

原子核的单粒位阱(I)*

一个定理

吴式枢

(吉林大学物理系)

提 要

本文证明了一个定理并讨论了它的一些应用。定理给出了单粒子能量与分离能的严格关系。

一、引 言

对某一个选定的单粒位阱 \mathbf{u} , 由本征方程

$$\mathbf{h}|\alpha\rangle = (\mathbf{t} + \mathbf{u})|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle \quad (1)$$

求得的单粒子能量 ε_α 和 $(N \pm 1)$ 核的能量本征值 $E_n(N \pm 1)$ 之间的关系是一个有实际物理意义的问题。四十年前, Koopmans^[1] 在 Hartree-Fock (简写 HF) 近似的基础上曾证明: 如果忽略由增加或者减少一个粒子而引起的单粒子波函数的改变 (称为轨道变位修正), 则

$$(\varepsilon_\alpha)_{\text{HF}} = \pm [E_{n_\alpha}(N \pm 1) - E_0(N)]_{\text{HF}}. \quad (2)$$

上式中当 α 为粒子态时取上面的符号, 为空穴态时取下面的符号; $E_0(N)$ 为满壳核 (粒子数为 N) 基态的能量本征值, 脚标 HF 表示按照 HF 近似计算得到的结果。由于真实的核力具有强排斥心, 这时 HF 近似不适用。最近 Becker 与 Patterson^[2] 推广了上述 Koopmans 定理并证明了以下结论: 倘若忽略轨道变位修正, 则有

$$(\varepsilon_\alpha)_{\text{RBHF}} = \pm [E_{n_\alpha}(N \pm 1) - E_0(N)]_{\text{RBHF}}, \quad (3)$$

式中脚标 RBHF 表示按重整化了的 Brueckner-Hartree-Fock 近似求得的结果。我们的结论和 (2), (3) 式的区别在于: 倘若 \mathbf{u} 满足第二节中所述定理的条件, 则严格地有

$$\varepsilon_\alpha = \pm [E_{n_\alpha}(N \pm 1) - E_0(N)], \quad (4)$$

其中 $E_0(N)$ 与 $E_{n_\alpha}(N \pm 1)$ 分别表示满壳核基态与 $(N \pm 1)$ 核的严格能量本征值。文中第二节将给出定理的内容及其证明。第三节将讨论定理的一些应用。

鉴于 (4) 式, 我们将要求 ε_α 是实的, 但允许 \mathbf{u} 是非厄米的。为此, 同时也为了阐明文中所用的符号, 这里将先对时间有关的摄动理论作一个简短的注记。文中希腊字母表示粒子或者空穴态, 拉丁字母 $p, p', \dots (h, h', \dots)$ 表示粒子 (空穴) 态。体系的哈密顿量可以写为

* 1975年2月26日收到。

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_1, \\
 H_0 &= T + U = \sum_a (t_a + u_a) = \sum_a h_a, \\
 H_1 &= V - U = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} v_{ab} - \sum_a u_a,
 \end{aligned} \tag{5}$$

其中 h_a 表示粒子 a 的哈密顿量, v_{ab} 为粒子 a 与 b 之间的二体相互作用. 引入以下双正交系^[3]:

$$\begin{aligned}
 h|\alpha\rangle &= \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle, \\
 h^+|\bar{\alpha}\rangle &= \varepsilon_\alpha^*|\bar{\alpha}\rangle = \varepsilon_\alpha|\bar{\alpha}\rangle, \\
 \langle\bar{\alpha}|\beta\rangle &= \delta_{\alpha\beta}.
 \end{aligned} \tag{6}$$

令 ξ_α^+ 与 ξ_α^+ 分别表示态 $|\alpha\rangle$ 与 $|\bar{\alpha}\rangle$ 的产生算符. 容易证明^[4], 它们满足下述反交换关系:

$$\begin{aligned}
 \{\xi_\alpha^+, \xi_\beta^+\} &= \{\xi_\alpha, \xi_\beta\} = 0, \\
 \{\xi_\alpha^+, \xi_\beta\} &= \delta_{\alpha\beta};
 \end{aligned} \tag{7}$$

而且 H_0 和 H_1 可以写为

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \sum_a \varepsilon_\alpha \xi_\alpha^+ \xi_\alpha, \\
 H_1 &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta,\gamma\delta} \xi_\alpha^+ \xi_\beta^+ \xi_\delta \xi_\gamma - \sum_{\alpha\gamma} u_{\alpha\gamma} \xi_\alpha^+ \xi_\gamma,
 \end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$\begin{aligned}
 v_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \langle\bar{\alpha}\bar{\beta}|\mathbf{v}|\gamma\delta\rangle - \langle\bar{\alpha}\bar{\beta}|\mathbf{v}|\delta\gamma\rangle, \\
 u_{\alpha\gamma} &= \langle\bar{\alpha}|\mathbf{u}|\gamma\rangle.
 \end{aligned} \tag{9}$$

满壳核基态的零级近似波函数可以取为 $|\phi_0\rangle = \prod_{\alpha=1}^N \xi_\alpha^+|0\rangle$. 显然, $H_0|\phi_0\rangle = E_0^0|\phi_0\rangle$

($E_0^0 = \sum_{\alpha=1}^N \varepsilon_\alpha$), 且 $|\phi_0\rangle$ 应是 H_0 的一个非退化解. 对应地有 $|\bar{\phi}_0\rangle = \prod_{\alpha=1}^N \xi_\alpha^+|0\rangle$, $H_0^+|\bar{\phi}_0\rangle = E_0^{0*}|\bar{\phi}_0\rangle$. 令

$$\begin{aligned}
 U(t, t_0) &= e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0} \\
 &= \sum_{\rho=0}^{\infty} \frac{(-i)^\rho}{\rho!} \int_{t_0}^t \cdots \int dt_1 \cdots dt_\rho T\{H_1(t_1) \cdots H_1(t_\rho)\},
 \end{aligned} \tag{10}$$

$$\bar{U}(t, t_0) = e^{iH_0^+ t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0^+ t} = U^+(t_0, t),$$

其中 $H_1(t) = e^{iH_0 t} H_1 e^{-iH_0 t}$. 容易求得

$$\begin{aligned}
 \xi_\alpha^+(t) &= e^{iH_0 t} \xi_\alpha^+ e^{-iH_0 t} = \xi_\alpha^+ e^{i\varepsilon_\alpha t}, \\
 \xi_\alpha(t) &= e^{iH_0 t} \xi_\alpha e^{-iH_0 t} = \xi_\alpha e^{-i\varepsilon_\alpha t}.
 \end{aligned} \tag{11}$$

此外, 当计算涉及 $t(t_0) = \pm\infty$ 时, 将引进绝热近似, 即以 $H_1(t)e^{-\eta|t|}$ 代替 $H_1(t)$, 积分后再取极限 $\eta \rightarrow 0^+$. 不难检验, 满壳核基态波函数 $|\Psi_0\rangle$ 的严格表达式可以写作如下形式:

$$\lambda|\Psi_0\rangle = \frac{U(0, \pm\infty)|\phi_0\rangle}{\langle\bar{\phi}_0|U(0, \pm\infty)|\phi_0\rangle}, \tag{12 \cdot 1}$$

$$= \frac{\bar{U}(0, \pm\infty)|\bar{\phi}_0\rangle}{\langle\bar{\phi}_0|\bar{U}(0, \pm\infty)|\bar{\phi}_0\rangle}, \tag{12 \cdot 2}$$

其中 λ 为归一化常数. (12.2) 式指出, 因为 H 还可写为 $H = H_0^+ + H_1^+$, 所以代替 $|\phi_0\rangle$

也可将 $|\bar{\phi}_0\rangle$ 取为 $|\Psi_0\rangle$ 的零级近似. 这两种选择是完全等价的, 下面将约定选取前者. 格林函数的定义和 \mathbf{u} 是厄米时相同, 例如, 对于单粒子格林函数 $G_{\alpha\beta}(t_1 - t_2)$ 有

$$G_{\alpha\beta}(t_1 - t_2) = \langle \Psi_0 | T \{ \xi_\alpha(t_1) \xi_\beta^\dagger(t_2) \} | \Psi_0 \rangle. \quad (13)$$

这里, $\xi(t) = e^{iHt} \xi e^{-iHt}$. 应用 (10) 与 (12) 式可以证明, $G_{\alpha\beta}(t_1 - t_2)$ 的摄动理论计算公式为

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(t_1 - t_2) &= \frac{\langle \bar{\phi}_0 | T \{ U(\infty, -\infty) \xi_\alpha(t_1) \xi_\beta^\dagger(t_2) \} | \phi_0 \rangle}{\langle \bar{\phi}_0 | U(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle} \\ &= \langle \bar{\phi}_0 | T \{ U(\infty, -\infty) \bar{\xi}_\alpha(t_1) \bar{\xi}_\beta^\dagger(t_2) \} | \phi_0 \rangle_L, \end{aligned} \quad (14)$$

其中 L 表示只向相连图求和. 由 (7), (8) 与 (11) 式不难看出, 计算 (14) 式时, Wick 定理同样适用, 费曼图的画法与计算规则和 \mathbf{u} 是厄米时完全相同, 如 Schäfer^[4] 已指出的那样, 只须注意, 对应于厄米时的 $\xi_\alpha, \xi_\alpha^\dagger, |\alpha\rangle$ 与 $\langle\alpha|$ 现为 $\bar{\xi}_\alpha, \bar{\xi}_\alpha^\dagger, |\alpha\rangle$ 与 $\langle\bar{\alpha}|$; 这点也是很自然的, 因为按 (7) 式, 态 $|\alpha\rangle$ 的消灭算符为 $\bar{\xi}_\alpha$. 例如, 我们有以下收缩关系:

$$\begin{aligned} \overline{\xi_\alpha^\dagger(t_1) \xi_\beta^\dagger(t_2)} &= \overline{\bar{\xi}_\alpha(t_1) \bar{\xi}_\beta(t_2)} = 0, \\ \overline{\bar{\xi}_\alpha(t_1) \bar{\xi}_\beta^\dagger(t_2)} &= \langle \bar{\phi}_0 | T \{ \bar{\xi}_\alpha(t_1) \bar{\xi}_\beta^\dagger(t_2) \} | \phi_0 \rangle \\ &= G_{\alpha\beta}^0(t_1 - t_2) = \delta_{\alpha\beta} G_\alpha^0(t_1 - t_2) \\ &= \delta_{\alpha\beta} [\theta(t_1 - t_2) - n_\alpha] e^{-i\varepsilon_\alpha(t_1 - t_2)}, \end{aligned} \quad (15)$$

其中按 $\alpha = p$ 或者 h , n_α 的取值为 0 或者 1;

$$\theta(t_1 - t_2) = \begin{cases} 1 & t_1 > t_2, \\ 0 & t_1 \leq t_2. \end{cases}$$

显然, 厄米算符在双正交表象里仍是厄米的. 例如, 对于总粒子数算符有

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \xi_\alpha^\dagger \xi_\alpha = \sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\dagger \bar{\xi}_\alpha = \mathcal{H}^+.$$

但是, 容易看出, 对应于 “ $|\phi_0\rangle$ -选择” 表达式 $\mathcal{H} = \sum_\alpha \xi_\alpha^\dagger \xi_\alpha$ 将更方便, 而对应于 “ $|\bar{\phi}_0\rangle$ -选择” $\mathcal{H}^+ = \sum_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\dagger \bar{\xi}_\alpha$ 却更方便. 由于 $[\mathcal{H}, H_0] = [\mathcal{H}, H_1] = 0$, 计算中粒子数无疑将保持守恒. 我们看到, 当 \mathbf{u} 是非厄米时, 虽然为了引进双正交系需要同时求解两个非厄米的单粒子本征方程 [参看 (6) 式], 但是在引进了双正交系后, 摄动理论的公式演算却并不比 \mathbf{u} 是厄米时更为复杂. 因此倘若 \mathbf{u} 的非厄米选择对于解决某些具体问题能带来其它的简化 [见后] 或者克服一定的困难时, 则它应是一个值得进一步考虑的选择. 显然, 上述双正交表象概括了 \mathbf{u} 是厄米的情形, 因为这时 $\mathbf{h}^+ = \mathbf{h}$, 所以只须令 $\bar{\xi}_\alpha = \xi_\alpha, \langle\bar{\alpha}| = \langle\alpha|$ 就得到有关厄米的结果.

二、定理及其证明

本节将首先叙述定理的内容并给出其证明, 然后对定理中的条件再作一些进一步的说明.

定理 设单粒位阱 \mathbf{u} 满足以下条件:

1) $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 存在¹⁾. $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 为可约质量算符, 其定义为

$$\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) = [u - M(\omega)]_{\alpha\beta} + \sum_{\rho} [u - M(\omega)]_{\alpha\rho} G_{\rho}^0(\omega) [u - M(\omega)]_{\rho\beta} \\ + \sum_{\rho\lambda} [u - M(\omega)]_{\alpha\rho} G_{\rho}^0(\omega) [u - M(\omega)]_{\rho\lambda} G_{\lambda}^0(\omega) [u - M(\omega)]_{\lambda\beta} + \dots, \quad (16)$$

其中 $M(\omega)$ 表示质量算符, $G_{\alpha\beta}^0(\omega) = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}^0(\omega)$ 为单粒子格林函数 $G_{\alpha\beta}(\omega)$ 的零级近似.

2) 至少存在有一个 $\beta(\beta \neq \alpha)$ 使 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\varepsilon_{\alpha}) \neq 0$ 或 $\mathfrak{M}_{\beta\alpha}(\varepsilon_{\alpha}) \neq 0$ ²⁾; 或者 $1 - \mathfrak{M}'_{\alpha\alpha}(\varepsilon_{\alpha}) \neq 0$ $\left\{ \mathfrak{M}'_{\alpha\alpha}(\varepsilon_{\alpha}) \equiv \left[\frac{d}{d\omega} \mathfrak{M}_{\alpha\alpha}(\omega) \right]_{\omega=\varepsilon_{\alpha}} \right\}$, 即以上三个不等式中至少有一个成立时,

则必有(4)式.

证明很简单. 大家熟知, $G_{\alpha\beta}(t = t_1 - t_2)$ 满足以下 Dyson 方程:

$$G_{\alpha\beta}(t_1 - t_2) = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}^0(t_1 - t_2) \\ + \iint_{-\infty}^{\infty} d\sigma_1 d\sigma_2 G_{\alpha}^0(t_1 - \sigma_1) \sum_{\gamma} [M_{\alpha\gamma}(\sigma_1 - \sigma_2) + i u_{\alpha\gamma} \delta(\sigma_1 - \sigma_2)] \\ \times G_{\gamma\beta}(\sigma_2 - t_2). \quad (17)$$

上式的傅氏变换 $\left[G_{\alpha\beta}(\omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G_{\alpha\beta}(t) \right]$ 可以写为

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}^0(\omega) + \sum_{\gamma} G_{\alpha}^0(\omega) [u_{\alpha\gamma} - M_{\alpha\gamma}(\omega)] G_{\gamma\beta}(\omega) \quad (18 \cdot 1)$$

$$= \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}^0(\omega) + G_{\alpha}^0(\omega) [u_{\alpha\beta} - M_{\alpha\beta}(\omega)] G_{\beta}^0(\omega) \\ + G_{\alpha}^0(\omega) \sum_{\gamma} [u_{\alpha\gamma} - M_{\alpha\gamma}(\omega)] G_{\gamma}^0(\omega) [u_{\gamma\beta} - M_{\gamma\beta}(\omega)] G_{\beta}^0(\omega) + \dots, \quad (18 \cdot 2)$$

式中

$$G_{\alpha}^0(\omega) = - \left[\frac{1 - n_{\alpha}}{\omega - \varepsilon_{\alpha} + i\eta} + \frac{n_{\alpha}}{\omega - \varepsilon_{\alpha} - i\eta} \right]. \quad (19)$$

由(18)式我们看到, 如果定理中的条件 1) 成立, 就有

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}^0(\omega) + G_{\alpha}^0(\omega) \mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) G_{\beta}^0(\omega), \quad (20)$$

或

$$\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) = G_{\alpha}^0(\omega)^{-1} G_{\alpha\beta}(\omega) G_{\beta}^0(\omega)^{-1} - \delta_{\alpha\beta} G_{\beta}^0(\omega)^{-1}. \quad (21)$$

根据(13)式的定义, $G_{\alpha\beta}(\omega)$ 也可以严格地写为

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = - \sum_n \left\{ \frac{g_{\alpha\beta}^{(+)}(n)}{\omega - \mathcal{E}_n^+ + i\eta} + \frac{g_{\alpha\beta}^{(-)}(n)}{\omega + \mathcal{E}_n^- - i\eta} \right\} \\ \equiv G_{\alpha\beta}^{(+)}(\omega) + G_{\alpha\beta}^{(-)}(\omega), \quad (22)$$

其中 $\mathcal{E}_n^{\pm} = E_n(N \pm 1) - E_0(N)$,

$$g_{\alpha\beta}^{(+)}(n) = \langle \Psi_0 | \xi_{\alpha} | \Psi_n(N+1) \rangle \langle \Psi_n(N+1) | \xi_{\beta}^+ | \Psi_0 \rangle, \\ g_{\alpha\beta}^{(-)}(n) = \langle \Psi_0 | \xi_{\beta}^+ | \Psi_n(N-1) \rangle \langle \Psi_n(N-1) | \xi_{\alpha} | \Psi_0 \rangle. \quad (23)$$

以(19)与(22)式代入(21)式, 容易看出, $\lim_{\omega \rightarrow \infty} \mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) = C_{\alpha\beta} \omega$, 即 $\omega = \infty$ 是 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 的

1) 这里“存在”一词允许有一定的奇异性.

2) (16)式可能使我们误认为, $\omega = \varepsilon_{\alpha}$ 或 ε_{β} 应是 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 的奇异点. 下面的讨论将指出 [参看(21)式], 事实并非如此. 因此在应用(16)式计算条件 2) 中的量时, 必须予以适当的注意.

极点;此外,例如,对于 $\mathfrak{M}_{p\beta}(\omega)$ 有

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{p\beta}(\omega) &= G_p^0(\omega)^{-1} \sum_n \left\{ -\frac{g_{p\beta}^{(+)}(n)}{\omega - \mathcal{E}_n^+ + i\eta} - \frac{g_{p\beta}^{(-)}(n)}{\omega + \mathcal{E}_n^- - i\eta} \right\} G_\beta^0(\omega)^{-1} - \delta_{p\beta} G_p^0(\omega)^{-1} \\ &\equiv \mathfrak{M}_{p\beta}^{(+)}(\omega) + \mathfrak{M}_{p\beta}^{(-)}(\omega) + \mathfrak{M}_{p\beta}^{(0)}(\omega). \end{aligned} \quad (24)$$

因为 $G_p^0(\omega)^{-1} = -(\omega - \varepsilon_p + i\eta)$, 所以倘若 \mathcal{E}_n^+ 中有 $\mathcal{E}_{n_p}^+ = \varepsilon_p$, 则 $\mathcal{E}_{n_p}^+$ 虽是 $G_{p\beta}(\omega)$ 的极点,却不是 $\mathfrak{M}_{p\beta}(\omega)$ 的极点[参看(30)式]. 因此(21)式说明,除了实轴附近的个别极点($\mathcal{E}^\pm \mp i\eta, \eta \rightarrow 0^+$)以及无穷远处的极点外, $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 应和 $G_{\alpha\beta}(\omega)$ 有相同的解析性.

现假定存在一个 $\beta (\neq p)$ 使 $\mathfrak{M}_{p\beta}(\varepsilon_p) \neq 0$. 由(24)式可以立即看出,这时 n 中必有一个 n_p 使得

$$\varepsilon_p = \mathcal{E}_{n_p}^+ = E_{n_p}(N+1) - E_0(N), \quad (25)$$

而且

$$\mathfrak{M}_{p\beta}(\varepsilon_p) = g_{p\beta}^{(+)}(n_p) G_\beta^0(\varepsilon_p)^{-1} = \mathfrak{M}_{p\beta}^{(+)}(\varepsilon_p). \quad (26)$$

注意,我们必须理解

$$\mathfrak{M}_{p\beta}^{(-)}(\varepsilon_p) = 0, \quad (27)$$

即 $\mathfrak{M}_{p\beta}(\varepsilon_p) \neq 0$ 只可能来源于 $\mathfrak{M}_{p\beta}^{(+)}(\varepsilon_p) \neq 0$. 为此可以考虑 $G_{pp'}(t > 0)$ 或者 $G_{ph}(t > 0)$. 假定(25)式不成立,即 $\mathfrak{M}_{p\beta}(\varepsilon_p) \neq 0$ 是由于 $\mathfrak{M}_{p\beta}^{(-)}(\varepsilon_p) \neq 0$. 让我们考虑 $G_{ph}(t > 0)$. 它满足

$$G_{ph}(t > 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} d\omega e^{-i\omega t} G_{ph}(\omega) \quad (28 \cdot 1)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} d\omega e^{-i\omega t} G_p^0(\omega) \mathfrak{M}_{ph}(\omega) G_h^0(\omega), \quad (28 \cdot 2)$$

虽然 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 含有极点 $\omega = \infty$, 但是因为它不是 $G_a^0(\omega) \mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) G_b^0(\omega)$ 的极点,所以它对(26)式中的积分没有贡献. 下面在提到 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}^{(+)}(\omega)$ 所含极点对积分的贡献时,将不包括这个极点. 显然,(28·2)式中只有 $G_p^0(\omega)$ 与 $\mathfrak{M}_{ph}^{(+)}(\omega)$ 的极点对积分有贡献,因此

$$\begin{aligned} G_{ph}(t > 0) &= \mathfrak{M}_{ph}(\varepsilon_p) G_h^0(\varepsilon_p) e^{-i\varepsilon_p t} \\ &\quad - \sum_n \text{Res} [G_p^0(\omega) \mathfrak{M}_{ph}^{(+)}(\omega) G_h^0(\omega)]_{\omega=\mathcal{E}_n^+} e^{-i\mathcal{E}_n^+ t} \\ &= \mathfrak{M}_{ph}^{(-)}(\varepsilon_p) G_h^0(\varepsilon_p) e^{-i\varepsilon_p t} + \sum_n g_{ph}^{(+)}(n) e^{-i\mathcal{E}_n^+ t}. \end{aligned} \quad (29)$$

现设 $\mathfrak{M}_{ph}^{(-)}(\varepsilon_p) \neq 0$ 且(25)式成立. 这时¹⁾,

$$\mathfrak{M}_{ph}^{(+)}(\omega) = g_{ph}^{(+)}(n_p) G_h^0(\omega)^{-1} - G_p^0(\omega)^{-1} \sum_{n \neq n_p} \frac{g_{ph}^{(+)}(n)}{\omega - \mathcal{E}_n^+ + i\eta} G_h^0(\omega)^{-1}, \quad (30)$$

因此由(28.2)式依然有

1) 由以下等式(其中 $t > 0$):

$$\begin{aligned} &\lim_{\eta_i \rightarrow 0^+} \frac{-1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} d\omega \frac{(\omega - a + i\eta_1)}{(\omega - a + i\eta_2)(\omega - a + i\eta_3)} e^{-i\omega t} \\ &= \lim_{\eta_i \rightarrow 0^+} \left\{ e^{-iat} \left[\frac{\eta_1 - \eta_2}{\eta_3 - \eta_2} + \frac{\eta_1 - \eta_3}{\eta_2 - \eta_3} \right] + o(\eta_i) \right\} \\ &= e^{-iat} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{-1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - a + i\eta} \end{aligned}$$

容易看出,(30)式右端第一项的写法是正确的,这里不存在“不确定性”.

$$\begin{aligned}
G_{ph}(t > 0) &= [\mathfrak{M}_{ph}^{(+)}(\varepsilon_p) + \mathfrak{M}_{ph}^{(-)}(\varepsilon_p)] G_h^0(\varepsilon_p) e^{-i\varepsilon_p t} \\
&+ \sum_{n \neq n_p} g_{ph}^{(+)}(n) e^{-i\varepsilon_n^+ t} = \mathfrak{M}_{ph}^{(-)}(\varepsilon_p) G_h^0(\varepsilon_p) e^{-i\varepsilon_p t} \\
&+ \sum_n g_{ph}^{(+)}(n) e^{-i\varepsilon_n^+ t}. \quad (29')
\end{aligned}$$

另外,根据(13)式的定义,或者以(22)式代入(28.1)式,可以求得

$$G_{ph}(t > 0) = \sum_n g_{ph}^{(+)}(n) e^{-i\varepsilon_n^+ t}. \quad (31)$$

对比(29)与(31)式,立即得到

$$\mathfrak{M}_{ph}^{(-)}(\varepsilon_p) = 0.$$

因此,若 $\mathfrak{M}_{p\beta}(\varepsilon_p) \neq 0 (p \neq \beta)$, 必有(25)式. 同理,若 $\mathfrak{M}_{h\beta}(\varepsilon_h) \neq 0 (h \neq \beta)$, 必有

$$\varepsilon_h = -\mathcal{E}_{nh}^- = E_0(N) - E_{nh}(N-1), \quad (32)$$

而且

$$\mathfrak{M}_{h\beta}(\varepsilon_h) = g_{h\beta}^{(-)}(n_h) G_\beta^0(\varepsilon_h)^{-1} = \mathfrak{M}_{h\beta}^{(-)}(\varepsilon_h), \quad (33)$$

即这时应理解 $\mathfrak{M}_{h\beta}^{(+)}(\varepsilon_h) = 0$ [为此可考虑 $G_{hh'}(t < 0)$ 或者 $G_{hp}(t < 0)$]. 显然,条件2)中所述其它命题可以同样证明. 定理因此证毕.

根据以上论据不难看出,条件2)实际上¹⁾也是(4)式严格成立的必要条件[在条件1)的前提下]. 现考虑以下非齐次线性积分方程:

$$\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) = [u - M(\omega)]_{\alpha\beta} + \sum_\gamma [u - M(\omega)]_{\alpha\gamma} G_\gamma^0(\omega) \mathfrak{M}_{\gamma\beta}(\omega) \quad (34 \cdot 1)$$

或者

$$\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) = [u - M(\omega)]_{\alpha\beta} + \sum_\gamma \mathfrak{M}_{\alpha\gamma}(\omega) G_\gamma^0(\omega) [u - M(\omega)]_{\gamma\beta}. \quad (34 \cdot 2)$$

从定理的证明容易看出,代替条件1)可以更一般地引进

1.1) (34)式有解[注意,其解必满足(20)式,因这时按(20)式定义的 $G_{\alpha\beta}(\omega)$ 必满足(18)式].

因为(34)式的迭代解就是条件1)中的无穷级数,所以条件1)只是实现1.1)的一个途径. 另一个熟知的实现1.1)的途径为

$$\begin{aligned}
1.2) \quad A(\omega) &= (1 - [u - M(\omega)] G^0(\omega))^{-1} \text{ 或者} \\
B(\omega) &= (1 - G^0(\omega) [u - M(\omega)])^{-1} \text{ 存在.}
\end{aligned}$$

这时(34)式的解可以写为

$$\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) = \{A(\omega)[u - M(\omega)]\}_{\alpha\beta} \quad (35 \cdot 1)$$

或者

$$\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega) = \{[u - M(\omega)]B(\omega)\}_{\alpha\beta}. \quad (35 \cdot 2)$$

另外,由(18)式有

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = G_\alpha^0(\omega) A_{\alpha\beta}(\omega) \text{ 或者 } G_{\alpha\beta}(\omega) = B_{\alpha\beta}(\omega) G_\beta^0(\omega). \quad (36)$$

1) 例如,若条件2)不满足,但(25)式成立,则对任一 β , 必有

$$g_{p\beta}^{(+)}(n_p) = g_{\beta p}^{(+)}(n_p) = 0.$$

(23)式说明,这时(25)式成立只是偶然的[显然,这里隐含着所考虑的是断续谱区]. 此外,若(4)式不成立,则条件2)不满足.

应用上式可求得 $A(\omega)$ 与 $B(\omega)$ 的解析性或者奇异性. 联立 (35) 与 (36) 式, 容易求得

$$G^0(\omega)\mathfrak{M}(\omega) = G(\omega)[u - M(\omega)] \quad (37 \cdot 1)$$

或者

$$\mathfrak{M}(\omega)G^0(\omega) = [u - M(\omega)]G(\omega), \quad (37 \cdot 2)$$

由此根据 (18) 式, 可立即得到 (20) 式, 即如果 $A(\omega)$ 或者 $B(\omega)$ 存在, 则 (20) 式必成立. 条件 1) 与 1.2) 的关系是众所周知的, 因为 (16) 式就是 (35) 式的幂级数展开. 我们注意, (34) 式并不比 (18.1) 式更简单, 引进 (34) 式的目的主要是为了说明, 即使 (16) 式中的级数不收敛, $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 仍可能存在.

由于定理的证明只用到单粒子格林函数的性质以及 (20) 或者 (21) 式, 因此可以直接将 (21) 式取为 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 的定义, 这样还可将条件 1) 叙述为

1.3) (18.1) 式有解, 即 $G_{\alpha\beta}(\omega)$ 存在.

显然, 如果上述条件能够得到满足, 由 (18) 与 (21) 式就可以求得 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 所满足的等式与方程. 例如, 若摄动理论适用, 以 (18.2) 式代入 (21) 式, 就可立即求得 (16) 式. 为了判断 (4) 式是否成立, 通常的途径为: 首先算出 $E_{n_a}(N \pm 1) - E_0(N)$ 或给出其计算公式, 然后和 ϵ_a 相比较. 本文的目的在于探讨是否还存有其它的途径和判据. 因此, 如果只能依赖 (21) 与 (22) 式来计算 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$, 取条件 2) 为 (4) 式成立的判据是无意义的. 定理的意义在于实际存在着其它(即无需事先求出 \mathcal{E}_n^+ 与 \mathcal{E}_n^- 的) 计算 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\omega)$ 的方法. 下一节将指出, 若条件 2) 中的量不等于零, 它们都有直接的物理意义(参看 (41), (44)——(46)式), 此外定理还有一些其它的应用.

三、定理的一些应用

定理的一个主要应用已包含在它的结论[参看(4)式]中, 这里将讨论它的一些其它应用. 首先我们指出, 由它可以得到以下判据:

(1) 因为 $E_0(N)$ 与 $E_n(N \pm 1)$ 分别是满壳核基态与 $(N \pm 1)$ 核的严格能量本征值, 所以它们的数值可由实验测定. 倘若 ϵ_p 与 $E_{\pi_p}(N + 1) - E_0(N)$ 或 ϵ_h 与 $E_0(N) - E_{n_h}(N - 1)$ 差别较大时, 这说明 $u_{\alpha\beta}$ 不满足条件 1) 或者 2). 如果根据 (16) 或 (35) 式进行的近似计算足以判断 $u_{\alpha\beta}$ 满足条件 2), 则它必不满足条件 1), 即它是一个不恰当的选择.

(2) 设 $u_{\alpha\beta}$ 是某一选定的单粒位阱, 由它所确定的单粒子能量 ϵ_a 不满足条件 2). 例如, 让我们考虑 $\alpha = h$ 时的情形. 这时 (32) 式不成立, 且

$$\mathfrak{M}_{h\beta}(\epsilon_h) = \mathfrak{M}_{\beta h}(\epsilon_h) = 1 - \mathfrak{M}'_{hh}(\epsilon_h) = 0.$$

根据 (19) 与 (20) 式, 容易求得

$$\begin{aligned} G_{hh}(t < 0) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha} d\omega e^{-i\omega t} [G_h^0(\omega) + G_h^0(\omega)\mathfrak{M}_{hh}(\omega)G_h^0(\omega)] \\ &= -[1 - \mathfrak{M}'_{hh}(\epsilon_h)]e^{-i\epsilon_h t} - \sum_n g_{hh}^{(-)}(n)e^{i\epsilon_n^- t} \end{aligned} \quad (38 \cdot 1)$$

$$= - \sum_n g_{hh}^{(-)}(n)e^{i\epsilon_n^- t}. \quad (38 \cdot 2)$$

(38.1) 式中中方括号内的第二项为二重极点 $(\epsilon_h + i\eta)$ 的贡献, 最后一项是 $\mathfrak{M}_{hh}^{(-)}(\omega)$ 所含

极点的贡献。(38)式说明, $G_{hh}(t < 0)$ 不包含时间随 $\exp(-i\varepsilon_h t)$ 变化的项。但是,按摄动理论进行计算,如果只取有限项,则 $G_{hh}(t < 0)$ 将含有上述项。例如,根据(15)式, $G_{hh}(t < 0)$ 的零级近似为 $G_{hh}^0(t < 0) = -\exp(-i\varepsilon_h t)$,所以当 ε_h 不满足条件2)时,取 $G_{hh}(t < 0) \simeq G_{hh}^0(t < 0)$ 或者只取摄动展开中少数最低级的项都可能导致错误的结论。

下面假定 $u_{\alpha\beta}$ 满足定理中的条件,我们看到,定理的结论还可能对 $G_{\alpha\beta}(t)$ 的计算带来以下简化。先考虑 $G_{p'p}(t > 0)$ 。容易求得

$$G_{pp}(t > 0) = [1 - \mathfrak{M}'_{pp}(\varepsilon_p)]e^{-i\varepsilon_p t} + \bar{P}_{pp}, \quad (39 \cdot 1)$$

$$G_{p'p}(t > 0) = \mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_{p'})G_p^0(\varepsilon_{p'})e^{-i\varepsilon_{p'} t} + \mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_p)G_p^0(\varepsilon_p)e^{-i\varepsilon_p t} + \bar{P}_{p'p} \quad (p' \neq p), \quad (39 \cdot 2)$$

其中

$$\bar{P}_{pp} = \sum_{n \neq n_p} g_{pp}^{(+)}(n)e^{-i\varepsilon_n^+ t}, \quad (40)$$

$$\bar{P}_{p'p} = \sum_{n \neq (n_{p'}, n_p)} g_{p'p}^{(+)}(n)e^{-i\varepsilon_n^+ t} \quad (p' \neq p),$$

而且

$$1 - \mathfrak{M}'_{pp}(\varepsilon_p) = g_{pp}^{(+)}(n_p), \quad (41 \cdot 1)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_{p'})G_p^0(\varepsilon_{p'}) &= g_{p'p}^{(+)}(n_{p'}), \\ \mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_p)G_p^0(\varepsilon_p) &= g_{p'p}^{(+)}(n_p). \end{aligned} \quad (p' \neq p) \quad (41 \cdot 2)$$

设所选 $u_{\alpha\beta}$ 是厄米的,注意,如果 $\Psi_{n_p}(N+1) = A\xi_p^+|\Psi_0\rangle$ (A 为归一化常数),则根据(23)式 \bar{P}_{pp} 与 $G_{p'p}(t > 0)$ ($p' \neq p$) 均等于零。虽然一般 $\Psi_{n_p}(N+1) \neq A\xi_p^+|\Psi_0\rangle$,但由于(25)式可以期望 $\langle \Psi_{n_p}(N+1)|\xi_p^+|\Psi_0\rangle$ ($n \neq n_p$) 和 $\langle \Psi_{n_p}(N+1)|\xi_p^+|\Psi_0\rangle$ 相比是高一级的量,由此 \bar{P}_{pp} 与 $\bar{P}_{p'p}$ 中所含最大的项将是二级小量。注意,只要 $u_{\alpha\beta}$ 满足定理中的条件,(25)与(39—41)式就成立,因此在这些 $u_{\alpha\beta}$ 中还可作进一步的选择,以使

$$|\langle \Psi_{n_p}(N+1)|\xi_{p'}^+|\Psi_0\rangle| / |\langle \Psi_{n_p}(N+1)|\xi_p^+|\Psi_0\rangle| \quad (n \neq n_{p'})$$

尽可能地小。当 \bar{P}_{pp} 与 $\bar{P}_{p'p}$ 可以忽略时,由(39)式将得到一个关于 $G_{p'p}(t > 0)$ 的准确且又相当简单的表达式,而且这时 $G_{p'p}(t > 0)$ ($p' \neq p$) 和 $G_{pp}(t > 0)$ 相比一般是高一级的量。无疑,以上预计仍是粗略的,还需要通过具体计算予以进一步检验。

同样有

$$G_{hh}(t < 0) = -[1 - \mathfrak{M}'_{hh}(\varepsilon_h)]e^{-i\varepsilon_h t} + \bar{P}_{hh}, \quad (42 \cdot 1)$$

$$G_{h'h}(t < 0) = -\mathfrak{M}_{h'h}(\varepsilon_{h'})G_h^0(\varepsilon_{h'})e^{-i\varepsilon_{h'} t} - \mathfrak{M}_{h'h}(\varepsilon_h)G_h^0(\varepsilon_h)e^{-i\varepsilon_h t} + \bar{P}_{h'h} \quad (h' \neq h), \quad (42 \cdot 2)$$

其中

$$\bar{P}_{hh} = -\sum_{n \neq n_h} g_{hh}^{(-)}(n)e^{i\varepsilon_n^- t}, \quad (43)$$

$$\bar{P}_{h'h} = -\sum_{n \neq (n_{h'}, n_h)} g_{h'h}^{(-)}(n)e^{i\varepsilon_n^- t} \quad (h' \neq h),$$

而且

$$1 - \mathfrak{M}'_{hh}(\varepsilon_h) = g_{hh}^{(-)}(n_h), \quad (44 \cdot 1)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{h'h}(\varepsilon_{h'})G_h^0(\varepsilon_{h'}) &= g_{h'h}^{(-)}(n_{h'}), \\ \mathfrak{M}_{h'h}(\varepsilon_h)G_h^0(\varepsilon_h) &= g_{h'h}^{(-)}(n_h); \end{aligned} \quad (h' \neq h) \quad (44 \cdot 2)$$

以及

$$\begin{aligned} G_{ph}(t > 0) &= \mathfrak{M}_{ph}(\varepsilon_p) G_h^0(\varepsilon_p) e^{-i\varepsilon_p t} + \bar{P}_{ph}^{(+)}, \\ \bar{P}_{ph}^{(+)} &= \sum_{n \neq n_p} g_{ph}^{(+)}(n) e^{-i\varepsilon_n^+ t}, \end{aligned} \quad (45 \cdot 1)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{ph}(\varepsilon_p) G_h^0(\varepsilon_p) &= g_{ph}^{(+)}(n_p); \\ G_{ph}(t < 0) &= -\mathfrak{M}_{ph}(\varepsilon_h) G_p^0(\varepsilon_h) e^{-i\varepsilon_h t} + \bar{P}_{ph}^{(-)}, \\ \bar{P}_{ph}^{(-)} &= -\sum_{n \neq n_h} g_{ph}^{(-)}(n) e^{i\varepsilon_n^- t}, \end{aligned} \quad (45 \cdot 2)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{ph}(\varepsilon_h) G_p^0(\varepsilon_h) &= g_{ph}^{(-)}(n_h); \\ G_{hp}(t > 0) &= \mathfrak{M}_{hp}(\varepsilon_p) G_h^0(\varepsilon_p) e^{-i\varepsilon_p t} + \bar{P}_{hp}^{(+)}, \\ \bar{P}_{hp}^{(+)} &= \sum_{n \neq n_p} g_{hp}^{(+)}(n) e^{-i\varepsilon_n^+ t}, \\ \mathfrak{M}_{hp}(\varepsilon_p) G_h^0(\varepsilon_p) &= g_{hp}^{(+)}(n_p); \dots \end{aligned} \quad (46)$$

很明显,上面对 $G_{p'p}(t > 0)$ 所作的讨论也适用于 $G_{h'h}(t < 0), \dots$.

最后,讨论一下 $u_{\alpha\beta}$ 的非厄米选择:

$$u_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}(\varepsilon_\beta). \quad (47)$$

仍先考虑 $G_{p'p}(t > 0)$. 另文中将证明,这时

$$\mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_p) = 0^{1)}. \quad (48)$$

显然,代替 (47·1) 式也可引入

$$u_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}(\varepsilon_\alpha), \quad (47')$$

由此将有

$$\mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_{p'}) = 0. \quad (48')$$

下面将只针对 (47) 式进行讨论,因为同样的论据适用于 (47') 式. 由于 (48) 式, (39·2) 式简化为

$$G_{p'p}(t > 0) = \mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_{p'}) G_p^0(\varepsilon_{p'}) e^{-i\varepsilon_{p'} t} + P_{p'p} \quad (p' \neq p). \quad (49)$$

此外,根据 (41) 式有

$$g_{p'p}^{(+)}(n_p) = \langle \Psi_0 | \xi_{p'} | \Psi_{n_p}(N+1) \rangle \langle \Psi_{n_p}(N+1) | \xi_p^+ | \Psi_0 \rangle = 0 \quad (p' \neq p). \quad (50)$$

因为已假定 $u_{\alpha\beta}$ 满足定理中的条件,可以预计 $\langle \Psi_{n_p}(N+1) | \xi_p^+ | \Psi_0 \rangle \neq 0$, 所以由 (50) 式有

$$\langle \Psi_0 | \xi_{p'} | \Psi_{n_p}(N+1) \rangle = 0 \quad (p' \neq p). \quad (51)$$

注意,除了和 ε_p 或者 ε_h [参看 (25) 或者 (32) 式] 对应的态外, $(N \pm 1)$ 核还可以有集体运动态,后者将用脚标 n_c 表示. 由 (40) 式并应用 (23) 与 (51) 式可得

$$\begin{aligned} P_{p'p} &= \sum_{p'(\neq p)} g_{p'p}^{(+)}(n_{p'}) e^{-i\varepsilon_{p'} t} + \sum_{n_c} g_{p'p}^{(+)}(n_c) e^{-i\varepsilon_{n_c}^+ t} \\ &= \sum_{n_c} g_{p'p}^{(+)}(n_c) e^{-i\varepsilon_{n_c}^+ t}. \end{aligned} \quad (52 \cdot 1)$$

1) 注意,由 (36) 式可得 $A_{p'\gamma}(\omega) = G_p^0(\omega)^{-1} G_{p'\gamma}(\omega)$. 因此当 $p' \neq p$ 时,按 (25) 式, $\omega = \varepsilon_p - i\eta$ 可能是 $A_{p'\gamma}(\omega)$ 的极点. 所以,虽然 $u_{\gamma p} = M_{\gamma p}(\varepsilon_p)$, 却不能根据 (35) 式由

$$\mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_p) = \Sigma_{\gamma} A_{p'\gamma}(\varepsilon_p) [u - M(\varepsilon_p)]_{\gamma p}$$

立即导出 $\mathfrak{M}_{p'p}(\varepsilon_p) = 0$.

同理有

$$P_{p'p} = \sum_{n_c} g_{p'p}^{(+)}(n_c) e^{-i\epsilon_{n_c}^+ t} \quad (p' \neq p). \quad (52 \cdot 2)$$

(49) 与 (52) 式应看为是非厄米选择 (47) 式的优点。自然我们更关心的是：是否 $P_{p'p}$ 与 $\bar{P}_{p'p}$ 均可忽略或者只是其中之一可以忽略？要想准确地回答这一问题还有待于具体的数值计算。根据“最大抵销原则”，Jones 与 Mohling^[5] 曾指出 (47) 式的非厄米选择有比 Brandow^[6] 与 Kirson^[7] 所建议的位阱更好的抵销性。J-M 只明显地考虑了 $M_{\alpha\beta}(\epsilon_\beta)$ 的二级近似。另文中我们将对 (47) 式的抵销性作更全面的探讨并将指出，(39.2) 式与 $\bar{P}_{p'p}$ 分别简化为 (49) 式与 $P_{p'p}$ 正是由于抵销的结果。由于 (49) 与 (52) 式，我们觉得，(47) 式的选择虽是非厄米的，却是一个值得进一步研究的选择¹⁾。

同理，(42.2) 式与 $\bar{P}_{h'h}$ (包括 $h' = h$) 分别简化为

$$G_{h'h}(t < 0) = -\mathfrak{M}_{h'h}(\epsilon_{h'}) G_h^0(\epsilon_{h'}) e^{-i\epsilon_{h'} t} + P_{h'h} \quad (h' \neq h),$$

$$P_{h'h} = -\sum_{n_c} g_{h'h}^{(-)}(n_c) e^{i\epsilon_{n_c}^- t}, \quad (53)$$

且

$$\langle \Psi_{n_h}(N-1) | \xi_{h'} | \Psi_0 \rangle = 0 \quad (h' \neq h). \quad (54)$$

此外，对应于 (45.2) 与 (46) 式有

$$G_{ph}(t < 0) = P_{ph}^{(-)} = -\sum_{n_c} g_{ph}^{(-)}(n_c) e^{i\epsilon_{n_c}^- t}, \quad (55)$$

$$G_{hp}(t > 0) = P_{hp}^{(+)} = \sum_{n_c} g_{hp}^{(+)}(n_c) e^{-i\epsilon_{n_c}^+ t}, \quad (56)$$

且

$$\langle \Psi_{n_h}(N-1) | \xi_p | \Psi_0 \rangle = 0,$$

$$\langle \Psi_0 | \xi_h | \Psi_{n_p}(N+1) \rangle = 0. \quad (57)$$

虽然根据“最大抵消原则”的观点，(47) 式比 B-K 的建议更优越，但是，由 (47) 式所给出的 u_{ph} 与 u_{hp} 和 Kirson^[9] 关于 u_{ph} 与 u_{hp} 的建议相比，却各有优点，这点将在另文中作进一步的阐述。

最后，我们注意，根据 (47) 式有 $\{[u_{\alpha\beta} - M_{\alpha\beta}(\omega)] G_\beta^0(\omega)\}_{\omega=\epsilon_\beta} = M'_{\alpha\beta}(\epsilon_\beta)$ (参看另文)，所以 (47) 式的选择也便于直接应用 (16) 与 (35) 式对 $\mathfrak{M}_{\alpha\beta}(\epsilon_\alpha)$ ($\alpha \neq \beta$) 和 $1 - \mathfrak{M}'_{\alpha\alpha}(\epsilon_\alpha)$ 进行计算。由 (16) 与 (35) 式不难看出，做近似计算时这些量一般不等于零。但是，当条件 1) 成立而 (4) 式不成立时，它们必须近似地等于零。此外，通过研究 $\omega \rightarrow \epsilon_\alpha$ 时，它们逼近于零的速率，还可以对 $\epsilon_\alpha \approx \pm [E_{n_\alpha}(N \pm 1) - E_0(N)]$ 的情形作进一步的判断。

参 考 文 献

- [1] T. Koopmans, *Physica*, 1 (1934), 104.
 [2] R. L. Becker, M. R. Patterson, *Nucl. Phys.*, A178 (1971), 88.

1) 根据 $M_{\alpha\beta}(\omega)$ 的二级摄动近似，Becker 与 Jones^[8] 曾指出 $u_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta}(\epsilon_\beta)$ 是复的，从而 ϵ_α 也将是复的。为此 B-J 建议将 (47) 式改选为

$$u_{\alpha\beta} = \text{Re} M_{\alpha\beta}(\epsilon_\beta). \quad (F1)$$

因为由摄动展开式所反映的极点并不是 $M_{\alpha\beta}(\omega)$ 真正的极点 [除非级数收敛很快]，另文中我们将指出，对于 ϵ_α 的低能断续谱区， $[M_{\alpha\beta}(\omega)]_{\omega=0}$ 的真正极点一般不与 ϵ_β 相重，因此当切断近似适用时，为了保证这一区域的 ϵ_α 是实的，并不一定需要将 (47) 式改选为 (F1)。

- [3] P. M. Morse, H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (1953), p. 884.
- [4] L. Schäfer, *Nucl. Phys.*, **A217** (1973), 361.
- [5] R. W. Jones, F. Mohling, *Nucl. Phys.*, **A151** (1970), 420.
- [6] B. H. Brandow, *Phys. Rev.*, **152** (1966), 863; *Ann. of Phys.*, **57** (1970), 214.
- [7] M. W. Kirson, *Nucl. Phys.*, **A115** (1968), 49.
- [8] R. L. Becker, R. W. Jones, *Nucl. Phys.*, **A174** (1971), 449.
- [9] M. W. Kirson, *Nucl. Phys.*, **A139** (1969), 57.

ON NUCLEAR SINGLE-PARTICLE POTENTIALS (I) A THEOREM

WU SHI-SHU

(*Department of Physics, Jilin University*)

ABSTRACT

In this paper a theorem is proved and some of its applications discussed. The theorem gives an answer to the question: Under what conditions does the following relation

$$\varepsilon_\alpha = \pm [E_\alpha(N \pm 1) - E_0(N)]$$

hold exactly? In the above relation, the ε_α 's are the single-particle (sp) energies determined by the corresponding sp potential, $E_0(N)$ is the exact ground state energy of a closed-shell nucleus N , and the $E_\alpha(N \pm 1)$'s denote the exact energy eigenvalues of its neighbouring $N \pm 1$ nucleus.