

关于 Brueckner-Goldstone 相連項展开公式*

吳 式 樞

(吉林大学物理系)

提 要

本文的目的是指明,倘滿壳层外只有一个粒子或只含一个空穴,即使情态存有退化,我們仍可以求得消去了所有含有粒子自能图的項、而且在形式上和滿壳层情况完全一样的相連項展开公式。

一、引 言

研究核結構問題时,非滿壳层組态是經常遇到的情况,因此对于理論的应用,将 Brueckner 与 Goldstone 所求得的滿壳层相連項展开公式^[1,2]推广到非滿壳层情形是发展上有意义的一步。Bloch 与 Horowitz^[3]曾严密地对非滿壳层理論进行过討論,并求得了相应的相連項展开公式,于敏等^[4]应用定态摄动理論也得到了类似的結論,但所得結果都只彻底地消去了含有滿壳层粒子自能图的項,对于滿壳层外的粒子或空穴展开式仍保留着 Brillouin-Wigner 的形式。本文的目的是指明,倘改变真空情态的定义,对于滿壳层外只有一个粒子或只含一个空穴的情况,我們可以求得消去了所有含有粒子自能图的項、而且在形式上和滿壳层情形完全一样的相連項展开公式。

二、平均核势場具有旋轉不变性时的解

設体系的哈密頓量如下形:

$$H = H_0 + H_1 = \sum_i h_i + \left\{ \sum_{i < j} g(i, j) - \sum_i V(i) \right\}, \quad (1)$$

式中 $g(i, j)$ 表示二体相互作用势函数,自然我們假定 $g(i, j)$ 具有空間旋轉、反演等不变性; V 表示平均核势場; $h = T + V$ 为单粒子哈密頓量;这里假定 V 具有旋轉不变性,并和粒子自旋有关,由此 h 的本征值 ϵ_{nj} 和粒子总角量子数 j 有关。令 φ_{njm} 表示 h 的本征函数: $h\varphi_{njm} = \epsilon_{nj}\varphi_{njm}$, 并以 ξ_r, ξ_r^+ [为了簡洁,在不会引起混淆的情况下,我們將常以一个脚标表示 (nj) 或 (njm)]; 此外由于应用同位旋坐标以概括核子可以是質子和中子是熟知的,我們將簡單假定体系只含有同一类型的費米子]表示情态 $\varphi_r \equiv \varphi_{njm}$ 的粒子消灭和产生算符: $\{\xi_r, \xi_s\}_+ = \{\xi_r^+, \xi_s^+\}_+ = 0, \{\xi_r, \xi_s^+\}_+ = \delta_{rs}$, 式(1)也可改写为

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_r \epsilon_r \xi_r^+ \xi_r, \\ H_1 &= \frac{1}{2} \sum_{rskl} \langle rs | g | kl \rangle \xi_r^+ \xi_s^+ \xi_l \xi_k - \sum_{rk} \langle r | V | k \rangle \xi_r^+ \xi_k. \end{aligned} \quad (2)$$

* 1963年3月28日收到。

为了叙述方便,我们下面的讨论将只针对满壳层外有一个粒子的情况而言. 令 $|njm\rangle = \xi_{njm}^+ \Phi_c$ 表示所选的模型情态^[5], 其中 Φ_c 表示满壳层波函数, 标号 (njm) 表示满壳层外粒子所处单粒模型情态为 φ_{njm} , 依定义, $|njm\rangle$ 满足下式:

$$H_0 |njm\rangle = E_{nj}^0 |njm\rangle. \quad (3)$$

我们证明, 倘代替 Φ_c 将 $|njm\rangle$ 定义为真空情态, 即倘作以下正则变换: 不仅将对应于满壳层粒子所处情态的算符 ξ_j 与 ξ_j^+ 也将 ξ_{njm} 与 ξ_{njm}^+ 取为空穴产生和消灭算符, 但其他单粒情态的 ξ_r 与 ξ_r^+ (其中包括 $\xi_{njm'}$ 与 $\xi_{njm'}^+$, 如 $m' \neq m$) 仍表示粒子消灭与产生算符, 我们有以下结论:

$$\Psi_{njm} = \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle, \quad (4)$$

满足以下 Schrödinger 方程

$$H \Psi_{njm} = (H_0 + H_1) \Psi_{njm} = E_{nj} \Psi_{njm}, \quad (5)$$

且本征值 E_{nj} 之值等于

$$E_{nj} = E_{nj}^0 + \langle njm | H_1 \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle, \quad (6)$$

式中 L_m 表示只向相連項求和, 即求和时删去所有含有自能图的項 (L_m 的脚标 m 标明所定义的真空情态为 $|njm\rangle$); 算符 Q 表示删去使分母 $E_{nj}^0 - H_0$ 等于零的項; 由于真空情态选为 $|njm\rangle$, 封闭的 Feynman 图中现包括由满壳层外粒子所引起的自能图.

我们将假定式(4)中的级数是收敛的, 下面有关级数的运算也都是在这假定的基础上进行. 至于对于给定的 $g(i, j)$ 是否能选得一具有旋转不变性的 V , 或如何求得这样一个最恰当的 V , 以使式(4)收敛或收敛最快, 则不是本文所想讨论的命题.

首先让我们证明以下引理, 即倘 $m' \neq m$, 我们有

$$\left\langle njm' \left| \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} \right| njm \right\rangle = 0 \quad m' \neq m. \quad (7)$$

令 S 表示由表象: “ $|njm\rangle$ 定义为真空” 变换至表象: “ Φ_c 定义为真空” 的正则变换, 并引入以下符号:

$$\begin{aligned} S\{F|njm\rangle\} &= F_c|njm\rangle_c, \\ S\{W_m|njm\rangle\} &= \{W_m|njm\rangle\}_c, \end{aligned} \quad (8)$$

式中脚标 c 标明所定义的真空情态现为 Φ_c ; F 表示任一和 ξ_r 与 ξ_r^+ 有关的算符,

$$W_m|njm\rangle \equiv \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle. \quad (9)$$

注意, 在 S 作用下, L_m 的变换规律不是显然的, 但我们可以在 $|njm\rangle$ 定义为真空的基础上计算出 $W_m|njm\rangle$, 然后对所得结果进行正则变换 S 以求得 $\{W_m|njm\rangle\}_c$. 显然, 矩阵元的值和正则变换 S 无关, 我们有

$$\langle njm' | W_m | njm \rangle = {}_c \langle njm' | \{W_m | njm \rangle \rangle_c,$$

由此并由式(9), 证明式(7)可归结为证明

$${}_c \langle njm' | \{W_m | njm \rangle \rangle_c = 0 \quad m' \neq m. \quad (10)$$

令 R 表示三維空間旋轉算符, 我們証明下式成立:

$$R\{\mathbf{W}_m|njm\rangle\}_c = \sum_{m'} \{\mathbf{W}_{m'}|njm'\rangle\}_c D_{m'm}^j(R), \quad (11)$$

式中 $D_{m'm}^j(R)$ 表示旋轉羣 R 的不可約表示 $D^j(R)$ 的 (m', m) 矩陣元, 式 (11) 成立說明 $\{\mathbf{W}_m|njm\rangle\}_c$ 属于 $D^j(R)$ 的第 m 行; 熟知地, $|njm'\rangle_c$ 属于 $D^j(R)$ 的第 m' 行, 因此倘若 $m' \neq m$, 按 Wigner 定理^[6]立即証得式 (10), 由此式 (7) 得証. 証明式 (11) 的途径不只一个, 但由于 L_m 并非相对 R 不变, 式 (11) 的成立却不是明显的. 为了叙述方便, 让我们引入

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp(i\mathbf{H}_0 t) \exp(-i\mathbf{H}t) = \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} (-i)^p \int \cdots \int_{t > t_1 > \cdots > t_p} dt_1 \cdots dt_p \mathbf{H}_1(t_1) \cdots \mathbf{H}_1(t_p), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\mathbf{G}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{H}} = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{H}_0} \left\{ 1 + \sum_{p=0}^{\infty} \mathbf{H}_1 \left\{ \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{H}_0} \mathbf{H}_1 \right\}^p \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{H}_0} \right\}, \quad (13)$$

式中 $\mathbf{H}_1(t) = \exp(i\mathbf{H}_0 t) \mathbf{H}_1 \exp(-i\mathbf{H}_0 t)$, ε 表一复数参数. 按照 Bloch^[7], $U(t)$ 与 $\mathbf{G}(\varepsilon)$ 間存有以下关系:

$$\begin{aligned} U(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} e^{i(\mathbf{H}_0 - \varepsilon)t} \mathbf{G}(\varepsilon) d\varepsilon, \\ \mathbf{G}(\varepsilon) &= \frac{1}{i} \int_0^{\pm\infty} e^{i(\varepsilon - \mathbf{H}_0)t} U(t) dt, \end{aligned} \quad (14)$$

$U(t)$ 中的积分綫路 γ 由两条从无穷远来到无穷远去并平行于实数軸的直綫組成, 綫路的方向如图示, $\mathbf{G}(\varepsilon)$ 中的积分上限依 $\text{Im } \varepsilon \geq 0$ 而取 $\pm \infty$.

应用和滿壳层情形完全相同的論証方法 (参看文献 [2] § 3

与 [7] § 3), 可以很容易証得下式成立:

$$U(t)|njm\rangle = U_{L_m}(t)|njm\rangle \langle njm|U(t)|njm\rangle, \quad (15)$$

式中 L_m 的含意如前, 即表示删去所有含有自能图的項且

所定义的真空情态为 $|njm\rangle$. 因已假定 $\mathbf{V}$ 具有旋轉不变性, 依式 (12) 与 (8), 我們有

$$R\{U(t)|njm\rangle\}_c = U_c(t)R|njm\rangle_c = \sum_{m'} \{U(t)|njm'\rangle\}_c D_{m'm}^j(R). \quad (16)$$

因矩陣元的值相对变换 S 不变, 由上式根据 Wigner 定理^[6]可首先求得以下熟知的結果:

$$\begin{aligned} \langle njm|U(t)|njm\rangle &= {}_c\langle njm|U_c(t)|njm\rangle_c = \\ &= {}_c\langle njm'|U_c(t)|njm'\rangle_c = \langle njm'|U(t)|njm'\rangle, \end{aligned} \quad (17)$$

由此并以式 (15) 代入式 (16), 立即得到

$$R\{U_{L_m}(t)|njm\rangle\}_c = \sum_{m'} \{U_{L_{m'}}(t)|njm'\rangle\}_c D_{m'm}^j(R), \quad (18)$$

依式 (14) 有

$$\mathbf{G}_{L_m}(\varepsilon)|njm\rangle = \frac{1}{i} \int_0^{\pm\infty} dt e^{i(\varepsilon - \mathbf{H}_0)t} U_{L_m}(t)|njm\rangle, \quad (19)$$

式 (18) 說明下式成立:

$$R\{\mathbf{G}_{L_m}(\varepsilon)|njm\rangle\}_c = \sum_{m'} \{\mathbf{G}_{L_{m'}}(\varepsilon)|njm'\rangle\}_c D_{m'm}^j(R), \quad (20)$$

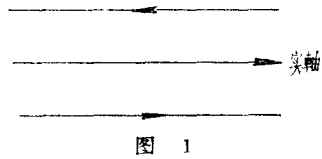


图 1

由上式与式(13), 我們求得

$$R\{\mathbb{W}_m(\varepsilon)|njm\rangle\}_c = \sum_{m'} \{\mathbb{W}_{m'}(\varepsilon)|njm'\rangle\}_c D_{m'm}^j(R), \quad (21)$$

式中

$$\mathbb{W}_m(\varepsilon)|njm\rangle \equiv \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{1}{\varepsilon - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle, \quad (22)$$

根据式(21)我們最后得到以下关系:

$$\langle njm'|\mathbb{W}_m(\varepsilon)|njm\rangle = {}_c\langle njm'|\{\mathbb{W}_m(\varepsilon)|njm\rangle\}_c = 0 \quad m' \neq m. \quad (23)$$

因式(22)只向相連項求和, 由式(23)在对式(22)右边进行計算时其中間情态不可能

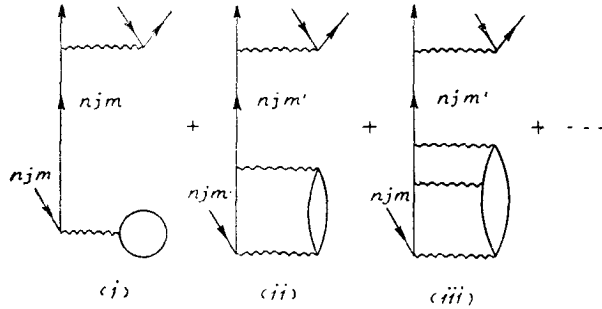


图 2

出現情态 $|njm'\rangle$, $m' \neq m$; 例如, 对应于图 2 中图(i)的項, 在式(22)的右边必同时出現图(ii), (iii)等等的項, 所有这些項的和很明显将含 $\langle njm'|\mathbb{W}_m(\varepsilon)|njm\rangle$ 作为一乘数因子, 依式(23)其值为零, 这說明式(22)实际不含有这类中間情态为 $|njm'\rangle$ 的項, 此外由 L_m 的定义式(22)也不可能含有中間情态等于 $|njm\rangle$ 的項; 我們將忽略偶然退化

[見 IV], 即假定使 H_0 取 E_{nj}^0 值的本征态只有 $|njm\rangle$, $m = -j, \dots, j$, 上面的討論因此等于說, 式(22)中将不出現使分母 $\varepsilon - H_0$ 取 $\varepsilon - E_{nj}^0$ 值的項, 即我們有

$$\sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{1}{\varepsilon - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle = \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{Q}{\varepsilon - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle. \quad (24)$$

以上式代入式(23), 并令 $\varepsilon = E_{nj}^0$, 即証得式(7).

下面我們証明, 式(4)滿足式(5), 且式(6)成立. 为此我們將引用代入法^[2,8]和分离定理^[4,8], 以 $E_{nj}^0 - H_0$ 作用于式(4)的两边, 有

$$\begin{aligned} (E_{nj}^0 - H_0)\Psi_{njm} &= \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} Q H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle = \\ &= \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle - \\ &\quad - \sum_{m'} |njm'\rangle \langle njm'| \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle, \end{aligned} \quad (25)$$

依式(7)以及 L_m 的定义, 上式右边第二項等于零, 由此得

$$\begin{aligned} (E_{nj}^0 - H_0)\Psi_{njm} &= \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle = \\ &= H_1 \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle - \left\{ H_1 \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |njm\rangle \right\}_{UL} = \\ &= H_1 \Psi_{njm} - \{H_1 \Psi_{njm}\}_{UL}, \end{aligned} \quad (26)$$

式中脚标 UL 表示只向 $H_1 \Psi_{njm}$ 中含有自能图的項求和. 倘对 Ψ_{njm} 中所含分立的相連图

分离定理适用,应用和文献[8](§3)完全相同的論据可以立即求得

$$\{H_1 \Psi_{njm}\}_{UL} = \Delta E_{nj} \Psi_{njm}, \quad (27)$$

式中

$$\Delta E_{nj} = \langle njm | H_1 \sum_{\rho=0, L, m}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} | njm \rangle. \quad (28)$$

以式(27)与(28)代入式(26),得到

$$(H_0 + H_1) \Psi_{njm} = (E_{nj}^0 + \Delta E_{nj}) \Psi_{njm} = E_{nj} \Psi_{njm},$$

命题因而得証。注意,分离定理的証得,例如欲証图3中A部分与B部分可以分离,基于:

波函数中倘含图3(i)的項,必同时包含图3(ii),(iii),(iv)的項。当模型情态存有退化时,这个前題是一般不存在的,例如对于我们这里的 Ψ_{njm} , 因A部分的中間情态 r 可以等于 $|njm'\rangle$ (见图3), 依算符 Q 的定义, Ψ_{njm} 中不可能包含图3(iii)及(iv)的項;这說明,倘存有退化,我們不能簡單搬用分离定理。本节里我們將忽略偶然退化,由此对 Ψ_{njm} 影响分离定理适用的唯一原因就是存有和 $|njm\rangle$ 成退化的情态 $|njm'\rangle$, 让我们先討論只由两个分立的相連部分所构成的图,这时影响分离定理适用的最一般情况可由图4表达, Ψ_{njm} 中可能包

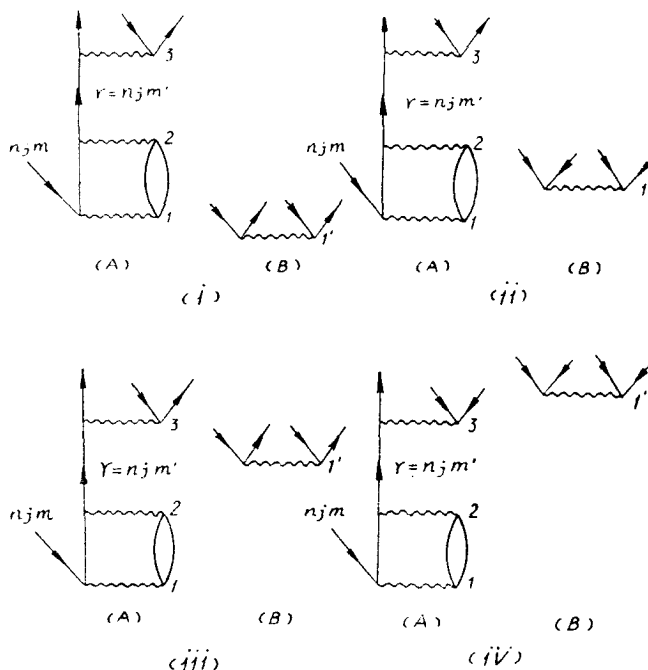


图 3

含图4(i)的項,但却必不包含图4(ii)的項。我們將称由不分立的部分所构成的相連图

为简单的相連图,图4中B部分表示任一简单的相連图,A部分表示含有中間情态等于 $|njm'\rangle$ 的简单相連图,附标 II 表示其中第一次出現中間情态等于 $|njm'\rangle$ 的部分,这部分将簡称为 AII。注意,我們不需要討論A部分或B部分的中間情态会等于 $|njm\rangle$ 的情形,例如倘 AII 的中間情态 $r = |njm\rangle$, 这时图4(i)将变为图5,按 L_m 的定义, Ψ_{njm} 中不含有这类項,由此图中 AI 部分的中間情态将既不等于 $|njm'\rangle$, 也不等于 $|njm\rangle$, 因式(7)成立,我們証明,事实上 Ψ_{njm} 中也不含图4(i)型的項,由此对于 Ψ_{njm} 实际上并不存有影响分离定理可以适用的困难。为此让我们先討論一个简单的举例,图6表示图4(i)型图的一个特例,图中B部分在作用綫 α' 下面假定只有两条作用綫且中間情态都不等于 $|njm'\rangle$; 上面已提到, AI 部分的中間情态不等于 $|njm'\rangle$, 且A与B部分的中間情态都不会等于 $|njm\rangle$; 这說明对图中作用綫2以下的部分,分离定理一定适用,因此将 Ψ_{njm} 中所含全部图6型的項加起来,这些图只 AI 部分不同,其他部分全同,图7表示其中一个特例,其总

贡献的 C -数部分可写为

$$\Sigma(6) = C(\alpha, \alpha') \frac{1}{a_2'} g_2' \frac{1}{a_1'} g_1' \frac{1}{a_2'} \langle njm' | W_m | njm \rangle, \quad (29)$$

式中 $C(\alpha, \alpha')$ 表示作用线 2 以上部分的贡献, 其他符号的含意和文献[4]相同, 只是这里

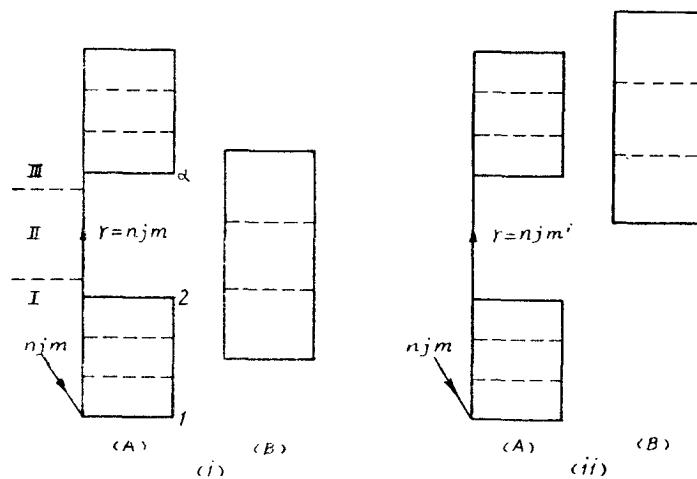


图 4

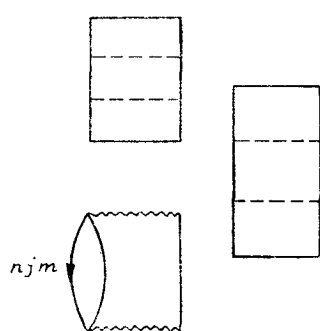


图 5

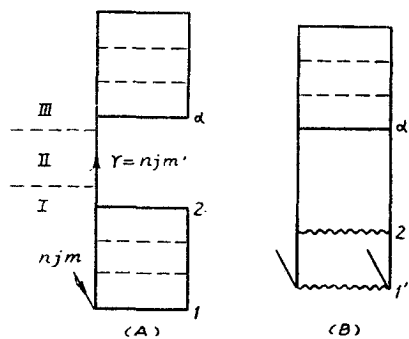


图 6

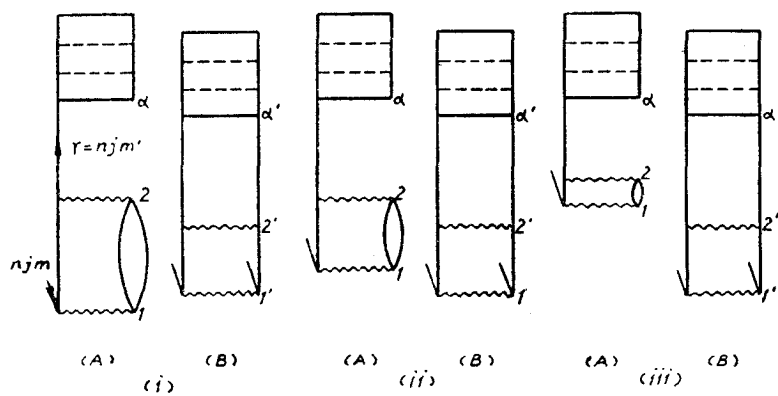


图 7

的 g 相当于文献[4]中的 ν 。例如图 7 的总贡献的 c -数部分为

$$\Sigma(7) = C(\alpha, \alpha') \frac{1}{a_2'} g_2' \frac{1}{a_1'} g_1' \frac{1}{a_2'} \left(g_2 \frac{1}{a_1} g_1 \right),$$

式中圆括弧内的项显然就是矩阵元 $\langle njm' | W_m | njm \rangle$ 中 $\rho = 1$ 的项

$$\langle njm' | H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{nj}^0 - H_0} H_1 \right\}_{L_m} | njm \rangle$$

所有的一个贡献,且式中所写 $\Sigma(7)$ 的结果无非也就是分离定理对图 7 中作用綫 2 以下部分的一个简单应用。现在让我们来讨论图 4(i) 所示的一般情况。我们将称和图 4(i) 中 A 部分同类的图为属于 A 型的,我们注意,只有 A 型的图才有可能影响分离定理的适用,因此倘图 4(i) 中 B 部分不属于 A 型或属于 A 型但如图 8(i) 所示,对于作用綫 2 以下的部

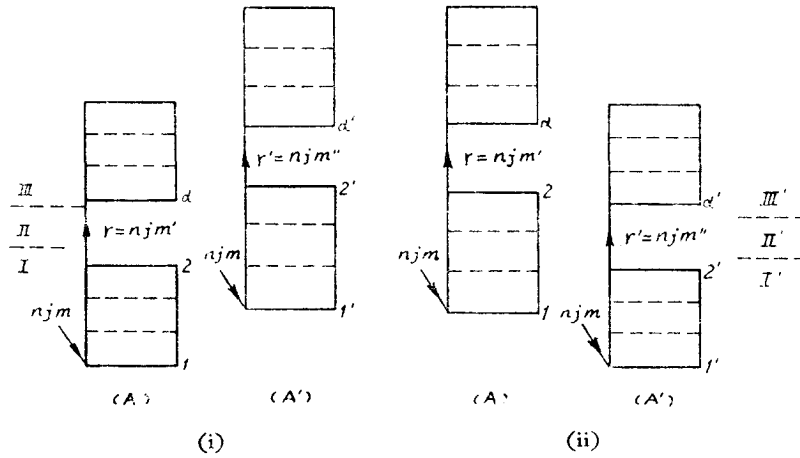


图 8

分分离定理将适用,因此如我们将所有这些只 AI 部分不同、其他部分全同的图加起来,其总贡献必含 $\langle njm' | W_m | njm \rangle$ 作为一个乘数因子,依式(7)因而等于零。同样倘 B 部分属于 A 型但如图 8(ii) 所示,这时作用綫 2' 以下部分,分离定理适用,因此倘我们将所有只是 A'I' 部分不同、其他部分全同的图加起来,其总贡献必含 $\langle njm'' | W_m | njm \rangle$ 作为一乘数因子,因而亦为零。因按 A 型图的定义, AII

或 A'I' 是其中間情态第一次等于 $|njm'\rangle$ 的部分,故对于 B 部分属于 A 型的情形,我们只需按作用綫 2 与 2' 的相对次序来分类讨论,这只有如图 8 所示的两个可能,由此我们全面地证明了,波函数 Ψ_{njm} 中不仅不含有如图 4(ii) 型的项,也不含有图 4(i) 型的项。对 Ψ_{njm} 中所含有可能影响分离定理适用的、由三个或三个以上的分立相連部分所构成的图,应用数学归纳法,我们显然也有相同的结论,例如对于图 9 作用綫 2'' 以下部分,分离定理适用,由此所有这些只

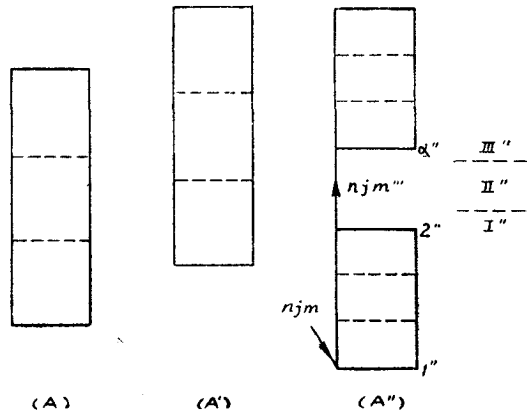


图 9

$A''I''$ 不同、其他部分全同的图的总贡献必含 $\langle njm''' | W_m | njm \rangle$ 作为一乘数因子, 因而等于零. 所以 Ψ_{njm} 中实际上也不含这类会影响分离定理适用的项, 即由于式(7)成立, 分离定理对 Ψ_{njm} 适用, 命题因此全部证毕.

根据粒子和空穴的共轭关系^[9], 对于满壳层内含有一个空穴的情形, 我們也有相同的結論是显然的. 事实上, 这时我們只需将式(4)与(6)中的模型情态 $|njm\rangle$ 改写为 $(-1)^{l-m} \xi_{nj-m} \Phi_c$, 并将这情态定义为真空, 由此所得的 Ψ_{njm} 与 E_{nj} 就是所欲求的解.

注意, 命题中所指的满壳层, 原則上并不必要是幻数满壳层, 可以是支满壳层, 只要平均核势場 V 具有旋轉不变性, 且式(4)收敛, 上面所得結論就可应用. 自然对支满壳层后一条件即使满足, 收敛性常可能很慢, 从而使实际应用受到更大的限制.

应用这里提出的論证方法, 我們沒有能够將所得結論推广到满壳层外含有多于一个粒子或空穴的情形, 其原因, 例如倘满壳层外存有两个粒子, 在于如下形的模型波函数

$$\Phi(njmm') = \xi_{njm}^+ \xi_{njm'}^+ \Phi_c$$

不是正确的(或称最优的)零級近似波函数[这点由 $\Phi(njmm')$ 不是总角动量平方 J^2 的本征函数就可看出], 此外也显然不存有任何一下形的正則变换:

$$\eta_{nj\mu}^+ = \sum_m \alpha_{\mu m} \xi_{njm}^+,$$

式中 $\alpha_{\mu m}$ 为常数系数, 使正确的模型波函数 $|(nj)^2JM\rangle$ 可以写成如下形:

$$|(nj)^2JM\rangle = \eta_{nj\mu}^+ \eta_{nj\mu'}^+ \Phi_c.$$

实际上为了証明式(4)是式(5)的解, 且式(6)成立, 应用和時間有关的摄动理論更为簡便. 我們上面沒有簡單就引用这理論进行証明的原因是由于所要討論的問題是定态問題, 因此习惯上愿意有一个和時間无关的証明, 此外也由于从以上的証明能更清楚地說明在应用分离定理时对有退化和沒有退化情况所应注意的區別. 下面讓我們提一下应用時間有关摄动理論的証明. 应用和 Goldstone^[2] 完全相同的論据容易証明, 倘 $\alpha \rightarrow 0$ 的极限存在, 則

$$\Psi_{njm} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \{ U_\alpha | njm \rangle / \langle njm | U_\alpha | njm \rangle \}, \quad (30)$$

滿足式(5), 且 E_{nj} 之值可写为

$$E_{nj} = E_{nj}^0 + \langle njm | H_1 | \Psi_{njm} \rangle, \quad (31)$$

式中所定义的真空情态为 $|njm\rangle$, 算符 U_α 的表达式如下:

$$U_\alpha = \sum_{\rho=0}^{\infty} (-i)^\rho \int \cdots \int_{0 > t_1 > \cdots > t_\rho} dt_1 \cdots dt_\rho H_{1\alpha}(t_1) \cdots H_{1\alpha}(t_\rho), \quad (32)$$

$$H_{1\alpha}(t) = \exp(iH_0 t) H_1 \exp(-iH_0 t) \exp(\alpha t);$$

对 U_α 中所含時間积分进行积分, 式(30)可写为

$$\Psi_{njm} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\rho=0, L_m}^{\infty} \frac{1}{E_{nj}^0 - H_0 + i\rho\alpha} H_1 \cdots \frac{1}{E_{nj}^0 - H_0 + i2\alpha} H_1 \frac{1}{E_{nj}^0 - H_0 + i\alpha} H_1 | njm \rangle, \quad (33)$$

式中 L_m 的定义如前. 同样我們將忽略偶然退化, 根据式(24), 当 $\alpha \rightarrow 0$ 时, 式(33)中不会出現使分母 $E_{nj}^0 - H_0$ 等于零的中間情态, 故 α 可以取 0 值, 由此立即得到式(4), 以式(4)代入式(31), 即得到式(6), 命题因此证毕.

三、V不具有旋轉不变性时的解

对于滿壳层外只有一个粒子或只含一个空穴的情形, 倘忽略偶然退化, H_0 的退化純由 h 的退化所决定. 熟知地, $h = T + V$ 的退化和存有与 h 交換的變換羣密切有关, 据此可以証明, 虽然 V 不具有旋轉不变性, 我們仍有和第二节中所得相同的結論. 作为举例, 讓我們首先討論一下 V 虽不具旋轉不变性、但有軸对称性时的情形. 这时 h 的每一本征值 $\varepsilon_{n|m|}$ 只存有二度正常退化, 对应的本征函数 $\chi_{n\mu}(\mu = \pm m)$ 可以应用時間反演變換 T 或迴轉反射變換 $G^{[10]}$ 来标志, 因 h 和 T 与 G 都交換; 虽然应用 T 含意更普遍, 因此可同时概括非軸对称 V 的退化, 为了能更直接借用第二节中的論述, 我們將采用 G . 显然式 (2) 的形式不变, 只是对应的单粒波函数系现为 $\{\chi_{n\mu}\}$; ξ_r 与 ξ_r^+ , $r \equiv (n\mu)$, 現表示情态 $\chi_{n\mu}$ 的粒子消灭与产生算符. 令 χ_{nm} 表示滿壳层外粒子所处情态, 則模型情态为 $|nm\rangle = \xi_{nm}^+ \Phi_c$:

$$\begin{aligned} H_0 |nm\rangle &= E_{n|m|}^0 |nm\rangle, \\ \Phi_c &= \xi_{n_a m_a}^+ \xi_{n_a - m_a}^+ \cdots \xi_{n_1 m_1}^+ \xi_{n_1 - m_1}^+ |0\rangle, \end{aligned} \quad (34)$$

式中 $a = N/2$, N 表示滿壳层所含粒子数. 我們証明, 倘將 $|nm\rangle$ 定义为真空情态, 我們有和第二节中式 (4) 与 (6) 相同的結論, 即虽然 V 只具有軸对称性, 依然有

$$\Psi_{nm} = \sum_{\rho=0, L, m}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_{n|m|}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |nm\rangle. \quad (4)$$

滿足以下 Schrödinger 方程

$$H\Psi_{nm} = (H_0 + H_1)\Psi_{nm} = E_{n|m|}\Psi_{nm}, \quad (5)$$

且 $E_{n|m|}$ 之值等于

$$E_{n|m|} = E_{n|m|}^0 + \langle nm | H_1 | \Psi_{nm} \rangle. \quad (6)$$

注意, 因現在 H_0 与 H_1 并不和三維空間旋轉算符 R 交換, 故当应用式 (4) 进行近似計算时, 倘只取展开式的有限項, 所得近似波函数一般不是总角动量平方 J^2 的本征函数, 此外 Ψ_{nm} 本身也只有当 $E_{n|m|}$ 相对于 J 不存有偶然退化时才一定是 J^2 的本征函数, 但由于 H 和 R 交換, 熟知地, 以下結論成立:

因 Ψ_{nm} 滿足式 (5), 以 Ψ_{nm} 代入下式:

$$\Psi_n(JM) = C \int d\omega D_{Mm}^{J*}(\omega) R(\omega) \Psi_{nm}, \quad (4')$$

C 为归一化常数. 所得 $\Psi_n(JM)$ 不仅也滿足式 (5), 且同时是 J^2 与 J_z 的本征函数. 此外, 当应用式 (4') 进行近似計算时, 虽然只取式 (4) 中的有限項, 由式 (4') 所得的近似波函数保持为 J^2 与 J_z 的本征函数, 式 (4') 中 $\omega \equiv (\alpha, \beta, \gamma)$ 表示尤拉角, $R(\omega)$ 表示对应于 ω 的旋轉算符.

注意, 在第二节中証明式 (4) 滿足式 (5), 且式 (6) 成立时只有式 (7) 的証明应用到 V 具有旋轉不变性, 其他論据都和 V 所有的对称性无关, 因此我們只需証明, 这里类似于式 (7) 的公式依然成立. 我們仍将忽略偶然退化, 由此和 $|nm\rangle$ 成退化的情态只有 $|n, -m\rangle$, 故和式 (7) 相应的公式为

$$\langle n, -m | W_m | nm \rangle \equiv \langle n, -m | \sum_{\rho=0, L, m}^{\infty} H_1 \left\{ \frac{Q}{E_{n|m|}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} | nm \rangle = 0. \quad (35)$$

我們証明,上式的确成立. 首先我們有

$$\langle n, -m | \mathbf{W}_m | nm \rangle = {}_c \langle n, -m | \{ \mathbf{W}_m | nm \} \rangle_c, \quad (36)$$

上式右边的脚标 c 表示所定义的真空情态现为 Φ_c . 熟知地^[10], 我們恆可以这样选择 $\chi_{n\mu}$, 使之并由此使 $|n\mu\rangle_c$, $\mu = \pm m$, 构成羣 G 不可約表示的正交基¹⁾, 即我們有

$$G | n\mu \rangle_c = | nm \rangle_c G_{m\mu} + | n, -m \rangle_c G_{-m\mu}, \quad \mu = \pm m,$$

式中 $\{G_{m\mu}\}$ 构成一么正矩陣. 注意到 H_0 与 H_1 都和羣 G 交換, 应用和第二节中所述完全相同的論証方法容易証明, 我們也有

$$G \{ \mathbf{W}_\mu | n\mu \} \}_c = \{ \mathbf{W}_m | nm \} \}_c G_{m\mu} + \{ \mathbf{W}_{-m} | n, -m \} \}_c G_{-m\mu} \quad \mu = \pm m. \quad (37)$$

由上式根据 Wigner 定理, 并注意到式(36), 可立即得到式(35), 命題因而証毕. 又对于非軸对称的 V , 例如倘所选 V 为非軸对称 Nilsson 位势:

$$V = \frac{1}{2} M (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) + \alpha \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + \beta P,$$

式中 $\omega_1 \neq \omega_2 \neq \omega_3$, 这时 $\mathbf{h} = \mathbf{T} + V$ 的每一本征值 $\varepsilon_{n|v|}$ 也有二度正常退化, 对应的本征函数 $\psi_{n\tau}$, $\tau = \pm v$ ²⁾ 可选为羣 D_2 的不可約表示的正交基; 由于 V , 因而 $\mathbf{h}$ 与 H_0 及 H_1 都和羣 D_2 交換, 应用前面关于軸对称 V 所述論据容易看出, 这里我們也仍有和第二节中式(4)与(6)相同的結論³⁾.

四、偶然退化

我們所指偶然退化分两类: (1)由 $\mathbf{h}$ 所引起的; (2)由于所討論的問題是多体問題引起的, 后者将簡称由 H_0 而引起的. 容易看出, 偶然退化有可能导致第二与第三节中所得結論不适用的原因在于对偶然退化的情态式(7)或式(35)有可能不成立. 作为举例, 也为了叙述方便, 我們將只針对 V 仅具有軸对称性的情形进行討論. 对于給定的 $|nm\rangle$ 是否会出现偶然退化, 由 V 的具体形式而定, 通过改变 V 的形式或其中所含参数可以得到消除. 倘 V 已选定, 由 $\mathbf{h}$ 所引起的偶然退化是指, 在 $\mathbf{h}$ 的本征值中可能出现 $\varepsilon_{n'|m'|} = \varepsilon_{n|m|}$, 从而使和 $|nm\rangle$ 成退化的情态除 $|n, -m\rangle$ 外还有 $|n'\mu'\rangle$, $\mu' = \pm m'$; 倘 $|m'| \neq |m|$, 因 $|n', \pm m'\rangle_c$ 和 $\{ \mathbf{W}_m | nm \} \}_c$ 属于羣 G 的不同不可約表示, 故仍有 $\langle n', \pm m' | \mathbf{W}_m | nm \rangle = 0$, 但对于 $(m' = m, n' \neq n)$, $\langle n'm | \mathbf{W}_m | nm \rangle$ 却不一定等于零, 如不等于零, 代替 $\xi_{n\mu}^+$

- 1) 讓我們引用文献[10]的符号, 羣 G 的元素为 D_Φ , S_Ψ 以及 D_Φ 与 S_Ψ 的乘积. 注意, 虽然 $D_\Phi \Phi_c = \Phi_c$, 但 $D_\Phi S_\Psi \Phi_c = S_\Psi D_{-\Phi} \Phi_c = S_\Psi \Phi_c = (-1)^{N/2} \Phi_c$, 这点对我們的証明显然不起任何影响. 一个简单的理由在于我們总可以将 $(N/2)$ 选为偶数, 例如倘 $(N/2)$ 为奇数, 代替式(34), 我們可将滿壳层波函数 Φ_c 改选为

$$\Phi'_c = \xi_{nm}^+ \xi_{n-m}^+ \xi_{n_a m_a}^+ \xi_{n_a - m_a}^+ \cdots \xi_{n_1 m_1}^+ \xi_{n_1 - m_1}^+ | 0 \rangle,$$

只是这样代替原来滿壳层外有一个粒子的組态, 我們現有滿壳层內含有一个空穴的組态.

- 2) 这里的 v 并不是 $\mathbf{j}_z$ 的本征值, 其含意可参看 Hecht and Satchler, *Nucl. Phys.*, **32** (1962), 286.
3) 和軸对称时情形一样, 代替式(4)形的 Ψ_{nv} , 可以引入

$$\Psi_{nv}(JM) = C \int d\omega \sum_{m=-J}^J D_{Mm}^*(\omega) R(\omega) \Psi_{nv}$$

或

$$\Psi_{nv}(JM)_m = C \int d\omega D_{Mm}^*(\omega) R(\omega) \Psi_{nv},$$

并于这 $m = -J, \dots, J$ 共 $(2J+1)$ 个 $\Psi_{nv}(JM)_m$ 中任取其中不等于零的一个, 因为这些只是 m 不同而又不等于零的 $\Psi_{nv}(JM)_m$ 相互間只差一个常数乘数因子.

与 $\xi_{n'\mu}^+$, 我們可以通过以下正則变换:

$$\begin{aligned}\eta_{n_i\mu}^+ &= \alpha_{n_in}\xi_{n\mu}^+ + \alpha_{n_in'}\xi_{n'\mu}^+ \quad i = 1, 2, \mu = \pm m, \\ \alpha_{n_in}^*\alpha_{n_in} + \alpha_{n_in'}^*\alpha_{n_in'} &= \delta_{ij},\end{aligned}\quad (38)$$

引入 $\eta_{n_i\mu}^+$ 而将模型情态改选为 $|n_i\mu\rangle = \eta_{n_i\mu}^+\Phi_c$, 并要求式(38)中的系数 α 满足下式:

$$\langle n_i\mu | W_\mu | n_i\mu \rangle = 0 \quad j \neq i, \quad (39)$$

因上式理論上总可以得到滿足, 所以由 $\mathbf{h}$ 所引起的偶然退化, 原則上不会对第二节与第三节中所得結論导致任何限制. 注意, $|n_i\mu\rangle_c$, $\mu = \pm m$, 仍构成羣 G 的不可約表示的正交基, 故下式

$$\langle n_j, -\mu | W_\mu | n_i\mu \rangle = 0 \quad i \neq j \text{ 或 } i = j \quad (40)$$

依然成立. 此外, 根据羣論, 式(38)中的系数 α 和 μ 等于 m 或 $-m$ 无关.

現讓我們討論由 $\mathbf{H}_0$ 所引起的偶然退化, 亦即由不同組态所引起的退化. 例如, 倘滿壳层外粒子所处单粒模型情态 χ_{nm} 是激发能較高的情态如图 10(i) 所示, 这时和 $|nm\rangle$ 成退化的情态除了 $|n, -m\rangle$ 外, 还可能有点 10(ii) 所示的 $|N\Lambda\rangle$, $\Lambda = \sum_\sigma m_\sigma$ 表示未成对的 m 值之和. 同样, 如 $\Lambda \neq m$, 則仍有 $\langle N\Lambda | W_m | nm \rangle = 0$, 但如 $\Lambda = m$, $\langle Nm | W_m | nm \rangle$ 却不一定等于零, 倘不等于零, 式(4)与式(6)的結論将不适用. 这个限制却是合理的, 因这說明, 当激发能較高时, 一般我們不再可以将模型情态选为純組态而必須考虑不同組态的混合.

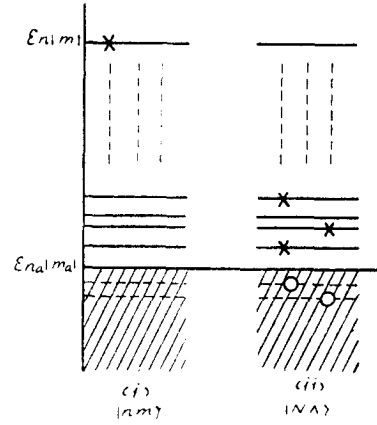


图 10

注意, 对于滿壳层外多于一个粒子或空穴的情形, 部分低能模型情态由于不需考虑不同情态的綫性組合就已是正确的零級近似, 这时类似于式(4)与(6)的結論仍成立. 作为

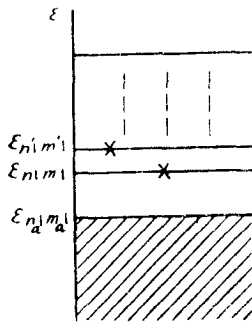


图 11

举例, 讓我們討論一个滿壳层外有两个粒子且 $\mathbf{V}$ 只具有軸对称性时的情形. 設这两粒子所处单粒模型情态分别为 $\chi_{n\mu}$ 与 $\chi_{n'\mu'}$, 对应的本征值 $\varepsilon_{n|\mu|}$ 与 $\varepsilon_{n'|\mu'|}$ ($\varepsilon_{n|\mu|} \neq \varepsilon_{n'|\mu'|}$) 是滿壳层外能量最低的两单粒能級如图 11 所示, 模型波函数可写为

$$|n'\mu'n\mu\Lambda\rangle = \xi_{n'\mu'}^+\xi_{n\mu}^+\Phi_c \quad \Lambda = \mu' + \mu, \quad (41)$$

式中 $\mu' = \pm m'$, $\mu = \pm m$, 互成退化的情态为

$$\Lambda = \pm \Lambda_1 = \pm (m' + m), \quad \Lambda = \pm \Lambda_2 = \pm (m' - m). \quad (42)$$

因 $|n'\mu'n\mu\Lambda_i\rangle$ 与 $|n'\mu'n\mu - \Lambda_i\rangle$ 已构成 G 的不可約表示的正交基, 故倘无偶然退化, 式(41)已是正确的零級近似波函数; 按第二节与第三节中的論据, 容易証明, 如 $m' \neq m$, 的确有: 倘将

$|n'\mu'n\mu\Lambda\rangle$ 定义为真空情态, 則

$$\Psi_{NA} = \sum_{\rho=0, L\mu', \mu}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_{n'|\mu'|, n|\mu|}^0 - H_0} H_1 \right\}^{\rho} |n'\mu'n\mu\Lambda\rangle. \quad (43)$$

满足以下 Schrödinger 方程

$$\mathbf{H}\Psi_{NA} = (\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1)\Psi_{NA} = E_{N|A|}\Psi_{NA},$$

且对应的能量本征值 $E_{N|A|}$ 等于

$$E_{N|A|} = E_{n'|\mu'|, n|\mu|}^0 + \langle n'|\mu' n\mu\Lambda | \mathbf{H}_1 | \Psi_{NA} \rangle, \quad (44)$$

式中 $E_{n'|\mu'|, n|\mu|}^0$ 的定义为

$$\mathbf{H}_0 | n'|\mu' n\mu\Lambda \rangle = E_{n'|\mu'|, n|\mu|}^0 | n'|\mu' n\mu\Lambda \rangle,$$

其他符号的含意如前。注意, 倘 $m' = m$, 依式(42)有 $\Lambda_2 = -\Lambda_2 = 0$, 因此下式

$$\langle n' - mn m, \Lambda = 0 | \sum_{\rho=0, L m, -m}^{\infty} \mathbf{H}_1 \left\{ \frac{Q}{E_{n'|\mu'|, n|\mu|}^0 - \mathbf{H}_0} \mathbf{H}_1 \right\}^{\rho} | n' mn - m, \Lambda = 0 \rangle = 0 \quad (45)$$

不一定成立; 倘不成立, 则式(43)与(44)对模型情态 $|n' \pm mn \pm m, \Lambda = \pm 2m\rangle$ 虽仍适用, 但对 $|n' \mp mn \pm m, \Lambda = 0\rangle$ 将不适用, 而且这时不存有如式(38)所示的正则变换以使式(45)在变换后成立。虽然如此, 对于一定的模型情态, 这类由 $\mathbf{H}_0$ 所引起的偶然退化仍可通过改变 V 的函数形式或其中所含参数而得到消除, 只是所新选的 V 是否恰当, 即是否能保证级数收敛将必须重新考虑。由于已有不少计算说明, 不仅对于强形变核, 即使对满壳层外仅含少数粒子或空穴的核选择非球对称的 V 已可能是恰当的, 式(43)与(44)的结果表明, 这里所得结论对于实际应用可能有更广泛些的意义。

本文曾和于敏同志进行过很有益的讨论, 并请杨立铭与于敏同志校阅过部分底稿, 特此志谢。

参 考 文 献

- [1] Brueckner, K. A., *Phys. Rev.*, **100** (1955), 36.
- [2] Goldstone, J., *Proc. Roy. Soc.*, **A239** (1957), 267.
- [3] Bloch, C. et Horowitz, J., *Nucl. Phys.*, **8** (1958), 91.
- [4] 于敏, 张宗燾, 余友文, *物理学报*, **15** (1959), 397.
- [5] Bethe, H. A., *Phys. Rev.*, **103** (1956), 1353.
- [6] Wigner, E. P., *Group Theory and Its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra* (1959), p. 116.
- [7] Bloch, C., *Nucl. Phys.*, **7** (1958), 451.
- [8] Frantz, L. M. and Mills, R. L., *Nucl. Phys.*, **15** (1960), 16.
- [9] Racah, G., *Phys. Rev.*, **62** (1942), 438.
- [10] van der Waerden, B. L., *Die gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik* (1932), p. 40.

ON THE BRUECKNER-GOLDSTONE LINKED CLUSTER EXPANSION FORMULA

WU SHI-SHU

(Department of Physics, Chilin University)

ABSTRACT

By a new choice of the vacuum state it is shown that the nondegenerate Brueckner-Goldstone linked cluster expansion formula can also be applied to the case where there is one particle outside or one hole inside the closed shell configuration, even though here exists degeneracy.