

链分子结构态中的子体关联

陈永寿 郑玉明 卢兆启
(中国科学院原子能研究所)

摘 要

本文从微观多体理论出发,给出了三中心位阱壳模型投影变分法公式,对⁹Be的正宇称低激发态能级进行了计算,并着重地分析了可能的链分子结构中的⁸Be子体关联和³He子体关联。

一、引 言

轻原子核的某些基态,尤其是激发态中,有类似分子态的性质。它们的内部结构类似于几个子体核关联起来的分子结构。子体核可以是某些轻原子核,也可以是单个核子。但是子体核不应该与它们的自由状态相同。由于核力的作用和泡利原理的作用,子体核一般都受到不同程度的激发,并且我们认为可能存在这样的核态,其中子体核本身又处于集团化的分子态,即子体中又含子体,整个核态具有类似大分子的结构,例如⁸Be的第三个0⁺态(能量为20.1 MeV)其内部态结构可能为 α - α^* 集团结构, α^* 又是³He~n或³T~P集团结构^[1]。我们认为,在具有三个子体核以上的分子态中,子体核之间的分子态关联对于整体核的分子结构态的性质具有重要的影响。本文的目的在于研究这种子体关联同整体分子态的相互关系。为使计算简化,图像清楚些,我们先从最简单的情况开始,即具有三个子体的链分子结构态。本文从微观多体理论出发,给出了三中心壳模型投影变分法计算公式,并计算了⁹Be的低激发正宇称态能级。在第二节中,给出了模型的简要描述;第三节是主要结果;在第四节进行简要讨论。

二、模 型

设所关心的原子核态具有三个子体核的链分子结构。每个子体核分别有 A_1 、 A_2 和 A_3 个核子,它们分别运动在位阱1、2和3中(如图

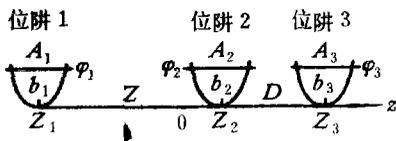


图1

1所示)。三个位阱中心选取在z轴上的三点(Z_1 , Z_2 和 Z_3)。坐标原点选取在整个体系的质心上。位阱为谐振子位阱。位阱参数分别为 b_1 、 b_2 和 b_3 。位阱1和2的中心间距为 Z 。位阱2和3的中心间距为 D 。本文只讨论 $A_i \leq 4$ 的情况。各位阱中单粒

子空间轨道波函数为

$$\left. \begin{aligned} \varphi_1 &= \delta |000\rangle + \sqrt{1-\delta^2} |001\rangle, \\ \varphi_2 &= \gamma |000\rangle + \sqrt{1-\gamma^2} |001\rangle, \\ \varphi_3 &= \beta |000\rangle + \sqrt{1-\beta^2} |001\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

式中 $|n_x n_y n_z\rangle$ 为谐振子波函数. n_x 、 n_y 和 n_z 分别为沿 x 轴、 y 轴和 z 轴方向的量子数. δ 、 γ 、 β 、 Z 、 D 和 b_i 为变分参数. 不过根据具体问题的特点可大大减少变分参数的数目. 当 $D=0$, 并 $b_2=b_3$ 时, 本模型变为双中心壳模型. 因而可同时描述三团和二团的集团结构.

体系的多体哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^A t_i - T_{c.m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}. \quad (2)$$

式中, t_i 为单粒子动能算符, $T_{c.m}$ 为质心动能算符, V_{ij} 为二核子相互作用势.

体系的具有确定轨道角动量为 L 的微观多体波函数可写为,

$$\Psi_L(\xi_1 \cdots \xi_A) = \mathcal{D}^L \Phi(\xi \cdots \xi_A). \quad (3)$$

式中, ξ 为核子的空间坐标, 自旋和同位旋坐标的缩写. 内部态波函数 Φ 为 A 个核子的 Slater 行列式. \mathcal{D}^L 为角动量投影算符. 考虑到所描述的体系的轴对称性质, 在如图 1 的坐标选取下, 投影算符 \mathcal{D}^L 可写为

$$\mathcal{D}^L = \frac{2L+1}{2} \int_{-1}^1 d \cos \theta P_L(\cos \theta) e^{-i\theta L_y}, \quad (4)$$

式中 P_L 为勒让德多项式. $e^{-i\theta L_y}$ 为绕 y 轴转 θ 角的转动算符.

体系的波函数由投影变分法确定,

$$\delta \langle \Psi_L | H | \Psi_L \rangle / \langle \Psi_L | \Psi_L \rangle, \quad (5)$$

能量期望值可写为:

$$E_L = \frac{\langle \Psi_L | H | \Psi_L \rangle}{\langle \Psi_L | \Psi_L \rangle} = \frac{\langle \Phi | H | \mathcal{D}^L \Phi \rangle}{\langle \Phi | \mathcal{D}^L | \Phi \rangle}. \quad (6)$$

三、计算结果

${}^9\text{Be}$ 的正宇称低激发态, 1.68 MeV, $J^\pi = \frac{1}{2}^+$; 3.06 MeV, $J^\pi = \frac{5}{2}^+$; 4.7 MeV, $J^\pi = \frac{3}{2}^+$ 等^[2]都是中子和 α 衰变能级态, 而且正好在 ${}^8\text{Be} + n$ 和 ${}^5\text{He} + \alpha$ 阈能附近. 因此, 我们假定这些态的主要内部结构为 $\alpha \sim \alpha \sim n$ 链分子结构. 按前述模型有 $A_1 = A_2 = 4$, $A_3 = 1$ (简称为(441)结构). 其内部态多体波函数可写为:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{9!}} \det \{ \varphi_1(+\uparrow+\downarrow-\uparrow-\downarrow) \varphi_2(+\uparrow+\downarrow-\uparrow-\downarrow) \varphi_3(-\uparrow) \}. \quad (7)$$

式中, “+”, “-”, “ \uparrow ”和“ \downarrow ”分别表示质子, 中子, 自旋朝上和朝下.

实验和理论知识告诉我们, α 粒子作为 ${}^8\text{Be}$ 分子态的子体核时, 同它的自由状态差不多. 因此, 在本计算中, 我们取 $\delta = \gamma = 1$ (即 φ_1 和 φ_2 都为 S 态单粒子波函数), 又

取 $b_1 = b_2 \equiv b_a$ (b_a 由对 ${}^4\text{He}$ 的变分计算确定). 当 $D = 0$, 即位阱 2 和 3 重合时, 为使粒子填充不会违反泡利原理, 本文假定 φ_2 同 φ_3 正交, 得到正交条件为,

$$\beta = \frac{\sqrt{2} b_3 D}{\sqrt{b_3^2 + (1 + 2D^2)b_3^2}} \quad (8)$$

由(8)式可见, $D \rightarrow 0$ 时 $\beta = 0$, 即中子填在 P 态上, α 粒子的 4 个核子处于 S 态, 构成了 ${}^3\text{He}$ 的简单壳模型态. 当 $D \rightarrow \infty$ 时, $\beta = 1$, 即中子处于 S 态.

对于中子的空间轨道态 φ_3 的不同选取, 我们得到三个具体模型: φ_3 有 S 和 P 态成分, 并满足(8)式的情况记为模型“MSP”; $\beta \equiv 1$, 即 φ_3 只含 S 态, 记为模型“MS”; $\beta \equiv 0$, 即 φ_3 只含 P 态, 记为模型“MP”. 计算结果, 如不特殊指明时均指二体核力 VOLKOV_{no.1}^[3], $m = 0.56$ 的结果. 由变分法计算得到 ${}^4\text{He}$ 的结合能为 -27.93 MeV , $b_a = 1.37 \text{ fm}$. 因此, 在对 ${}^9\text{Be}$ 计算中, 我们取 $b_1 = b_2 \equiv 1.37 \text{ fm}$.

对 ${}^9\text{Be}$ 的正宇称低激发态能谱, 我们假定 $\frac{1}{2}^+$ 态是由轨道角动量 $L = 0$ 同自旋 $S = \frac{1}{2}$ (由中子贡献)耦合的结果. 而 $\frac{3}{2}^+$ 和 $\frac{5}{2}^+$ 态则是 $L = 2, S = \frac{1}{2}$ 相耦合, 并由自旋轨道耦合力劈裂开的二条能级. 其耦合常数取由实验能级确定的值. 能谱的计算结果见图 2. 图中第一列为实验值(计算的 0^+ 态已重整化为实验的 $\frac{1}{2}^+$ 态). 除第三列为模型 MSP 下对 Z, D 和 b_3 同时变分的结果外, 其余均为给定 b_3 对 Z 和 D 变分的结果. 几种模型的计算值同实验符合的相当好. 这说明本文假定的 (441) 链分子结构是该能级的内部态的主要结构, 它较好的给出了适中的转动惯量, 使 $E_{2^+} - E_{0^+}$ 值落在实验值 2.2 MeV 附近. 本文计算了 ${}^8\text{Be}$ 的 (44) 分子态能级(见表 2), 得到 2^+ 态为 3.28 MeV (实验值为 3 MeV), 其转动惯量比 ${}^9\text{Be}$ 的小. 这同(44)分子结构比(441)链分子结构转动惯量小的直观概念是一致的.

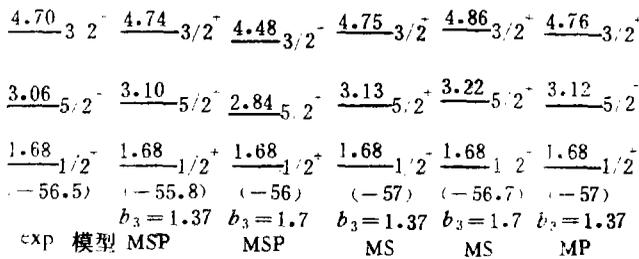


图 2 ${}^9\text{Be}$ 正宇称低激发能谱, 括号中数为 $\frac{1}{2}^+$ 态总能量, 能量单位 MeV, 长度单位 (fm)

表 1 为 ${}^9\text{Be}$ 该正宇称态的能量和波函数的计算值. 表 3 为 ${}^5\text{He}$, $L^\pi = 1^-$ 态的能量和波函数计算值. 表 2 为 ${}^8\text{Be}$ 的计算结果. 将这三个表中的内部态波函数的结果加以比较, 不难看出, ${}^9\text{Be}$ 的这些正宇称态的内部结构中, 明显地存在有二个 α 粒子的 ${}^8\text{Be}$ 分子态关联和中子与一个 α 粒子的 ${}^5\text{He}$ 分子态关联, 并且子体 ${}^8\text{Be}$ 的内部态同自由 ${}^8\text{Be}$ 的内部态的结构差别不大 (二 α 间平均间距相差很小), 但是子体 ${}^5\text{He}$ 的内部态则受到较大扭曲, 中子同 α 间的平均间距比自由 ${}^5\text{He}$ 的缩小了, 中子的轨道变化也较大.

表 1 能量 E_{L^*} 和波函数. 能量单位 MeV, 长度单位 fm

核 力	模 型	L^*	E_{L^*}	$b_1 = b_2$	b_3	β	Z	D	
VOL _{no,1}	MSP	0+	-49.50	1.37	1.37	0.250	3.5	0.5	
		2+	-47.26	1.37	1.37	0.250	3.5	0.5	
		0+	-50.91	1.37	1.70	0.245	3.5	0.5	
		2+	-48.92	1.37	1.70	0.245	3.5	0.5	
		MS	0+	-49.70	1.37	1.37	1.0	3.5	1.25
			2+	-47.43	1.37	1.37	1.0	3.5	1.0
	0+		-50.34	1.37	1.70	1.0	3.25	1.5	
	2+		-47.98	1.37	1.70	1.0	3.0	1.75	
	MP	0+	-49.45	1.37	1.37	0.0	3.5	0.5	
		2+	-47.19	1.37	1.37	0.0	3.5	0.5	
	HN _{no,1}	MS	0+	-56.40	1.317	1.32	1.0	3.0	1.0
			2+	-54.15	1.317	1.32	1.0	3.0	1.0
MSP		0+	-57.10	1.317	1.50	0.249	3.25	0.5	
		2+	-54.90	1.317	1.50	0.249	3.25	0.5	

表 2 ${}^9\text{Be}$ 的能级和波函数. 按去掉位阱 3 的双中心壳模型计算. $b_0 = b_1 = b_2, Z_0 = Z$

L^*	E_{L^*} (MeV)	b_0 (fm)	Z_0 (fm)
0+	-55.43	1.36	3.4
2+	-52.15	1.38	3.23
4+	-44.05	1.41	2.65

表 3 ${}^9\text{He}$ 的 $L^* = 1^-$ 态能量和波函数. 按去掉位阱 1 的双中心壳模型计算.

$$b_2 = b_0 = 1.37 \text{ fm}, D_0 = D$$

模 型	E (MeV)	b_3 (fm)	β	D_0 (fm)
MSP	-21.98	1.37	0.612	1.75
	-23.38	1.70	0.710	2.0
MS	-23.10	1.37	1.0	3.25
	-23.86	1.70	1.0	3.5
MP	-20.92	1.37	0.0	1.10

从表 1 可见,对 VOL_{no,1} 核力, 0^+ 态总结合能计算值为 -50 MeV 左右. 实验值为 -56.49 MeV. 这种结合能的短缺主要来自一般核力对 ${}^9\text{He}$ 结合能的贡献都总是不足这一事实. 这种核力不确定性的影响在本文模型中可以加以估计. 作为一种近似估计,我

们假定在核力相同，内部结构基本模型一致的前提下， ${}^7\text{He}$ 同 ${}^8\text{Be}$ 结合能计算值的不足与 ${}^9\text{Be}$ 该态结合能计算值的不足近似相同。从而本文采取了通过 ${}^7\text{He}$ 和 ${}^8\text{Be}$ 结合能的独立计算来修正 ${}^9\text{Be}$ 的链分子结构态总能量的方法。修正后的值已在图 2 中标出，它同实验值是接近的。这又说明了 ${}^9\text{Be}$ 该态中主要存在着 ${}^8\text{Be}$ 子体关联和 ${}^7\text{He}$ 子体关联。这同时也使 0^+ 态计算值重整化到 $\frac{1}{2}^+$ 态实验值的做法更有根据些。用核力 $\text{HN}_{\text{no.1}}^{[4]}$ 对 ${}^9\text{Be}$ 的 E_{0^+} 计算值达到 -57 MeV (见表 1)，同实验符合很好。计算说明此核力对 ${}^7\text{He}$ 结合能的贡献也是不足的，不过这一不足与此核力对 ${}^8\text{Be}$ 结合能过大的贡献相抵销了。 $\text{HN}_{\text{no.1}}$ 核力是三力程核力，同 VOLKOV 力差别较大。但二种力的计算结果经修正后的值都与实验符合较好。这说明 ${}^9\text{Be}$ 的该分子链态结构中 ${}^8\text{Be}$ 子体关联同 ${}^7\text{He}$ 子体关联起着重要作用这一特点对于核力的选取不是非常敏感的。这同链结构中，子体 A_1 与子体 A_3 由于平均间距大，其相互作用将居次要地位的直观图像是一致的。对 ${}^9\text{Be}$ 正宇称低激发态的总结合能和能谱的计算值都与实验符合较好。这说明 (441) 链分子结构是 ${}^9\text{Be}$ 该态的主要内部结构。

图 3 是 $L^\pi = 0^+$ 态的能量曲面等位图。由图可见， $D \approx 0.5\text{ fm}$ ，沿 Z 方向的峭壁

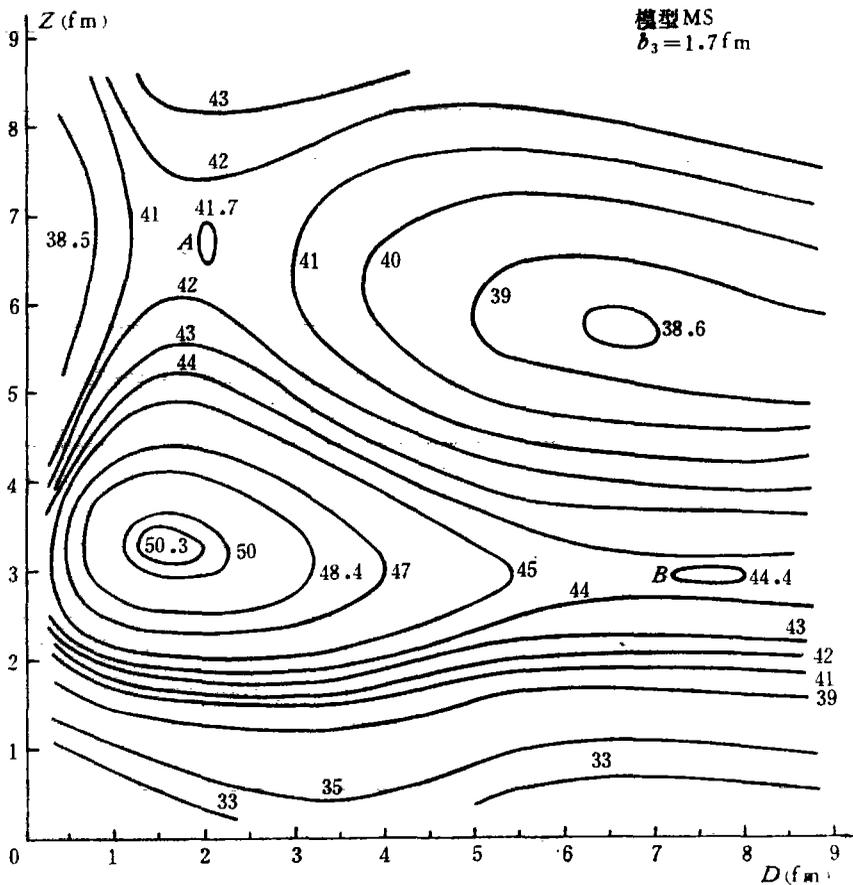


图 3 ${}^9\text{Be}$ 的 $L^\pi = 0^+$ 态总能量等位图，能量单位 MeV，标数符号相反

和 $Z \approx 0.5 \text{ fm}$ 沿 D 方向的峭壁以及 $Z \sim 6 \text{ fm}$, $D \sim 6.5 \text{ fm}$ 为中心的较平坦的小丘形成了以 $Z \approx 3.25 \text{ fm}$, $D \approx 1.5 \text{ fm}$ 为中心的谷和两个马鞍结构 A 和 B 。这种图像是由于 ${}^8\text{Be}$ 子体关联同 ${}^3\text{He}$ 子体关联的共存和相互制约而形成的。谷的位置显示了这两种子体关联的存在。从谷到 B 的方向是中子衰变的主通道。 ${}^8\text{Be}$ 子体关联引起的沟同中子衰变需越过的位垒形成了此通道上的马鞍结构 B 。从谷到 A 的方向是 α 衰变的主通道。 ${}^3\text{He}$ 子体关联引起的沟同 α 衰变需越过的位垒形成了此通道上的马鞍结构 A 。中子衰变通道较 α 衰变通道沟深而鞍点较低。因此中子衰变优于 α 衰变。对于 $L^\pi = 2^+$ 态总结合能等位图也有上述特点。这同实验上发现的 ${}^9\text{Be}$ 这几条正宇称态能级主要是中子衰变能级的事实是定性符合的。按模型 MSP 计算的总结合能等位图也大致还能反映出上述特点。但当继续增加中子单粒子态的 P 态成份时,由于 ${}^3\text{He}$ 子体关联的增强, α 衰变成为主要衰变了。因此,虽则模型 MP 也能得到较好的能谱计算值(这是由于变分结果也是(441)内部结构),但从衰变的主要方式看,我们认为模型 MS 和 MSP 更适合于 ${}^9\text{Be}$ 的这些正宇称低激发态的描述。

图 4 为 $L^\pi = 0^+$ 态总能量随 D 的变化。 D 取负值时,中子处于二 α 之间。当 $D = 0$ 时,中子与一个 α 构成简单壳模型 ${}^3\text{He}$ (对 MS 模型,并且 $b_3 = b_2$ 时将违反泡利原理,图中曲线间断)。由图可见,具有双 ${}^3\text{He}$ 子体关联的(414)链结构能量较高。具有 $\alpha \sim {}^3\text{He}$ 关联的(45)结构能量也高。能量最低的构型总是具有 ${}^8\text{Be}$ 子体关联同 ${}^3\text{He}$ 子体关联的(441)链结构。

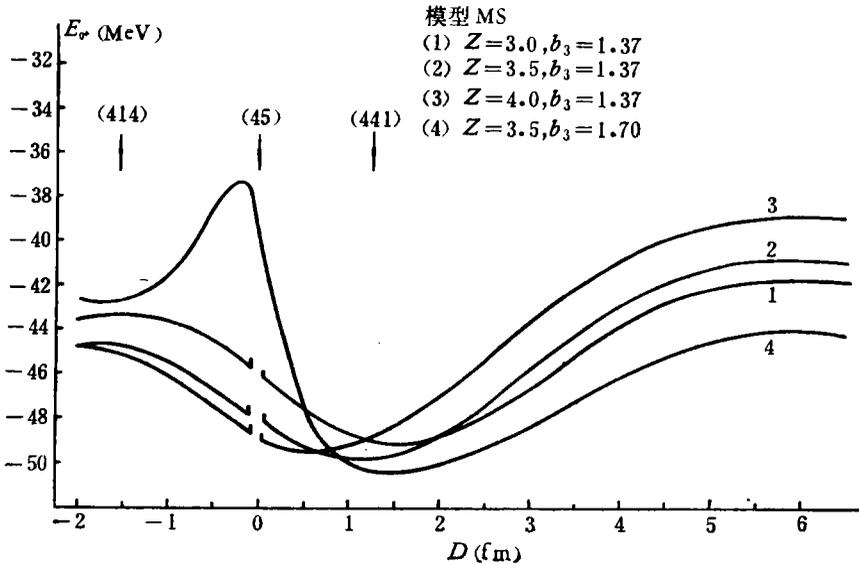


图 4 ${}^9\text{Be}$ 的 $L^\pi = 0^+$ 态能量 E_{0+} 随 D 的变化,长度单位为 fm

${}^9\text{B}$ 的几条低激发态能级 (1.6 MeV, 2.79 MeV 和 4.8 MeV)^[2] 同 ${}^9\text{Be}$ 的正宇称低能级相似。它们处于 ${}^3\text{Li} + \alpha$ 和 ${}^8\text{Be} + \text{P}$ 阈能附近,是 P 和 α 衰变能级。根据这些特点,同时考虑到质子同 α 的库仑力作用更有利于分子链态的产生,本文用具有 ${}^8\text{Be}$ 子体关联和 ${}^3\text{Li}$ 子体关联的(441)链分子结构,用上述方法计算了 ${}^9\text{B}$ 的这些能级,计算值同实验值符合也

相当好(见图5).

1.8	<u>4.84</u> _{3/2⁺}	<u>4.85</u> _{3/2⁺}	<u>4.86</u> _{3/2⁺}
<u>2.79</u> _{5/2⁺}	<u>2.84</u> _{5/2⁺}	<u>2.85</u> _{5/2⁺}	<u>2.86</u> _{5/2⁺}
<u>1.6</u> (-54.7)	<u>1.6</u> _{1/2⁺} (-54.5)	<u>1.6</u> _{1/2⁺} (-54.8)	<u>1.6</u> _{1/2⁺} (-54)
exp	模型 MSP	MS	MP
	$b_3=1.37$	$b_3=1.37$	$b_3=1.37$

图5 ${}^9\text{Be}$ 的可能的正宇称低激发态能谱, 能量单位 MeV, 各标符意义同图2

四、讨 论

本文模型计算是对多子体核的分子态结构中, 子体关联的初步研究. 虽则主要对 ${}^9\text{Be}$ 情况进行了计算, 但本模型方法可用于研究其它可能的三子体链分子结构态. 虽然本计算说明了链分子结构在 ${}^9\text{Be}$ 的正宇称低激发态中是主要的内部结构, 然而进一步对该能级的其它性质进行研究是必要的. 进一步考虑其它的内部结构态的混合也是很有意义的. 另外, 从动力学角度, 在重离子反应、三体和四体反应中研究子体关联同整体分子共振态的相互关系也是很有意思的工作.

作者对金星南同志对有关问题的讨论和帮助表示感谢.

参 考 文 献

- [1] H. Furutani, H. Horinchi, R. Tamagaki, *FIZIKA*, 9 (1977), 29.
- [2] F. Ajzenberg-selove, T. Lauritsen, *Nucl. Phys.*, A227 (1974), 1.
- [3] A. B. Volkov, *Nucl. Phys.*, 74 (1965), 33.
- [4] A. Hasegawa, S. Nagata, *Prog. Theor. Phys.*, 45 (1971), 1768.

THE SUB-BODY CORRELATION IN THE CHAIN-LIKE MOLECULAR STRUCTURE STATE

CHEN YONG-SHOU ZHENG YU-MING LU ZHAO-QI

(Institute of Atomic Energy, Academia Sinica)

ABSTRACT

From the microscopical many body theory, the formula of the projected variation method for three Well-Cluster shell model is given. The calculation has been made for the positive parity excited energy levels of ${}^9\text{Be}$, and then discuss the ${}^9\text{Be}$ correlation and the ${}^3\text{He}$ correlation in the possible chain-like molecular structure.