参数选为生成坐标,则此方法就是一种普通的生成坐标法,并常被用于软核低激发态的研究 [17–21]。

1.3 本文选题和结构

本文的研究内容有两部分,一是对Kr同位素高自旋转动带性质的研究,二 是对W同位素中所有K同核异能带的研究。

角动量投影模型能够很好的从微观角度描述原子核的转动特性。这种模型 理论的出发点是各种形变平均场,如相对论 [18]平均场、自洽的Skyrme [17]平 均场以及Nilsson 平均场 [14]等。然后在平均场的基础上考虑核子间的对力进 而构建内禀坐标系中的形变准粒子基矢。然而,这些准粒子基矢打破了空间 转动对称性。一般我们用角动量投影来恢复被打破的转动对称性。对准粒子 基矢进行角动量投影的同时也将对原子核体系的描述从内禀坐标系变换到了 实验室坐标系。最后,在投影基矢中求解体系的哈密顿量本征方程,进而可 获得实验室坐标系中原子核体系的能谱和波函数等信息。传统的PSM利用广 义Wick定理 [22]计算准粒子基矢中的转动矩阵元。由于这种计算方法耗时且复 杂,因此组态空间只能包含不超过四准粒子的组态。最近,我们通过采用一种 叫作Pfaffian 的算法 [23-29],首次把PSM的(偶偶核)组态空间扩展到了十准 粒子组态。应用这种算法我们解决了数值计算的耗时问题,并能研究原子核极 高自旋态的性质。本文以扩展的PSM为理论工具,对Kr和W同位素链的高自旋 态的微观结构及其电磁属性进行了研究,包括对B(E2)、B(M1)和g 因子的大量 计算和分析,以及高自旋态的预言。计算结果与实验数据符合得很好,表明在 传统的PSM中引入的Pfaffian算法可以大幅提高计算效率,并可以应用到重核 区高自旋态的研究中,进一步证明扩展的PSM十分成功。

本文具体内容的结构为: 第二章主要是介绍投影壳模型的理论框架和最近的发展。第三章研究的是Kr同位素高自旋转动带的性质。第四章研究的是W同位素中所有K同核异能带的性质。第五章为总结和展望。

第二章 投影壳模型的基本理论介绍

2.1 形变的准粒子基矢

人们普遍用到的大型球型壳模型理论是在球谐振子的正交完备基矢下对角 化哈密顿量而获得原子核的波函数的。球型基矢的产生和湮灭算符分别表示 为: $c^{\dagger}_{\alpha}, c_{\alpha}$,其中 $\alpha \equiv \{nljm\}$ 分别是单粒子轨道的主量子数、轨道角动量量子 数、总角动量量子数以及总角动量的三分量,如图2.1所示。用大型球型壳模型 计算原子核能级和其他物理量时需要在所有球型基矢下展开原子核的波函数, 即便是原子核基态也如此。当原子核质量数越来越大,需要的球型基矢维数也 爆炸式增加,从而导致计算时间和计算量也大幅度上升。于是,大型球型壳模 型很难计算质量数超过60的形变原子核。要想计算质量数超过60的重原子核, 就需要一种技巧对基矢(即组态空间)进行合理地截断,即删除一些不重要 的基矢从而减少计算时所需的基矢维数。投影壳模型(Projected Shell Model, PSM)理论就提出了一种有效截断组态空间的方法。PSM 理论不是用球型基 矢而是用接下来要介绍的Nilsson+BCS 准粒子内禀基矢描述重形变原子核的。

一般来说,一个单体算符 \hat{O} (如 $r^2Y_{2\mu}$ 等)在球型基矢下的矩阵元可表示为

$$\hat{O} = \sum_{\alpha\alpha'} \langle nljm | \hat{O} | n'l'j'm' \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha'}$$
$$= \sum_{\alpha\alpha'} O_{\alpha\alpha'} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha'}$$
(2.1)

在球型基矢中对角化给定形变的Nilsson哈密顿量,可以获得固定形变的Nilsson单粒子能级(ε_i)、波函数(ϕ_i)和球型基矢变换到形变基矢的幺正变换矩阵 $W_{\alpha\nu}$ 。形变基矢中的产生和湮灭算符可分别表示为 b_i^{\dagger}, b_i 。单体算符在形变基下的矩阵元以及两种基矢之间的关系可表示为

$$\hat{O} = \sum_{ii'} \langle \phi | \hat{O} | \phi' \rangle b_i^{\dagger} b_{i'}$$
(2.2)

$$b_{\nu} = \sum_{\alpha} W_{\alpha\nu} c_{\alpha} \tag{2.3}$$

我们平时常用到的单体算符在球形基矢下的矩阵元可通过量子力学角动 量理论较容易计算得到,单体算符在形变基下的矩阵元则可用幺正矩阵 *W*_{αν}



图 2.1 原子核的球型单粒子能级图

和球形基下的单体算符矩阵元进行幺正变换而获得。然后,我们用计算出的Nilsson单粒子能级波函数通过BCS理论构建形变的准粒子基矢。接下来,我们对Nilsson哈密顿量、BCS理论以及PSM要用到的准粒子组态空间进行简要的介绍。

对于一个处于实验室坐标下的形变原子核,其表面的函数可以用球谐函数 进行展开 [13]

$$R = R(\theta, \phi) = R_0 \left(1 + \alpha_{00} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{\mu=1\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right)$$
(2.4)

其中 R_0 表示与该形变原子核体积相等的球体的半径。对于体积很难改变的原子核体系, α_{00} 近似为零,可忽略。 $\lambda = 1$ 的项主要受原子核体系质心平移的影响,将体系的质心平移到实验室坐标系原点则可确定 $\alpha_{1\mu}$ 的值。于是,我们只考虑 $\lambda = 2$ 的项(即四极形变)。 $\alpha_{2\mu}$ ($\mu = -2 \sim 2$)则是5个四极形变参数。更

高极的项我们忽略不计。为了研究方便,我们把实验室坐标系换成原子核的内 禀坐标系,将原子核的三个惯量主轴设为内禀系的三个坐标轴。原子核内禀坐 标系中的四极形变参数可表示为*a*_{2µ}。根据*R*的转动不变性,内禀系中的四极 形变参数*a*_{2µ}可由下式求出

$$a_{2\mu} = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega) \alpha_{2\mu'} \tag{2.5}$$

其中 $D^{\lambda}_{\mu'\mu}$ 是D-函数, Ω 是内禀坐标系在实验室坐标系中转动的欧拉角。原子核体系的表面函数(只考虑四极形变时)在内禀坐标系中有如下关系式

$$R(\theta',\phi') = R(\pi - \theta',\phi') = R(\theta',-\phi')$$
(2.6)

于是我们得到

$$a_{2\mu} = a_{2-\mu} = (-1)^{\mu} a_{2\mu} \quad \Rightarrow \quad a_{21} = a_{2-1} = 0, \ a_{22} = a_{2-2}$$
 (2.7)

也就是说在内禀坐标系中只有 a_{20} 和 a_{22} 是独立的形变参数。另外(2.5)式中的 欧拉角具有3个自由度。因此,与实验室坐标系类似,我们在内禀坐标系中 也得到5个四极形变参数。一般人们习惯用Hill-Wheeler 坐标(β , γ)来表达参 数 a_{20} 和 a_{22}

$$a_{20} = \beta \cos \gamma$$

$$a_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma$$
(2.8)

下面,我们给出Nilsson哈密顿量的表达式 [30]

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_h + C\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{l} + D\boldsymbol{l}^2$$
(2.9)

其中 $V_h + Cs \cdot l + Dl^2$ 就是Nilsson势。 $Cs \cdot l$ 为自旋-轨道耦合项, Dl^2 是修正项 (使Nilsson势更趋近Woods-Saxon 势)。 V_h 则是形变的谐振子势,其在球坐标 系中的表达式为

$$V_h(\theta, \phi, r) = \frac{1}{2}m\omega_0 r^2 \left\{ 1 - 2\beta \left[\cos\gamma Y_{20}(\theta, \phi) + \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\gamma (Y_{22} + Y_{2-2}) \right] \right\}$$
(2.10)

在直角坐标系中的表达式为

$$V_h = \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2)$$
(2.11)

若Nilsson势场为轴对称形变(假设z轴是对称轴), V_h 可简化为

$$V_h = \frac{1}{2}m \left[\omega_1^2 (x^2 + y^2) + \omega_3^2 z^2\right]$$
(2.12)

Ŷ

$$\omega_1 = \omega_0 \left(1 + \frac{1}{3} \varepsilon_2 \right), \qquad \omega_3 = \omega_0 \left(1 - \frac{2}{3} \varepsilon_2 \right) \tag{2.13}$$

将(2.13)代入(2.12),再与(2.10)式作比较,忽略不计 ε_2^2 项,因考虑的是轴对称情况,所以 $\gamma = 0$,于是有 [30]

$$\varepsilon_2 = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\beta = 0.95\beta \tag{2.14}$$

 ε_2 就是投影壳模型中的四极形变参数。于是,我们可以将 V_h 写成下面的形式

$$V_h = \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2 - \frac{1}{3}m\omega_0^2 \varepsilon_2 (3z^2 - r^2) + O(\varepsilon_2)$$
(2.15)

上式第一项为Nilsson势场的球形部分,后面的项为形变部分。由于原子核发生 形变时体积始终保持不变,于是有

$$\omega_1^2 \omega_3 = \omega_{00}^3 \tag{2.16}$$

其中

$$\hbar\omega_{00} = 41A^{-1/3} [\text{MeV}] \tag{2.17}$$

A表示相应原子核的质量数。根据上面几个式子我们能够导出(2.10)中的 ω_0 值 [30]

$$\omega_0 = \omega_{00} \left(1 - \frac{1}{3} \varepsilon_2^2 - \frac{2}{27} \varepsilon_2^3 \right)^{-1/3}$$
(2.18)

把(2.9)式的C, D换成Nilsson参数 κ, μ

 $C = -2\hbar\omega_{00}\kappa, \qquad D = -\hbar\omega_{00}\kappa\mu \tag{2.19}$

Nilsson哈密顿量的表达式则变成

$$\hat{h} = h_0 + h_{\varepsilon} - 2\hbar\omega_{00}\kappa\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l} - \hbar\omega_{00}\kappa\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{l}^2$$
(2.20)

$$-10 -$$

上式 h_0 就是(2.15)式的第一项(球形部分), h_{ε} 即(2.15)式的第二项(形变部分)。 这样,Nilsson哈密顿量的本征方程可写成

$$(h_0 + h_{\varepsilon} - 2\hbar\omega_{00}\kappa \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{l} - \hbar\omega_{00}\kappa\mu\boldsymbol{l}^2)\phi_i = \varepsilon_i\phi_i$$
(2.21)

求解(2.21)式时,我们可以选择球谐振子势的本征波函数 $|N,l,j,\Omega >$ 作为基 矢。方程的解 ε_i 就是形变原子核的Nilsson单粒子态的能量, ϕ_i 是Nilsson单粒子 态的波函数。我们通常用量子数 $\Omega^{\pi}[N, n_z, \Lambda, \Sigma]$ 来标记Nilsson单粒子态 $|\phi_i >$ 。 因为我们这里研究的都是轴对称体系,所以总角动量J在z轴的投影 Ω 是好量 子数, π 为宇称,也是好量子数。N是主壳量子数, n_z 是z轴主量子数。 Λ, Σ 分 别是 l_z 和 s_z 的本征值。量子数 N, n_z, Λ, Σ 在大形变单粒子平均场中是近似好量 子数。因为大形变单粒子平均场中,我们可以不考虑自旋轨道耦合项,所 以 Λ, Σ 就能够成为两个近似好量子数。

前面提到的Nilsson单粒子平均场只考虑了核子之间的长程相互作用(四极-四极作用力)。然而,在实际的一个原子核体系中,核子之间还存在着一种短程的相互作用,我们称为对力。为了将这种短程力考虑进平均场中,我们需要在前面计算出的Nilsson单粒子态的基础上用到BCS理论。在BCS理论中,哈密顿量的表达式为

$$\hat{H} = \sum_{k>0} \varepsilon_k (b_k^{\dagger} b_k + b_{\bar{k}}^{\dagger} b_{\bar{k}}) - G \sum_{kk'} b_k^{\dagger} b_{\bar{k}}^{\dagger} b_{\bar{k}'} b_{k'}$$
(2.22)

整数 $k = 1, 2, 3, \dots$ 标记着每个Nilsson单粒子态。在上式的第一项求和中, k > 0是指 $\Omega = 1/2, -3/2, 5/2, -7/2 \dots$ 的Nilsson单粒子态。k是指k的时间反 演态, ε_k 是这两个简并态的能量。G是对力强度。(2.22)式第一项是单粒子哈 密顿量部分,第二项就是对力部分。取试探波函数为

$$|BCS\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k b_k^{\dagger} b_{\bar{k}}^{\dagger})|0\rangle$$
(2.23)

 u_k, v_k 是需要求解的变分参数。 $|0\rangle$ 是Nilsson单粒子能级真空态。另有 u_k, v_k 的归 一化关系式为

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 (2.24)$$

在试探函数中求算符b_k的平均值可得

$$\langle BCS | b_k^{\dagger} b_k | BCS \rangle = v_k^2 \tag{2.25}$$

(2.25)式说明Nilsson单粒子能级k被粒子占有的概率为 v_k^2 ,因此, $u_k^2 = 1 - v_k^2$ 就 是该能级没被占有的概率。若把(2.23)式的各项乘积结果全部明确写出,我们 可以发现准粒子真空态 $|BCS\rangle$ 是所有被 $0, 1, 2, 3, \cdots$ 对粒子占有的Nilsson态的叠 加,所以 $|BCS\rangle$ 并非粒子数算符 \hat{N} 的本征态。

令粒子数算符 Ñ 在准粒子真空态 | BCS) 下的平均值和实际的粒子数相等

$$\langle BCS | \hat{N} | BCS \rangle = N \tag{2.26}$$

利用变分原理可得

$$\delta \langle BCS | \hat{H} - \lambda \hat{N} | BCS \rangle = 0 \tag{2.27}$$

其中λ是Lagrange乘子。联合(2.22)、(2.23)、(2.27)三个式子可得

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right)$$
(2.28a)

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right)$$
(2.28b)

其中

$$\Delta = G \sum_{k>0} u_k v_k$$
$$= \frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}}$$
(2.29)

根据粒子数守恒条件有

$$\sum_{k>0} 2v_k^2 = \sum_{k>0} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right) = N$$
(2.30)

上面几个式子中的 Δ 是对隙, λ 为费米能。 ε_k 是Nillson单粒子能级的能量。对于 一个选定的费米子体系,G,N是两个给定的常数。一般情况下,我们很难用代 数方法求解(2.28)、(2.29)、(2.30)式中的 $u_k, v_k, \Delta, \lambda$ 的值,只能用数值迭代法 近似求解。解出了 u_k, v_k 值,我们便获得了试探波函数 $|BCS\rangle$ 。这个波函数对 应于体系能量最低的态,即基态。为了获得体系的激发态,我们需要利用已解 出的 u_k, v_k 值进行粒子-准粒子变换(Bogoliubov变换)

$$a_k^{\dagger} = u_k b_k^{\dagger} - v_k b_{\bar{k}} \tag{2.31a}$$

$$a_{\bar{k}}^{\dagger} = u_k b_{\bar{k}}^{\dagger} + v_k b_k \tag{2.31b}$$

-12-

 $a_k^{\dagger}, a_k^{\dagger}$ 分别是互为时间反演态的准粒子产生算符,准粒子湮灭算符 a_k, a_k 是准粒子产生算符的厄米共轭。这些算符遵守费米子反对易式。由于

$$a_k |BCS\rangle = 0, \qquad \forall \ k \tag{2.32}$$

上式表明 $|BCS\rangle$ 就是准粒子真空态的波函数。因此,当一个准粒子产生算符 a_k^{\dagger} 作用到准粒子真空态波函数 $|BCS\rangle$ 上,就构造了一个准粒子激发态。经过Bogoliubov变换,我们将体系简化成一个无对力作用的准粒子体系。该体系的哈密顿量可表示为

$$\hat{H}_{qp} = \langle BCS | \hat{H} - \lambda \hat{N} | BCS \rangle + \sum_{k} E_k a_k^{\dagger} a_k$$
(2.33)

上式中 $E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda) + \Delta}$ 是准粒子能级的能量。对于一个偶偶原子核体系, 最低能量的激发是两准粒子激发态

$$a_{k_1}^{\dagger}a_{k_2}^{\dagger}|BCS\rangle \tag{2.34}$$

其激发能量等于 $E_{k_1} + E_{k_1}$ 。为了简捷方便,在后面的内容中我们用 $|\Phi\rangle$ 代替 $|BCS\rangle$ 来代表体系的准粒子真空态。

我们知道,BCS方法会导致被研究体系的粒子数不守恒,且未考虑阻 塞(blocking)效应。本文将用粒子数投影方法来处理体系粒子数不守恒的问题, 进而用粒子数守恒方法处理阻塞效应。

PSM是在Nilsson+BCS准粒子基矢上进行角动量和粒子数投影的 [14]。这些准粒子基矢是利用考虑对力的Nilsson单粒子平均场进行Bogoliubov变换而获得的。对于三种不同的原子核(偶偶核、奇中子核和奇质子核),它们采用的基矢各不相同。每一种核采用的基矢构成一组PSM组态空间。接下来,我们分别列出这三种原子核体系的组态空间 [14,31-33]。

偶偶核组态空间:

$$\left\{ \begin{array}{l} |\Phi\rangle, \ a^{\dagger}_{\nu_{i}}a^{\dagger}_{\nu_{j}}|\Phi\rangle, \ a^{\dagger}_{\pi_{i}}a^{\dagger}_{\pi_{j}}|\Phi\rangle, \ a^{\dagger}_{\nu_{i}}a^{\dagger}_{\nu_{j}}a^{\dagger}_{\pi_{k}}a^{\dagger}_{\pi_{l}}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\nu_{i}}a^{\dagger}_{\nu_{j}}a^{\dagger}_{\nu_{k}}a^{\dagger}_{\nu_{l}}|\Phi\rangle, \ a^{\dagger}_{\pi_{i}}a^{\dagger}_{\pi_{j}}a^{\dagger}_{\pi_{k}}a^{\dagger}_{\pi_{l}}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\nu_{i}}a^{\dagger}_{\nu_{j}}a^{\dagger}_{\nu_{k}}a^{\dagger}_{\nu_{l}}a^{\dagger}_{\nu_{m}}a^{\dagger}_{\nu_{n}}|\Phi\rangle, \ a^{\dagger}_{\pi_{i}}a^{\dagger}_{\pi_{j}}a^{\dagger}_{\pi_{k}}a^{\dagger}_{\pi_{l}}a^{\dagger}_{\pi_{m}}a^{\dagger}_{\pi_{n}}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\pi_{i}}a^{\dagger}_{\pi_{j}}a^{\dagger}_{\nu_{k}}a^{\dagger}_{\nu_{l}}a^{\dagger}_{\nu_{m}}a^{\dagger}_{\nu_{n}}|\Phi\rangle, \ a^{\dagger}_{\nu_{i}}a^{\dagger}_{\nu_{j}}a^{\dagger}_{\pi_{k}}a^{\dagger}_{\pi_{l}}a^{\dagger}_{\pi_{m}}a^{\dagger}_{\pi_{n}}a^{\dagger}_{\pi_{n}}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\pi_{i}}a^{\dagger}_{\pi_{j}}a^{\dagger}_{\nu_{k}}a^{\dagger}_{\nu_{l}}a^{\dagger}_{\nu_{m}}a^{\dagger}_{\nu_{n}}a^{\dagger}_{\nu_{o}}a^{\dagger}_{\nu_{p}}|\Phi\rangle, a^{\dagger}_{\pi_{i}}a^{\dagger}_{\pi_{j}}a^{\dagger}_{\pi_{k}}a^{\dagger}_{\pi_{l}}a^{\dagger}_{\mu}a^{\dagger}_{\nu_{m}}a^{\dagger}_{\nu_{n}}a^{\dagger}_{\nu_{p}}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\pi_{i}}a^{\dagger}_{\pi_{j}}a^{\dagger}_{\pi_{k}}a^{\dagger}_{\pi_{l}}a^{\dagger}_{\nu_{m}}a^{\dagger}_{\nu_{n}}a^{\dagger}_{\nu_{o}}a^{\dagger}_{\nu_{p}}a^{\dagger}_{\mu}a^{\dagger}_{\mu}a^{\dagger}_{\nu_{r}}|\Phi\rangle, \\ a^{\dagger}_{\nu_{i}}a^{\dagger}_{\nu_{\mu}}a^{\dagger}_{\nu_{l}}a^{\dagger}_{\pi_{m}}a^{\dagger}_{\pi_{n}}a^{\dagger}_{\pi_{n}}a^{\dagger}_{\pi_{n}}a^{\dagger}_{\pi_{p}}a^{\dagger}_{\pi_{q}}a^{\dagger}_{\pi_{q}}|\Phi\rangle. \right\}$$

$$(2.35)$$

-13-

奇中子核组态空间:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{\nu_{i}}^{\dagger}|\Phi\rangle, \ a_{\nu_{i}}^{\dagger}a_{\nu_{j}}^{\dagger}a_{\nu_{k}}^{\dagger}|\Phi\rangle, \ a_{\nu_{i}}^{\dagger}a_{\pi_{j}}^{\dagger}a_{\pi_{k}}^{\dagger}|\Phi\rangle, \ a_{\nu_{i}}^{\dagger}a_{\nu_{j}}^{\dagger}a_{\nu_{k}}^{\dagger}a_{\pi_{n}}^{\dagger}a_{\pi_{m}}^{\dagger}|\Phi\rangle, \\ a_{\nu_{i}}^{\dagger}a_{\nu_{j}}^{\dagger}a_{\nu_{k}}^{\dagger}a_{\nu_{n}}^{\dagger}a_{\pi_{n}}^{\dagger}a_{\pi_{n}}^{\dagger}|\Phi\rangle, \ a_{\nu_{i}}^{\dagger}a_{\nu_{j}}^{\dagger}a_{\nu_{k}}^{\dagger}a_{\pi_{n}}^{\dagger}a_{\pi_{n}}^{\dagger}a_{\pi_{n}}^{\dagger}|\Phi\rangle. \right\}$$

$$(2.36)$$

奇质子核组态空间:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{\pi_i}^{\dagger} |\Phi\rangle, \ a_{\pi_i}^{\dagger} a_{\pi_j}^{\dagger} a_{\pi_k}^{\dagger} |\Phi\rangle, \ a_{\pi_i}^{\dagger} a_{\nu_j}^{\dagger} a_{\nu_k}^{\dagger} |\Phi\rangle, \ a_{\pi_i}^{\dagger} a_{\pi_j}^{\dagger} a_{\pi_k}^{\dagger} a_{\nu_l}^{\dagger} a_{\nu_m}^{\dagger} |\Phi\rangle, \\ a_{\pi_i}^{\dagger} a_{\pi_j}^{\dagger} a_{\pi_k}^{\dagger} a_{\pi_l}^{\dagger} a_{\pi_m}^{\dagger} a_{\nu_n}^{\dagger} |\Phi\rangle, \ a_{\pi_i}^{\dagger} a_{\pi_j}^{\dagger} a_{\pi_k}^{\dagger} a_{\nu_l}^{\dagger} a_{\nu_n}^{\dagger} a_{\nu_n}^{\dagger} |\Phi\rangle. \right\}$$

$$(2.37)$$

在实际计算中,PSM通常选定三个谐振子主壳(如N = 3,4,5或N = 4,5,6)。于是,上面列出的每个准粒子基矢中的中子产生算符(ν)和质子产 生算符(π)的下角标应分别取遍选定的中子和质子主壳的准粒子能级。这是 一个很庞大的组态空间,随着准粒子数的增加,组态维数也爆炸式增加。在最 初的PSM组态空间中,偶偶核的基矢只包含了(2.35)式中的前四项。然而,太 小的组态空间无法正确描述原子核的高自旋态。为了进一步扩展PSM的应用, 我们最近将偶偶核的基矢扩展到了十准粒子态 [31,32]。同时,将奇质量核的基 矢从最初的三准粒子扩展到了现在的七准粒子 [33]。组态空间扩展后的PSM极 大地增加了模型的应用范围,同时也极大地增加了计算量。现在,最初版本 的PSM使用Wick定理计算转动矩阵元的方法已很难适用于扩展后的PSM [27]。 于是,我们引入了一种新的计算转动矩阵元的方法,即Pfaffian算法。这种算法 的详细理论和公式将在本章第三节以及附录A讨论。

2.2 角动量与粒子数投影

上一节的(2.35)、(2.36)和(2.37) 三式中列出的所有Nilsson+BCS 基矢都是 原子核体系在内禀坐标系中的量子态波函数。这些波函数并不能正确描述原子 核体系的实际状态。因为首先,所有核物理实验数据(如能级能量、原子核角 动量以及电磁跃迁几率等)皆是在实验室坐标中获得的。其次,实验观测到的 原子核能级皆是粒子数和角动量的本征态。然而,Nilsson+BCS基矢并不是粒 子数和角动量的本征态。为了获得更接近原子核真实状态的波函数,我们可以 采用角动量与粒子数投影技术。

一般情况下,在实验室坐标系中转动内禀坐标系(即转动波函数)并不会

改变原子核体系的物理性质。于是有

符号 $\hat{R}(\Omega)$ 代表转动算符。空间各项同性导致有对易式 $[\hat{H}, \hat{R}] = 0$ 的成立,于 是有

由上式可以看出,任意转动波函数不会改变该波函数描述的体系量子态的能量。于是,该量子态的波函数可以由转动不同角度的波函数叠加而成

$$|\Psi\rangle = \int d\Omega F(\Omega) \hat{R}(\Omega) |\Phi\rangle \qquad (2.40)$$

用D-函数将F(Ω)进行展开 [13,14]

$$F(\Omega) = \sum_{IMK} \frac{2I+1}{8\pi^2} f^I_{MK} D^{I*}_{MK}(\Omega)$$
(2.41)

其中*I*是原子核体系的总角动量,*M*是总角动量在实验室坐标系中*Z*轴的分量, *K*则是总角动量在内禀坐标系中*Z*轴的分量。于是有

$$|\Psi\rangle = \sum_{IMK} \frac{2I+1}{8\pi^2} f^I_{MK} \int d\Omega D^{I*}_{MK}(\Omega) \hat{R}(\Omega) |\Phi\rangle$$
(2.42)

利用式子 $\sum_{\nu IM} |\nu IM\rangle \langle \nu IM | = 1$ 的特性可得

$$\begin{split} |\Psi\rangle &= \sum_{IMK} \frac{2I+1}{8\pi^2} f_{MK}^I \int d\Omega D_{MK}^{I*}(\Omega) \sum_{\nu_1 I_1 M_1} \sum_{\nu_2 I_2 M_2} |\nu_1 I_1 M_1\rangle \\ &\times \langle \nu_1 I_1 M_1 | \hat{R}(\Omega) | \nu_2 I_2 M_2 \rangle \langle \nu_2 I_2 M_2 | \Phi \rangle \\ &= \sum_{IMK} \frac{2I+1}{8\pi^2} f_{MK}^I \int d\Omega D_{MK}^{I*}(\Omega) \sum_{\nu_1 I_1 M_1} \sum_{M_2} |\nu_1 I_1 M_1 \rangle D_{M_1 M_2}^{I_1}(\Omega) \langle \nu_1 I_1 M_2 | \Phi \rangle \\ &= \sum_{IMK} \frac{2I+1}{8\pi^2} f_{MK}^I \sum_{\nu_1 I_1 M_1} \sum_{M_2} |\nu_1 I_1 M_1 \rangle \langle \nu_1 I_1 M_2 | \Phi \rangle \frac{8\pi^2}{2I_1+1} \delta_{I_1 I} \delta_{M_1 M} \delta_{M_2 K} \\ &= \sum_{IMK} f_{MK}^I \sum_{\nu_1} |\nu_1 I M \rangle \langle \nu_1 I K | \Phi \rangle \\ &= \sum_{IMK} f_{MK}^I \hat{P}_{MK}^I | \Phi \rangle \end{split}$$
(2.43)

(2.43)式第三行的结果用到了D函数的正交性 [34]。(2.43)式最后一行用到了角动量投影算符的其中一种定义式

$$\hat{P}^{I}_{MK} = \sum_{\nu} |\nu IM\rangle \langle \nu IK| \qquad (2.44)$$

PSM中用到的角动量投影算符为另一种形式

$$\hat{P}^{I}_{MK} = \frac{2I+1}{8\pi^2} \int d\Omega D^{I*}_{MK}(\Omega) \hat{R}(\Omega)$$
(2.45)

角动量投影算符满足下面两种性质

$$\hat{P}_{MK}^{I\dagger} = \hat{P}_{KM}^{I}$$
 and $\hat{P}_{KM}^{I}\hat{P}_{M'K'}^{I'} = \delta_{II'}\delta_{MM'}\hat{P}_{KK'}^{I}$ (2.46)

(2.43)式中的 f_{MK}^{I} 是相应投影基矢在波函数 $|\Psi\rangle$ 中的权重。 f_{MK}^{I} 可通过求解哈密顿量的本征方程(即Hill-Wheeler方程)获得。前面我们说过,实验观测到的原子核能级皆是角动量的本征态,所以,在最终求出的原子核体系波函数 $|\Psi\rangle$ 应该也是一个角动量的本征态。由此我们可知,(2.43)式最后一行应该只对K求和,I,M为特定不变的单值。于是,(2.43)式最后一行可写为[14]

$$|\Psi^{I\alpha}\rangle = \sum_{K\kappa} f^{I}_{MK} \hat{P}^{I}_{MK} |\Phi_{\kappa}\rangle \qquad (2.47)$$

上式的 α 标记了具有相等角动量 I 的各不同能级态,求和角标 κ 取遍组态空间(2.35)、(2.36)、(2.37)中被选定的准粒子基矢态。通过波函数| $\Psi^{I\alpha}$)的表达式
可以看出,角动量投影技术修复了由形变平均场导致的转动对称性破缺。经过 角动量投影,我们将描述原子核体系的波函数从内禀波函数 $|\Phi_{\kappa}\rangle$ 变换到了实验 室坐标系波函数 $|\Psi^{I\alpha}\rangle$ 。

真实的原子核体系是具有确定核子数的,但Nilsson+BCS准粒子波函数描述的是粒子数不确定的态,即不是粒子数本征态。角动量投影能获得角动量本征态,于是,要获得粒子数本征态,我们需要对Nilsson+BCS准粒子波函数进行粒子数投影。与角动量投影类似,粒子数投影可以表示为[13]

$$|\Psi^A\rangle = \int d\phi f^A(\phi) |\Phi(\phi)\rangle \tag{2.48}$$

 $|\Psi^{A}\rangle$ 是粒子数为 A (质子数或中子数)的粒子数本征波函数。此规范群对应于 在三维的准自旋空间内进行转动 [13],绕相应的z 轴转动的生成元是粒子数算 符 \hat{N} ,即

$$\hat{N} = i \frac{\partial}{\partial \phi},\tag{2.49}$$

$$|\Phi(\phi)\rangle = e^{i\phi\hat{N}}|\Phi(0)\rangle \tag{2.50}$$

对应的生成函数 $f^A(\phi)$ 为

$$f^A(\phi) = \sum_A \frac{1}{2\pi} e^{-iA\phi} \cdot g_A \tag{2.51}$$

于是, (2.48)式可以写成

$$|\Psi^A\rangle = \sum_A g_A \hat{P}^A |\Phi\rangle \tag{2.52}$$

上式的粒子数投影算符 PA定义为

$$\hat{P}^{A} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} e^{i\phi(\hat{N}-A)} d\phi \qquad (2.53)$$

从数学上分析,算符 \hat{P}^A 也具有投影算符的性质: $\hat{P}^2 = \hat{P}, \hat{P}^{\dagger} = \hat{P}$ 。将粒子数投影算符作用到Nilsson+BCS准粒子波函数之后,粒子守恒便得以恢复。我们也可以通过下面的式子看出这一点

$$\hat{P}^{A} = \sum_{N\alpha,N'\alpha'} |N\alpha\rangle \langle N\alpha| \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\phi e^{i\phi(\hat{N}-A)} |N'\alpha'\rangle \langle N'\alpha'|$$

$$= \sum_{N\alpha,N'\alpha'} |N\alpha\rangle \langle N\alpha| N'\alpha'\rangle \langle N'\alpha'| \cdot \delta_{NA}$$

$$= \sum_{\alpha} |A\alpha\rangle \langle A\alpha| \qquad (2.54)$$

-17-

2.3 本征方程与Pfaffian算法

在获得准粒子投影基矢之后,我们需要选取适当形式的哈密顿量在投影基 矢中对角化,然后便可计算出原子核体系的能级谱。PSM选取的哈密顿量为可 分离相互作用的形式

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\rm QP} \tag{2.55a}$$

$$\hat{H}_{\rm QP} = -\frac{1}{2}\chi_{QQ}\sum_{\mu}\hat{Q}^{\dagger}_{2\mu}\hat{Q}_{2\mu} - G_M\hat{P}^{\dagger}\hat{P} - G_Q\sum_{\mu}\hat{P}^{\dagger}_{2\mu}\hat{P}_{2\mu} \qquad (2.55b)$$

其中第一项 \hat{H}_0 是考虑了自旋-轨道耦合项再加上 l^2 修正项的球谐单粒子哈密顿量 [35]。 \hat{H}_{QP} 包含的三项属于剩余相互作用。它们分别是四极-四极力、单极对力以及四极对力。求和号中的 $\mu = -2, -1, 0, 1, 2$ 。四极-四极力的强度 χ_{QQ} 可通过一个自洽关系式获得 [14]

$$\chi_{\tau\tau'} = \frac{\frac{2}{3}\varepsilon_2 \hbar \omega_\tau \hbar \omega_{\tau'}}{\hbar \omega_\tau \langle \hat{Q}_0 \rangle_\tau + \hbar \omega_{\tau'} \langle \hat{Q}_0 \rangle_{\tau'}}$$
(2.56)

其中 ε_2 是Nilsson单粒子平均场的四极形变参数。下标 τ, τ' 是中子或质子的标记 (中子-中子、质子-质子以及中子-质子之间的四极-四极相互作用力强度是不相 等的)。 $\langle \hat{Q}_0 \rangle_{\tau}$ 表示(2.55)式中的 \hat{Q}_0 在中子或质子准粒子真空态中的期望值。单 极对力强度 G_M 为 [15]

$$G_M = \left[G_1 \mp G_2 \frac{(N-Z)}{A}\right]/A \tag{2.57}$$

其中N是中子数, Z为质子数, A表示原子核质量数。G₁, G₂则通过拟合相应 原子核区的奇偶质量差来获得。其中的负号和正号分别表示中子-中子对力和 质子-质子对力。在重核中,中子-质子对力因两者的费米面相距很远而不考 虑。四极对力强度G_Q和单极对力强度G_M成正比, PSM常用的比例系数值大概 为0.15~0.25。一般来说,原子核质量数越小,则相对应的比例系数越大。

(2.55)式中各单体算符的具体形式分别为

$$\hat{Q}_{2\mu} = \sum_{\alpha,\alpha'} \langle \alpha | \hat{Q}_{2\mu} | \alpha' \rangle c^{\dagger}_{\alpha} c_{\alpha'}$$

$$\hat{P}^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} c^{\dagger}_{\alpha} c^{\dagger}_{\bar{\alpha}}$$

$$\hat{P}^{\dagger}_{2\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\alpha'} \langle \alpha | \hat{Q}_{2\mu} | \alpha' \rangle c^{\dagger}_{\alpha} c^{\dagger}_{\bar{\alpha'}}$$
(2.58)

-18-

其中c[†]_α和c_α对应球谐振子单粒子基矢下的产生和覆灭算符,详细讨论见前面的(2.1)式。

在得到非正交的准粒子投影基矢和PSM哈密顿量具体形式之后,我们便可 求解PSM本征值方程(即Hill-Wheeler 方程)。根据前面的讨论,原子核体系的 角动量和粒子数本征波函数为

$$|\Psi_{IM}\rangle = \sum_{\kappa K} F^{I}_{\kappa K} \hat{P}^{IN}_{MK} |\Phi_{\kappa}\rangle$$
(2.59)

上式中的 \hat{P}_{MK}^{IN} 是角动量投影算符和粒子数投影算符的乖积, $F_{\kappa K}^{I}$ 则是相应投影 基矢在波函数 $|\Psi_{IM}\rangle$ 中的权重系数。相应的Hill-Wheeler方程为

$$\sum_{\kappa'K'} \left\{ H^{I}_{\kappa K \kappa' K'} - E N^{I}_{\kappa K \kappa' K'} \right\} F^{I}_{\kappa' K'} = 0$$
(2.60)

其中 $H^{I}_{\kappa\kappa\kappa'\kappa'}$ 为哈密顿量在投影基矢中的矩阵元, $N^{I}_{\kappa\kappa\kappa'\kappa'}$ 则称为norm矩阵元

$$H^{I}_{\kappa K \kappa' K'} = \langle \Phi_{\kappa} | \hat{H} \hat{P}^{IN}_{KK'} | \Phi_{\kappa'} \rangle$$
(2.61a)

$$N^{I}_{\kappa K \kappa' K'} = \langle \Phi_{\kappa} | \hat{P}^{IN}_{KK'} | \Phi_{\kappa'} \rangle$$
(2.61b)

波函数|Ψ_{IM}〉的归一化条件可表示为

$$\sum_{\kappa K \kappa' K'} F^{I}_{\kappa K} N^{I}_{\kappa K \kappa' K'} F^{I}_{\kappa' K'} = 1$$
(2.62)

因投影基矢彼此不正交, 即 $N_{\kappa K \kappa' K'}^{I} \neq 0$, 所以权重系数模的平方 $|F_{\kappa K}^{I}|^{2}$ 并不是 κK 取相应数值的概率。于是, 我们可以先将norm (即 $N_{\kappa K \kappa' K'}^{I}$) 进行对角化, 求解出一组正交归一完备的基矢。我们再将哈密顿量在这组基矢中对角化, 就可解出原子核在各能级态的最终波函数 [14]。

将Norm进行对角化

$$\sum_{\kappa'K'} N^{I}_{\kappa K \kappa' K'} U^{\sigma}_{\kappa' K'} = n_{\sigma} U^{\sigma}_{\kappa K}$$
(2.63)

利用上式求出的波函数U^σ_K定义一个新的波函数

$$W_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{n_{\sigma}}} \sum_{\kappa K} U^{\sigma}_{\kappa K} \hat{P}^{I}_{MK} |\Phi_{\kappa}\rangle$$
(2.64)

波函数W。的内积为

$$W_{\sigma}^{\dagger}W_{\sigma'} = \frac{1}{\sqrt{n_{\sigma}n_{\sigma'}}} \sum_{\kappa K\kappa'K'} U_{\kappa K}^{\sigma\dagger} \langle \Phi_{\kappa} | \hat{P}_{MK}^{I\dagger} \hat{P}_{M'K'}^{I'} | \Phi_{\kappa'} \rangle U_{\kappa'K'}^{\sigma'}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_{\sigma}n_{\sigma'}}} \sum_{\kappa K\kappa'K'} U_{\kappa K}^{\sigma\dagger} N_{\kappa K\kappa'K'}^{I} U_{\kappa'K'}^{\sigma'}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_{\sigma}n_{\sigma'}}} \sum_{\kappa K} U_{\kappa K}^{\sigma\dagger} n_{\sigma'} U_{\kappa K}^{\sigma'}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_{\sigma}n_{\sigma'}}} n_{\sigma'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$= \delta_{\sigma\sigma'} \qquad (2.65)$$

上式第一行到第二行的推导用到了角动量投影算符的关系式(2.46)式和Norm的 定义式(2.61)式。第二行到第三行则用到了对角化方程(2.63)式。第三行到第 四行则是根据波函数 $U^{\sigma}_{\kappa K}$ 的正交属性而得出的。从(2.65)式的结果可以知道,波 函数 W_{σ} 可作为一组正交归一的基矢。然而,由波函数 W_{σ} 的定义(2.64)式可以 看出, n_{σ} 不能等于零。但从(2.63)式求出的本征值 n_{σ} 是有可能等于零的。于 是,我们需要去掉(2.63)式中全部 $n_{\sigma} = 0$ 的解。最后,我们将哈密顿量在本征 值 $n_{\sigma} \neq 0$ 的波函数 W_{σ} 所组建的基矢中进行对角化

$$W^{\dagger}_{\sigma}\hat{H}W_{\sigma'} = \frac{1}{\sqrt{n_{\sigma}n_{\sigma'}}} \sum_{\kappa K \kappa' K'} U^{\sigma}_{\kappa K} \langle \Phi_{\kappa} | \hat{P}^{I\dagger}_{MK} \hat{H} \hat{P}^{I'}_{M'K'} | \Phi_{\kappa'} \rangle U^{\sigma'}_{\kappa' K'}$$
(2.66)

对应的本征值方程可表示为

$$\sum_{\sigma'} G^{I}_{\sigma\sigma'} V^{E}_{\sigma'} = E V^{E}_{\sigma'}, \qquad G^{I}_{\sigma\sigma'} = \frac{\sum_{\kappa K \kappa' K'} U^{\sigma}_{\kappa K} H^{I}_{\kappa K \kappa' K'} U^{\sigma'}_{\kappa' K'}}{\sqrt{n_{\sigma} n_{\sigma'}}}$$
(2.67)

由上面两个式子求解出的原子核能级波函数的形式为

$$|\Psi_{IM}\rangle = \sum_{\sigma, n_{\sigma} \neq 0} V_{\sigma}^{E} W_{\sigma}$$
(2.68)

式(2.59)中 $F_{\kappa K}^{I}$ 的解为

$$F^{I}_{\kappa K} = \sum_{\sigma, n_{\sigma} \neq 0} \frac{V^{E}_{\sigma} U^{\sigma}_{\kappa K}}{\sqrt{n_{\sigma}}}$$
(2.69)

波函数|Ψ_{IM})的归一化条件表示为

$$\langle \Psi_{IM} | \Psi_{IM} \rangle = \sum_{\kappa K \kappa' K'} F^{I}_{\kappa K} N^{I}_{\kappa K \kappa' K'} F^{I}_{\kappa' K'} = 1$$
(2.70)

$$-20-$$

由于投影基矢不正交,我们无法用传统的对角化程序求解本征方程(2.60)式。 于是,我们使用了一些数学技巧,通过(2.67)式求出原子核能级的能量*E*,并获 得一个过渡波函数 $V_{\sigma'}^{E}$ 。然后,根据(2.69)式求解出以投影基矢为表象的原子核 能级波函数 $F_{\kappa K}^{I}$ 。有了波函数 $F_{\kappa K}^{I}$ 便能计算一些实验上可观测的量,如本文中 将要计算的电四极跃迁几率B(E2)以及磁偶极跃迁几率B(M1)等。

接下来,我们简单介绍一下转动矩阵元的计算和Pfaffian算法的概念。 由本征方程(2.60)式可以看出来,求解该方程最主要的过程是投影矩阵元 (即(2.61)式)的计算,然后是较容易的(2.63)、(2.67)式的对角化计算。为了方 便,我们选择一个通用符号 \hat{O} 来代表哈密顿量算符($\hat{O} = \hat{H}$)以及norm 算符 ($\hat{O} = 1$)。在目前的PSM理论中,我们暂时不考虑粒子数投影。于是,利用角 动量投影算符的表达式(2.45),投影矩阵元(2.61)式可写成

$$\hat{O}^{I}_{\kappa K \kappa' K'} = \langle \Phi_{\kappa} | \hat{O} \hat{P}^{I}_{K K'} | \Phi_{\kappa'} \rangle
= \frac{2I+1}{8\pi^{2}} \int d\Omega D^{I*}_{K K'}(\Omega) \langle \Phi_{\kappa} | \hat{O} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{\kappa'} \rangle
= \frac{2I+1}{8\pi^{2}} \langle \Phi | \hat{R}(\Omega) | \Phi \rangle \int d\Omega D^{I*}_{K K'}(\Omega) \langle \Phi_{\kappa} | \hat{O} [\Omega] | \Phi_{\kappa'} \rangle$$
(2.71)

可以看出,求解上式的主要工作就是计算转动矩阵元 $\langle \Phi_{\kappa} | \hat{O}[\Omega] | \Phi_{\kappa'} \rangle$ 。为了方便 计算,式中引进了一个操作算符[Ω]

$$[\Omega] = \frac{\hat{R}(\Omega)}{\langle \Phi | \hat{R}(\Omega) | \Phi \rangle}$$
(2.72)

在PSM理论中,哈密顿量转动矩阵元可分解为norm转动矩阵元与一些被称为"linded"的收缩项之和 [14]。于是,计算norm转动矩阵元成为求解(2.60)式最关键的环节。为了方便,我们可以将norm转动矩阵元在粒子数表象中写出

$$\mathcal{N}_{\kappa\kappa'} = \langle \Phi | a_1 \cdots a_n [\Omega] a_{1'}^{\dagger} \cdots a_{n'}^{\dagger} | \Phi \rangle$$
(2.73)

利用广义Wick定理,我们推导出 $\mathcal{N}_{\kappa\kappa'}$ 可表示为下面的形式

$$\mathcal{N}_{\kappa\kappa'} = \sum_{k=m}^{n'/2} \sum_{P} (\pm) (B)^{k - \frac{n'-n}{2}} (C)^{n'-2k} (A)^k$$
(2.74)

上式的 $m \equiv \max\{0, \frac{(n-n')}{2}\}$ 。第二个求和号(对P的求和)表示n + n'个下角标构成的(n + n')/2个收缩的可能的排列组合式之和。(±)是对应的排列组合式的置换字称。若一个收缩项的两个下角标都出自[Ω]右边,则该收缩项是A。类

似,若两个下角标都出自[Ω]左边则是*B*。还有一种情况是两个角标出自[Ω]一左 一右,则是*C*。(*A*)^{*k*}表示*k*个*A*收缩项相乘,其他类似(*A*)^{*k*}的幂指数表示法含义 相同。下面,我们给出*n* + *n*' = 4的其中一个例子

 $\langle \Phi | a_1 a_2 a_3[\Omega] a_4^{\dagger} | \Phi \rangle = B_{12}(\Omega) C_{34}(\Omega) - B_{13}(\Omega) C_{24}(\Omega) + C_{14}(\Omega) B_{23}(\Omega)$ (2.75)

(2.74)式的收缩项A, B和C的定义为

$$A_{\nu\nu'}(\Omega) \equiv \langle \Phi | [\Omega] a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}^{\dagger} | \Phi \rangle$$

$$B_{\nu\nu'}(\Omega) \equiv \langle \Phi | a_{\nu} a_{\nu'}[\Omega] | \Phi \rangle$$

$$C_{\nu\nu'}(\Omega) \equiv \langle \Phi | a_{\nu}[\Omega] a_{\nu'}^{\dagger} | \Phi \rangle$$

(2.76)

(2.74)式为我们提供了一个norm转动矩阵元的计算公式,使得PSM计算 最关键的部分可以进行下去。然而,随着n + n'值的增大,(2.74)式的展开项 数也快速增加(即该式的展开项数为(n + n' - 1)!!项)。也就是说,(2.35)、 (2.36)、(2.37)式中基矢的准粒子数目越多,(2.74)式展开项数目也越多。例 如,若n = n' = 4,(2.74)式的展开项数为105项;若n = n' = 6,为10395项; 若n = n' = 8,为2027025项;若n = n' = 10,则达到654729075项等等。如此 巨大的展开项数目给我们的计算带来了很大的困难,以现有的计算设备进行计 算会消耗我们大量时间。特别是在用(2.74)式计算电磁跃迁几率时会消耗更多 时间。这也导致扩展前的PSM计算只包含不多于四个准粒子的基矢 [36]。

通过利用Fermi相干态以及Grassmann积分法,Mizusaki提出了一种计算 矩阵元 $\mathcal{N}_{\kappa\kappa'}$ 的优越算法。这种算法把矩阵元 $\mathcal{N}_{\kappa\kappa'}$ 表示为一个具有Pfaffian形式 的反对称分块矩阵 [27],于是我们把它叫作Pfaffian算法。这里用到的只是众 多Pfaffian算法的其中之一。norm转动矩阵元 $\mathcal{N}_{\kappa\kappa'}$ 利用Pfaffian算法可表示为 (详细讨论见 [27] 或附录A)

$$\mathcal{N}_{\kappa\kappa'} = \langle \Phi | a_1 \cdots a_n [\Omega] a_{1'}^{\dagger} \cdots a_{n'}^{\dagger} | \Phi \rangle = Pf(X) = Pf\begin{pmatrix} B & C \\ -C^T & A \end{pmatrix}$$
(2.77)

其中X表示 $(n+n') \times (n+n')$ 维分块矩阵,由四个小矩阵 $A, B, C, -C^T$ 组成。矩阵B与A皆为行数和列数相等的方阵,其中矩阵B为n阶方阵,矩阵A为n'阶方阵。矩阵<math>C则不一定是方阵,它的行数和矩阵B的行数n相等,列数和矩阵A的列数n'相等。用Pfaffian 算法计算矩阵更省时且易操作 [24],因此用(2.77)式计算 $\mathcal{N}_{\kappa\kappa'}$ 比(2.74)式的Wick定理更加优越高效。

反对称矩阵A的Pfaffian算法定义为

$$Pf(\mathcal{A}) \equiv \frac{1}{2^n n!} \sum_{\sigma \in S_{2n}} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{\sigma(2i-1)\sigma(2i)}$$
(2.78)

其中反对称矩阵A是以 a_{ij} 为矩阵元且维数为 $2n \times 2n$ 的方阵。 σ 代表整数集 合 $\{1, 2, 3, \dots, 2n\}$ 的一种排列组合。 $sgn(\sigma) = (-1)^{P(\sigma)}$, $P(\sigma)$ 表示整数集合从 最初的排列 $\{1, 2, 3, \dots, 2n\}$ 到相应的排列 $\{\sigma(1), \sigma(2), \dots, \sigma(2n)\}$ 的换位次数。 S_{2n} 是一个2n阶置换群。若矩阵A的维数是奇数,则Pf(A) = 0。若矩阵A为2阶 方阵,则 $Pf(A) = a_{12}$ 。若矩阵A为4阶方阵,则 $Pf(A) = a_{12}a_{34} - a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23}$ 。另外,一个矩阵的Pfaffian表示式和这个矩阵的行列式的关系为

$$Pf(X) = \sqrt{\det X} \tag{2.79}$$

2.4 电磁跃迁

电磁跃迁的测量和研究是核物理学中的重要工作。本文将要研究的电磁跃 迁有两种形式,一种是电四极跃迁(*E*2),另一种是磁偶极跃迁(*M*1)。它们的 约化跃迁几率计算需要用到PSM计算获得的波函数(2.59)式和(2.69)式。其约化 跃迁几率可由相应的约化矩阵元得到

$$B(E\lambda \text{ or } M\lambda; I \to I') = \frac{2I'+1}{2I+1} |\langle \Psi_{I'} \| \hat{T}_{\lambda} \| \Psi_{I} \rangle|^2$$
(2.80)

其中 *I*, *I*'分别是初态和末态的自旋值。*Î*表示跃迁算符。例如,一个电多极跃 迁算符的形式为 [37]

$$\hat{T}_{\lambda\nu} = \sum_{i} \mathrm{e}r_{i}^{\lambda} Y_{\lambda\nu}^{*}(\theta_{i}, \phi_{i})$$
(2.81)

接下来,我们给出(2.80)式的约化矩阵元较详细的推导步骤。推导过程中 将用到一些量子力学公式,包括不可约张量算符的变换规则

$$\hat{R}^{\dagger}(\Omega)\hat{T}_{\lambda\mu}\hat{R}(\Omega) = \sum_{\nu} D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)\hat{T}_{\lambda\nu} \quad \text{or} \quad \hat{R}^{\dagger}(\Omega)\hat{T}_{\lambda\mu} = \sum_{\nu} D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega)\hat{T}_{\lambda\nu}\hat{R}^{\dagger}(\Omega) \quad (2.82)$$

和D-函数的耦合规则

$$D_{M_1K_1}^{J_1}(\Omega)D_{M_2K_2}^{J_2}(\Omega) = \sum_{JMK} C_{J_1M_1J_2M_2}^{JM} C_{J_1K_1J_2K_2}^{JK} D_{MK}^J(\Omega)$$
(2.83)

还有D-函数的性质

$$D^{\lambda}_{\mu\nu}(\Omega) = (-)^{\mu-\nu} D^{\lambda*}_{-\mu-\nu}(\Omega)$$
 (2.84)

于是有

$$\hat{P}_{M'K'}^{I'\dagger} \hat{T}_{\lambda\mu} = \frac{2I'+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{M'K'}^{I'*} \hat{R}^{\dagger} \hat{T}_{\lambda\mu} = \sum_{\nu} \frac{2I'+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{M'K'}^{I'*} D_{\mu\nu}^{\lambda} \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{R}^{\dagger} = \sum_{\nu} (-)^{\mu-\nu} \frac{2I'+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{M'K'}^{I'*} D_{-\mu-\nu}^{\lambda*} \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{R}^{\dagger} = \sum_{IMK\nu} (-)^{\mu-\nu} C_{I'M'\lambda-\mu}^{IM} C_{I'K'\lambda-\nu}^{IK} \hat{T}_{\lambda\nu} \frac{2I'+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MK}^{I*} \hat{R}^{\dagger} = \sum_{IMK\nu} (-)^{\mu-\nu} C_{I'M'\lambda-\mu}^{IM} C_{I'K'\lambda-\nu}^{IK} \hat{T}_{\lambda\nu} \frac{2I'+1}{2I+1} \hat{P}_{MK}^{I\dagger}$$
(2.85)

根据C-G系数的对称属性

$$C_{I'M'\lambda-\mu}^{IM} = (-)^{\lambda-\mu} \sqrt{\frac{2I+1}{2I'+1}} C_{\lambda\mu IM}^{I'M'}$$
(2.86)

和投影算符的性质 $\hat{P}_{MK}^{I\dagger} = \hat{P}_{KM}^{I}$,我们有

$$\hat{P}_{M'K'}^{I'\dagger}\hat{T}_{\lambda\mu} = \hat{P}_{K'M'}^{I'}\hat{T}_{\lambda\mu}$$

$$= \sum_{IMK\nu} (-)^{\mu-\nu} C_{I'M'\lambda-\mu}^{IM} C_{I'K'\lambda-\nu}^{IK} \hat{T}_{\lambda\nu} \frac{2I'+1}{2I+1} \hat{P}_{MK}^{I\dagger}$$

$$= \sum_{IMK\nu} (-)^{\mu-\nu} (-)^{\lambda-\mu} \sqrt{\frac{2I+1}{2I'+1}} C_{\lambda\mu IM}^{I'M'} (-)^{\lambda-\nu} \sqrt{\frac{2I+1}{2I'+1}} C_{\lambda\nu IK}^{I'K'} \hat{T}_{\lambda\nu} \frac{2I'+1}{2I+1} \hat{P}_{MK}^{I\dagger}$$

$$= \sum_{IMK\nu} C_{\lambda\mu IM}^{I'M'} C_{\lambda\nu IK}^{I'K'} \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{P}_{KM}^{I}$$
(2.87)

由上式可得

$$\hat{P}_{K'M'}^{I'}\hat{T}_{\lambda\mu}\hat{P}_{MK}^{I} = \sum_{I''M''K''\nu} C_{\lambda\mu I''M''}^{I'M'} C_{\lambda\nu I''K''}^{I'K'} \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{P}_{K''M''}^{I''} \hat{P}_{MK}^{I}$$

$$= \sum_{I''M''K''\nu} C_{\lambda\mu I''M''}^{I'M'} C_{\lambda\nu I''K''}^{I'K'} \hat{T}_{\lambda\nu} \delta_{I''I} \delta_{M''M} \hat{P}_{K''K}^{I''}$$

$$= \sum_{\nu} C_{\lambda\mu IM}^{I'M'} C_{\lambda\nu IK'-\nu}^{I'K'} \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{P}_{K'-\nu K}^{I}$$

$$= \sum_{\nu} C_{IM\lambda\mu}^{I'M'} C_{IK'-\nu\lambda\nu}^{I'K'} \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{P}_{K'-\nu K}^{I}$$
(2.88)

-24-

上式的推导分别用到了(2.46)式和C-G系数的对称性

$$C^{c\gamma}_{a\alpha b\beta} = (-1)^{a+b-c} C^{c\gamma}_{b\beta a\alpha}$$
(2.89)

根据Wigner-Echart定理

$$\langle \Psi_{I'M'} | \hat{T}_{\lambda\mu} | \Psi_{IM} \rangle = C_{IM\lambda\mu}^{I'M'} \langle \Psi_{I'} | \hat{T}_{\lambda} | | \Psi_{I} \rangle$$
(2.90)

联合(2.59)式、(2.88)式有

$$\langle \Psi_{I'M'} | \hat{T}_{\lambda\mu} | \Psi_{IM} \rangle = \sum_{\kappa\kappa'} F_{\kappa'}^{I'} F_{\kappa}^{I} \langle \Phi_{\kappa'} | \hat{P}_{M'K'}^{I'\dagger} \hat{T}_{\lambda\mu} \hat{P}_{MK}^{I} | \Phi_{\kappa} \rangle$$

$$= \sum_{\nu\kappa\kappa'} C_{IM\lambda\mu}^{I'M'} C_{IK'-\nu\lambda\nu}^{I'K'} \langle \Phi_{\kappa'} | \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{P}_{K'-\nuK}^{I} | \Phi_{\kappa} \rangle F_{\kappa'}^{I'} F_{\kappa}^{I}$$

$$(2.91)$$

联合(2.90)式、(2.91)式有

$$\langle \Psi_{I'} \| \hat{T}_{\lambda} \| \Psi_{I} \rangle = \sum_{\nu \kappa \kappa'} C_{IK'-\nu\lambda\nu}^{I'K'} \langle \Phi_{\kappa'} | \hat{T}_{\lambda\nu} \hat{P}_{K'-\nu K}^{I} | \Phi_{\kappa} \rangle F_{\kappa'}^{I'} F_{\kappa}^{I}$$
(2.92)

需要特别指出的是,常用的约化跃迁几率单位有两种形式,一种是Weisskopf (W.u.)单位,另一种是 $e^{2b^{\lambda}}$ 、 $\mu_{N}^{2}b^{\lambda-1}$ 单位。两种单位可相互转换 [21]

$$B(E\lambda)_W = \frac{(1.2)^{2\lambda}}{4\pi} \left(\frac{3}{\lambda+3}\right)^2 A^{2\lambda/3},$$
 (2.93)

$$B(M\lambda)_W = \frac{\pi}{10} (1.2)^{2\lambda - 2} \left(\frac{3}{\lambda + 3}\right)^2 A^{(2\lambda - 2)/3}$$
(2.94)

第三章 Kr同位素中高自旋转动带的研究

3.1 引言

位于过渡区的缺中子Kr同位素具有不同的半衰期,例如,⁷²Kr的半衰期 只有几秒,⁷⁴Kr的半衰期有几分钟,⁷⁶Kr的半衰期有几小时,^{78,80}Kr却是稳定 核。这些Kr同位素展现出不同的核结构,因此常常被用来探究一些核物理现 象。例如, *N* = *Z* = 36的核⁷²Kr就是一个在低能区具有扁椭和长椭形状共存的 例子 [38–40]。⁷²Kr在高自旋还明显呈现出'延时顺排'的效应,这种现象是研 究中子质子对关联的重要工具。最近有研究表明,⁷²Kr的形状共存和形状跃迁 现象可以被用来研究原子核多体哈密顿量的张量力。^{74,76}Kr基态附近也发现有 形状共存 [41]。⁷⁸Kr是少数已知的可研究两中微子和无中微子双β衰变的原子 核 [42]。

由于具有丰富的核结构,Kr同位素链是理论模型的理想试验场。在过去的 几年,积累了许多高品质的Kr同位素高自旋数据。例如,Valiente-Dobón等人 用融合蒸发反应研究了⁷⁴Kr的高自旋结构 [43],并获得了一个自旋达到32 \hbar 的正 字称晕带和两个自旋达到35 \hbar 的负字称带。这些高自旋态能够研究具有极高角 动量的原子核的属性和快速转动下的形状变化,所以也能成为研究集体运动 和单粒子激发之间相互作用的例子。集体运动和单粒子激发之间的相互作用 是原子核结构物理领域非常重要的一个研究课题 [44,45]。然而,大多数以前 的理论工作主要讨论低自旋区的形状变化 [46–51],只有一个之前的工作通过 复杂的激发VAMPIR方法研究了更高的自旋态,⁷²Kr 达到 $I = 20\hbar$ 以及⁷⁴Kr达 到 $I = 28\hbar$ 。所以,这些Kr同位素的高自旋态的系统性研究是非常缺乏的。

投影壳模型(PSM) [14]的发展最初是为了描述形变核的高自旋结构 [15]。 模型空间包括角动量投影多准粒子组态,适合讨论快速转动下的形变核。早期 的PSM只包含很小的准粒子组态空间。例如,偶偶核达到四准粒子组态,奇质 量核达到三准粒子组态,奇奇核达到两准粒子组态 [14,36]。PSM计算最主要也 最消耗时间的部分是利用Wick定理计算多准粒子态转动矩阵元 [14],当模型包 含的准粒子组态超过四准粒子时,这种计算将遭遇极大的复杂性 [27]。为了描 述一些高自旋数据,我们最近极大地扩展了准粒子基矢,超过了四准粒子态, 并初步地应用到了重形变核的极高自旋态 [31,32]。利用扩大的准粒子组态空间 成功地描述了希土区核 [31]和质量大约为A ~ 130的核 [32],这极大地促动了我 们更进一步利用扩展的PSM系统性的研究中间质量核区A~80的属性。

3.2 沿着晕带的带图



图 3.1 理论计算的⁷²Kr,⁷⁴Kr,⁷⁶Kr,⁷⁸Kr, 和⁸⁰Kr 正宇称晕带带图

正如前面所述,本章主要研究内容是伴随对破缺和对须排的高速转动下的 形变体系的高自旋态。我们的理论方法出发点是采用多准粒子基构成的形变 基。对于本章研究的Kr同位素链,形状演化特性已有许多不同的实验和理论 工作研究过。现已知道,这些核的基态和低自旋态处于扁椭与长椭形状共存的 状态。为了描述形状共存态,需要应用生成坐标方法,在此方法中,波函数由 一系列形变的准粒子真空态叠加而成。然而,生成坐标方法十分复杂,据我们 了解还没有人公开做过这方面的计算。目前,正有人常试这方面的计算 [52]。 在PSM中,为了让问题简化,我们在固定形变的情况下构建基矢。这种处理方 法的代价是不能精确描述处于形状共存状态下的低自旋态。 然而,尽管本章研究的同位素链具有复杂的基态结构,有实验和理论指出,当体系开始转动,具有长椭形变的转动带很快就能成型。实验上已经观察到⁷²Kr的较大的E2跃迁几率 [40], $B(E2;4_1^+ \rightarrow 2_1^+)$,等于文献 [39]中给出的 $B(E2;2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$ 的3.4倍。这表明⁷²Kr的0₁⁺态与晕带的2₁⁺和4₁⁺态不属于同一形状,这提供了一个基态附近形状跃迁的例子。这个测量到的较大的E2跃迁几率 [40], $B(E2;4_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ 标记为晕带的带内跃迁。最近,Kaneko等人 [53]用球型壳模型计算分析了⁷²Kr 的低能级态,指出⁷²Kr基态的确是扁椭和长椭的形状共存态。长椭形状在 $I = 2\hbar$ 时就占据主要形态。沿着晕带,当 $I \ge 4\hbar$,体系就具有明确的长椭形状。所以,我们假设体系具有固定的长椭形变,进而构建PSM基矢去研究低能级态是合理的。

表 3.1 本章采用的形变基矢的四极和十六极形变参数

	$^{72}\mathrm{Kr}$	$^{74}\mathrm{Kr}$	$^{76}\mathrm{Kr}$	$^{78}\mathrm{Kr}$	$^{80}\mathrm{Kr}$
ε_2	0.346	0.352	0.350	0.340	0.250
ε_4	0.020	0.016	-0.016	-0.020	0.0

在本章的计算过程中,我们选取中子和质子的三个谐振子主壳,N = 2,3,4,然后进行Nilsson-BCS计算,进而构成形变准粒子基矢。PSM采用的哈密顿量中的单极对力强度为 $G_M = [G_1 \mp G_2(N - Z)/A]/A$,其中"+"("-")对应质子(中子),耦合常数 $G_1 = 20.25$, $G_2 = 16.20$ [54],四极对力强度 $G_Q = 0.2G_M$,这个关系式适用于本章所研究的所有原子核。我们假设体系具有轴对称长椭形变。四极和十六极形变参数取自文献[55-57]。为使每个同位素产生适当的基矢,我们对形变参数做了一些细微调整并列于表 3.1。我们注意到这些简化的基矢并不是低能态最理想的。然而,正如我们将要阐述的,在高自旋态转动和准粒子激发取代形状共存成为主要的运动模式,这些基矢非常适合高自旋态。在早期有人用PSM对这个质量区的核做过计算,但他们用更小的准粒子空间,同样假设体系具有轴对称长椭形变[54,58-60]。

两体哈密顿量在经过角动量投影的多准粒子组态形成的壳模型基中对角化。这些多准粒子组态由费米面附近的形变Nilsson单粒子态构建。在大多数情况下,一个实验上可观测的态的波函数的主要成分是能量最低的那个准粒子组态,并且这个准粒子组态的能量大致相当于可观测的态的能量。

带(以κ为标记)能量作为自旋I的表达式为

$$E_{\kappa}(I) = \frac{\langle \Phi_{\kappa} | \hat{H} \hat{P}_{KK}^{I} | \Phi_{\kappa} \rangle}{\langle \Phi_{\kappa} | \hat{P}_{KK}^{I} | \Phi_{\kappa} \rangle}$$
(3.1)

上式表示不同的带在体系转动时带能量随自旋的变化,我们把它称为带图 [36]。 对应每个自旋值都有一个能量最低的带以及实验上可观测的晕态,这个带的组 态结构就是该晕态波函数的主要成份。图 3.1显示了本章讨论的Kr同位素链角 动量投影的准粒子组态能量,即带图。

从图 3.1中我们可以看到,除了⁸⁰Kr,基带(准粒子真空带)与K = 1+的 质子两准粒子带大约在自旋 $I = 10 - 12\hbar$ 处交叉,之后趋于平行。图 3.1 (b) ⁷⁴Kr带图中,一个K = 1+的中子两准粒子带大约在自旋 $I = 12\hbar$ 处与基带和质 子两准粒子带交叉。随着自旋增加,越来越多更高阶准粒子组态在晕带能级结 构中扮演着主要角色。需要指出的是,对角化之后的高自旋能级波函数是许多 投影的多准粒子组态的混合。表 3.2- 3.6给出了各个核晕带的主要组态。

然而,对于⁸⁰Kr,中子两准粒子带在*I* = 6ħ处就与基带交叉,然后在*I* = 8ħ处同时与质子两准粒子带交叉。自旋*I* = 14ħ之后,更高准粒子组态在晕带的结构中占据主要位置。从图 3.1(e)中我们可以看到,当自旋*I* > 30ħ,八准粒子带能量最接近晕带,于是八准粒子组态在晕带的结构中起到最重要的作用。相比其他更轻的Kr 同位素,⁸⁰Kr的第一次带交叉发生在自旋更低的位置。这可能是因为⁸⁰Kr比其他同位素有更小的形变,这导致费米面附近的形变单粒子轨道与其他同位素有所不同。

我们从图 3.1可以了解到晕带的组态结构。各同位素的转动带的主要组态分别列于表 3.2-3.6。从这些表中我们看到,两准粒子和四准粒子都是由来自*g*_{9/2}轨道的准粒子构成。这是一个闯入轨道,在所有单粒子态中拥有最高的*j*值。我们知道,作用在核子对上的科里奥利力能拆散核子对并破坏原子核的超流性。核子对被拆散会导致原子核的转动惯量在某一自旋值附近突然增大。在费米面附近的核子占据着具有不同*j*值的子壳,因此它们感受到的科里奥利力也大不相同。于是转动的原子核具有一系列临界转动频率,而不是一个。位于最高*j*值轨道的核子对感受到最强的科里奥利力,并且在最低的临界频率ω_c处第一个被拆对 [61]。首先被拆对的核子形成了一个两准粒子态。这个两准粒子态构成了晕带的主要组态,并导致实验上观察到的转动惯量回弯现象 [62]。

带交叉的物理含义可以通过带图清楚地说明。我们已经知道,来自高*j*闯入轨道的准粒子带首先与其他准粒子带交叉,之后成为晕带组态的主要构成部分。源自*g*_{9/2}轨道的准粒子构成的六准粒子和八准粒子态必然位于较高的能级,因为根据泡利不相容原理,当有许多核子占据相同*j*轨道时会互相排斥。从图 3.1可以看到,在低自旋区六准粒子和八准粒子之间有很大的间隙。在实际的 计算中,间隙中有许多八准粒子带,只是我们没有显示出来。然而,没有显示出来的八准粒子带与其他更低阶准粒子带趋于平行而不相交。只有源自g_{9/2}轨道的准粒子形成的八准粒子带(尽管带头能量很高)才能在高自旋区与更低阶准粒子带交叉,并且成为晕带结构的重要组成部分。这可以从图 3.1(e)关于⁸⁰Kr的带图中清楚地看到。

3.3 晕带的转动惯量

一条转动带的态结构变化可以通过更敏感的转动惯量演化来分析。转动 惯量定义为 $\mathcal{J}(I) = (2I-1)/E_{\gamma}(I)$,其中 $E_{\gamma}(I) = E(I) - E(I-2)$ 是跃迁能量。 通过研究晕带的转动惯量变化可以更好的了解体系的转动特性。图 3.2是我们 计算的⁷²⁻⁸⁰Kr晕带转动惯量和实验值的比较。从图中我们看到,用PSM计算 的转动惯量值很好的重复了实验值。图中曲线显示在低自旋区转动惯量有一 个快速的上升,在中间自旋区达到极大值。在高自旋区,^{72,74,76}Kr的转动惯量 朝着减小的趋势变化,而^{78,80}Kr的转动惯量基本保持常数。较轻的三个同位 素^{72,74,76}Kr的转动惯量在自旋 $I \approx 18 - 20\hbar$ 处达到极大值,而较重的两个同位 素^{78,80}Kr 在自旋 $I \approx 12 - 14\hbar$ 处达到极大值。



图 3.2 计算的Kr同位素晕带转动惯量和实验数据的比较

 72 Kr的转动惯量在自旋 $I = 18\hbar$ 处有一个明显的峰值,但我们计算获得的峰值有一个偏差,在自旋 $I = 16\hbar$ 处。来自 $g_{9/2}$ 闯入轨道的中子对和质子对因自旋增加而同时发生顺排,这导致了转动惯量的快速增加而形成一个峰

值。从图3.1(a)中我们可以看到,有几条四准粒子带与基带和两准粒子带交 叉,这造成了晕带波函数结构的突然改变。以前有人用PSM对较轻的*N* = *Z*原 子核⁴⁸Cr [63] 和³⁶Ar [64]进行过研究。结果显示,这些自共轭原子核在转动 时,沿着晕带容易发生四核子(由两中子和两质子构成)激发现象 [65]。在偶 偶*N* = *Z* 的原子核中,α粒子具有很高的结合能,这很可能是发生四核子激发 现象的主要原因 [65]。

然而,在最低的自旋态,我们的计算结果普遍不理想。计算的自旋*I* = 2ħ的转动惯量和能量与实验数据有明显的差别。除了⁸⁰Kr,计算的较轻的四个同位素的转动惯量(*I* = 2ħ)比实验值大的太多。这些偏差是因为我们假设了一个固定形变的原子核体系。然而,正如我们前面提到过的,这些核在基态附近是处于形状共存的状态。

在高自旋区,计算的转动惯量有一个上升的趋势。⁷²Kr的转动惯量实验数 据在自旋(*I* = 28ħ)处有一个峰值。我们通过PSM计算发现,这个峰值是由六 准粒子和八准粒子组态带来的。由图 3.2(a) 可见,当我们只考虑到四准粒子组 态,计算的结果没有出现第二个峰值。于是我们得出结论,在极高自旋区,为 了描述这些核的结构细节,在PSM的计算中扩大组态空间是必要的 [31,32]。

3.4 计算的能级和组态结构以及边带转动惯量

通过在投影的基矢中对角化哈密顿量,我们能够得到某个自旋的所有正宇称和负宇称能级。图 3.3 - 3.11 是我们用PSM计算获得的所有Kr同位素的能级以及和实验值的比较。表 3.2-3.6 列出的是每个同位素的主要组态。

3.4.1 $^{72}{
m Kr}$

Band	Type	K^{π}	Configuration
yrast	2-qp	1^{+}	$\pi 1/2^+[440]\otimes \pi 3/2^+[431]$
yrast	2-qp	1^{+}	$ u 1/2^+[440] \otimes u 3/2^+[431] $
yrast	4-qp	$0^+,2^+$	$\nu 1/2^+[440]3/2^+[431] \otimes \pi 1/2^+[440]3/2^+[431]$
yrast	4-qp	1^{+}	$\nu 3/2^{+}[431]3/2^{+}[431] \otimes \pi 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]$
yrast	6-qp	4^{+}	$\nu 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]3/2^{+}[431]3/2^{-}[312] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{-}[312]$
yrast	6-qp	1^{+}	$\nu 3/2^{+}[431]3/2^{+}[431] \otimes \pi 3/2^{-}[312]3/2^{-}[312]3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]$
yrast	8-qp	1^{+}	$\nu 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]5/2^{+}[422] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]3/2^{+}[431]1/2^{+}[431]3/2^{+}[4$
side 1, 2	2-qp	3^{-}	$ u 3/2^{-}[312] \otimes u 3/2^{+}[431] $

表 3.2⁷²Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态

⁷²Kr同位素的激发能为671 keV的0⁺态被观察到是一个形状同核异能态 [38],并被认为是一个具有长椭形变的转动带带头。实验上观测到这个转动



图 3.3 计算的⁷²Kr 转动带能谱和实验数据的比较



图 3.4 计算的⁷²Kr的3⁻带、4⁻带的转动惯量与实验数据的比较

带的自旋达到30 \hbar [66]。从图3.3可以看到,用PSM计算的晕带能级较好的重 复了实验数据 [67]。但是,计算的晕带高自旋态能量没有很好的重复实验 值。图3.2(a)显示计算的晕带转动惯量变化与实验值符合的很好。表 3.2给出 了⁷²Kr晕带和边带的主要组态。表中列出的晕带组态正是带图3.1中显示的准 粒子带组态。从表 3.2可以看出,大部分K态来自 $g_{9/2}$ 轨道。我们发现,中子 和质子两准粒子组态都是由来自 $g_{9/2}$ 轨道的 $K = 1/2\pi K = 3/2$ 两个态耦合而 成。两准中子组态 ($\nu 1/2^{+}$ [440] $\otimes \nu 3/2^{+}$ [431])和两准质子组态 ($\pi 1/2^{+}$ [440] $\otimes \pi 3/2^{+}$ [431])首先与基带交叉,并且在自旋区间 $I = 10 - 14\hbar$ 成为晕态的主要组 态。表 3.2列出的几个四准粒子组态在自旋区间*I* = 16 - 26ħ成为晕态的主要组态。在最高的自旋区间*I* ≥ 28ħ,一些六准粒子和八准粒子组态的转动能量非常接近晕态并成为晕态的主要组态。最有代表性的一些六准粒子和八准粒子组态列于表 3.2。从图 3.1(a)我们看到,这些六准粒子和八准粒子组态与更低阶的 准粒子组态温和地交叉。六准粒子和八准粒子组态对计算结果的影响在前面研 究晕带转动惯量时已经讨论过了。

Kelsall 等人曾观察到⁷²Kr同位素的一条带头组态为K = 3,能量为1.849 MeV的负字称转动带 [68]。实验测得这条转动带的最高自旋达到 $I = 17\hbar$ 。除了 正字称的晕带,图3.3还给出了两条负字称的边带。我们将自旋值为奇数的边带 计算结果与实验值进行了对比。从图3.3可以看到,除了自旋和字称为3⁻的带 头能量,我们的计算结果和实验值对比还算合理。从图3.4 可以看出,负字称 带的转动惯量计算结果在带头附近与实验值偏差很大。我们认为出现这个问题 的原因和正字称晕带在基态附近出现问题的原因是相同的,即我们假设体系具 有固定形变。通过PSM计算,我们认为这个 $K = 3^-$ 的转动带在低自旋区占据 主要地位的组态为中子两准粒子组态 $\nu3/2^-$ [312] $\otimes \nu3/2^+$ [431]。当然,随着自 旋增大,这个中子两准粒子组态会被更高阶的准粒子组态(表 3.2 未列出)交 叉。和正字称的晕带类似,3⁻带在高自旋部分的组态结构也是由许多多准粒子 组态叠加而成的。正如图3.3和图. 3.4(b)所显示的,自旋值为偶数的负字称边 带能量没有实验数据,图中给出的是我们计算预言的结果。

3.4.2 ⁷⁴Kr

Band	Type	K^{π}	Configuration
yrast	2-qp	1^{+}	$ u 3/2^+[431] \otimes u 5/2^+[422] $
yrast	2-qp	1^{+}	$\pi 1/2^+[440]\otimes \pi 3/2^+[431]$
yrast	4-qp	$0^+,2^+$	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]$
yrast	4-qp	$0^+,2^+$	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422] \otimes \pi 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]$
yrast	4-qp	1^{+}	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422] \otimes \pi 3/2^{+}[431]3/2^{+}[431]$
yrast	6-qp	1^{+}	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422] \otimes \pi 3/2^{-}[312]3/2^{-}[312]3/2^{+}[431]3/2^{+}[431]$
yrast	8-qp	2^+	$\nu 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]5/2^{+}[422] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]5/2^{+}[4$
side 1, 2	2-qp	3^{-}	$\pi 3/2^{-}[312]\otimes \pi 3/2^{+}[431]$
side 3, 4	$2\text{-}\mathrm{qp}$	3^{-}	$ u 3/2^{-}[312] \otimes u 3/2^{+}[431] $

表 3.3⁷⁴Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态

离开N = Z线, Kr同位素链第一个N > Z的原子核,⁷⁴Kr拥有丰富的高自 旋实验数据。这个核可以成为我们模型计算的理想试验场。通过库仑激发研究 发现,⁷⁴Kr基带的低能级态呈现长椭的形状 [41,69]。Valiente-Dobón等人用聚 变蒸发反应研究过⁷⁴Kr的高自旋态,获得最高自旋值达到32ħ的晕带 [43]。图



图 3.5 计算的⁷⁴Kr 转动带能谱和实验数据的比较



图 3.6 计算的⁷⁴Kr 的第一个4⁻ 带、第一个5⁻ 带、第二个5⁻ 带和第二个4⁻ 带的转动惯量 与实验数据的比较

3.5 是计算的转动带能级,实验数据取自文献 [67,70]。和实验观测值对比,我 们计算的晕带是一个很好的结果。表 3.3列出了正宇称晕带的主要多准粒子组态。

除了晕带,实验上还获得了几条负字称的边带能级 [67]。图 3.5显示了理 论计算得到的'side band 1'和'side band 2'分别与文献 [43]中的实验数据'Band B'和'Band A'的对比。通过对比,我们认为文献 [43]中的奇自旋值转动带'Band A' 带头的主要组态为质子两准粒子组态 $\pi 3/2^{-}[312] \otimes \pi 3/2^{+}[431]$,同时,文 献 [43]中的偶自旋值转动带'Band B' 带头的主要组态与'Band A'相同。实验测 得另一个奇自旋负字称带'side band 3'的最高自旋为23⁻,文献 [71]的作者认为 这个转动带带头的组态为质子两准粒子组态 $\pi 1/2^{-}[310] \otimes \pi 3/2^{+}[431]$ 。然而,通 过我们的计算发现,我们建议的带头组态 $\nu 3/2^{-}[312] \otimes \nu 3/2^{+}[431]$ 比文献 [71]给 出的带头组态更合理。这一点从我们下面将要讨论的转动惯量变化也能证明。 最后,我们还预言了带头组态为 $\nu 3/2^{-}[312] \otimes \nu 3/2^{+}[431]$ 的偶自旋转动带'side band 4'。表 3.3列出了⁷⁴Kr负字称带带头的组态。

如图<mark>3.2</mark>(b)所示,除了第一个数据点I = 2ħ,我们计算的⁷⁴Kr正宇称晕 带转动惯量与实验数据符合的很好。转动惯量在中间自旋区 $I \approx 14 - 20\hbar$ 的 增大是因为几个两准粒子组态和四准粒子组态连续的交叉而导致的,正如 图3.1(b)所示。图3.6 是74Kr负宇称带理论计算的转动惯量和实验数据的对 比 [70, 71]。从图中我们看到, 图3.6(a)中计算的转动惯量 'Side 1 theo' 和 图3.6(b)中计算的转动惯量 'Side 2 theo' 很好的符合了实验数据。然而,在 带头附近的计算结果仍然不理想,出现问题的症结应该还是归于我们假设体 系具有固定形变这个事实。图3.6(c)是计算的第二个5⁻带转动惯量和实验值的 比较。我们计算了两个组态的转动惯量。一个是我们建议的中子两准粒子组 态ν3/2^{-[312]} ⊗ ν3/2^{+[431]},图3.6(c)中的'theo 1'。另一个是文献 [71]提出的质 子两准粒子组态π1/2⁻[310] ⊗ π3/2⁺[431],图3.6(c)中的'theo 2'。从图中我们能 清楚地看到,基于两种组态计算的转动惯量在低自旋区的变化趋势相反。很 明显, 'theo 1' 的转动惯量变化与实验数据符合的更好。这进一步证明 'Side band 3'的带头组态是中子两准粒子组态ν3/2-[312]⊗ν3/2+[431]。图3.6(d)是用 与 'Side band 3' 相同的两个组态计算的 'Side band 4' 的转动惯量。图3.6(c)显 示我们基于中子两准粒子组态计算的奇自旋带转动惯量在自旋I = 17h处有一 个峰值。图3.6(d)显示'theo 1'的计算值在自旋 $I = 16\hbar$ 有一个峰值。我们还预 言了更高自旋的转动惯量有一个下降的趋势。对于⁷⁴Kr,高自旋的转动惯量有 一个下降的趋势似乎是一个普遍的特性(见图3.2(b)和Fig. 3.6)。

3.4.3 76 Kr



图 3.7 计算的⁷⁶Kr 转动带能谱和实验数据的比较

表 3.4⁷⁶Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态

Band	Type	K^{π}	Configuration
yrast	2-qp	1^{+}	$\pi 1/2^+[440]\otimes \pi 3/2^+[431]$
yrast	4-qp	1^+	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422] \otimes \pi 3/2^{+}[431]3/2^{+}[431]$
yrast	6-qp	1^+	$\nu 3/2^{-}[301]3/2^{-}[301]3/2^{+}[431]5/2^{+}[422] \otimes \pi 3/2^{+}[431]3/2^{+}[431]$
yrast	8-qp	3^{+}	$\nu 3/2^+[431]5/2^+[422]1/2^+[431]1/2^+[431] \otimes \pi 1/2^+[440]3/2^+[431]5/2^+[422]1/2^+[431]5/2^+[422]1/2^+[431]3/2^+[431]5/2^+[4$
side 1, 2	2-qp	2^{-}	$ u 3/2^{-}[301] \otimes u 1/2^{+}[431] $
side 3, 4	2-qp	4^{-}	$ u 3/2^{-}[301]\otimes u 5/2^{+}[422]$

对于N = Z + 4的同位素⁷⁶Kr,实验 [69,72]和理论计算 [73]都认为这个核的 基态为长椭形状。⁷⁶Kr也有丰富的转动带实验数据。我们用轴对称长椭形变的 基矢对这个核进行PSM计算是合理的。从图3.7看到,我们的计算从低自旋到 高自旋态能级都与实验符合的很好 [67]。研究结果说明⁷⁶Kr从基态到高激发态 都具有长椭形状,这也与实验观察到的结果一致 [69,72]。

⁷⁶Kr的正宇称晕带从实验上观测到最高自旋*I* = 30*h*。从图 3.7和3.2(c)中看 到,我们用PSM计算的晕带很好的重复了实验观测数据。和前面讨论过的更轻 的同位素类似,通过包含更高阶的六准粒子和八准粒子组态,我们对⁷⁶Kr高自 旋态的计算结果也很理想。表 3.4 列出了⁷⁶Kr晕带和边带带头的主要组态。

实验上观察到⁷⁶Kr有一条最低的 $K^{\pi} = 2^{-}$ 的负宇称带 [72]。这条转动带分为偶自旋和奇自旋分支。我们基于组态 $\nu 3/2^{-}$ [301] $\otimes \nu 1/2^{+}$ [431]计算的 $K^{\pi} =$



图 3.8 计算的⁷⁶Kr 的2⁻ 带、3⁻ 带、4⁻ 带和5⁻带的转动惯量与实验数据的比较

2⁻偶自旋和奇自旋带呈现于图3.7的'Side band 1'和'Side band 2'。如图所示, 我们计算的包含高自旋态的结果与实验观测值相比符合的很好。有意思的是, $K^{\pi} = 2^{-}$ 偶自旋分支转动带在自旋高于26ħ的态比正宇称的晕带能量还低,于 是成为晕态。这个特性在实验上被观测到,并也被我们的计算重现证实,见 图3.7。

除了上面提到的负宇称带,Valiente-Dobón等人还给出了另一个负宇称 带(文献 [72] 图3 Band E)。其中偶自旋和奇自旋分支的最高自旋分别达 到28ħ和27ħ。偶自旋分支的带头自旋为 $I^{\pi} = 4^{-}$,能量为2.743 MeV。奇自旋分 支的带头自旋为 $I^{\pi} = 5^{-}$,能量为2.946 MeV。通过我们的计算得出这个带的带 头主要组态为 $K^{\pi} = 4^{-}$ 的中子两准粒子组态 $\nu 3/2^{-}$ [301] $\otimes \nu 5/2^{+}$ [422]。尽管我们 算出的带头能量比实验值大约高出200 keV,但总的来说,我们的计算结果与 实验观测值对比还算合理。如图3.7所示。

图3.8给出了⁷⁶Kr负宇称带的转动惯量。我们的计算结果只是定性的与实验 值符合。我们计算获得的转动惯量有许多不规则的变化,这与实验观测值有较 大差别。这些变化有可能是不同的带与带之间发生不正确的相互作用导致的。 然而,计算的高自旋态转动惯量与实验值符合的比较好。

3.4.4 ⁷⁸Kr



图 3.9 计算的⁷⁸Kr 转动带能谱和实验数据的比较

表 3.5 ⁷⁸Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态

Band	Type	K^{π}	Configuration
yrast	2-qp	1^{+}	$\pi 1/2^+[440]\otimes \pi 3/2^+[431]$
yrast	4-qp	1^+	$\nu 5/2^{+}[422]5/2^{+}[422] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]$
yrast	4-qp	1^+	$\nu 5/2^{+}[422]5/2^{+}[422] \otimes \pi 5/2^{+}[422]3/2^{+}[431]$
yrast	6-qp	1^+	$\nu 5/2^{+}[422]5/2^{+}[422]1/2^{+}[440]7/2^{+}[413] \otimes \pi 3/2^{+}[431]3/2^{+}[431]$
yrast	8-qp	3^+	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[440]1/2^{+}[440] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[422]1/2^{+}[431]5/2^{+}[4$
side 1, 2	2-qp	3^{-}	$\nu 5/2^{-}[303] \otimes \nu 1/2^{+}[431]$
side 3, 4	2-qp	4^{-}	$\pi 3/2^{-}[312] \otimes \pi 5/2^{+}[422]$
side 5	$2\text{-}\mathrm{qp}$	4^{-}	$ u 3/2^{-}[301] \otimes u 5/2^{+}[422] $

⁷⁸Kr是少数可以研究两中微子和无中微子双 β 衰变的核 [42]。最近几年,人 们又开始热衷于研究双正电子衰变($\beta^+\beta^+$)、正电子发射电子俘获($EC\beta^+$) 和双电子俘获(ECEC) [74]。事实上,⁷⁸Kr 是六个能同时经历正电子双 β 跃迁 的三个可能衰变通道($\beta^+\beta^+$, $EC\beta^+$ 和ECEC)的原子核之一。于是,⁷⁸Kr是 一个令人十分感兴趣的同位素,并且它的微观结构信息对于这些研究应该也很 重要 [75]。⁷⁸Kr的结构从实验和理论上的研究已经成为一个重要课题 [76,77]。

图 3.9是计算的⁷⁸Kr能级和实验观测值的比较 [67,78]。从图中可看到,包 括正宇称晕带和几条负宇称激发带的计算结果与实验数据都符合的很好。我们 注意到,⁷⁸Kr的计算结果是我们研究的几个同位素中转动能谱和带头能量与实



图 3.10 计算的⁷⁸Kr 的3⁻ 带、第一个4⁻ 带、第二个4⁻ 带、第一个5⁻ 带和第二个5⁻ 带的 转动惯量与实验数据的比较

验符合的最好的。然而,后面我们将看到,计算的电四极跃迁几率B(E2)和实验观察值符合的不理想。

与上述更轻的同位素类似,随着自旋增大,⁷⁸Kr正宇称晕态的主要组态 两准粒子、四准粒子、六准粒子、八准粒子组态依次交叉(如图3.1(d))。和 其他的同位素不同,⁷⁸Kr晕带组态的带交叉比较温和。晕带转动惯量没有明 显的峰值,在低自旋态有相对光滑的上升趋势,到了较高自旋态上升速度变 的更小。在自旋*I* = 12*h* 和22*h*处晕带转动惯量出现小凸起,这是带交叉导致 的。⁷⁸Kr正宇称晕带转动惯量演化的实验数据被我们的计算很好的重复了出 来,(如图3.2(d))。

实验上也观测到⁷⁸Kr的几条负字称边带能谱。如图3.9 所示,我们的计算结 果与实验对比很理想,甚至连计算的边带转动惯量也很令人满意(如图3.10)。 于是我们认为,图3.9 中的'side band 1'和'side band 2'的带头组态为中子两准 粒子组态 ν 5/2⁻[303] $\otimes \nu$ 1/2⁺[431], $K^{\pi} = 3^{-}$ 。'side band 3'和'side band 4'的 带头组态为质子两准粒子组态 π 3/2⁻[312] $\otimes \pi$ 5/2⁺[422], $K^{\pi} = 4^{-}$ 。'side band 5'的带头组态为中子两准粒子组态 ν 3/2⁻[301] $\otimes \nu$ 5/2⁺[422], $K^{\pi} = 4^{-}$ 。

3.4.5 ⁸⁰Kr

N = 44原子核⁸⁰Kr高自旋态的实验观测数据相对较少。实验观测到晕带最高自旋只有20ħ。有人从实验上研究过这些高自旋态 [79],但无人在这些工作



图 3.11 计算的⁷²Kr 转动带能谱和实验数据的比较



图 3.12 计算的⁸⁰Kr 的3⁻ 带、4⁻ 带、6⁻ 带和7⁻ 带的转动惯量与实验数据的比较

Band	Type	K^{π}	Configuration
yrast	2-qp	1^{+}	$\nu 5/2^+[422]\otimes \nu 7/2^+[413]$
yrast	2-qp	1^{+}	$\pi 1/2^+[440]\otimes \pi 3/2^+[431]$
yrast	4-qp	$0^+, 2^+$	$\nu 5/2^{+}[422]7/2^{+}[413] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]$
yrast	4-qp	1^{+}	$\nu 5/2^{+}[422]5/2^{+}[422] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]$
yrast	6-qp	4^{+}	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]5/2^{-}[303]1/2^{-}[301] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]$
yrast	8-qp	1^{+}	$\nu 3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]7/2^{+}[413]1/2^{+}[431] \otimes \pi 1/2^{+}[440]3/2^{+}[431]5/2^{+}[422]5/2^{+}[4$
side 1, 2	2-qp	3^{-}	$\nu 1/2^{-}[301] \otimes \nu 5/2^{+}[422]$
side 3, 4	$2\text{-}\mathrm{qp}$	6^{-}	$ u 5/2^{-}[303] \otimes \nu 7/2^{+}[413] $

表 3.6⁸⁰Kr 晕带在不同自旋区间的主要组态和边带带头组态

的基础上进行扩展研究。从图3.2(e)和图3.11可以看出,我们基于具有固定形变 的壳模型基矢的理论计算是很合理的,计算结果与实验符合的非常好。对于正 宇称晕带转动惯量,图3.2(e)给出了我们的两种计算结果。一种计算只考虑零 准粒子、两准粒子和四准粒子组态,另一种则加入了六准粒子和八准粒子组 态。我们看到两种计算结果在我们预言的高自旋态有一些差别。这些预言的正 确性需要将来的实验证实。

尽管只有少量的 γ 射线跃迁,实验上仍然观察到了四条⁸⁰Kr的负字称边带 能谱。图3.11显示我们的计算很好的符合了实验数据 [67,80]。通过计算我们 认为,带头为3⁻和4⁻的负字称转动带(对应图3.11 中的'side band 1'和'side band 2')组态为中子两准粒子组态 $\nu 1/2^{-}[301] \otimes \nu 5/2^{+}[422]$, $K^{\pi} = 3^{-}$ 。带头 为6⁻和7⁻的负字称转动带(对应图3.11中的'side band 3'和'side band 4')组态 为中子两准粒子组态 $\nu 5/2^{-}[303] \otimes \nu 7/2^{+}[413]$, $K^{\pi} = 6^{-}$ 。这些组态列于表3.6。

图3.12显示的是计算的负字称带转动惯量与实验值的对比。我们预言两条偶自旋带转动惯量在自旋I = 14有一个峰值,两条奇自旋带转动惯量在自旋I = 15有一个峰值.从图3.12(a)可以看出,实验观测到的3⁻带转动惯量在自旋I = 15有一个峰值,只是相比计算值更加平缓。总的来说,除了图3.12(a)'side band 1'和图3.12(b)中自旋I = 6的值,我们的计算结果在低自旋区与实验符合的比较好。

3.5 电磁跃迁B(E2) 的变化

当原子核转动时,电四极跃迁几率*B*(*E*2)携带着非常重要的与形变有关的 微观结构信息。然而,这个物理量通常是描述体系集体属性的,对波函数的结构变化十分敏感,特别对带交叉很敏感。从初态*ψ*_L到末态*ψ*_L的*B*(*E*2)表示为

$$B(E2, I_i \to I_f) = \frac{e_{eff}^2}{2I_i + 1} |\langle \Psi_{I_f} || \hat{Q}_2 || \Psi_{I_i} \rangle|^2$$
(3.2)

-42-



图 3.13 计算的Kr 同位素B(E2) (单位为W.u.) 值和实验数据的比较。(a) ⁷²Kr 晕带B(E2), (b) ⁷⁴Kr 晕带B(E2), (c) ⁷⁴Kr 第一个5⁻ 带B(E2), (d) ⁷⁶Kr 晕带B(E2), (e) ⁷⁸Kr 晕 带B(E2), 和(f)⁸⁰Kr 晕带B(E2)

上式的初态和末态由在投影基矢中对角化两体哈密顿量给出。计算中我们 用到的质子有效电荷为1.5e,中子有效电荷为0.5e,这是PSM计算中通用的标 准值 [14]。

实验观测到⁷²⁻⁸⁰Kr同位素在高自旋态的*B*(*E*2)总体上呈现下降的趋势 [81]。 图 3.13是我们计算的*B*(*E*2)值。从图中我们看到,理论计算的电四极跃迁几率 正确地重复了实验观测值的总体趋势 [40,70,78,81,82]。实验观测到*B*(*E*2)在 中间自旋区域有突然的下降和高自旋区有较小的值,这些特性被我们的计 算结果定性地展现出来。由带交叉带来的初态和末态之间波函数结构的改 变是*B*(*E*2)突然下降的原因。以⁷⁴Kr为例,如图3.13(b)所示,晕带*B*(*E*2)在自 旋*I* = 12 - 14*h*突然下降,同时基带和两准粒子带在自旋*I* = 12 - 14*h*第一次 交叉(见3.1(b))。图 3.13(c)是理论计算的⁷⁴Kr第一个5⁻带的*B*(*E*2)。我们计算 的这个负宇称边带*B*(*E*2)值没有预言到突然的下降,但与现有实验数据的变 化趋势符合的很好。这个5⁻带的*B*(*E*2)实验数据直到自旋*I* = 17*h*也没有显示 下降的信号。然而,我们注意到,一些理论计算的*B*(*E*2)只是在定性上与实验 观测值符合。例如,计算的^{74,78}Kr在低自旋区的*B*(*E*2)和^{72,76,78}Kr在高自旋区 的*B*(*E*2)都未能重复实验观测值。最差的一个例子是⁷⁸Kr,尽管计算的能级与 实验符合的很好,但相应的波函数不能正确的描述跃迁几率。因此,为了改进 这些原子核的多体波函数,我们应该考虑三轴形变或者形状混合自由度 [83]。

3.6 本章小结

本章用扩展的PSM研究了质量区域为A = 70 - 80的缺中子Kr同位素的微 观结构。我们尤其对这些核的高自旋态结构进行了着重分析。以前的理论研究 主要集中于这些核的低自旋态。于是,本章的工作可以被认为是对之前研究的 补充。随着Pfaffian方法的发展,PSM的组态空间得到了极大的扩展。这些扩 展增进了我们的模型的应用,尤其改进了对高自旋态的描述 [32]。我们的理论 计算结果与实验数据总体上符合。在有些例子中,我们对基态和低激发态计算 的结果与实验观测数据差别较大。主要原因是我们用了固定形变的基矢进行计 算。然而,我们主要感兴趣的是高自旋态的结构。随着原子核体系转速增加, 固定长椭形状的壳模型基矢在高自旋态是一个有效的近似。从一些我们计算的 结果与实验观测数据的符合可以印证这一点。随着自旋的增大,晕带和晕带附 近的边带的结构演化被两准粒子、四准粒子、六准粒子和八准粒子组态连续的 带交叉描述。我们认为,包含六准粒子和八准粒子组态的基矢对高自旋态的结 构细节的描述是必需的。另外,我们还计算了电四极跃迁几率并与实验值进行 了对比。理论计算的B(E2)与实验值定性上符合。为了获得更全面的Kr同位素 结构演化的理论知识,我们须要在轴对称形变的基础上将三轴形变或软 γ 形状 考虑进PSM。这些优化措施预计会改进本章的研究成果。为了获得更深的有关 这个质量区域结构演化的知识,人们需要更多的实验和理论研究。

第四章 W同位素中多准粒子K同核异能转动带的研究

4.1 引言

同核异能态(isomer)是激发的亚稳定原子核量子态 [84-86]。从同核异能 态到更低能级态的衰变被以某种方式阻碍,因此同核异能态比一般的激发态有 更长的半衰期。质量区域A ~ 180的原子核(如一些Hf和W同位素)具有比较 稳定的轴对称形变,基于Nilsson轨道的费米面(包括中子和质子)具有在对称 轴上的大角动量投影(即高K值) [87]。两个或更多具有高K量子数的态能够 耦合成一个高K多准粒子组态。电磁跃迁选择定则阻碍从一个高K态到普通态 (低K态)的跃迁,导致K同核异能态具有相对较长的寿命 [84]。理解原子核同 核异能态是原子核结构物理的一个主要课题 [88-90]。如今的实验可以找到六 准粒子或八准粒子同核异能态的证据 [91,92],并且预期一些现代化的实验设 施,如储存环(storage rings),将会发现更多的高K同核异能态 [93]。这些数 据可以提供单粒子态和原子核集体运动在形变势中相互作用的信息。

另处,在有些情况下,同核异能态对于在宇宙中元素合成的测定具有关键 作用 [59,94]。这是核天体物理中重要但很少被研究的领域。在具有恒星内部温 度的环境中,激发的同核异能态能够激发或退激发到一些中间态。这些激发的 同核异能态和中间态的微观结构是值得人们去仔细分析和研究的课题。一个很 好的例子是¹⁸⁰Ta^m,唯一自然存在的激发能为75 keV的原子核同核异能态,寿 命大于1.2×10¹⁵年。这个例子在核天体物理研究领域占据十分特殊的位置。人 们对¹⁸⁰Ta残存于恒星内部感到很困惑。¹⁸⁰Ta在星体内的合成机制已成为核天 体物理研究的一个主题。对同核异能态的衰变和中间态的鉴别的研究能够帮助 人们理解一些天体物理学问题 [95,96]。

目前,人们用多种方法研究过K同核异能态,例如,推转平均场模型或 斜轴推转模型 [97–100],Wood Saxon 准粒子无规相位近似模型(QRPA)和 基于斜面上的无规相位近似模型(RPA) [101],和限制组态的原子核势能计 算 [102]。然而,若要同时研究K同核异能态和与它相关的转动带,就需要用到 超越平均场并进行壳模型计算。

本章用扩展的投影壳模型(PSM) [31,32]研究了¹⁷⁴⁻¹⁸⁶W偶偶同位素的微观 结构。扩展的PSM是在最初的PSM [14]基础上改进的版本。现在版本的模型的 多准粒子组态空间已扩展到十准粒子组态 [31,32],这给我们研究高K同核异能 态和与其相关的转动带提供了一个合适的框架。

质量区域为 $A \approx 180$ 的原子核多数具有稳定的轴对称形变。第一个4⁺态 和第一个2⁺态的激发能比值(E_{4^+}/E_{2^+})可被用于区别轴对称形变转子 ($E_{4^+}/E_{2^+}=3.33$),球形振动原子核($E_{4^+}/E_{2^+}=2.0$),和三轴转子($E_{4^+}/E_{2^+}=2.5$) [103]。图 4.1 总结了N = 98至116的W同位素的 E_{4^+}/E_{2^+} 实验数据[104]。从图 中看到,N = 116的同位素的 E_{4^+}/E_{2^+} 值接近代表三轴的比值3.33。但对于更轻 质量的W同位素(N = 100至112),大轴对称形变是主要的特性。



图 4.1 实验测得的W同位素链的第一个4⁺和2⁺态能量比值。两条位于3.33和2.5的水平虚 线作为引导,分别代表轴对称形变转子和三轴转子

4.2 沿着晕带的带图

对稳定形变原子核转动的微观描述涉及到很多核子共同的贡献。晕态是特别有吸引力的研究对象,因为它携带着一些有价值的信息。例如,在晕态的核子组织形式是怎样的,以及某种核子组织形式是如何回应原子核转动的。在偶偶核基态,核子是成对耦合的。角动量投影的准粒子真空态描述着形变核基带的转动行为。随着原子核开始转动,内禀转动参考系中作用在核子对上的科里奥利力能够拆散核子对,然后破坏原子核的超流性。核子对被拆散会导致原子核的转动惯量在某一自旋值附近突然增大。投影的两准粒子组态描述着自旋顺排的态 [105]。通过对角化之后,投影的准粒子真空和投影的两准粒子态的叠加态描述着集体基态和自旋顺排态之间的相互作用。应用这种方法,实验观察到的很多稳定形变原子核的转动惯量变化可以被微观地描述。

在本章的计算过程中,我们选取中子和质子的三个谐振子主壳分别为, $N = 4,5,6\pi N = 3,4,5$,然后进行Nilsson-BCS计算,进而构成形变准粒子基



图 4.2 理论计算的¹⁷⁴W,¹⁷⁶W,¹⁷⁸W,¹⁸⁰W,¹⁸²W,¹⁸⁴W,和¹⁸⁶W 正宇称晕带带图

矢。PSM采用的哈密顿量中的单极对力强度为 $G_M = [G_1 \mp G_2(N - Z)/A]/A$, 其中"+"("-")对应质子(中子),耦合常数 $G_1 = 21.24$, $G_2 = 13.86$ [54],四 极对力强度 $G_Q = 0.16G_M$,这个关系式适用于本章所研究的所有原子核。我们 假设每个W同位素具有长椭、轴对称形变。为产生合适的基矢,我们将四极形 变参数 ε_2 和十六极形参数 ε_4 以文献 [55]为参考进行了细微的调整。表 4.1列出了 每个核的形变参数。从表中我们看到,随着中子数增加,四极形变参数ε₂呈现 减小的趋势,而十六形变参数 ϵ_4 呈现增加的趋势。这种趋势和文献 [55]的数据 是一致的。我们将看到,表4.1列出的形变参数对低能级态和高自旋态都是合 适的。文献 [55]的形变参数数据对基态是最优值,但对于我们研究的多数多准 粒子带不一定是最好的。于是,我们对形变参数以文献 [55]为参考进行了细微 的调整。我们注意到一种概念上先进,但技术上复杂的处理方法,即将属于不 同形变的准粒子组态包含进基矢。例如文献 [106]。

	表 4.1 本章采用的形变基矢的四极和十六极形变参数								
	^{174}W	^{176}W	^{178}W	^{180}W	^{182}W	^{184}W	^{186}W		
ε_2	0.262	0.220	0.220	0.210	0.230	0.210	0.200		
ε_4	0.033	0.047	0.025	0.020	0.020	0.040	0.060		

我们用BCS计算处理对关联。对能隙由对力强度和标准BCS计算中的能级 分布决定。表4.2列出了我们计算的每个同位素的对隙参数。未受扰动的高K同 核异能带带头能量依赖于单粒子能谱中的对隙大小。从表4.2看到,计算的中子 对隙随着中子数增加而减小,于是我们预测在重核中(如^{184,186}W)会出现低 能准粒子同核异能态。我们要指出的是,表4.2中的数值比通过中子和质子分离 能 [107] 计算得出的奇偶质量差小20 - 30%, 这对我们能计算出较低的多准粒 子K同核异能态的激发能很重要。

(2.35) 式中多准粒子组态能量的计算结果提供了这些态相对基态位置的 信息,以便我们鉴定在对角化之后哪些多准粒子组态属于低能级态。这能让 我们对壳模型空间进行截断 [108],即排除那些能级较高的多准粒子组态。本 章的计算中,投影的准粒子态数量,即投影基矢的维数通常为几百。例如本 章计算中具有最高维数的一个核,¹⁷⁴W计算采用的能量截断是两准粒子为3.5 MeV, 四准粒子为4.5 MeV, 六准粒子为5.2 MeV, 八准粒子为8.6 MeV, 十准 粒子为10.0 MeV。能量截断后多准粒子组态的维数是两准粒子为77, 四准粒子 为210,六准粒子为260,八准粒子为109,十准粒子为23。包括零准粒子态,这 个例子包含的准粒子组态总数为680。

	^{174}W	^{176}W	^{178}W	^{180}W	^{182}W	^{184}W	^{186}W
neutron	0.760	0.840	0.684	0.551	0.575	0.617	0.584
proton	0.740	0.663	0.699	0.706	0.710	0.672	0.647

表 4.2 计算的准粒子真空态的中子和质子对隙参数(单位为MeV)

PSM中被角动量投影的多准粒子组态形成一个壳模型基矢,两体哈密顿量 在这个基矢中对角化。每个多准粒子组态的K量子数是构成这个组态的每个一 准粒子态的K量子数之和。因此,我们可以用量子数K对观察到的能级进行分 类,尽管对角化程序会混合这些多准粒子K组态。

和第三章相同,带(以κ为标记)能量作为自旋I的表达式为

$$E_{\kappa}(I) = \frac{\langle \Phi_{\kappa} | \hat{H} \hat{P}_{KK}^{I} | \Phi_{\kappa} \rangle}{\langle \Phi_{\kappa} | \hat{P}_{KK}^{I} | \Phi_{\kappa} \rangle}.$$
(4.1)

上式表示不同的带在体系转动时带能量随自旋的变化,我们把它称为带图.图 4.2显示了本章讨论的W同位素链角动量投影的准粒子组态能量,即带图。图 4.2显示了每个核不同的准粒子组态在不同的角动量的带交叉。这些带交叉的 物理含义是,当一些位于更高能级的多准粒子组态开始转动,它们的能量增加 速度较慢甚至减小,并在更高角动量成为能量最接近晕态的准粒子组态。通过 这种方式,它们可能会与几个更低阶的多准粒子带交叉,最终在某个角动量成 为能量最低的带,并因此成为晕带最重要的分量。正如文献 [105]讨论的,两 个交叉带的交叉角的大小可以反应转动惯量的变化。一个大交叉角会给转动 惯量带来一个大扰动,小交叉角会导致转动惯量有一个小扰动或没有扰动。如 图 4.2 所示,大交叉角主要存在于自旋小于20ħ的区域。于是我们预期转动惯 量在自旋小于20ħ的区域会有较大的变化。自旋大于20ħ的区域仍有带交叉,但 交叉角很小。从图 4.2 看到,带分布密度在高自旋区更大,表示更加复杂的组 态混合。做为一个有代表性的例子,¹⁷⁴W晕带在不同自旋区域的主要组态列于 表4.3。

4.3 晕带的转动惯量

对于一个处于基态的原子核,对力容易使核子耦合成对并且整个原子核体 系表现的像一个超流体。在转动的原子核中,科里奥利力变的更强并倾向于拆 散核子对,并使单粒子角动量沿着转动轴顺排。科里奥利力对不同轨道上的核 子的作用也不同,并且依赖于核子所在轨道的单粒子角动量*j*的大小。这就是 大家所知的Stephens-Simon效应 [61]。

表 4.3	^{174}W	晕带在不同	自旋区间的主要组	组态,第一3	列的自旋表	示对应的	组态近似在	E这个
自旋值	开始成	为星杰的主	要组态					

Spin	Type	K^{π}	Configuration
10	2-qp	1^{+}	$\nu 5/2^+[642] \otimes 7/2^+[633]$
18	4-qp	2^{+}	$\nu 5/2^{+}[642]7/2^{+}[633] \otimes \pi 1/2^{-}[541]3/2^{-}[532]$
20	4-qp	1^{+}	$\nu 5/2^{+}[642]7/2^{+}[633] \otimes \pi 1/2^{-}[541]1/2^{-}[541]$
28	6-qp	2^{+}	$\nu 5/2^{+}[642]7/2^{+}[633] \otimes \pi 1/2^{-}[541]3/2^{-}[532]9/2^{-}[514]9/2^{-}[514]$
34	8-qp	2^{+}	$\nu 3/2^{+}[651]5/2^{+}[642]7/2^{+}[633]7/2^{+}[633] \otimes \pi 1/2^{-}[541]1/2^{-}[541]7/2^{-}[523]9/2^{-}[514]$
38	10-qp	2^+	$\nu 3/2^{+}[651]5/2^{+}[642]7/2^{+}[633]7/2^{+}[633]$
			$\otimes \pi 1/2^{-}[541]1/2^{-}[541]7/2^{-}[523]9/2^{-}[514] \otimes \pi 5/2^{+}[402]5/2^{+}[40]5/2^{+}[40]5/2^{+}[40]5/2^{+}[40]5/2^{+}[40]5/2^{+}[40]5/2^{+}[40]5/$

一条转动带的态结构变化可以通过更敏感的转动惯量演化来分析。转动 惯量定义为 $\mathcal{J}(I) = (2I-1)/E_{\gamma}(I)$,其中 $E_{\gamma}(I) = E(I) - E(I-2)$ 是跃迁能量。 通过研究晕带的转动惯量变化可以更好的了解体系的转动特性。图 4.3是我们 计算的¹⁷⁴⁻¹⁸⁶W晕带转动惯量和实验值的比较。从图中我们看到,用投影壳模 型计算的转动惯量值很好的重复了实验值。图中曲线显示在低自旋区转动惯量 有一个上升的趋势,但在高自旋区转动惯量保持稳定的趋势(有些核几乎为常 数)。

W同位素的转动惯量变化可以通过前面讨论过的带交叉来理解。对于本章 研究的稀土区偶偶核,中子费米面主要建立在*i*_{13/2}轨道上。*i*_{13/2}轨道被相同宇 称的轨道远远地隔离,并常常被称为纯*j*态。另外,这个纯*j*态也没有和其他更 低的*j*轨道混合太多。由于转动,第一个对被拆散并产生一个基于*i*_{13/2}轨道上 的两准中子带。在低自旋区和中间自旋区,这些原子核的微观结构主要被基 带和两准中子带之间的相互作用决定。随着原子核转动加快,更高阶的准粒 子组态陆续产生重要作用。在质量较轻的W同位素中,转动惯量在自旋区间10 - 16*ħ*快速上升。正如图 4.2所示,更轻质量核的基带和两准粒子带的交叉角较 大。换句话说,基带和s带之间的相互作用小,因此转动惯量在带交叉处有急 剧上升的现象。

4.4 计算的能级和组态结构

在被投影的准粒子基矢中对角化两体哈密顿量,我们可以得到正宇称和负 宇称的能级。图 4.4-4.10是我们计算的¹⁷⁴⁻¹⁸⁶W能级与实验观测数据的比较。

4.4.1 ¹⁷⁴W

转动的原子核¹⁷⁴W在大转动频率范围内呈现长椭轴对称形状 [109,110]。 实验上观察到晕带最高自旋达到38*ħ* [111]。从图 4.4看到, PSM计算很好地



图 4.3 计算的W 同位素晕带转动惯量和实验数据的比较

主 1 1	174 M	it	書き	与北	65	÷	西伯	ĸ

band	type	K^{π}	configuration
side 1	2-qp	8^{-}	$\pi 7/2^+[404] \otimes 9/2^-[514]$
side 2	4-qp	12^{+}	$\nu 1/2^{-}[521]7/2^{+}[633] \otimes \pi 7/2^{+}[404]9/2^{-}[514]$

重复了晕带实验数据 [109,111,112]。¹⁷⁴W有多个低K和高K 转动带。这些带的最高自旋达到39 \hbar [111]。实验上还观察到半衰期为158 ns的K = 8同核异能态和半衰期为128ns的K = 12同核异能态以及两个同核异能态的转动带 [109]。通过PSM分析,我们认为K = 8同核异能态的主要组态是质子两准粒子组态 $\pi7/2^{+}$ [404] $\otimes \pi9/2^{-}$ [514]。实验上观测到以K = 8⁻同核异能态为带头的转动带最高自旋为21 \hbar 。除了带头能量比实验值高出200 keV,我们计算的图 4.4 中



图 4.4 计算的¹⁷⁴W 转动带能谱和实验数据的比较

的'side band 1' 与实验值符合的很好。K = 12同核异能态组态为四准粒子组态并列于表4.4。除了最高自旋态,我们计算的K = 12转动带能谱很好地重复了实验观测值。

4.4.2 ^{176}W



图 4.5 计算的¹⁷⁶W 转动带能谱和实验数据的比较
band	type	K^{π}	configuration
side 1	4-qp	14^{+}	$\nu 5/2^{-}[512]7/2^{+}[633] \otimes \pi 7/2^{+}[404]9/2^{-}[514]$
side 2	6-qp	18^{+}	$\nu 5/2^{-}[512]7/2^{-}[514]1/2^{-}[521]7/2^{+}[633] \otimes \pi 7/2^{+}[404]9/2^{-}[514]$

表 4.5¹⁷⁶W 边带带头的主要组态

图 4.5显示了理论计算的¹⁷⁶W能级和实验的对比 [113,114]。实验观察到 晕带最高自旋为 $I = 26\hbar$ [113,114]。Crowell等人观察到一个 $I, K^{\pi} = 14, 14^{+}\pi$ 半衰期为 $t_{1/2} = 35 \pm 10$ ns的高K同核异能态 [113]。他们预测这个同核异能 态的组态为四准粒子组态 $\nu 5/2^{-}$ [512] $\otimes \nu 7/2^{+}$ [633] $\otimes \pi 7/2^{+}$ [404] $\otimes \pi 9/2^{-}$ [514]。 邻近的偶偶同中子素¹⁷⁴Hf也有一个类似的同核异能态 [115]。实验上观察到 这两个原子核都有违背K选择定则的跃迁。我们对图 4.5中'side band 1'的理 论计算合理地描述了这个转动带。另外,Crowell等人还观察到一个带头能量 为4.893 MeV和半衰期为10ns的转动带 [113]。这个10ns的同核异能态的自旋和 宇称没有实验观测值。我们的计算结果认为这个带可能建立在 $K^{\pi} = 18^{+}$ 的 六准粒子同核异能态之上。尽管我们计算的带头能量与实验数据有些小差 别,但计算的转动惯量与实验数据符合的较好。我们认为这个带的带头组态 为 $\nu 5/2^{-}$ [512] $\otimes \nu 7/2^{-}$ [514] $\otimes \nu 1/2^{-}$ [521] $\otimes \nu 7/2^{+}$ [633] $\otimes \pi 7/2^{+}$ [404] $\otimes \pi 9/2^{-}$ [514]。 表4.5列出了这两个同核异能态的组态。



4.4.3 ¹⁷⁸W

图 4.6 计算的¹⁷⁸W 转动带能谱和实验数据的比较

N = 104原子核被标记为振动模式和转动顺排激发之间的分界线,这些原 子核的微观结构具有十分重要的研究价值 [116]。宏观和微观的计算显示在这个

band	type	K^{π}	configuration
side 1	2-qp	6^{+}	$\nu 5/2^{-}[512] \otimes 7/2^{-}[514]$
side 2	2-qp	7^{-}	$\nu 7/2^{-}[514] \otimes 7/2^{+}[633]$
side 3	4-qp	14^{-}	$\nu 5/2^{-}[512]7/2^{-}[514] \otimes \pi 7/2^{+}[404]9/2^{-}[514]$
side 4	4-qp	15^{+}	$\nu 7/2^{-}[514]7/2^{+}[633] \otimes \pi 7/2^{+}[404]9/2^{-}[514]$
side 5	6-qp	21^{-}	$\nu 5/2^{-}[512]7/2^{-}[514]7/2^{+}[633]9/2^{+}[624] \otimes \pi 5/2^{+}[402]9/2^{-}[514]$
side 6	8-qp	25^{+}	$\nu 5/2^{-}[512]7/2^{-}[514]7/2^{+}[633]9/2^{+}[624] \otimes \pi 1/2^{-}[541]5/2^{+}[402]7/2^{+}[404]9/2^{-}[514]$

表 4.6 ¹⁷⁸W 边带带头的主要组态

区域 $N = 104\pi Z = 66$ 的原子核有最大的形变 [55]。实事上,¹⁷⁰Dy是这个区域 中核子价(即质子价和中子价的乘积 N_pN_n)最大的原子核。然而,实验研究 结果不支持这个观点 [117]。最近的理论计算预言了一个中子数为N = 100的形 变封闭壳 [118]。有人对这个预言以Sm,Gd核为例在实验上进行了证实 [119]。 对稀土区中更高质量的原子核,这个预言并不成立。对于¹⁷⁸W(N = 104)同 位素,准粒子顺排假设是必然有效的。

我们采用轴对称基矢进行PSM计算并成功地描述了¹⁷⁸W的晕带和K同核 异能带,如图 4.6所示,能谱实验数据取自文献 [120,121]。除了晕带,¹⁷⁸W还 有几个高K带。通过PSM计算,我们得到了两个两准中子带(图 4.6中的'side band 1'和'side band 2')的组态分别为 ν 5/2⁻[512] $\otimes \nu$ 7/2⁻[514] 和 ν 7/2⁻[514] \otimes ν 7/2⁺[633]。这两个组态和实验文献建议的组态是一致的 [120]。实验还发现 一个负字称转动带,这个带的带头是一个寿命为3 ns, K = 14的同核异能态。 然而,实验上观察到这个带的最高自旋只有15 \hbar 。通过计算我们认为这个带的 带头组态为四准粒子组态 ν 5/2⁻[512] $\otimes \nu$ 7/2⁻[514] $\otimes \pi$ 7/2⁺[404] $\otimes \pi$ 9/2⁻[514]。 实验上观测到带头为K = 15的正字称四准粒子带(图 4.6中的'Side band 4')最高自旋达到39 \hbar 。和实验建议的一致 [120],理论计算获得的带头组态 为 ν 7/2⁻[514] $\otimes \nu$ 7/2⁺[633] $\otimes \pi$ 7/2⁺[404] $\otimes \pi$ 9/2⁻[514]。 表4.6列出了计算获得的 每个带带头的主要组态。

¹⁷⁸W是少数被观察到有多于六准粒子高K带的原子核。文献 [120]提到一 个 $K^{\pi} = 21^{-}$ 的六准粒子带,带头组态为 $\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 7/2^{+}[633] \otimes$ $\nu 9/2^{+}[624] \otimes \pi 5/2^{+}[402] \otimes \pi 9/2^{-}[514], 和一个<math>K^{\pi} = 25^{+}$ 八准粒子带,带头组态 为 $\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 7/2^{+}[633] \otimes \nu 9/2^{+}[624] \otimes \pi 1/2^{-}[541] \otimes \pi 5/2^{+}[402] \otimes$ $\pi 7/2^{+}[404] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$ 。如图4.6所示,包括两个带的带头能量和最高自旋态 能量,我们的理论模型都给出了很好的计算结果。

4.4.4 ¹⁸⁰W

图 4.7显示的是¹⁸⁰W的计算结果和实验数据的对比 [122]。每个带的带



图 4.7 计算的¹⁸⁰W 转动带能谱和实验数据的比较

表 4.7¹⁸⁰W 边带带头的主要组态

band	$_{\mathrm{type}}$	K^{π}	configuration
side 1	2-qp	2^{-}	$\pi 5/2^+[402] \otimes 9/2^-[514]$
side 2 cal 1	2-qp	5^{-}	$\nu 1/2^{-}[521] \otimes 9/2^{+}[624]$
side 2 cal 2 $$	2-qp	5^{-}	$\pi 1/2^+[411] \otimes 9/2^-[514]$
side 3 cal 1	2-qp	8^{-}	$\nu 7/2^{-}[514] \otimes 9/2^{+}[624]$
side 3 cal 2	2-qp	8^{-}	$\pi 7/2^+[404] \otimes 9/2^-[514]$
side 4	2-qp	8^+	$\nu 7/2^+[633] \otimes 9/2^+[624]$
side 5	4-qp	14^{-}	$\nu 7/2^{-}[514]9/2^{+}[624] \otimes \pi 5/2^{+}[402]7/2^{+}[404]$

头主要组态列于表4.7。实验观测到晕带最高自旋为24ħ。文献 [122]指出实验上观察到一条 $K = 5^-$ 的同核异能带,最高自旋为 $I = 9\hbar$ 。实验文献建议这条带的带头主要组态为中子两准粒子组态 $\nu 1/2^-$ [521] $\otimes \nu 9/2^+$ [624]。通过PSM分析,我们发现两个可能的能够构成5⁻的两准粒子组态,一个带头能量为2.022 MeV的组态 $\nu 1/2^-$ [521] $\otimes \nu 9/2^+$ [624],和一个带头能量为1.495 MeV的组态 $\pi 1/2^+$ [411] $\otimes \pi 9/2^-$ [514]。尽管两个组态的转动惯量有相似的变化趋势,但计算的质子两准粒子组态的转动能谱与实验相比更合理。因此,我们认为这个两准粒子带的带头主要组态是质子两准粒子结构 $\pi 1/2^+$ [411] $\otimes \pi 9/2^-$ [514]。为了从实验上测定这条带的组态,测量这条带的g因子是一个有效的方案,因为质子组态和中子组态具有差别很大的g因子。

早期的实验观察到一条基于K = 8⁻,寿命为5.47 ms的两准粒子同核异能态之上的转动带 [123]。实验文献认为这个同核异能态的组态为 ν 7/2⁻[514] \otimes ν 9/2⁺[624],但有可能是两中子和两质子组态的混合。通过理论计算我们发现有两个两准粒子组态可能是这个同核异能态的主要组态。一个是两准中子组

态 $\nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$,另一个是两准质子组态 $\pi 7/2^{+}[404] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$ 。 两条计算的K = 8⁻转动带具有相似的转动惯量并且能谱与实验数据对比都很接 近。我们注意到同中子素¹⁷⁸Hf也有两质子两中子组态混合的现象 [124]。为了 最终确定¹⁸⁰W的K = 8⁻同核异能态组态,测量这个态的g因子仍然是个有效的 办法。

实验上发现一条围绕斜轴旋转的K = 8⁺转动带,即所谓的t带 [125]。以前 有人用PSM对这个带进行过计算,并讨论了t带和参与贡献晕带结构的低K带 之间的相互作用 [125]。图 4.7同样包含了这个K = 8⁺带的计算结果。从图中我 们看到,这条带的位置正确地被重复出来,尽管计算的能级分布比实验数据更 加宽广一些。

对于¹⁸⁰W中的四准粒子K=14⁻同核异能态,实验测量得出组态 ν 7/2⁻[514] \otimes ν 9/2⁺[624] $\otimes \pi$ 5/2⁺[402] $\otimes \pi$ 7/2⁺[404]为这个态的主要组态 [122]。图 4.7给出了这个组态的计算结果。理论计算与实验测量获得的能级3.265 MeV惊人的一致。我们还在这个同核异能态的基础上预言了一个转动带(Side band 5)。

4.4.5 ¹⁸²W



图 4.8 计算的¹⁸²W 转动带能谱和实验数据的比较

除了晕带,实验还观察到¹⁸²W的几条多准粒子高K带 [126–128]。实验观 测到晕带最高自旋为 $I = 20\hbar$ 。图 4.8显示了我们的计算结果和实验数据的 对比 [126–128]。各高K同核异能带的带头主要组态列于表 4.8。 $K = 4^-$ 的

band	type	K^{π}	configuration
side 1	$2\text{-}\mathrm{qp}$	4^{-}	$\nu 1/2^{-}[510] \otimes 9/2^{+}[624]$
side 2	2-qp	10^{+}	$\nu 9/2^+[624] \otimes 11/2^+[615]$
side 3	4-qp	15^{+}	$\nu 7/2^{-}[503]9/2^{+}[624] \otimes \pi 5/2^{+}[402]9/2^{-}[514]$
side 4	4-qp	17^{-}	$\nu 9/2^{+}[624]11/2^{+}[615] \otimes \pi 5/2^{+}[402]9/2^{-}[514]$

表 4.8¹⁸²W 边带带头的主要组态

两准粒子带的带头主要组态为两准中子组态 $\nu 1/2^{-}[510] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$ 。实验 观测到 $K = 10^{+}$ 转动带最高自旋为 $I = 19\hbar$ 。计算的带头主要组态和实验 文献建议的组态都是两准中子结构 $\nu 9/2^{+}[624] \otimes \nu 11/2^{+}[615]$ 。实验上还观察 到两条 $K^{\pi} = 15^{+}\pi 17^{-}$ 的四准粒子带,后者在自旋I > 16之后的态成为晕 态 [126]。通过计算,我们定性地描述了这两个带,并得出它们的带头主要 组态分别为 $\nu 7/2^{-}[503] \otimes \nu 9/2^{+}[624] \otimes \pi 5/2^{+}[402] \otimes \pi 9/2^{-}[514] \pi \nu 9/2^{+}[624] \otimes$ $\nu 11/2^{+}[615] \otimes \pi 5/2^{+}[402] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$ 。

4.4.6 ¹⁸⁴W



图 4.9 计算的¹⁸⁴W 转动带能谱和实验数据的比较

图 4.9是¹⁸⁴W的能谱图,实验数据取自文献 [129,130]。实验测得晕带最高自旋为16ħ。我们的计算很好的重复了晕带实验数据并预言了晕带更高的自旋态,最高的预言态自旋为28ħ。Wheldon等人发现了一个 $K = 5^{-1}$ 组态 为 $\nu 1/2^{-}$ [510] $\otimes \nu 11/2^{+}$ [615] (图 4.9 side band 1 cal 1)的两准粒子同核异能态 [129]。我们根据这个组态用PSM计算的 $I^{\pi} = 5^{-}$ 态能量比实验值高出1.0

		1.0	
band	type	K^{π}	configuration
side 1 cal 1	$2\text{-}\mathrm{qp}$	5^{-}	$\nu 1/2^{-}[510] \otimes 11/2^{+}[615]$
side 1 cal 2	2-qp	5^{-}	$\nu 1/2^{-}[510] \otimes 9/2^{+}[624]$
side 2 cal 1	2-qp	7^{-}	$\nu 3/2^{-}[512] \otimes 11/2^{+}[615]$
side 2 cal 2	2-qp	7^{-}	$\pi 5/2^+[402] \otimes 9/2^-[514]$
side 3 cal 1	4-qp	18^{-}	$\nu 9/2^+[624]11/2^+[615] \otimes \pi 7/2^+[404]9/2^-[514]$
side 3 cal 2	4-qp	17^{-}	$\nu 9/2^{+}[624]11/2^{+}[615] \otimes \pi 5/2^{+}[402]9/2^{-}[514]$

表 4.9¹⁸⁴W 边带带头的主要组态

MeV,然而根据另一个两准中子组态 $\nu 1/2^{-}[510] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$ (图 4.9 side band 1 cal 2)计算得出的能量与实验数据非常接近。于是,我们认为这个5⁻带的带 头主要组态为 $\nu 1/2^{-}[510] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$ 。

相似的情况也发生在实验上已知的 $I^{\pi} = 7^{-}$ 态。PSM计算倾向于认为这个态的组态为 $\pi 5/2^{+}[402] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$ (图 4.9 side band 2 cal 2)。而我们根据另一个组态 $\nu 3/2^{-}[512] \otimes \nu 11/2^{+}[615]$ (图 4.9 side band 2 cal 1)计算得出的能量比实验能量值高出很多。

Wheldon等人首先观察到一个能量为3862 keV、寿命为188±38 ns的同核异 能态,但自旋宇称以及组态结构都未确定 [129]。PSM计算认为这个态的一个可 能的组态为四准粒子组态 ν 9/2⁺[624] $\otimes \nu$ 11/2⁺[615] $\otimes \pi$ 7/2⁺[404] $\otimes \pi$ 9/2⁻[514], 自旋和宇称为 $K^{\pi} = 18^{-}$ 。实事上,计算的 $I^{\pi} = 18^{-}$ 带的带头能量和实验能 级3862 keV很接近。然而,我们的计算发现另一个 $I^{\pi} = 17^{-}$ 的能级与实验能级 也很接近。这也是一个四准粒子组态 ν 9/2⁺[624] $\otimes \nu$ 11/2⁺[615] $\otimes \pi$ 5/2⁺[402] $\otimes \pi$ 9/2⁻[514]。目前,我们很难确定这个实验能级的组态是哪一个四准粒子 组态。然而,我们计算显示这两个组态转动惯量明显不同。从图4.9中看到, $I^{\pi} = 18^{-}$ 转动带的能级间距比较小,对应着较大的转动惯量。为了正确地描述 这个同核异能态的结构,更多的实验测量数据是必要的。

4.4.7 ¹⁸⁶W

 K^{π} type configuration band 2^{-} $\nu 7/2^{-}[503] \otimes 11/2^{+}[615]$ side 1 2-qp 7^{-} $\pi 5/2^+[402] \otimes 9/2^-[514]$ side 2 2-qp 16^{+} $\nu 7/2^{-}[503]11/2^{+}[615] \otimes \pi 5/2^{+}[402]9/2^{-}[514]$ side 3 4-qp

表 4.10¹⁸⁶W 边带带头的主要组态

目前,¹⁸⁶W的实验数据相当有限 [131]。从图4.10中看到,我们的模型计算 很好地重复了晕带实验数据并预言了高自旋部分。实验发现一条*K* = 2⁻的转动 带,但只有几个低激发态被实验测定。我们的计算结果显示带头能量比实验值



图 4.10 计算的¹⁸⁶W 转动带能谱和实验数据的比较

高出大约350 keV。我们建议这个带的带头主要组态为 $\nu7/2^{-}[503] \otimes \nu11/2^{+}[615]$ (见表4.10)。实验还观察到一个 $K = 7^{-}$ 的同核异能态。我们认为这个态的主要 组态为两准质子组态 $\pi5/2^{+}[402] \otimes \pi9/2^{-}[514]$ 。计算的结果和实验观察到的两 个能级7⁻、8⁻十分接近。图4.10还显示了高自旋部分的预言结果。

实验观察到一个¹⁸⁶W的长寿命同核异能态,能量为3.543 MeV,自旋和宇称暂定为16⁺。我们计算了一个比实验能级高的16⁺激发态,并在这个激发态的基础上预言了一个转动带。如图4.10 side band 3 所示。我们建议这个同核异能态的主要组态为 $\nu7/2^{-}[503]11/2^{+}[615] \otimes \pi5/2^{+}[402]9/2^{-}[514] (见表4.10)。$

4.5 晕带和*K* 同核异能带的电磁属性

和第三章相同,在B(E2)的计算中,我们用到的质子有效电荷为1.5e,中 子有效电荷为0.5e,这是PSM计算中通用的标准值。另一方面,磁偶极跃迁几 率B(M1)和g因子被认为是波函数中单粒子结构变化的敏感探针。特别地,这 两个物理量能够区分质子和中子对波函数的贡献。B(M1)和g因子算符的轨道 部分只由质子贡献,并且它们的自旋算符持相反的符号。PSM计算中,g因子 可通过下面的表达式获得

$$g(I) = \frac{\mu(I)}{\mu_N I} = \frac{1}{\mu_N I} [\mu_\pi(I) + \mu_\nu(I)]$$
(4.2)

 $\mu_{\tau}(I)$ 是量子态 ψ^{I} 的磁矩

$$\mu_{\tau}(I) = \langle \Psi_{I}^{I} | \hat{\mu}_{z}^{\tau} | \Psi_{I}^{I} \rangle$$

$$= \frac{I}{\sqrt{I(I+1)}} \langle \Psi^{I} | | \hat{\mu}^{\tau} | | \Psi^{I} \rangle$$

$$= \frac{I}{\sqrt{I(I+1)}} [g_{l}^{\tau} \langle \Psi^{I} | | \hat{j}^{\tau} | | \Psi^{I} \rangle$$

$$+ (g_{s}^{\tau} - g_{l}^{\tau}) \langle \Psi^{I} | | \hat{s}^{\tau} | | \Psi^{I} \rangle]$$
(4.3)

其中 $\tau = \pi \pi \nu$ 分别代表质子和中子。在我们的计算中,上式中的 $g_l \pi g_s$ 的标准 取值为

$$g_l^{\pi} = 1, \quad g_s^{\pi} = 5.586 \times 0.75$$

 $g_l^{\nu} = 0, \quad g_s^{\nu} = -3.826 \times 0.75$ (4.4)

其中, g^π_s和g^v_s值通常会乘以一个因子0.75,这是核心极化和介子交换流修正 导致的结果 [132]。这种处理方式被用于本文中对所有B(M1)和g因子的计算。 计算B(E2), B(M1)和g因子的表达式可以在之前的PSM工作中找到,例如文 献 [133,134]。

4.5.1 晕带的B(E2)和g因子

图 4.11 描绘了我们计算的¹⁷⁴⁻¹⁸⁶W晕带*B*(*E*2)和实验数据的对比,实验数 据分别取自文献 [112,121,122,128,130,131]。理论计算结果给出了*B*(*E*2)随自旋 的变化趋势。我们看到*B*(*E*2)在低自旋区平稳地上升,在高自旋区趋于常数。 三个较轻的同位素^{174,176,178}W的*B*(*E*2)在中间自旋区域有一个突然的下降,实 验数据也支持这个总体的变化趋势,尽管理论计算相比实验数据偏离了一些 变化细节。例如,在图 4.11(a)中,实验数据在自旋10*h*处有一个极小值,而理 论计算的*B*(*E*2)在自旋16*h*处有极小值。理论计算获得的极小值是由带交叉导 致的晕带波函数结构变化带来的。实验上还没有测定¹⁷⁶W的晕带*E*2跃迁几率, 并且^{178,180}W也只有最低态的跃迁实验数据。^{182,184,186}W三个同位素有相当高自 旋态的跃迁实验数据。在低自旋,实验观察到*B*(*E*2)平稳地上升,并且计算的 结果很好地重复了这个变化趋势。在高自旋,实验值有较小的上下起伏,但我 们计算获得的*B*(*E*2)没有精确地重现这个变化细节。

图 4.12是计算的W同位素晕带g因子和实验值的对比 [135]。图中理论计算 结果分为质子和中子贡献,以及两者之和(图 4.12中的"Yrast total")。正如前



图 4.11 计算的W 同位素晕带B(E2) (单位为W.u.) 值和实验数据的比较。(a) ¹⁷⁴W, (b)¹⁷⁶W, (c)¹⁷⁸W, (d)¹⁸⁰W, (e)¹⁸²W, (f) ¹⁸⁴W 和(g) ¹⁸⁶W

面讨论的, g因子的变化是由沿着晕线的带交叉产生的结构改变导致的。我们 看到在自旋I = 12 – 18ħ 的区间内, 波函数中中子单粒子成分增加导致总的g因 子呈现下降的趋势。在自旋I = 18ħ之后,总g因子呈现上升的趋势。这是因为 在自旋I = 18ħ 之后具有一个或多个质子对的四准粒子和更高阶的准粒子组 态成为波函数中的主要成分(见表4.3)。波函数中质子单粒子成分增加导致总 的g因子呈现上升的趋势。较轻质量的三个核(^{174,176,178}W)的g因子还没有实 验数据。我们计算的总g因子值比已知的实验值稍微偏小。文献 [136]中也发现 了同样的问题。对公式(4.4)中乘上的因子"0.75"的修正可以改进计算结果, 但我们倾向于使用标准值。

4.5.2 K同核异能带的B(E2)和B(M1)以及g因子

在文献 [113]中, Crowell等人提供了¹⁷⁶W同位素的四准粒子14⁺转动带 (图4.5 中的side band 1) B(M1)/B(E2)比值的实验数据。这个带的带头组态包



图 4.12 计算的W同位素晕带g因子和实验数据的比较



图 4.13 计算的图4.5 中¹⁷⁶W side band 1 的B(M1)/B(E2) 比值和实验数据的比较

-62-

含了分别占据四个高K轨道的四个核子(见表4.5),所以B(M1)/B(E2)比值包含的信息常常被用于测试理论计算模型。在已经获得很好的理论计算能谱的基础之上(见图4.5),我们计算了这个四准粒子14⁺转动带的B(M1)/B(E2)比值,并在图 4.13中展示了计算结果和实验数据的对比 [113]。因为总体的变化趋势被正确地重现,所以我们的计算结果可以说是令人满意的,尽管理论计算值是实验值的两到三倍。这个差别主要来自B(M1)的计算,因为B(E2)的计算通常都能获得正确的结果,正如图4.11所示。

这个质量区域积累了一些从同核异能态跃迁到其它态的*B*(*E*2)和*B*(*M*1)实 验数据 [121,122,128,130]。理解这些数据对研究*K*选择定则和违反*K*选择定则 很重要。对这些数据系统性的描述是一个理论挑战。表 4.11呈现了那些有实验 数据的同核异能态跃迁的理论计算结果,并给出了与实验值的对比。我们的计 算包括初态和末态有相近*K*量子数的允许跃迁以及初态和末态*K*量子数相差很 大的禁止跃迁,见表 4.11。

从表 4.11我们看到,很大一部分理论计算结果和实验数据的差别在一个数 量级以内。然而,也有很多理论计算结果和实验数据相差几个数量级。例如, ¹⁷⁸W核的6⁺同核异能态*B*(*E*2)跃迁和21⁻同核异能态*B*(*M*1)跃迁以及¹⁸²W核 的15⁺同核异能态*B*(*E*2)跃迁。在所有的跃迁计算结果和实验值有大偏差的实 例中,我们的计算值比实验值都小很多。这说明模型中的*K*混合不够强烈以致 于不能产生足够大的同核异态跃迁几率。我们或许需要考虑本文应用的模型之 外的特殊效应。文献 [137]中指出从6⁺两准粒子同核异能态到基带的*K*禁止跃 迁对与γ振动带的6⁺态的混合十分敏感,这解释了PSM在什么情况下需要采用 三轴形变的单粒子基矢。

最后,讨论一下同核异能态的g因子是很有意义的。g因子是一个能够反应 多准粒子高K组态的单粒子成份的物理量。表 4.12总结了本章研究的所有K同 核异能态的g因子理论计算值和实验值。我们列出了建议的组态并给出了计算 的这些同核异能态能量和实验能量的比较。大部分g因子是我们的预言并为未 来的实验做参考。我们非常期待这些预言的同核异能态g因子将来能被实验测 量。

从表 4.12中我们可以看到一些大于 1 的*g*因子。特别地,这些都属于质子 两准粒子态,如¹⁸⁰W的5⁻同核异能态和^{184,186}W的7⁻同核异能态。另一方面, 中子两准粒子态的*g*因子一般很小甚至是负值。例如,¹⁷⁸W的6⁺和7⁻同核异能 态,¹⁸²W的4⁻和10⁺同核异能态和¹⁸⁴W的5⁻和7⁻同核异能态。对于那些由质子 和中子单粒子构成的四准粒子或更高阶准粒子态,它们的*g*因子值一般介于上

表 4.11	计算的W	同位素同核异	¥能态的B(E2)	和B(M1) 值	(单位为W.u.)	与实验数据的
比较						

K_i^{π}	I_i	K_f^{π}	I_f	$\overline{B(E2, M1; I_i \to I_f)}$		
				exp.	cal.	
^{178}W						
6^{+}	6	0^{+}	4	$B(E2) = 4.67 \times 10^{-4}$	4.56×10^{-8}	
14^{-}	14	13^{-}	13	$B(M1) = 6.7 \times 10^{-3}$	1.25×10^{-5}	
21^{-}	21	18^{-}	20	$B(M1) = 3.9 \times 10^{-4}$	$5.36 imes10^{-7}$	
^{180}W						
14^{-}	14	8-	12	$B(E2) = 2.8 \times 10^{-6}$	2.11×10^{-7}	
^{182}W						
4-	4	2^{-}	2	B(E2) = 0.7	9.03×10^{-3}	
4-	4	2^{-}	3	B(E2) = 2.6	1.09×10^{-2}	
4-	4	2^{-}	3	$B(M1) = 1.19 \times 10^{-4}$	9.06×10^{-5}	
4-	4	2^{-}	4	B(E2) = 5.2	1.92×10^{-2}	
4^{-}	4	2^{-}	4	$B(M1) = 6.24 \times 10^{-3}$	7.24×10^{-4}	
10^{+}	10	0^+	10	$B(M1) = 7.0 \times 10^{-8}$	1.19×10^{-8}	
10^{+}	10	0^+	8	$B(E2) = 1.9 \times 10^{-6}$	2.84×10^{-7}	
15^{+}	15	10^{+}	13	$B(E2) = 5.3 \times 10^{-4}$	9.14×10^{-7}	
15^{+}	15	10^{+}	14	$B(M1) = 1.3 \times 10^{-7}$	$1.07 imes 10^{-9}$	
^{184}W						
5^{-}	5	2^{-}	3	B(E2) = 0.019	4.41×10^{-3}	
7^{-}	7	6^{-}	6	B(E2) = 1.8	8.52×10^{-1}	
7^{-}	7	6^{-}	6	$B(M1) = 5.2 \times 10^{-3}$	$3.87 imes 10^{-3}$	
7^{-}	7	5^{-}	5	B(E2) = 3.09	$1.17 imes 10^{-1}$	

面两个极端之间并严重依赖它们的结构。对于唯一有实验数据的实例,我们计 算的¹⁷⁶W四准粒子14⁺同核异能态的*g*因子为0.58,和实验值[0.48(2)]相比非常 合理。我们预言¹⁷⁸W的八准粒子25⁺同核异能态的*g*因子为0.43,这个中等大小 的*g*因子值来自于四个独立的质子和四个独立的中子轨道的组合贡献。

4.6 本章小结

史无前例的高敏感度和高分辨率大型γ射线探测器阵列提供了令人着迷的

Isotope	K^{π}	Configuration		[MeV]	g-factor	
			Th.	Expt.	Th.	Expt.
^{174}W	8-	$\pi 7/2^+[404] \otimes \pi 9/2^-[514]$	2.268	2.527	0.90	-
	12^{+}	$\nu 1/2^{-}[521] \otimes \nu 7/2^{+}[633] \otimes \pi 7/2^{+}[404] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$	3.617	3.515	0.56	-
^{176}W	14^{+}	$\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{+}[633] \otimes \pi 7/2^{+}[404] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$	3.664	3.747	0.58	0.48(2)
	18^{+}	$\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 1/2^{-}[521]$	5.280	4.895	0.41	-
		$\otimes \nu 7/2^+[633] \otimes \pi 7/2^+[404] \otimes \pi 9/2^-[514]$				
$^{178}\mathrm{W}$	6^{+}	$\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{-}[514]$	1.550	1.665	0.04	-
	7^{-}	$\nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 7/2^{+}[633]$	1.510	1.739	-0.03	-
	14^{-}	$\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{-}[514] \otimes \pi 7/2^{+}[404] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$	3.320	3.593	0.56	-
	15^{+}	$\nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 7/2^{+}[633] \otimes \pi 7/2^{+}[404] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$	3.390	3.654	0.51	-
	21^{-}	$\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 7/2^{+}[633]$	5.273	5.313	0.37	-
		$\otimes \nu 9/2^+[624] \otimes \pi 5/2^+[402] \otimes \pi 9/2^-[514]$				
	25^{+}	$\nu 5/2^{-}[512] \otimes \nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 7/2^{+}[633] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$	6.452	6.572	0.43	-
		$\otimes \pi 1/2^{-}[541] \otimes \pi 5/2^{+}[402] \otimes \pi 7/2^{+}[404] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$				
^{180}W	2^{-}	$\pi 5/2^+[402] \otimes \pi 9/2^-[514]$	1.140	1.006	0.57	-
	5^{-}	$\nu 1/2^{-}[521] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$	2.022	1.640	0.12	-
	5^{-}	$\pi 1/2^+[411] \otimes \pi 9/2^-[514]$	1.495	1.640	1.05	-
	8^{-}	$\nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$	1.608	1.529	0.06	-
	8-	$\pi 7/2^+[404] \otimes \pi 9/2^-[514]$	1.461	1.529	0.91	-
	8^+	$\nu 7/2^+[633] \otimes \nu 9/2^+[624]$	1.869	2.133	-0.16	-
	14^{-}	$\nu 7/2^{-}[514] \otimes \nu 9/2^{+}[624] \otimes \pi 5/2^{+}[402] \otimes \pi 7/2^{+}[404]$	3.297	3.265	0.40	-
^{182}W	4^{-}	$\nu 1/2^{-}[510] \otimes \nu 9/2^{+}[624]$	1.512	1.553	-0.17	-
	10^{+}	$\nu 9/2^+[624] \otimes \nu 11/2^+[615]$	2.274	2.231	-0.10	-
	17^{-}	$\nu 9/2^+[624] \otimes \nu 11/2^+[615] \otimes \pi 5/2^+[402] \otimes \pi 9/2^-[514]$	3.684	4.041	0.43	-
^{184}W	5^{-}	$\nu 1/2^{-}[510] \otimes \nu 11/2^{+}[615]$	2.210	1.285	-0.13	-
	5^{-}	$ u 1/2^{-}[510] \otimes \nu 9/2^{+}[624] $	1.120	1.285	-0.01	-
	7^{-}	$\nu 3/2^{-}[512] \otimes \nu 11/2^{+}[615]$	2.370	1.502	-0.05	-
	7^{-}	$\pi 5/2^+[402] \otimes \pi 9/2^-[514]$	1.440	1.502	1.17	—
	18^{-}	$\nu 9/2^+[624] \otimes \nu 11/2^+[615] \otimes \pi 7/2^+[404] \otimes \pi 9/2^-[514]$	3.805	(3.863)	0.34	—
	17^{-}	$\nu 9/2^+[624] \otimes \nu 11/2^+[615] \otimes \pi 5/2^+[402] \otimes \pi 9/2^-[514]$	3.890	(3.863)	0.43	—
^{186}W	2^{-}	$\nu 7/2^{-}[503] \otimes \nu 11/2^{+}[615]$	1.307	0.953	0.16	-
	7^{-}	$\pi 5/2^+[402] \otimes \pi 9/2^-[514]$	1.513	1.517	1.16	-
	16^{+}	$\nu 7/2^{-}[503] \otimes \nu 11/2^{+}[615] \otimes \pi 5/2^{+}[402] \otimes \pi 9/2^{-}[514]$	4.101	3.543	0.44	_

表 4.12 K同核异能态转动带的带头能量(BHE)和g因子

高自旋数据。这些新数据揭示了许多有关原子核激发模型的有趣现象。一些 新发现使人们想要更好的理解核多体问题时面临着挑战。我们强调了多准粒 子高*K*激发需要用原子核理论模型进行系统性的研究。考虑到这个问题,我们 用Pfaffian方法把PSM的组态空间扩展到了十准粒子组态。

在本章内容中,我们系统性地分析了偶偶的^{174–186}W同位素高自旋态和 高*K*同核异能态的微观结构。多准粒子激发被用于分析晕带高自旋能级的结 构。除了晕带,我们还研究了同核异能态和基于这个同核异能态之上的转动 带,并预言了这些同核异能态的占据主要权重的多准粒子结构。我们对*K*同核 异能态的电磁属性(如*B*(*E*2),*B*(*M*1),*g*因子)也进行了大量的计算。我们 的计算结果总体上与实验数据符合的较好。目前,仍有大量K同核异能态的电 磁属性没有实验数据,本章的理论预言结果有待更多实验的进一步检验。

第五章 总结和展望

我们运用最近扩展过的投影壳模型理论分别对Kr同位素中高自旋转动带和W同位素中K同核异能带进行了研究。由于传统的投影壳模型利用广义Wick定理计算准粒子基矢中的转动矩阵元,导致数值计算耗时且复杂,因此组态空间只能包含不超过四准粒子的组态。最近,我们通过采用一种叫作Pfaffian的算法,首次把PSM的(仅限于偶偶核)组态空间扩展到了十准粒子组态。应用这种算法我们解决了数值计算的耗时问题,并能研究原子核极高自旋态的性质。通过研究重核在高自旋态的结构演化和低自旋的高K同核异能态的一些性质,我们发现超过四准粒子的组态在其中发挥着极其重要的作用。

关于Kr同位素,我们对这条同位素链的高自旋态结构进行了着重分析。随着原子核转速增加,固定长椭形状的壳模型基矢在高自旋态是一个有效的近似。从一些我们计算的结果与实验观测数据的符合可以印证这一点。随着自旋的增大,晕带和晕带附近的边带的结构演化被各多准粒子组态连续的带交叉描述。我们认为,包含六准粒子和八准粒子组态的基矢对高自旋态的结构细节描述是关键且必要的。另外,我们还计算了电四极跃迁几率并与实验值进行了对比。理论计算的B(E2)与实验值定性上符合。

关于W同位素,我们系统性地分析了^{174–186}W高自旋态和高K同核异能态的微观结构。多准粒子激发被用于分析晕带高自旋能级的结构。除了晕带,我们还研究了同核异能态和基于这个同核异能态之上的转动带,并预言了这些同核异能态的微观结构。我们还计算了K同核异能态的B(E2), B(M1)和g因子,并与实验数据进行了对比。

将来,我们还会在几个重点方面继续发展改进投影壳模型理论,并充分扩 大应用领域。第一,在轴对称形变的基础上将三轴形变或软γ形状考虑进投影 壳模型。第二,考虑粒子数守恒效应,即在PSM理论和计算程序中将粒子数投 影考虑进去。第三,将计算程序进行较大改进,如用并行计算替代现在的串行 计算,从而节省大量时间。

附录 A Pfaffian 算法介绍

我们在第二章提到,投影壳模型计算的最核心部分就是对转动矩阵 元(2.73)式的计算。然而,传统的用广义Wick定理计算转动矩阵元的方法 在应对包含高阶准粒子组态的计算时显得效率低下。于是,Mizusaki提出 将Pfaffian算法用于转动矩阵元的计算,这使得我们能够计算包含十准粒子组 态的转动矩阵元。这里我们呈现出Pfaffian算法的一些主要公式和步骤,更详 细的讨论见参考文献 [27]。为了一般性原则,我们把第二章的矩阵元(2.73)式 改写为下面的形式

$$\mathcal{M}_{I} = \langle \phi | a_{\nu_{1}'} \cdots a_{\nu_{n'}'} [\theta] a_{\nu_{1}}^{\dagger} \cdots a_{\nu_{n}}^{\dagger} | \phi \rangle \tag{A.1}$$

其中[θ]是一个与[Ω]类似的幺正算符,波函数| ϕ 〉是Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB) 准粒子真空态, a^{\dagger} ,a则是(HFB)准粒子产生湮灭算符。上式的[θ]定义为

$$[\theta] \equiv \frac{e^{-i\theta\hat{S}}}{\langle \phi | e^{-i\theta\hat{S}} | \phi \rangle} \tag{A.2}$$

其中Ŝ是相关对称群的生成元,类似的例子,角动量则是空间转动的生成元。

A.1 Balian-Brezin分解

在准粒子基矢中,算符[θ]可表示为下面的形式 [27]

$$[\theta] = e^{\hat{B}(\theta)} e^{\hat{C}(\theta)} e^{\hat{A}(\theta)}$$
(A.3)

其中的三个算符分别为

$$\hat{A}(\theta) = \sum \frac{1}{2} A(\theta)_{\nu',\nu} a_{\nu} a_{\nu'},$$

$$\hat{B}(\theta) = \sum \frac{1}{2} B(\theta)_{\nu',\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}^{\dagger},$$

$$\hat{C}(\theta) = \sum (\ln C(\theta))_{\nu,\nu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}$$
(A.4)

上式即Balian-Brezin分解法。其中的矩阵A, B, C分别为下面的三个收缩项

$$A_{\nu,\nu'}(\theta) \equiv \langle [\theta] a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}^{\dagger} \rangle$$

$$B_{\nu,\nu'}(\theta) \equiv \langle a_{\nu} a_{\nu'}[\theta] \rangle$$

$$C_{\nu,\nu'}(\theta) \equiv \langle a_{\nu}[\theta] a_{\nu'}^{\dagger} \rangle$$
(A.5)

由(A.1)和(A.3)两式可得

$$\mathcal{M}_{I} = \langle \phi | a_{\nu_{1}'} \cdots a_{\nu_{n'}'} e^{\hat{B}(\theta)} e^{\hat{C}(\theta)} e^{\hat{A}(\theta)} a_{\nu_{1}}^{\dagger} \cdots a_{\nu_{n}}^{\dagger} | \phi \rangle \tag{A.6}$$

为方便书写,我们在后文中忽略e指数上的符号(θ)。为简单考虑,我 们把准粒子产生覆灭算符的下角标编为一个集合: $J = \{\nu_1 \cdots \nu_n\}, J' = \{\nu'_1 \cdots \nu'_{n'}\}$ 。集合J和J'是集合 $[M] = \{1, 2, \cdots, M\}$ 的子集,其中M表示(HFB) 准粒子基矢的维数,且只能是偶数。将(A.6)式中的准粒子算符下角标编 为集合 $I = \{\nu'_1 \cdots \nu'_{n'}, \nu_1 + M \cdots \nu_n + M\}$ 。I是集合 $[2M] = \{1, 2, \cdots, 2M\}$ 的 一个子集。用符号 $(a \cdots a)_{\overline{J}}$ 和 $(a^{\dagger} \cdots a^{\dagger})_{\overline{J}}$ 分别代表准粒子算符的某种排列方 式 $a_{\nu'_1} \cdots a_{\nu'_{n'}}$ 和 $a^{\dagger}_{\nu_1} \cdots a^{\dagger}_{\nu_n}$,于是(A.6)式可写成

$$\mathcal{M}_{I} = \langle \phi | (a \cdots a)_{\overrightarrow{J}'} e^{\overrightarrow{B}} e^{\overrightarrow{C}} e^{\overrightarrow{A}} (a^{\dagger} \cdots a^{\dagger})_{\overrightarrow{J}} | \phi \rangle \tag{A.7}$$

当准粒子产生算符(或者湮灭算符)的下角标排列组合形式完全反向时, 我们将这种排列构成的集合标记为分。分和分的关系为

$$(a \cdots a)_{\overrightarrow{J}} = (a \cdots a)_{\overleftarrow{J}}(-)^{\frac{1}{2}n(n-1)}$$
(A.8)

其中 $(a \cdots a)_{5} = a_{\nu_n} \cdots a_{\nu_1}$ 。 $\frac{1}{2}n(n-1)$ 是从上式等号左边的排列到右边的排列 所需的总换位次数。 $(-)^{\frac{1}{2}n(n-1)}$ 项是因费米子产生湮灭算符遵循反对易式而产 生的。

A.2 费米相干态和Grassmann积分

这里我们简要的介绍一下费米相干态和Grassmann积分的概念和相关公式, 详细的讨论请看参考文献 [138]第一章。通常我们把费米子HFB准粒子湮灭算 符的本征态就称为费米相干态,即

$$a_{\nu}|\boldsymbol{\xi}\rangle = \xi_{\nu}|\boldsymbol{\xi}\rangle \tag{A.9}$$

其厄米共轭式为

$$\langle \boldsymbol{\xi} | a_{\nu}^{\dagger} = \langle \boldsymbol{\xi} | \xi_{\nu}^{*} \tag{A.10}$$

上面两式的本征值 ξ_{ν},ξ_{ν} 就是所谓的Grassmann数,并满足反对易关系式

$$\xi_{\nu}\xi_{\nu'} + \xi_{\nu'}\xi_{\nu} = 0 \tag{A.11}$$

$$-70-$$

$$\xi_{\nu}^* \xi_{\nu'}^* + \xi_{\nu'}^* \xi_{\nu}^* = 0 \tag{A.12}$$

$$\xi_{\nu}\xi_{\nu'}^{*} + \xi_{\nu'}^{*}\xi_{\nu} = 0 \tag{A.13}$$

其中 ν,ν' 等于(1,2,···,M)。费米相干态| $\boldsymbol{\xi}$)的表达式为

$$|\boldsymbol{\xi}\rangle = e^{-\sum_{\nu}\xi_{\nu}a_{\nu}^{\dagger}}|\phi\rangle \tag{A.14}$$

于是,由准粒子产生算符作用于费米相干态上可得出

$$a_{\alpha}^{\dagger}|\boldsymbol{\xi}\rangle = -\frac{\partial}{\partial\xi_{\alpha}}|\boldsymbol{\xi}\rangle$$
 (A.15a)

$$\langle \boldsymbol{\xi} | a_{\alpha} = + \frac{\partial}{\partial \xi_{\alpha}^*} \langle \boldsymbol{\xi} | \tag{A.15b}$$

HFB准粒子真空态波函数具有归一化特性: $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ 。准粒子真空态和费 米相干态波函数的内积为: $\langle \phi | \xi \rangle = 1$ 。 $| \xi \rangle$ 满足完备性关系式 [138]

$$\int \mathcal{D}(\xi^*,\xi) e^{-\sum_{\nu} \xi^*_{\nu} \xi_{\nu}} |\boldsymbol{\xi}\rangle \langle \boldsymbol{\xi}| = 1$$
(A.16)

其中: $\mathcal{D}(\xi^*,\xi) = \prod_{\alpha} d\xi^*_{\alpha} d\xi_{\alpha}$ 。微分元 $d\xi n d\xi^*$ 两者间也满足反对易规则。为简 单考虑,我们在后面的讨论中把 $\mathcal{D}(\xi^*,\xi)$ 中的乘积改成下面的形式

$$\mathcal{D}(\xi^*,\xi) = d\xi_{[\overline{M}]}^* d\xi_{[\overline{M}]} = d\xi_{[\overline{M}]} d\xi_{[\overline{M}]}^*$$
(A.17)

由于*M*只能是偶数,因此上式中的两项微分元的位置交换没有产生负号, 即 $(-)^{M} = 1$ 。其中的"半乘积" $d\xi_{\overline{[M]}} \pi d\xi_{\overline{[M]}}$ 表示

$$d\xi_{\overrightarrow{[M]}} = d\xi_1 \cdots d\xi_M, \qquad d\xi_{\overrightarrow{[M]}} = d\xi_M \cdots d\xi_1$$
 (A.18)

其中[M] = {1,2,…M}。与上式类似,对应于(A.7)式的下角标集合J = { ν_1, \dots, ν_n }也有类似的"部分乘积":

$$d\xi_{\overrightarrow{J}} = d\xi_{\nu_1} \cdots d\xi_{\nu_n}, \qquad d\xi_{\overleftarrow{J}} = d\xi_{\nu_n} \cdots d\xi_{\nu_1}$$
(A.19)

另有对应于J的补集 $\overline{J} = [M] - J$ 的"部分乘积"为

$$d\xi_{\overrightarrow{J}} = d\xi_1 d\xi_2 \cdots \widehat{d\xi_{\nu_1}} \cdots \widehat{d\xi_{\nu_n}} \cdots d\xi_{M-1} d\xi_M$$
$$d\xi_{\overleftarrow{J}} = d\xi_M d\xi_{M-1} \cdots \widehat{d\xi_{\nu_n}} \cdots \widehat{d\xi_{\nu_1}} \cdots d\xi_2 d\xi_1$$
(A.20)

$$-71 -$$

其中 $\hat{d\xi}_i$ 表示在 $d\xi_{[M]}$ 或 $d\xi_{[M]}$ 中去掉 $d\xi_i$ 。例如: $d\xi_1 \hat{d\xi}_2 d\xi_3 d\xi_4 = d\xi_1 d\xi_3 d\xi_4$ 。于是, 结合上面两式,半乘积 $d\xi_{[M]}$ 和 $d\xi_{[M]}$ 可表示为

$$d\xi_{[\overline{M}]} = d\xi_{\overline{J}} d\xi_{\overline{J}} (-)^{|J| - \frac{n(n+1)}{2}}$$
(A.21a)

$$d\xi_{\overrightarrow{[M]}} = d\xi_{\overrightarrow{J}} d\xi_{\overrightarrow{J}} (-)^{|J| + \frac{n(n-1)}{2}}$$
(A.21b)

其中 $|J| \equiv \sum_{k} \nu_{k}$ 。上面第二式由第一式的[M], *J*中的下角标全部反向排列得到。 相应的相因子可以通过(A.8)式看出。我们知道,一个集合补集的补集便等于其 自身,如: $J = \overline{J}$,再通过(A.21)式可得

$$d\xi_{\underline{[M]}} = d\xi_{\underline{[J]}} d\xi_{\underline{[J]}} (-)^{|\overline{J}| - \frac{\overline{n}(\overline{n}+1)}{2}}$$
(A.22a)

$$d\xi_{\overrightarrow{[M]}} = d\xi_{\overrightarrow{J}} d\xi_{\overrightarrow{J}} (-)^{|\overrightarrow{J}| + \frac{\overrightarrow{n}(\overrightarrow{n}-1)}{2}}$$
(A.22b)

其中 $\bar{n} = M - n$,是 \bar{J} 的元素数量。同理,我们也能给出 ξ^* 的与(A.21)和(A.22)相似的关系式。

于是,根据关系式 $|J| + |\bar{J}| = \frac{1}{2}M(M+1)和(A.21)、(A.22)两式,总微分元 可以写成$

$$d\xi_{\overrightarrow{[M]}}^* d\xi_{\overrightarrow{[M]}} = d\xi_{\overrightarrow{J}}^* d\xi_{\overrightarrow{J}}^* d\xi_{\overleftarrow{J}} d\xi_{\overleftarrow{J}}$$
(A.23a)

$$d\xi_{\overleftarrow{[M]}} d\xi_{\overrightarrow{[M]}}^* = d\xi_{\overleftarrow{J}} d\xi_{\overleftarrow{\overline{J}}} d\xi_{\overrightarrow{\overline{J}}}^* d\xi_{\overrightarrow{\overline{J}}}^* d\xi_{\overrightarrow{\overline{J}}}^*$$
(A.23b)

A.3 利用Grassmann积分表示矩阵元

设 $\{\xi^*,\xi\}$ 和 $\{\eta^*,\eta\}$ 是两组Grassmann数。这两组Grassmann数都遵循反对易规则。于是,将Grassmann数满足的完备性关系式(A.16)插入(A.6)式可得

$$\mathcal{M}_{I} = \int \mathcal{D}(\xi^{*},\xi) \langle \phi | (a \cdots a)_{\overrightarrow{J'}} | \xi \rangle e^{-\sum_{\nu} \xi_{\nu}^{*} \xi_{\nu}} \\ \times \int \mathcal{D}(\eta^{*},\eta) \langle \xi | e^{\hat{B}} e^{\hat{C}} e^{\hat{A}} | \eta \rangle e^{-\sum_{\nu} \eta_{\nu}^{*} \eta_{\nu}} \\ \times \langle \eta | (a^{\dagger} \cdots a^{\dagger})_{\overrightarrow{J}} | \phi \rangle$$
(A.24)

因关系式 $\langle \phi | \xi \rangle = 1$ 和 $\langle \phi | \eta \rangle = 1$ 成立,再由(A.9)和(A.10)两式,我们可以得出以下两个式子

$$\langle \phi | (a \cdots a)_{\vec{j}'} | \xi \rangle = (\xi \cdots \xi)_{\vec{j}'} \tag{A.25}$$

-72-

$$\langle \eta | (a^{\dagger} \cdots a^{\dagger})_{\overrightarrow{J}} | \phi \rangle = (\eta^{\dagger} \cdots \eta^{\dagger})_{\overrightarrow{J}}$$
(A.26)

从(A.4)可以看到, \hat{A} 和 \hat{B} 两个算符都不含有 $a^{\dagger}a$ 的项,于是,算符 $e^{\hat{B}}e^{\hat{C}}e^{\hat{A}}$ 在以 ξ^* 和 η 为Grassmann数的费米相干态中的矩阵元为

$$\langle \xi | e^{\hat{B}} e^{\hat{C}} e^{\hat{A}} | \eta \rangle = e^{\sum \frac{1}{2} B_{\nu',\nu} \xi_{\nu}^* \xi_{\nu'}^*} \langle \xi | e^{\hat{C}} | \eta \rangle e^{\sum \frac{1}{2} A_{\nu',\nu} \eta_{\nu} \eta_{\nu'}}$$
(A.27)

根据式子(详细推导见参考文献 [27])

$$e^{\hat{C}}|\eta\rangle = \left|\sum C_{\nu,\nu'}\eta_{\nu'}\right\rangle \tag{A.28}$$

以及根据(A.14)推导出的式子

$$\langle \xi | \eta \rangle = e^{\sum_{\nu} \xi_{\nu}^* \eta_{\nu}} \tag{A.29}$$

我们得到

$$\langle \xi | e^{\hat{C}} | \eta \rangle = \langle \xi | C \eta \rangle = e^{\sum \xi_{\nu}^* C_{\nu,\nu'} \eta_{\nu'}} \tag{A.30}$$

联合前面的(A.17)、(A.25)、(A.26)、(A.27)和(A.30)等式,(A.24)式可以表示 为下面的形式

$$\mathcal{M}_{I} = \int d\xi_{[M]}^{*} d\xi_{[M]} (\xi \cdots \xi)_{\overrightarrow{J'}} e^{-\sum_{\nu} \xi_{\nu}^{*} \xi_{\nu}} \\ \times \int d\eta_{\overrightarrow{[M]}} d\eta_{[M]}^{*} (\eta^{\dagger} \cdots \eta^{\dagger})_{\overrightarrow{J}} e^{-\sum_{\nu} \eta_{\nu}^{*} \eta_{\nu}} B(\xi^{*}, \eta)$$
(A.31)

其中

$$B(\xi^*,\eta) \equiv e^{\sum \frac{1}{2}B_{\nu',\nu}\xi^*_{\nu}\xi^*_{\nu}}e^{\sum \xi^*_{\nu}C_{\nu,\nu'}\eta_{\nu'}}e^{\sum \frac{1}{2}A_{\nu',\nu}\eta_{\nu}\eta_{\nu'}}$$
(A.32)

A.4 Grassmann积分的计算

这一节我们讨论(A.31)式的Grassmann积分如何计算。以下是我们将要用 到的几个公式

$$e^A = \sum_n \frac{A^n}{n!} \tag{A.33}$$

$$\int d\xi = 0 \tag{A.34a}$$

$$\int d\xi \ \xi = 1 \tag{A.34b}$$

根据Grassmann数遵循的反对易规则可得: $\xi_{\nu}^2 = 0$ 。积分式(A.31)中只和 η, η^* 有 关系的Grassmann积分部分为

$$\int d\eta_{\overline{[M]}} d\eta_{\overline{[M]}}^* (\eta^{\dagger} \cdots \eta^{\dagger})_{\overrightarrow{J}} e^{-\sum_{\nu} \eta_{\nu}^* \eta_{\nu}} B(\xi^*, \eta)$$
$$= \int d\eta_{\overrightarrow{J}} d\eta_{\overrightarrow{J}} B(\xi^*, \eta) \int d\eta_{\overleftarrow{J}}^* d\eta_{\overleftarrow{J}}^* (\eta^{\dagger} \cdots \eta^{\dagger})_{\overrightarrow{J}} e^{-\sum_{\nu} \eta_{\nu}^* \eta_{\nu}}$$
(A.35)

上式的推导运用了(A.23)式的结果。因 $\xi_{\nu}^2 = 0$,于是对 η_{ν}^* ($\nu \in J$)的积分为

$$\int d\eta_{\overleftarrow{J}}^* (\eta^{\dagger} \cdots \eta^{\dagger})_{\overrightarrow{J}} e^{-\sum_{\nu} \eta_{\nu}^* \eta_{\nu}} = 1$$
(A.36)

 $对\eta_{\nu}^{*} (\nu \in \overline{J})$ 的积分为

$$\int d\eta_{\overline{j}}^* e^{-\sum_{\nu \in \bar{J}} \eta_{\nu}^* \eta_{\nu}} = (-)^{\bar{n}} (\eta \cdots \eta)_{\overline{j}}$$
(A.37)

其中 $\bar{n} = M - n$ 。于是在(A.35)式中,对Grassmann数 η_{ν} ($\nu \in \bar{J}$)的积分为

$$\int d\eta_{\overrightarrow{J}} d\eta_{\overrightarrow{J}} (-)^{\overline{n}} (\eta \cdots \eta)_{\overleftarrow{J}} B(\xi^*, \eta)$$
$$= (-)^{\overline{n}} \int d\eta_{\overrightarrow{J}} B(\xi^*, \{\eta\}_J)$$
(A.38)

上式的 $\{\eta\}_J$ 表示一系列Grassmann数 $\eta_{\nu_1}, \dots, \eta_{\nu_n}$ 。对 η_{ν} ($\nu \in \overline{J}$)和 η_{ν}^* 积分之后,还有对 η_{ν} ($\nu \in J$)的积分。于是,(A.31)式可表示为

$$\mathcal{M}_{I} = (-)^{\bar{n}} \int \xi_{[M]}^{*} d\xi_{[M]} (\xi \cdots \xi)_{\overrightarrow{J'}} e^{-\sum_{\nu} \xi_{\nu}^{*} \xi_{\nu}} d\eta_{\overrightarrow{J}} B(\xi^{*}, \{\eta\}_{J})$$
$$= (-)^{\bar{n}} \int d\xi_{\overrightarrow{J'}}^{*} d\xi_{\overrightarrow{J'}}^{*} d\xi_{\overleftarrow{J'}} (\xi \cdots \xi)_{\overrightarrow{J'}} e^{-\sum_{\nu} \xi_{\nu}^{*} \xi_{\nu}} \int d\eta_{\overrightarrow{J}} B(\xi^{*}, \{\eta\}_{J}) \quad (A.39)$$

同理,对ξ的积分应为

$$\int d\xi_{\overline{j'}} d\xi_{\overline{j'}} (\xi \cdots \xi)_{\overline{j'}} e^{-\sum_{\nu} \xi_{\nu}^* \xi_{\nu}} = (\xi^* \cdots \xi^*)_{\overline{j'}}$$
(A.40)

于是有

$$\mathcal{M}_{I} = (-)^{\bar{n}} \int d\xi^{*}_{\overline{J'}} d\xi^{*}_{\overline{J'}} (\xi^{*} \cdots \xi^{*})_{\overline{J'}} \int d\eta_{\overline{J}} B(\xi^{*}, \{\eta\}_{J})$$
$$= (-)^{\bar{n}} \int d\xi^{*}_{\overline{J'}} d\eta_{\overline{J}} B(\{\xi^{*}\}_{J'}, \{\eta\}_{J})$$
$$= (-)^{\sigma} \int d\eta_{\overline{J}} d\xi^{*}_{\overline{J'}} B(\{\xi^{*}\}_{J'}, \{\eta\}_{J})$$
(A.41)

-74-

上式的 $\{\xi^*\}_J$ 表示一系列Grassmann数 $\xi^*_{\nu_1}, \dots, \xi^*_{\nu_n}$ 。其中表示相位的符号 $\sigma = \overline{n} + \frac{1}{2}(n+n')(n+n'-1)$ 。

Grassmann积分和Pfaffian之间的关系为

$$\int d\theta_{2n} \cdots d\theta_2 d\theta_1 \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2n} \theta_i A_{ij} \theta_j\right) = Pf(A)$$
(A.42)

利用上式和(A.41)式可得

$$\mathcal{M}_{I} = (-)^{\sigma} \int dz_{n+n'} \cdots dz_{2} dz_{1} e^{\frac{1}{2} \sum (\mathbb{M})_{\nu,\nu'} z_{\nu} z_{\nu'}}$$
$$= (-)^{\sigma} Pf(\mathbb{M}'_{I})$$
(A.43)

其中 $z = (\xi_{\nu'_1}^*, \dots, \xi_{\nu'_{n'}}^*, \eta_{\nu_1}, \dots, \eta_{\nu_n})$, 是一个Grassmann矢量。 M'_I 是M'的子矩阵, 维数为(n + n')。M'则是一个维数为2M的反对称矩阵

$$\mathbb{M}' = \begin{pmatrix} -B & C\\ -C^T & -A \end{pmatrix} \tag{A.44}$$

其中A, B, C就是(A.5)式中的各收缩项。再利用Pfaffian的变换,我们可将矩阵 元 \mathcal{M}_I 表示为

$$\mathcal{M}_{I} = Pf(\mathbb{M}_{I}) = Pf\left(\begin{array}{cc} B & C\\ -C^{T} & A \end{array}\right)$$
(A.45)

附录 B d-函数的数值精度

通过第二章的讨论我们知道,正如(2.71)式所描述的,在计算PSM投影矩 阵元时需要对*d*-函数进行积分。然而,我们以前用Wigner公式计算*d*-函数时会 遇到一个问题,即计算的自旋值越高计算精度就越低。本章讨论的就是如何解 决这个问题。

一般情况下,一个D函数可以表示为下面的形式

$$D_{mk}^{j}(\phi,\theta,\psi) = \langle jm|e^{-i\phi\hat{j}_{z}}e^{-i\theta\hat{j}_{y}}e^{-i\psi\hat{j}_{z}}|jk\rangle$$
$$= e^{-i(m\phi+k\psi)}d_{mk}^{j}(\theta)$$
(B.1)

其中

$$d^{j}_{mk}(\theta) = \langle jm | e^{-i\theta j_{y}} | jk \rangle \tag{B.2}$$

就是Wigner小d-函数,并可利用Wigner公式进行计算 [34,139]

$$d_{mk}^{j}(\theta) = \sum_{n=n_{\min}}^{n_{\max}} (-1)^{n} W_{n}^{jmk}(\theta)$$
(B.3)

其中n_{min}和n_{max}为非负整数

$$n_{\min} = \max(0, k - m) \tag{B.4}$$

$$n_{\max} = \min(j - m, j + k) \tag{B.5}$$

而

$$W_n^{jmk}(\theta) = w_n^{jmk} \left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{2j+k-m-2n} \left(-\sin\frac{\theta}{2}\right)^{m-k+2n}$$
(B.6)

$$w_n^{jmk} = \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+k)!(j-k)!}}{(j-m-n)!(j+k-n)!(n+m-k)!n!}$$
(B.7)

上面几个式子就是计算d-函数的Wigner公式,因其无法满足高自旋计算的 精度要求,我们需要其他的替代算法。文献 [139]提出了一种在极高自旋处(小 于100*ħ*)都具有高精度的计算方法

$$d_{mk}^{j}(\theta) = \sum_{\nu} t_{\nu}^{jmk} f(\nu\theta)$$
(B.8)

$$-77-$$



图 B.1 Wigner公式所计算的d-函数的数值结果与解析结果之间误差的分布图,自 $\hat{k}_j = 40\hbar, \ \beta \epsilon \theta = 60^\circ$

其中下标ν取遍

$$\nu = \nu_{\min}, \nu_{\min} + 1, \cdots, j \tag{B.9}$$

 ν_{\min} 见表**B**.1。函数f为

表 B.1 公式(B.8)中 _{vmin} 的取值						
Even $m - k$ Odd $m - k$						
Even $2j$	0	1				
Odd $2j$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				

$$f = \begin{pmatrix} \cos \\ \sin \end{pmatrix}$$
 for $\begin{pmatrix} \text{even} \\ \text{odd} \end{pmatrix} m - k$ (B.10)

而系数

$$t_{\nu}^{jmk} = \frac{2(-1)^{m-k}}{1+\delta_{\nu 0}} \sum_{n=n_{\min}}^{n_{\max}} (-1)^n w_n^{jmk} \sum_{r=0}^{[\nu-\frac{1}{2}p]} (-1)^r \binom{2\nu}{2r+p} \times \frac{1}{2\pi} I_{2(j+\nu-n-r)-m+k-p,2(n+r)+m-k+p}$$
(B.11)

$$-78-$$

当自旋小于100ħ时,这种计算方法的数值精度能够达到10⁻¹²,大大高于Wigner公式的精度。然而,由(B.11)式计算系数*t*^{jmk}时十分耗时,所以这种算法效率并不高。这里,我们给出一种精度很高效率也很高的计算*d*-函数的算法。

d-函数可以用下面的公式进行计算 [34]

$$d_{mk}^{j}(\theta) = \xi_{mk} \left[\frac{s!(s+\mu+\nu)!}{(s+\mu)!(s+\nu)!} \right]^{1/2} \left(\sin\frac{\theta}{2} \right)^{\mu} \left(\cos\frac{\theta}{2} \right)^{\nu} P_{s}^{(\mu,\nu)}(\cos\theta)$$
(B.12)

其中

$$\mu = |m - k|, \quad \nu = |m + k|, \quad s = j - \frac{1}{2}(\mu + \nu)$$
 (B.13)

而

$$\xi_{mk} = \begin{cases} 1 & \text{if } k \ge m, \\ (-1)^{k-m} & \text{if } k < m. \end{cases}$$
(B.14)

 $P_s^{(\mu,\nu)}(\cos\theta)$ 则是Jacobi多项式,可通过一个递推公式求出 [140]

$$2n(n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta-2)P_{n}^{(\alpha,\beta)}(z) = (2n+\alpha+\beta-1)\left\{(2n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta-2)z+\alpha^{2}-\beta^{2}\right\}P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(z) - 2(n+\alpha-1)(n+\beta-1)(2n+\alpha+\beta)P_{n-2}^{(\alpha,\beta)}(z)$$
(B.15)

其中n = 2,3,....。另外,还可利用下面的公式来简化算法

$$d_{mk}^{j}(\theta) = (-1)^{m-k} d_{-m-k}^{j}(\theta) = (-1)^{m-k} d_{km}^{j}(\theta) = d_{-k-m}^{j}(\theta)$$
(B.16)

参考文献

- Sobiczewski A. and Pomorski K., "Description of structure and properties of superheavy nuclei", Prog. Part. Nucl. Phys., 2007, 58(1), 292–349.
- [2] Casten R. and Sherrill B., "The study of exotic nuclei", Prog. Part. Nucl. Phys., 2000, 45, S171–S233.
- [3] Ren Z., Chen B., Ma Z., *et al.*, "One-proton halo in ²⁶p and two-proton halo in ²⁷s", Phys. Rev. C, 1996, **53**(2), R572.
- [4] Tanihata I., Hamagaki H., Hashimoto O., et al., "Measurements of interaction cross sections and nuclear radii in the light p-shell region", Phys. Rev. Lett., 1985, 55, 2676–2679.
- [5] Meng J. and Ring P., "Giant halo at the neutron drip line", Phys. Rev. Lett., 1998, 80, 460–463.
- Singh B., Zywina R., and Firestone R.B., "Table of superdeformed nuclear bands and fission isomers: (october 2002)", Nuclear Data Sheets, 2002, 97(2), 241–592.
- [7] Leoni S., Matsuo M., Bracco A., et al., "Compound and rotational damping in warm deformed rare-earth nuclei", Phys. Rev. Lett., 2004, 93(2), 022501.
- [8] Afanasjev A.V., Fossan D.B., Lane G.J., et al., "Termination of rotational bands: disappearance of quantum many-body collectivity", Phys. Rep., 1999, 322(1), 1–124.
- [9] Heyde K., Basic ideas and concepts in nuclear physics, IOP Publishing Ltd, 1999.
- [10] Caurier E., Martinez-Pinedo G., Nowacki F., et al., "The shell model as a unified view of nuclear structure", Rev. Mod. Phys., 2005, 77(2), 427.
- [11] 孟杰*et al.*, "原子核中的协变密度泛函理论", 物理学进展, 2011, **31**(4), 199.

- [12] 王顺金, 高等量子论与量子多体理论, 四川大学出版社, 2005.
- [13] Ring P. and Schuck P., The nuclear many-body problem, Springer Verlag, 2004.
- [14] Hara K. and Sun Y., "Projected shell model and high-spin spectroscopy", Int. J. Mod. Phys. E, 1995, 4(04), 637–785.
- [15] Sun Y. and Feng D.H., "High spin spectroscopy with the projected shell model", Phys. Rep., 1996, 264(1), 375–391.
- [16] Sheikh J.A., Bhat G.H., Sun Y., et al., "Triaxial projected shell model study of γ-vibrational bands in even-even er isotopes", Phys. Rev. C, 2008, 77(3), 034313.
- [17] Bender M. and Heenen P.H., "Configuration mixing of angular-momentum and particle-number projected triaxial hartree-fock-bogoliubov states using the skyrme energy density functional", Phys. Rev. C, 2008, 78, 024309.
- [18] Yao J.M., Meng J., Ring P., et al., "Three-dimensional angular momentum projection in relativistic mean-field theory", Phys. Rev. C, 2009, 79, 044312.
- [19] Rodríguez T.R. and Egido J.L., "Triaxial angular momentum projection and configuration mixing calculations with the gogny force", Phys. Rev. C, 2010, 81, 064323.
- [20] Chen F.Q., Sun Y., and Ring P., "Quantum fluctuations in the collective 0+ states of deformed nuclei", Phys. Rev. C, 2013, 88(1), 014315.
- [21] 尧江明, 原子核谱学性质的协变密度泛函理论, 北京大学-博士研究生学位 论文, 2009.
- [22] Hara K. and Iwasaki S., "On the quantum number projection", Nucl. Phys. A, 1979, **332**(1), 61–28.
- [23] Robledo L.M., "Sign of the overlap of hartree-fock-bogoliubov wave functions", Phys. Rev. C, 2009, 79, 021302.

- [24] González-Ballestero C., Robledo L.M., and Bertsch G.F., "Numeric and symbolic evaluation of the pfaffian of general skew-symmetric matrices", Comput. Phys. Commun., 2011, 182(10), 2213–2218.
- [25] Bertsch G.F. and Robledo L.M., "Symmetry restoration in hartree-fockbogoliubov based theories", Phys. Rev. Lett., 2012, 108, 042505.
- [26] Mizusaki T. and Oi M., "A new formulation to calculate general hfb matrix elements through the pfaffian", Phys. Lett. B, 2012, 715(1), 219–224.
- [27] Mizusaki T., Oi M., Chen F.Q., et al., "Grassmann integral and balian– brézin decomposition in hartree–fock–bogoliubov matrix elements", Phys. Lett. B, 2013, 725(1), 175–179.
- [28] Gao Z.C., Hu Q.L., and Chen Y., "A convenient implementation of the overlap between arbitrary hartree–fock–bogoliubov vacua for projection", Phys. Lett. B, 2014, 732, 360–363.
- [29] Hu Q.L., Gao Z.C., and Chen Y., "Matrix elements of one-body and twobody operators between arbitrary hfb multi-quasiparticle states", Phys. Lett. B, 2014, 734, 162–166.
- [30] 胡济民, 原子核理论, 原子能出版社, 1996.
- [31] Wang L., Chen F., Mizusaki T., et al., "Toward extremes of angular momentum: Application of the pfaffian algorithm in realistic calculations", Phys. Rev. C, 2014, 90, 011303.
- [32] Wang L., Sun Y., Mizusaki T., et al., "Reduction of collectivity at very high spins in ¹³⁴nd: Expanding the projected-shell-model basis up to 10quasiparticle states", Phys. Rev. C, 2016, 93, 034322.
- [33] Wang L.J., Sun Y., and Ghorui S.K., "Shell model for gamow-teller transition of heavy, deformed odd-*a* nuclei with high excitation energy", in preparation.
- [34] Varshalovich D.A., Moskalev A.N., and Khersonskii V.K., *Quantum theory* of angular momentum, World Scientific, 1988.

- [35] Bengtsson T. and Ragnarsson I., "Rotational bands and particle-hole excitations at very high spin", Nucl. Phys. A, 1985, 436(1), 14–82.
- [36] Sun Y. and Hara K., "Fortran code of the projected shell model: feasible shell model calculations for heavy nuclei", Comp. Phys. Comm., 1997, 104(1), 245–258.
- [37] Lawson R.D., Theory of the nuclear shell model, Clarendon Press, 1980.
- [38] Bouchez E., Matea I., Korten W., et al., "New shape isomer in the selfconjugate nucleus ⁷²kr", Phys. Rev. Lett., 2003, 90, 082502.
- [39] Gade A., Bazin D., Becerril A., et al., "Quadrupole deformation of the self-conjugate nucleus ⁷²kr", Phys. Rev. Lett., 2005, 95, 022502.
- [40] Iwasaki H., Lemasson A., Morse C., et al., "Evolution of collectivity in ⁷²kr:evidence for rapid shape transition", Phys. Rev. Lett., 2014, **112**, 142502.
- [41] Clement E., Gorgen A., Korten W., et al., "Shape coexistence in neutrondeficient krypton isotopes", Phys. Rev. C, 2007, 75, 054313.
- [42] Suhonen J., "Analysis of double- β transitions in ⁷⁸kr", Phys. Rev. C, 2013, 87, 034318.
- [43] Valiente-Dobón J.J., Steinhardt T., Svensson C.E., et al., "Evidence for nontermination of rotational bands in ⁷⁴kr", Phys. Rev. Lett., 2005, 95, 232501.
- [44] de Voigt M.J.A., Dudek J., and Szymański Z., "High-spin phenomena in atomic nuclei", Rev. Mod. Phys., 1983, 55, 949.
- [45] Frauendorf S., "Spontaneous symmetry breaking in rotating nuclei", Rev. Mod. Phys., 2001, 73, 463.
- [46] Rodriguez T.R., "Structure of krypton isotopes calculated with symmetryconserving configuration-mixing methods", Phys. Rev. C, 2014, 90, 034306.

- [47] Fu Y., Mei H., Xiang J., et al., "Beyond relativistic mean-field studies of low-lying states in neutron-deficient krypton isotopes", Phys. Rev. C, 2013, 87, 054305.
- [48] Bai Z., Fu X., Jiao C., et al., "Shape coexistence and evolution in neutrondeficient krypton isotopes", Chin. Phys. C, 2015, 39, 094101.
- [49] Girod M., Delaroche J., Görgen A., et al., "The role of triaxiality for the coexistence and evolution of shapes in light krypton isotopes", Phys. Lett. B, 2009, 676, 39.
- [50] Sato K. and Hinohara N., "Shape mixing dynamics in the low-lying states of proton-rich kr isotopes", Nucl. Phys. A, 2011, 849, 53.
- [51] Bender M., Bonche P., and Heenen P., "Shape coexistence in neutrondeficient kr isotopes:constraints on the single-particle spectrum of selfconsistent mean-field models from collective excitations", Phys. Rev. C, 2006, 74, 024312.
- [52] Chen F.Q. and Egido J.L., private communications.
- [53] Kaneko K., Sun Y., and Wadsworth R., submitted for publication.
- [54] Palit R., Sheikh J.A., Sun Y., et al., "Projected shell model study for the yrast-band structure of the proton-rich mass-80 nuclei", Nucl. Phys. A, 2001, 686, 141.
- [55] Moller P., Nix J.R., Myers W.D., et al., "Nuclear ground-state masses and deformations", At. Data Nucl. Data Tables, 1995, 59(2), 185–381.
- [56] Lalazissis G.A. and Raman S., "Ground-state properties of even-even nuclei in the relativistic mean-field theory", At. Data Nucl. Data Tables, 1999, 71, 1.
- [57] Raman S., Nestor C.W., and Tikkanen P., "Transition probability from the ground to the first-excited 2⁺ state of even-even nuclides", At. Data Nucl. Data Tables, 2001, 78, 1.

- [58] Verma S., Devi R., and Khosa S.K., "Microscopic study of yrast bands and backbending anomaly in ^{78–82}kr isotopes", Eur. Phys. J. A, 2006, **30**, 531.
- [59] Sun Y., M.Wiescher, Aprahamian A., et al., "Nuclear structure of the exotic mass region along the rp process path", Nucl. Phys. A, 2005, 758, 765.
- [60] Sun Y. and Sheikh J.A., "Anomalous rotational alignment in n=z nuclei and residual neutron-proton interaction", Phys. Rev. C, 2001, **64**, 031302.
- [61] Stephens F.S. and Simon R.S., "Coriolis effects in the yrast states", Nucl. Phys. A, 1972, 183(2), 257–284.
- [62] Johnson A., Ryde H., and Hjorth S.A., "Nuclear moment of inertia at high rotational frequencies", Nucl. Phys. A, 1972, 179, 753.
- [63] Hara K., Sun Y., and Mizusaki T., "Backbending mechanism of ⁴⁸cr", Phys. Rev. Lett., 1999, 83, 1922.
- [64] Long G.L. and Sun Y., "Superdeformed band in ³⁶ar described by the projected shell model", Phys. Rev. C, 2001, 63, 021305(R).
- [65] Freer M., "Nuclear physics: Nucleons come together", Nature (London), 2012, 487, 309.
- [66] Andreoiu C., "High-spin lifetime measurements in the n=z nucleus ⁷²kr", Phys. Rev. C, 2007, 75, 041301(R).
- [67] http://www.nndc.bnl.gov/.
- [68] Kelsall N.S., "Consequences of neutron-proton pairing correlations for the rotational motion of the n=z nucleus ⁷²kr", Phys. Rev. C, 2001, 64, 024309.
- [69] Görgen A., "Lifetime measurement in ⁷⁴kr and ⁷⁶kr", Eur. Phys. J. A, 2005, 26, 153.
- [70] Singh B. and Farhan A.R., "Nuclear data sheets for a = 74", Nucl. Data Sheets, 2006, **107**, 1923.

- [72] Valiente-Dobón J.J., Svensson C.E., O' Leary C.D., et al., "High-spin rotational structures in ⁷⁶kr", Phy. Rev. C, 2005, **71**, 034311.
- [73] R. Bengtsson P.M., Nix J.R., and Zhang J., "Nuclear shapes and shape transitions", Phys. Scr., 1984, 29, 402.
- [74] Kotila J. and Iachello F., "Phase space factors for β⁺β⁺ decay and competing modes of double-β decay", Phys. Rev. C, 2013, 87, 024313.
- [75] Suhonen J. and Civitarese O., "Weak-interaction and nuclear-structure aspects of nuclear double beta decay", Phys. Rep., 1998, 300, 123.
- [76] Dhal A., Sinha R.K., Agarwal P., et al., "Shape changes at high spin in ⁷⁸kr", Eur. Phys. J. A, 2006, 27, 33.
- [77] Petrovici A., Schmid K.W., Radu O., et al., "Shape coexistence effects in ⁷⁸kr", J. Phys. (London) G, 2006, **32**, 583.
- [78] Farhan A.R. and Singh B., "Nuclear data sheets for a = 78", Nucl. Data Sheets, 2009, **110**, 1917.
- [79] Döring J., Wood V.A., Holcomb J.W., et al., "High-spin bands in ⁸⁰kr", Phys. Rev. C, 1995, 52, 76.
- [80] Singh B., "Nuclear data sheets for a = 80", Nucl. Data Sheets, 2005, **105**, 223.
- [81] Mukherjee G., Jain H.C., Palit R., et al., "Shape of ⁸⁰kr at high spin", Phys. Rev. C, 2001, 64, 034316.
- [82] Abriola D. and Sonzogni A.A., "Nuclear data sheets for a = 72", Nucl. Data Sheets, 2010, **111**, 1.
- [83] Yao J.M., Hagino K., Li Z.P., et al., "Microscopic benchmark study of triaxiality in low-lying states of ⁷⁶kr", Phys. Rev. C, 2014, 89, 054306.

- [84] Walker P. and Dracoulis G., "Energy traps in atomic nuclei", nature(London), 1999, 399, 35–40.
- [85] Walker P.M. and Xu F.R., "High-k isomerism in rotational nuclei", Physica Scripta, 2016, 91(1), 013010.
- [86] Dracoulis G.D., Walker P.M., and Kondev F.G., "Review of metastable states in heavy nuclei", Rep. Prog. Phys., 2016, 79, 076301.
- [87] Walker P.M., "Angular momentum orientation at bandcrossings in rotating nuclei", Journal of Physics G Nuclear Physics, 2007, 34, 123–127.
- [88] Walker P.M. and Carroll J.J., "Ups and downs of nuclear isomers", Phys. today, 58(6), 39.
- [89] Xu F.R., Zhao E.G., Wyss R., et al., "Enhanced stability of superheavy nuclei due to high-spin isomerism", Phys. Rev. Lett., 2004, 92(25), 252501.
- [90] Herzberg R.D., Greenlees P.T., Butler P.A., et al., "Nuclear isomers in superheavy elements as stepping stones towards the island of stability", Nature, 2006, 442(7105), 896–899.
- [91] Purry C.S., Walker P.M., Dracoulis G.D., et al., "Rotation of an eightquasiparticle isomer", Phys. Rev. Lett., 1995, 75, 406.
- [92] Dracoulis G.D., Lane G.J., Kondev F.G., et al., "Structure of two-,four-,and six-quasiparticle isomers in ¹⁷⁴yb and k-forbidden decays", Phys. Rev. C, 2005, **71**, 044326.
- [93] Reed M.W., Cullen I.J., Walker P.M., et al., "Discovery of highly excited long-lived isomers in neutron-rich hafnium and tantalum isotopes through direct mass measurements", Phys. Rev. Lett., 2010, 105, 172501.
- [94] Aprahamian A. and Sun Y., "Nuclear physics: Long live isomer research", Nat.Phys., 2005, 1, 81–82.
- [95] Belic D., Arlandini C., Besserer J., et al., "Photoactivation of ¹⁸⁰ta^m and its implications for the nucleosynthesis of nature's rarest naturally occurring isotope", Phys. Rev. Lett., 1999, 83, 5242.
- [96] Walker P.M., Dracoulis G.D., and Carroll J.J., "Interpretation of the excitation and decay of interpretation of the excitation and decay of ¹⁸⁰ta^m through a k^π=5⁺ band", Phys. Rev. C, 2001, **64**, 061302.
- [97] Frauendorf S., Neergård K., Sheikh J.A., et al., "Moments of inertia for multiquasiparticle configurations", Phys. Rev. C, 2000, 61, 064324.
- [98] Frauendorf S., "Description of multi-quasiparticle bands by the tilted axis cranking model", Nuclear Physics A, 2000, 677, 115–170.
- [99] Almehed D., Frauendorf S., and Dönau F., "Pairing correlations in high-k bands", Phys. Rev. C, 2001, 63, 044311.
- [100] Ohtsubo S.I. and Shimizu Y.R., "Calculation of strongly-coupled rotational bands in terms of the tilted axis cranking model", Nuclear Physics A, 2003, 714, 44–62.
- [101] Shimizu Y.R., Matsuzaki M., and Matsuyanagi K., "High-K precession modes: Axially symmetric limit of wobbling motion in the cranked randomphase approximation description", Phys. Rev. C, 2005, 72, 014306.
- [102] Xu F.R., Walker P.M., and Wyss R., "Limit to high-spin isomerism in hafnium isotopes", Phys. Rev. C, 2000, 62, 014301.
- [103] Jolie J. and Linnemann A., "Prolate-oblate phase transition in the hf-hg mass region", Phys. Rev. C, 2003, 68, 031301(R).
- [104] Richard B.F., Coral M.B., and Chu S.Y.F., Table of isotopes, 1999.
- [105] Hara K. and Sun Y., "Studies of high-spin states in rare-earth nuclei using the angular momentum projection method:(i). back-bending and plateau of moments of inertia", Nucl. Phys. A, 1991, 529(3), 445–466.
- [106] Chen F.Q. and Egido J.L., "Shape vibration and quasiparticle excitations in the lowest 0⁺ excited state in erbium isotopes", Phys. Rev. C, 2016, 93, 064313.
- [107] Wang M., Audi G., Kondev F.G., et al., "The ame2016 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references", Chin. Phys. C, 2017, 41, 030003.

- [108] Sun Y., "Projection techniques to approach the nuclear many-body problem", Physica Scripta, 2016, 91, 043005.
- [109] Tandel S.K., Chowdhury P., Seabury E.H., et al., "High-Kisomers and rotational structures in ¹⁷⁴W", Phys. Rev. C, 2006, 73, 044306.
- [110] Vandone V., Leoni S., Benzoni G., *et al.*, "Global properties of k hindrance probed by the γ decay of the warm rotating ¹⁷⁴w nucleus", Phys. Rev. C, 2013, **88**, 034312.
- [111] Tandel S.K., Knox A.J., Parnell-Lampen C., et al., "Search for strongly deformed structures and observation of multiple nucleon alignments in ¹⁷⁴W", Phys. Rev. C, 2008, 77, 024313.
- [112] Browne E. and Junde H., "Nuclear data sheets for a = 174", Nuclear Data Sheets, 1999, **87**(1), 15–176.
- [113] Crowell B., Chowdhury P., Blumenthal D.J., et al., "High-K isomers in ¹⁷⁶W and mechanisms of K violation", Phys. Rev. C, 1996, 53, 1173–1190.
- [114] Basunia M., "Nuclear data sheets for a = 176", Nuclear Data Sheets, 2006, 107(4), 791–1026.
- [115] Walker P.M., Sletten G., Gjrup N.L., et al., "High-K barrier penetration in ¹⁷⁴Hf: A challenge to K selection", Phys. Rev. Lett., 1990, 65, 416–419.
- [116] Nakatsukasa T., Matsuyanagi K., Matsuzaki M., et al., "Quantal rotation and its coupling to intrinsic motion in nuclei", Physica Scripta, 2016, 91(7), 073008.
- [117] Söderström P.A., Nyberg J., Regan P.H., *et al.*, "Spectroscopy of neutronrich ^{168,170}Dy: Yrast band evolution close to the N_pN_n valence maximum", Phys. Rev. C, 2010, **81**, 034310.
- [118] Ghorui S.K., Sahu B.B., Praharaj C.R., *et al.*, "Examining the stability of sm nuclei around n = 100", Phys. Rev. C, 2012, **85**, 064327.

- [119] Patel Z., Söderström P.A., Podolyák Z., *et al.*, "Isomer decay spectroscopy of ¹⁶⁴Sm and ¹⁶⁶Gd: Midshell collectivity around n = 100", Phys. Rev. Lett., 2014, **113**, 262502.
- [120] Purry C.S., Walker P.M., Dracoulis G.D., et al., "Multi-quasiparticle isomers and rotational bands in ¹⁷⁸W", Nuclear Physics A, 1998, 632, 229– 274.
- [121] Achterberg E., Capurro O., and Marti G., "Nuclear data sheets for a = 178", Nuclear Data Sheets, 2009, **110**(7), 1473 1688.
- [122] Wu S.C. and Niu H., "Nuclear data sheets for a = 180", Nuclear Data Sheets, 2003, **100**(4), 483 705.
- [123] Mann L.G., Carlson J.B., Lanier R.G., *et al.*, "¹⁸¹Ta $(p,2n\gamma)^{180}$ W reaction", Phys. Rev. C, 1979, **19**, 1191–1204.
- [124] Smith M.B., Walker P.M., Ball G.C., *et al.*, " γ rays emitted in the decay of 31-yr ¹⁷⁸hf^{m2}", Phys. Rev. C, 2003, **68**, 031302(R).
- [125] Walker P.M., Yeung K.C., Dracoulis G.D., et al., "Backbending in ¹⁸⁰w: a t-band crossing", Phys. Lett. B, 1993, **309**, 17.
- [126] Regan P.H., Walker P.M., Dracoulis G.D., et al., "Yrast four-quasi-particle states in ¹⁸²W", Nuclear Physics A, 1994, 567, 414–430.
- [127] Shizuma T., Mitarai S., Sletten G., *et al.*, "High-spin states in ¹⁸²W", Nuclear Physics A, 1995, **593**, 247–280.
- [128] Singh B. and Roediger J.C., "Nuclear data sheets for a=182", Nuclear Data Sheets, 2010, 111(8), 2081–2330.
- [129] Wheldon C., Valiente-Dobón J.J., Regan P.H., et al., "Multi-quasiparticle states in ¹⁸⁴W via multi-nucleon transfer", European Physical Journal A, 2004, 20, 365–369.
- [130] Baglin C.M., "Nuclear data sheets for a = 184", Nuclear Data Sheets, 2010, **111**(2), 275–523.

- [131] Baglin C.M., "Nuclear data sheets for a = 186", Nuclear Data Sheets, 2003, 99(1), 1 196.
- [132] Castel B. and Towner I., *Modern theories of nuclear moments*, Oxford studies in nuclear physics, 1990.
- [133] Sun Y. and Egido J.L., "Angular-momentum-projected description of the yrast line of dysprosium isotopes", Nucl. Phys. A, 1994, 580, 1.
- [134] Sun Y. and Egido J.L., "Excited bands of ¹⁶⁸yb in an angular momentum projected theory", Phys. Rev. C, 1994, 50, 1893.
- [135] Stone N., "Table of nuclear magnetic dipole and electric quadrupole moments", Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2005, 90(1), 75–176.
- [136] Bian B.A., Di Y.M., Long G.L., et al., "Systematics of g factors of 2⁺₁ states in even-even nuclei from gd to pt: A microscopic description by the projected shell model", Phys. Rev. C, 2007, 75, 014312.
- [137] Chen F.Q., Sun Y., Walker P.M., et al., "Mixing effects on k-forbidden transition rates from the 6⁺ isomers in the n = 104", J. Phys. G, 2013, 40, 015101.
- [138] Negele J.W. and Orland H., Quantum many-particle systems, Westview Press, Oxford, 1998.
- [139] Tajima N., "Analytical formula for numerical evaluations of the wigner rotation matrices at high spins", Phys. Rev. C, 2015, 91, 014320.
- [140] Abramowitz M. and Stegun I.A., Handbook of mathematical functions, U.S. Government Printing Office, 1972.

攻读学位期间发表的学术论文目录

- Systematical study of high-spin rotational bands in neutron-deficient Kr isotopes by the extended projected shell model Nuclear Physics A 957, 208-229 (2017)
 Xin-Yi Wu, S. K. Ghorui, Long-Jun Wang, K. Kaneko, and Yang Sun
- [2] Systematic study of multi-quasiparticle K-isomeric bands in tungsten isotopes by the extended projected shell model Physical Review C 95, 064314 (2017)
 Xin-Yi Wu, S. K. Ghorui, Long-Jun Wang, Yang Sun, Mike Guidry, and Philip M. Walker

致 谢

首先,感谢我的博士导师孙扬教授。感谢孙老师多年来对我的培养。我的 论文能够顺利完成离不开孙老师的帮助和指导。孙老师治学严谨、学术视野开 阔、学术交流频繁、科研经验丰富,是我将来学习的榜样,是我未来科研之路 的灯塔。其次,特别感谢王龙军和来自印度的Surja。王龙军以卓越的科研能力 改进了我们的投影壳模型程序,使我能够在此基础上进行大量的计算并顺利的 发表论文。在我撰写发表的论文时,Surja也给了我极大的无私的帮助,对此我 深表感谢。另外,还要感谢陈芳祁在我博士期间对我在科研上的关心和帮助。

然后,感谢孙老师组内其他同学在科研和生活上对我的帮助。他们是:杨 迎春、刘艳鑫、金华、王韩奎、周之翌、胡庆丽、吕翠娟、邱远和Wendell。此 外,感谢物理与天文学院和粒子所的其他老师和同学对我的帮助,包括陈列文 教授、符长波教授、贺刚老师、薛颖老师、蔡宝军、初鹏程、孙开佳、王睿、 徐栋、张笑鹏、张振、郑皓等。感谢华东师范大学的周先荣教授和原子能院的 高早春研究员。

最后,感谢我的父母和家人对我的包容和支持,这是我能够顺利毕业的最 大源动力和精神支柱。