

DOI: 10.13718/j.cnki.xdzk.2016.11.015

基于形变 Woods-Saxon 势和 大型笛卡尔基下的单粒子计算^①

段芳芳, 李加兴

西南大学 物理科学与技术学院, 重庆 400715

摘要: 通过用基矢展开法计算解决了在 Woods-Saxon 势的平均场下的定态 Schrödinger 方程, 从而得到单粒子在形变势中, 处于单个谐振子壳层空间的能量本征值和能量本征函数. 这个方法的实质在于写出 Hamiltonian 的代表矩阵, 在此基础上再将矩阵对角化. 最后, 给出了主要的计算公式, 并对计算结果进行了讨论.

关键词: 单粒子能级; 波函数; Schrödinger 方程; Woods-Saxon 势; 谐振子基

中图分类号: O571.21

文献标志码: A

文章编号: 1673-9868(2016)11-0100-08

求解单粒子在平均场中的能量本征值方程是研究核性质的一个非常基础的工作. 在平均场中计算单粒子的本征值和本征函数是核物理中必须解决的首要问题. 而且, 单粒子波函数是构成多粒子体系波函数必需的基础, 原子核壳结构的发现就是来自这种平均场方法. 在研究壳模型的时候, 需要考虑单核子处于由谐振子势形成的多个确定的 N 壳层^[1]. 由于壳层间的能量间距较大, 本研究只考虑单粒子处于由谐振子势形成的单个确定的 N 壳层时, 在形变势中的本征值和本征函数.

为了解释原子核的基态性质, 人们提出了许多模型, 如宏观-微观模型(macroscopic-microscopic)模型^[2]、非相对论的 Hartree-Fock 模型^[3]和相对论平均场(RMF)模型^[4]. 本研究的主要工作是在形变平均场中基于 Woods-Saxon 势和谐振子基下的单粒子计算. 形变粒子的 Hamiltonian 大多通过 Skyrme 类型的有效核子-核子相互作用的 Hartree-Fock 自洽约束计算得到, 自洽的过程需要大型服务器运算, 过程复杂, 耗时很长, 而本研究的方法仅仅是用 Woods-Saxon 势的唯象平均场代替自洽求解单体势, 目前并没有采用相同方法来研究同类问题的论文. 这个方法的原理是在以谐振子为基的截位展开式中找 Schrödinger 方程的本征函数, 简言之, 这个方法解决问题的实质是求出 Hamiltonian 的矩阵形式. 这个方法具有两个不同阶段的特征, 先是引用谐振子基来建立 Hamiltonian 的矩阵形式, 然后使这个矩阵对角化来获得本征值和本征矢量. 这种计算方法简单, 计算量较小, 运行很快.

1 Schrödinger 方程

单体形变势的 Schrödinger 方程:

$$H|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle \quad (1)$$

① 收稿日期: 2015-08-03

基金项目: 国家自然科学基金(11075133, U1332126, 10205019).

作者简介: 段芳芳(1991-), 女, 山东临清人, 硕士研究生, 主要从事理论物理的研究.

方程中 $\mathbf{H}$ 代表核子(中子或质子)系统的 Hamiltonian, E_i 和 ϕ_i 分别代表系统的本征值和本征函数. 通过求矩阵特征值和特征矢量的方法求解方程(1), 选用柱坐标中的谐振子波函数为基矢, 在基矢空间中将矩阵 $\mathbf{H}$ 对角化.

核子(质子和中子)的 Hamiltonian 表示为

$$\mathbf{H} = T + V + V^{so} + e\phi^C \quad (2)$$

式中: T, V 和 V^{so} 分别表示动能、势能和自旋轨道耦合能; 对于质子来说, 库仑势表示为 ϕ^C ; e 是电子. 动能表示为

$$T = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2 \quad (3)$$

式中: $\hbar$ 为普朗克常数, m 为核子质量. 由于核力是短程力, 那么原子核可以通过相对论平均场这一量子多体体系唯象描述. 对于形变核, 将 V 定义为^[5]

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp(R_V L_V / a_V)} \quad (4)$$

其中: V_0, R_V 和 a_V 是平均场参数; L_V 为准半径.

$$V^{so} = \frac{1}{\hbar} (\nabla S(\mathbf{r}) \wedge \mathbf{p}) \boldsymbol{\sigma} \quad (5)$$

(5) 式中 $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ 为核子的动量, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 为泡利矩阵. 平均场中 V^{so} 与 V 有相同的定义:

$$S(\mathbf{r}) = \frac{\kappa}{1 + \exp(R_{so} L_{so} / a_{so})}$$

其中: κ 是自旋轨道耦合强度, R_{so} 和 a_{so} 是有关 $S(\mathbf{r})$ 平均场参数, L_{so} 是自旋轨道平均场的准半径.

对于质子来说, 库仑势可以通过液滴模型近似得到

$$\phi^C(Z, P, \phi) = \frac{\rho_{\text{charge}}}{4} \int_{Z_1}^{Z_2} dz \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{-(z-Z) \frac{\partial \rho_s^2}{\partial z} + 2\rho_s^2 - 2\rho_s P \cos(\phi - \phi) - 2P \frac{\partial \rho_s}{\partial \phi} \sin(\phi - \phi)}{\sqrt{(z-Z)^2 + \rho_s^2 + P^2 - 2\rho_s P \cos(\phi - \phi)}} \right] \quad (6)$$

式中: ρ_s 为质子核面密度; ρ_{charge} 是液滴模型的电荷密度, 即

$$\rho_{\text{charge}} = (Z - 1)e / (4/3)\pi R_{\text{ch}}^3$$

其中: $(Z - 1)$ 是液滴模型中的质子数, R_{ch} 是电荷密度.

2 平均场的形变参数

满壳外只有一个核子时, 满壳层是球形, 而壳外核子具有确定的轨道角动量, 所以它的分布几率不是球形, 这将导致原子核出现非球形变化. 这个壳外核子的运动使核心受到一定的力, 从而使核心跟着产生形变. 这就叫壳外核子对满壳层核心的“极化”作用. 原子核的形变主要也是由这种极化作用引起的. 另外, 核心中的核子间有相互作用, 可以反抗外围核子对核心的极化作用而尽量保持原型^[6].

中心平均势的表面形变信息是无量纲的准半径 $L_V(\mathbf{r})$ 给出^[7]:

$$L_V(\mathbf{r}) = \frac{\Pi_V(\mathbf{r})}{R_V \|\nabla \Pi_V(\mathbf{r})\|} \quad (7)$$

式中:

$$\Pi_V(\mathbf{r}) = \sqrt{\pi_V(\mathbf{r}) - \pi_{V_{\min}}} - \sqrt{-\pi_{V_{\min}}} \quad (8)$$

其中 $\pi_{V_{\min}}$ 是 $\pi_V(\mathbf{r})$ 的绝对小值.

将中心势相互作用面定义为

$$\pi_v(\mathbf{r}) = \frac{x^2}{A_v^2} + \frac{y^2}{B_v^2} + \frac{z^2}{C_v^2} - 1 = 0 \quad (9)$$

同理可得出自旋轨道相互作用势面和库伦相互作用势面的表达式为

$$\pi_{so}(\mathbf{r}) = \frac{x^2}{A_{so}^2} + \frac{y^2}{B_{so}^2} + \frac{z^2}{C_{so}^2} - 1 = 0 \quad (10)$$

$$\pi_{ch}(\mathbf{r}) = \frac{x^2}{A_{ch}^2} + \frac{y^2}{B_{ch}^2} + \frac{z^2}{C_{ch}^2} - 1 = 0 \quad (11)$$

这里的 3 个曲面具有核面对称性, 也就意味着

$$\pi(x, y, z) = \pi(-x, y, z) = \pi(x, -y, z) = \pi(x, y, -z) \quad (12)$$

那么对于两个中心势、自旋-轨道耦合势和库仑势, 就可以得到:

$$V(-x, -y, -z) = V(x, y, z) \quad (13)$$

$$S(-x, -y, -z) = S(x, y, z) \quad (14)$$

$$\phi^C(-x, -y, -z) = \phi^C(x, y, z) \quad (15)$$

由于(13)、(14)和(15)可以看出宇称

$$p_a = (-1)^{n_x + n_y + n_z} = \pm 1 \quad (16)$$

如果 $n_x + n_y + n_z$ 为偶数, 则宇称为正; 如果 $n_x + n_y + n_z$ 为奇数, 那么宇称为负. 此外, 这里也体现了 Kramer 简并, 事实上本征值的双重简并与旋称 q_K 有关

$$q_K = (-1)^{n_x + n_y} \sum = \pm \frac{1}{2} \quad (17)$$

体系具有时间反演不变性, 久期矩阵分成两个子矩阵, 只需要考虑一个, 因为两个矩阵具有相同的本征值, 但是本征函数彼此之间时间反演.

由式(6)可知库伦势必须在柱坐标中, 因此(6)式中的库伦势曲面可以写为

$$\rho_s^2 = \frac{1 - (z/C_{ch})^2}{\{(\cos\phi/A_{ch})^2 + (\sin\phi/B_{ch})^2\}} \quad (18)$$

用玻尔参数(β, γ)表示 A, B 和 C , 即:

$$A = \frac{R}{\chi} \left[1 + \beta \left(\frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \left(\gamma - \frac{2}{3}\pi \right) \right] \quad (19)$$

$$B = \frac{R}{\chi} \left[1 + \beta \left(\frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \left(\gamma - \frac{4}{3}\pi \right) \right] \quad (20)$$

$$C = \frac{R}{\chi} \left[1 + \beta \left(\frac{5}{4\pi} \right)^{1/2} \cos(\gamma) \right] \quad (21)$$

式中: R 是半径, χ 是确保体系守恒的条件^[7].

对于中子数和质子数而言, 首先应该定义两个辅助量^[8]:

$$\hat{\delta} = \frac{\frac{N-Z}{A} + 0.0112 \frac{Z^2}{A^{5/3}}}{1 + \frac{3.15}{A^{1/3}}} \quad (22)$$

$$\hat{\epsilon} = -\frac{0.147}{A^{1/3}} + 0.330\hat{\delta}^2 + \frac{0.00248Z^2}{A^{4/3}} \quad (23)$$

在计算过程中, 参数 V_0, R_v, R_{so} 和 R_{ch} 通过液滴模型推到得到^[7].

$$V_{0, \chi} = -52.5 \mp 48.7\hat{\delta} \quad (24)$$

$$R_{v, \zeta_N} = R_0 \cdot \zeta_N \left[1 - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{a_v}{R_0 \cdot \zeta_N} \right)^2 \right] \quad (25)$$

$$R_{so} = R_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{a_{so}}{R_0} \right) \right] \quad (26)$$

$$R_{ch} = R_0 - \frac{1}{3} r_0 A^{\frac{1}{3}} \left(\frac{N-Z}{N+Z} \right) - \delta \quad (27)$$

其中

$$R_0 = r_0 A^{\frac{1}{3}} (1 - \epsilon) \quad (28)$$

$$R_{0, \zeta_N} = R_0 + 0.82 - \frac{0.56}{R_0} \pm 0.22 \delta \quad (29)$$

而 $r_0 = 1.16 \text{ fm}$, 对于扩散参数 a_v, a_{so} 和自旋-轨道耦合系数 κ , 分别为^[9]:

$$a_v = 0.70 \text{ fm} \quad a_{so} = 0.70 \text{ fm} \quad \kappa_N = 17.33 \text{ MeV fm}^2 \quad \kappa_Z = 21 \text{ MeV fm}^2 \quad (30)$$

3 谐振子基函数

为了求解 Schrödinger 方程(1), 基于笛卡尔哈密顿谐振子基下构建 Hamiltonian 的代表矩阵. 谐振子基函数表示为:

$$|n_x n_y n_z \Sigma\rangle = i^{n_y} \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) \cdot \sigma_\Sigma \quad (31)$$

式中 i^{n_y} 是复数,

$$\phi_{n_x}(x) = \sqrt{\beta_x} \exp[-(\beta_x x)^2/2] \cdot h_{n_x}(\beta_x x) \text{ 其中 } \beta_x = \sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}} \quad (32)$$

$$h_{n_x}(x) = H_{n_x}(x) / \sqrt{(2^{n_x} \cdot n_x! \cdot \pi^{\frac{1}{2}})} \quad (33)$$

同理, 在 y 和 z 坐标轴有相同的表示. 固有自旋表示为:

$$\sigma_{+\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_{-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (34)$$

$\hbar\omega_x, \hbar\omega_y$ 和 $\hbar\omega_z$ 为形变参数, 用 β_x, β_y 和 β_z 来代替它们. 基函数(23) 中量子数 n_x, n_y 和 n_z 用来表示无自旋的形变谐振子势:

$$E(n_x, n_y, n_z) = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots, \infty \quad (35)$$

在计算中采取的形变标准为

$$\left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z \leq E = \left(N_{\max} + \frac{3}{4}\right) \hbar\omega_0 \quad (36)$$

式中的 $\hbar\omega_0$ 采取的是 Nilsson 模型^[8]:

$$\hbar\omega_0 \approx 41 \cdot A^{-\frac{1}{3}} \quad (37)$$

核子在谐振子势阱中运动时的能量为

$$E(n, l, m) = \left[2(n-1) + l + \frac{3}{2}\right] \hbar\omega_0 = \left[N + \frac{3}{2}\right] \hbar\omega_0 \quad (38)$$

这里的 N 指定为主壳层 $N = 2(n-1) + l$, 其中 n 为径向量子数, l 是轨道量子数.

以上讨论都没有考虑核子的自旋-轨道耦合问题. 事实上核子不但存在自旋-轨道耦合, 而且这种耦合作用很强. 由于这种强作用力, 核子的能量不仅取决于轨道角动量 l 的大小, 而且取决于轨道角动量 l

相对于 s 的取向. s 与 l 平行时, 总角动量 j 的量子数 $j = l + \frac{1}{2}$; s 与 l 反平行时, 总角动量 j 的量子数 $j = l - \frac{1}{2}$. 这两种情况下能量是不同的. 而且 $j = l + \frac{1}{2}$ 小于 $j = l - \frac{1}{2}$ 的能级. 自旋轨道耦合后, 同一条 l 能级将劈裂成两条^[6]. 于是得到新的能级:

$$E\left(n, l, j = l \mp \frac{1}{2}\right) = \left[2(n-1) + l + \frac{3}{2}\right] \hbar \omega_0 + \Delta E \left(l \mp \frac{1}{2}\right) \quad (39)$$

4 Hamiltonian 代表矩阵元

在上面的谐振子基下, *Hamiltonian* 矩阵元素的计算形式为

$$\begin{aligned} & \langle n'_x, n'_y, n'_z, \sum' | H | n_x, n_y, n_z, \sum \rangle = \\ & \langle n'_x, n'_y, n'_z, \sum' | T + V + V^{so} + e \cdot \phi^C | n_x, n_y, n_z, \sum \rangle \end{aligned} \quad (40)$$

动能 T 矩阵元素可通过下式直接求得

$$\begin{aligned} \langle n'_x, n'_y, n'_z, \sum' | T | n_x, n_y, n_z, \sum \rangle &= \frac{1}{4} \delta_{\sum \sum'} i^{(n_y - n'_y)} [\hbar \omega_z \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} (2n_z + 1) - \\ & \hbar \omega_z \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} + 2\sqrt{n'_z(n_z + 1)} - \\ & \hbar \omega_z \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} - 2\sqrt{n_z(n'_z + 1)} + cycl] \end{aligned} \quad (41)$$

由于势能 V 不依赖自旋, 在(13) 式的条件下, 平均势的矩阵元素可表达为

$$\langle n'_x, n'_y, n'_z, \sum' | V | n_x, n_y, n_z, \sum \rangle = \langle n'_x, n'_y, n'_z | V | n_x, n_y, n_z \rangle \times \delta_{\sum \sum'} \quad (42)$$

式中:

$$\begin{aligned} & \langle n'_x, n'_y, n'_z | V | n_x, n_y, n_z \rangle = \\ & i^{(n_y - n'_y)} \iiint \phi_{n'_x}(x) \phi_{n'_y}(y) \phi_{n'_z}(z) V(x, y, z) \phi_{n_x}(x) \phi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z) dx dy dz = \\ & i^{(n_y - n'_y)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2 + y^2 + z^2)} h_{n'_x}(x) \cdot h_{n'_y}(y) \cdot h_{n'_z}(z) \times \\ & V\left(\frac{x}{\beta_x}, \frac{y}{\beta_y}, \frac{z}{\beta_z}\right) \cdot h_{n_x}(x) \cdot h_{n_y}(y) \cdot h_{n_z}(z) \cdot dx dy dz \end{aligned} \quad (43)$$

量子数 $\beta_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \beta_x = \sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}}, \beta_y = \sqrt{\frac{m\omega_y}{\hbar}}$ 和 $\beta_z = \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}}$ 通过数值计算得

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar^2 c^2} \hbar \omega} \quad (44)$$

因为 $m_p c^2 = 938.259\ 2\ \text{MeV}$, $m_n c^2 = 939.553\ \text{MeV}$, $\hbar c = 197.3287\ 9\ \text{MeV fm}$. 因此可以得到

$$\frac{m_p c^2}{(\hbar c)^2} = t_p = 0.024\ 095\ 831\ 5\ \text{MeV}^{-1}\ \text{fm}^{-2} \quad (45)$$

$$\frac{m_n c^2}{(\hbar c)^2} = t_n = 0.024\ 129\ 057\ 1\ \text{MeV}^{-1}\ \text{fm}^{-2} \quad (46)$$

于是, 可以得到

$$\beta_0 = \sqrt{t \cdot \hbar \omega_0} \quad \beta_x = \sqrt{t \cdot \hbar \omega_x} \quad \beta_y = \sqrt{t \cdot \hbar \omega_y} \quad \beta_z = \sqrt{t \cdot \hbar \omega_z} \quad (47)$$

式中 $t = t_p$ 或 $t = t_n$.

自旋-轨道耦合势能 V^{so} 的矩阵元素可以依照 V 的矩阵元素表达. 通过简单的计算可得到

$$\langle n'_x, n'_y, n'_z, \sum' | V^{so} | n_x, n_y, n_z, \sum \rangle = \frac{m\omega_0}{2\hbar} [2B_z \langle \sum' | \sigma_z | \sum \rangle + B_+ \langle \sum' | \sigma_- | \sum \rangle + B_- \langle \sum' | \sigma_+ | \sum \rangle] \quad (48)$$

式中:

$$\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm \sigma_y \quad (49)$$

$$B_{\pm} = B_x \mp B_y \quad (50)$$

$$B_x = \sqrt{\frac{\omega_y \omega_z}{\omega_0^2}} [-\sqrt{n'_y(n_z+1)} \langle n'_x, n'_y-1, n'_z | S | n_x, n_y, n_z+1 \rangle - \sqrt{n_y(n'_z+1)} \langle n'_x, n'_y, n'_z+1 | S | n_x, n_y-1, n_z \rangle - \sqrt{n_z(n'_y+1)} \langle n'_x, n'_y+1, n'_z | S | n_x, n_y, n_z-1 \rangle - \sqrt{n'_z(n_y+1)} \langle n'_x, n'_y, n'_z-1 | S | n_x, n_y+1, n_z \rangle] \quad (51)$$

$$B_y = \sqrt{\frac{\omega_z \omega_x}{\omega_0^2}} [-\sqrt{n'_z(n_x+1)} \langle n'_x, n'_y, n'_z-1 | S | n_x+1, n_y, n_z \rangle - \sqrt{n_z(n'_x+1)} \langle n'_x+1, n'_y, n'_z | S | n_x, n_y, n_z-1 \rangle - \sqrt{n_x(n'_z+1)} \langle n'_x, n'_y, n'_z+1 | S | n_x-1, n_y, n_z \rangle - \sqrt{n'_x(n_z+1)} \langle n'_x-1, n'_y, n'_z | S | n_x, n_y, n_z+1 \rangle] \quad (52)$$

$$B_z = \sqrt{\frac{\omega_x \omega_y}{\omega_0^2}} [-\sqrt{n'_x(n_y+1)} \langle n'_x-1, n'_y, n'_z | S | n_x, n_y+1, n_z \rangle - \sqrt{n_x(n'_y+1)} \langle n'_x, n'_y+1, n'_z | S | n_x-1, n_y, n_z \rangle - \sqrt{n_y(n'_x+1)} \langle n'_x+1, n'_y, n'_z | S | n_x, n_y-1, n_z \rangle - \sqrt{n'_y(n_x+1)} \langle n'_x, n'_y-1, n'_z | S | n_x+1, n_y, n_z \rangle] \quad (53)$$

5 计算结果

基于以上理论计算了¹²⁶Ba 基于 Woods-Saxon 势下的单粒子形变的定态 Schrödinger 方程, 得到相应的本征值和本征函数. 事实上, 这个计算解决 Schrödinger 方程的方法纯粹运用的数值计算, 这个程序每次只能计算一种粒子, 为了计算中子和质子, 这个程序必需执行 2 次. 运行过程中选取的 $N_{\max} = 10$, 这使得结果会有一些离散误差, 但不超过 0.05 MeV. 壳层 $N_{\max}$ 可以根据精度选取, 一般 $N_{\max}$ 的值越大, 精度越高^[10].

用这个程序计算了所有 Ba 的同位素能级. 并对 Ba 的质子和中子得出的数值进行了构图分析. 图 1 是¹²⁶Ba 随着粒子数的增加的中子能量. 在微观系统中在没有单粒子效应下所有的能级呈现的是一条光滑的曲线, 但是单粒子的离散性造成了一些波动并且是关于单粒子数 n 单调递增的. 离散能 E_n 被认为是由水平线和垂直线组成的“阶梯”函数 $\epsilon_{\text{stair}}(n)$. 如果不考虑单粒子的波动那么就在“阶梯”函数的基础上得带一条光滑的曲线 $\bar{\epsilon}(n)$ ^[11].

壳修正能能量的大小只与费米面 $\bar{\lambda}$ 附近的单粒子能级有关, 这里¹²⁶Ba 的中子壳修正能 $\Delta E_{\text{SH}} = \epsilon(n) - \bar{\epsilon}(n) > 0$. 这还可以解释壳修正能量的正负问题. 其实在图 1 中还可以发现中子数为幻数的位置的壳修正能量均为最大负修正, 这使幻数核具有相当大的稳定性, 而且介于两个满壳层的核, 不管壳修正能是从负到正, 还是从正到负都说明了这些核发生了或大或小的形变^[12].

基于 Woods-Saxon 势, 算出了核的实际单粒子能级. 表 1 给出了¹²⁶Ba 的中子和质子单粒子能级的对应

值. 图 2 给出了¹²⁶Ba 的中子和质子的单粒子能级的比较.

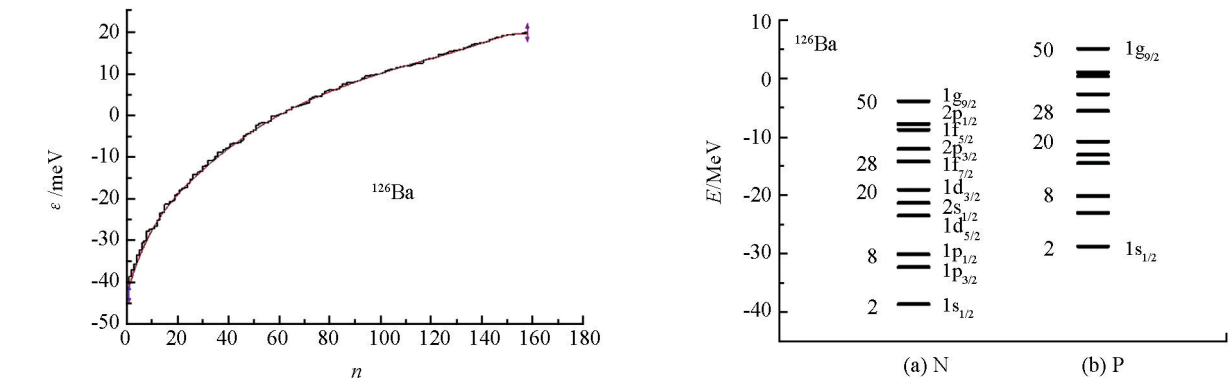


图 1 ¹²⁶Ba 中子实际的单粒子能级 $\epsilon_{\text{stair}}(n)$ 和光滑的单粒子能级 $\bar{\epsilon}(n)$ 曲线

图 2 ¹²⁶Ba 中子和质子的单粒子能级比较图

表 1 ¹²⁶Ba 的中子和质子单粒子能级对应值

能级	1/2	3/2	1/2	5/2	1/2	3/2	7/2	3/2	5/2	1/2	9/2
N	-38.62	-32.24	-30.07	-23.46	-21.30	-19.02	-14.16	-12.03	-8.75	-7.78	-3.83
P	-28.73	-22.98	-20.08	-14.48	-13.04	-10.78	-5.54	-2.70	0.42	1.05	5.08

原子核是由两种不同的费米子(中子和质子)组成, 同样¹²⁶Ba 中的质子和中子也各自遵循 Pauli 原理, ¹²⁶Ba 的原子核中也存在着质子壳和中子壳, 因此质子和中子分别有各自的单粒子能级体系. 当中子数或质子数为 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 时, 这些元素非常稳定, 这些数目称为幻数. 幻数同样与原子核的壳层效应直接相关, 从图 2 可以看出¹²⁶Ba 很清晰的壳结构, 幻数也很好地体现出来. 同时也明显可以看出中子和质子相同的能级, 质子的位阱比中子的位阱高, 即质子的费米面高于中子的费米面.

6 结束语

本研究主要是基于 Woods-Saxon 势, 通过选取谐振子基的壳层来求解 Schrödinger 方程, 从而得到单粒子能级. 精确地求解单粒子能级特性是整个壳修正能量计算的基础. 单粒子能级的计算影响着壳修正能的计算. 光滑能级是从实际单粒子能级中提取出来的, 本研究对 Ba 同位素的计算, 并通过图形软件对¹²⁶Ba 数据的处理给出了质子和中子的单粒子能级图, 可以清楚地展现壳结构.

参考文献:

[1] HARA K, SUN Y. Projected Shell Model and High Spin Spectroscopy [J]. International Journal of Modern Physics E, 1995, 4(4): 637—785.

[2] ROBLEDO L M, EGIDO J L, BERGER J F, et al. Stable Octupole Deformation in Some Actinide Nuclei [J]. Physics Letters B, 1987, 187(3/4): 223—228.

[3] RING P. Relativistic Mean Field Theory in Finite Nuclei [J]. Progress in Particle and Nuclear Physics, 1996, 37: 193—263.

[4] WOODS R D, SAXON D S. Diffuse Surface Optical Model for Nucleon-Nuclei Scattering [J]. Physics Review, 1954, 95(2): 577—578.

[5] DAMGAARD J, PAULI H C, PASHKEVICH V V, et al. A Method for Solving the Independent-Particle Schrödinger Equation with a Deformed Average Field [J]. Nuclear Physics A, 1969, 135(2): 432—444.

[6] 卢希庭. 原子核物理 [M]. 北京: 原子能出版社, 2000: 196—197.

[7] PAULI H C. On the Shell Model and Its Application to the Deformation Energy of Heavy Nuclei [J]. Physics Reports,

- 1973, 7(2): 35—100.
- [8] MYERS W D. Droplet Model Nuclear Density Distributions and Single-Particle Potential Wells [J]. Nuclear Physics A, 1970, 145(2): 387—400.
- [9] MOHAMMED-AZIZI B, MEDJADI D E. Single Particle Calculations for a Woods-Saxon Potential with Triaxial Deformations, and Large Cartesian Oscillator Basis [J]. Computer Physics Communications, 2004, 156(3): 241—282.
- [10] GÖTZ U, PAULI H C, ALDEL K. Single-Particle States in a Non-Axially Symmetric Average Field [J]. Nuclear Physics A, 1971, 175(3): 481—494.
- [11] 刘俊华. 原子核壳修正方法研究 [D]. 桂林: 广西师范大学, 2010.
- [12] BOLSTERLI M, FISET E O, NIX J R, et al. New Calculation of Fission Barriers for Heavy and Superheavy Nuclei [J]. Physics Review C, 1972, 5(3): 1050—1077.

Calculation of Single Particle for a Deformed Woods-Saxon Potential and Large Cartesian Oscillator Basis

DUAN Fang-fang, LI Jia-xing

School of Physics Science and Technology, Southwest University, Chongqing 400715, China

Abstract: We solve the Schrödinger equation of the stationary state for an average nuclear potential of Woods-Saxon type by their expansion of the harmonic oscillator. And then, we obtain the eigen-values and eigen-functions for a single particle located in single shell of harmonic oscillator. The essence of the method consists to write the representative matrix of Hamiltonian, in this basis, diagonalizes this matrix. In this paper, we give the main formulas and discuss the result.

Key words: single-particle energy level; wave functions; Schrödinger equation; Woods-Saxon potential; harmonic oscillator basis

责任编辑 潘春燕

