第44卷 第10期 物 理 学 报 Vol. 44, No. 10
1995年10月 ACTA PHYSICA SINICA Oct., 1995

准旋-角动量标量算符本征值与费密子 j-j 耦合态的完全分类

陈健华 程香爱
(国防科技大学应用物理系,长沙 410073)

(1994年4月24日收到)

用二次量子化和不可约张量方法,对 j 壳层引入对准旋-角动量为 $(1/2, j)$ 阶不可约张量的产生-湮没算符 $b_{qm}^{1/2j}$,由此耦合成准旋-角动量标量算符 $Y(x,k)=(bb)^{x,k}\cdot(bb)^{x,k}$,并用其本征值对费密子 j-j 耦合态进行分类.计算表明:对 $j=9/2,11/2,13/2$,当 $x+k\geqslant 3$,$Y(x,k)$ 与准旋、角动量共同本征态能对耦合态完全分类.对多数 (x,k) 值,$Y(x,k)$ 本身就能对耦合态完全分类.列出了对 $j=9/2$ 耦合态完全分类的主要结果.

PACC: 0365

1 引 言

费密子 j-j 耦合态可写为 $|j\beta QJM_QM_J\rangle$,其中 j 为单粒子角动量,Q,M_Q 与 J,M_J 分别为准旋与角动量量子数,$M_Q=(n-j-1/2)/2$,n 为粒子数,β 为附加量子数.对 $j\leqslant 7/2$,准旋、角动量给出完全分类,β 可略去.对 $j\geqslant 9/2$,尚未见耦合态完全分类的报道. 本文采用二次量子化和不可约张量方法,对 j 壳层引入产生-湮没算符 $b_{qm}^{1/2j}$,它对准旋-角动量为 $(1/2,j)$ 阶不可约张量(双重张量)[1],再由4个产生-湮没算符耦合成准旋-角动量标量算符(双重标量)[2] $Y(x,k)=(bb)^{x,k}\cdot(bb)^{x,k}$,它与准旋、角动量算符均对易,因而可对 Q,J 耦合态进一步分类,并可用 $Y(x,k)$ 的本征值或其序号赋予附加量子数 β 以确定的意义.对 $j=9/2,11/2,13/2$ 进行了全部计算,结果表明:当 $x+k\geqslant 3$,$Y(x,k)$ 的本征值能完全代替 β 与 Q,J 一起对耦合态完全分类;对多数 (x,k) 值,$Y(x,k)$ 的本征值本身就能对耦合态完全分类.

2 双重标量算符

单粒子角动量为 j 的费密子产生、湮没算符记为 a_{jm}^+,a_{jm},$m=-j,-j+1,\cdots,j$.引入产生-湮没算符 $b_{qm}^{1/2j}$

$$b_{1/2m}^{1/2j}=a_{jm}^+,\quad b_{-1/2m}^{1/2j}=(-1)^{j-m}a_{j-m},\tag{1}$$

$b_{qm}^{1/2j}$ 对应准旋、角动量为 $(1/2,j)$ 阶不可约张量[1].定义耦合双重张量

$$(bb)^{xk}_{pp'}=\sum_{qmq'm'}\langle 1/2q1/2q'|xp\rangle\langle jmjm'|kp'\rangle b^{1/2j}_{qm}b^{1/2j}_{q'm'},\tag{2}$$

其中 $\langle 1/2q1/2q'|xp\rangle$ 为 C-G 系数，$(bb)^{xk}_{pp'}$ 为 (x,k) 阶双重张量，x, k 的可能值为

$$x=0,1,\ k=0,1,\cdots,2j.\tag{3}$$

利用费密子产生、湮没算符满足的反对易关系和 C-G 系数对称性，易得[2]

$$x+k=\text{奇数或零},\tag{4}$$

否则 $(bb)^{xk}_{pp'}$ 为零。

双重张量 $(bb)^{xk}_{pp'}$，当 $(x,k)=(0,0),(0,1),(1,0)$ 时，依次简化为常数、角动量和准旋[2]

$$\begin{aligned}(bb)^{00}_{00}&=-(j+1/2)^{1/2},\\(bb)^{01}_{0p'}&=-\{6/[j(j+1)(2j+1)]\}^{1/2}J_{p'},\\(bb)^{10}_{p0}&=-2[2/(2j+1)]^{1/2}Q_p.\end{aligned}\tag{5}$$

一般情况下，$p=0$ 时，对应单体算符；$p=1,-1$ 时，分别对应产生、湮没一对粒子的算符。因此，双重张量 $(bb)^{xk}_{pp'}$ 为角动量、准旋的自然推广。

双重标量算符 $Y(x,k)$ 由两个 $(bb)^{xk}$ 的标量积定义为

$$\begin{aligned}Y(x,k)&=(bb)^{xk}\cdot(bb)^{xk}\\&=(-1)^{x+k}[(2x+1)(2k+1)]^{1/2}((bb)^{xk}(bb)^{xk})^{00}\\&=\sum_{p,p'}(-1)^{-p-p'}(bb)^{xk}_{pp'}(bb)^{xk}_{-p-p'}.\end{aligned}\tag{6}$$

由(5)式，$Y(0,0)$ 为常数，$Y(0,1)$、$Y(1,0)$ 与 $\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{Q}^2$ 有简单关系

$$\begin{aligned}&Y(0,0)=j+1/2,\ Y(0,1)=\{6/[j(j+1)(2j+1)]\}\boldsymbol{J}^2,\\&Y(1,0)=[8/(2j+1)]\boldsymbol{Q}^2.\end{aligned}\tag{7}$$

故只需对

$$x+k=3,5,\cdots,2j\ \text{或}\ k=2,3,\cdots,2j,x=\mathrm{mod}(k+1,2)\tag{8}$$

的 $Y(x,k)$ 进行计算。$\mathrm{mod}(k+1,2)$ 为 $k+1$ 除以 2 的余数。

3　$Y(x,k)$ 的本征值与 j-j 耦合态的完全分类

根据 $Y(x,k)$ 的表达式，编制了计算 $Y(x,k)$ 的本征值及相应本征矢的程序，并在 Sun4/330 上用双精度 (64bit) 对 $j=9/2,11/2,13/2$ 进行了计算，结果表明：满足(8)式的 $Y(x,k)$ 有极好的分类功能，除少数情况外，$Y(x,k)$ 的本征值就能对 j-j 耦合态完全分类，而 $Y(x,k)$ 与 $\boldsymbol{Q}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ 联合无例外地能对 j-j 耦合态完全分类。由于数据较多，以下只给出 $j=9/2$ 的结果。

3.1　$Y(x,k)$ 对 Q,J 简并子空间的完全分类

$j=9/2$ 壳层按准旋 Q、总角动量 J 分类，除两处二重简并外，其余非简并。两处二重简并出现在 $(Q,J)=(1/2,4),(1/2,6)$。因此，只要在两处二重简并子空间计算 $Y(x,k)$ 的本征值，若本征值相异，则简并解除。计算结果见表 1。表 1 中本征值计算误差小

表 1　$Y(x,k)$ 在 $j=9/2, Q=1/2, J=4,6$ 二重简并处的本征值 $Y(x,k)$

$Y(x,k)$ \ Q,J	1/2,	4	1/2,	6
$Y(1,2)$	$15.\dot{3}\dot{6}$,	$5.\dot{8}\dot{4}$	$13.\dot{3}\dot{6}$,	$4.\dot{8}\dot{4}$
$Y(0,3)$	$7.\dot{4}5687\dot{6}$,	$2.\dot{3}$	$6.8\dot{4}6620\dot{0}$,	$2.2\dot{6}1538\dot{4}$
$Y(1,4)$	$17.9\dot{8}7412\dot{5}$,	$11.4\dot{0}$	$16.8\dot{3}3566\dot{4}$,	$10.9\dot{3}8461\dot{5}$
$Y(0,5)$	$8.8\dot{6}$,	$7.\dot{2}5641\dot{0}$	$8.\dot{0}7692\dot{3}$,	$6.6\dot{3}5897\dot{4}$
$Y(1,6)$	$22.\dot{5}\dot{1}$,	$13.\dot{0}$	$22.3\dot{1}\dot{5}$,	$13.8\dot{0}$
$Y(0,7)$	14.686274509804,	$5.\dot{7}7389\dot{3}$	13.570135746606,	$5.\dot{5}9440\dot{5}$
$Y(1,8)$	$22.\dot{6}\dot{3}$,	$16.\dot{0}4895\dot{1}$	$24.2\dot{9}7902\dot{0}$,	$18.4\dot{0}2797\dot{2}$
$Y(0,9)$	$11.0\dot{2}797\dot{2}$,	5.628877005348	$11.9\dot{0}4895\dot{1}$,	7.073220896750

于 10^{-13}，凡实数近似值明显显示循环小数结构的，标出了第一循环节。由表 1 看出，二重简并子空间中 $Y(x,k)$ 的两个本征值均相异，因此 $Y(x,k)$ 与 Q^2, J^2 的共同本征态给出 $j=9/2$ 壳层的完全分类。

3.2　$Y(x,k)$ 对耦合态的完全分类

当 $j=9/2$，满足(8)式的 $Y(x,k)$ 除 $Y(1,2), Y(0,5)$ 对 $n=5$ (或准旋为整数)的耦合态有一组二重根外，其余全部为非简并，给出完全分类。即全部 $Y(x,k)$ 对偶数粒子(准旋为半奇数)耦合态完全分类，$Y(0,3)$, $Y(1,4)$, $Y(1,6)$, $Y(0,7)$, $Y(1,8)$ 和 $Y(0,9)$ 均能对奇数粒子(准旋为整数)耦合态完全分类。表 2，3 列出 $Y(1,6)$ 对 $j=9/2$ 的分类结果。对 $n=j-1/2, j+1/2$ 分开列出(相当于按准旋半奇数、整数分开列出)，分别有 18 和 20 个独立耦合态。表 2 和 3 中第一列为序号；第二列 Y 为 $Y(1,6)$ 的本征值，按递减次序排列，无重根，循环小数结构，乘以 330，可全部化为整数，计算精度 14 位有效数字；第三，四列分别为准旋、角动量在相应态上的期待值，分别按

$$\langle Q^2\rangle = Q(Q+1), \quad \langle J^2\rangle = J(J+1) \tag{9}$$

算得。期待值与精确值之差的绝对值的最大值，分别为表 2 和 3 中的 erq, erj，均小于 10^{-13}，即 Q, J 的计算误差小于 10^{-13}。可见，$Y(1,6)$ 的本征态作为准旋、角动量的本征

表 2　$Y(1,6)$ 对 $j=9/2$ 偶数粒子耦合态的完全分类

$erq=0.31086\times10^{-14}$,　$erj=0.2132\times10^{-13}$

No	Y	Q	J	No	Y	Q	J
1	26.000000000000	2.5	0.0	2	25.272727272727	0.5	0.0
3	23.618181818182	0.5	3.0	4	22.787878787879	1.5	4.0
5	22.587878787879	1.5	6.0	6	22.515151515152	0.5	4.0
7	22.315151515152	0.5	6.0	8	20.545454545455	0.5	9.0
9	20.345454545455	1.5	8.0	10	20.072727272727	0.5	8.0
11	18.818181818182	0.5	5.0	12	18.278787878788	1.5	2.0
13	18.006060606061	0.5	2.0	14	17.945454545455	0.5	12.0
15	16.272727272727	0.5	10.0	16	16.218181818182	0.5	7.0
17	13.800000000000	0.5	6.0	18	13.000000000000	0.5	4.0

表 3 $Y(1,6)$ 对 $j=9/2$ 奇数粒子耦合态的完全分类

$erq=0.31086\times10^{-14}$, $erj=0.2487\times10^{-13}$

No	Y	Q	J	No	Y	Q	J
1	24.000000000000	1.0	1.5	2	23.400000000000	2.0	4.5
3	23.036363636364	1.0	4.5	4	22.854545454545	0.0	4.5
5	22.618181818182	0.0	3.5	6	22.090909090909	1.0	7.5
7	21.818181818182	0.0	6.5	8	20.133333333333	1.0	8.5
9	20.090909090909	1.0	2.5	10	19.436363636364	1.0	5.5
11	19.036363636364	0.0	9.5	12	18.436363636364	0.0	0.5
13	18.406060606061	1.0	10.5	14	17.363636363636	0.0	12.5
15	17.181818181818	0.0	7.5	16	17.151515151515	1.0	6.5
17	14.618181818182	1.0	3.5	18	14.254545454545	0.0	5.5
19	13.163636363636	0.0	8.5	20	12.181818181818	0.0	2.5

态具有足够好的精度.

当 $j=11/2$, 满足(8)式的 $Y(x,k)$ 除 $Y(0,11)$ 对 $n=6$ (或准旋为整数)的耦合态有一组二重根外,其余全部为非简并,给出完全分类.

当 $j=13/2$, 满足(8)式的 $Y(x,k)$ 全部给出完全分类.

3.3 Q^2、J^2 对 $Y(x,k)$ 简并子空间的完全分类

$Y(1,2)$,$Y(0,5)$ 对 $j=9/2$,Q 为整数的耦合态各有一组二重根,其余为单根. 在二重根相应子空间中,需对 Q^2,J^2 对角化实现完全分类,结果列于表 4.

表 4 $Y(1,2)$,$Y(0,5)$ 二重根对应的 (Q,J) 分类

算 符	二 重 根	(Q,J) 分类
$Y(1,2)$	48/11	(0,13/2), (0,19/2)
$Y(0,5)$	1204/195	(1,11/2), (1,13/2)

4 讨论与结论

1.群链 本文状态分类采用群链

$$U(2^{2j+1})\supset U(2^{2j})\supset Y(x,k)\times SU^Q(2)\times SO(3), \tag{10}$$

其中 2^{2j+1} 为 j 壳层总状态数, $U(2^{2j+1})$ 为任意,状态间么正变换, 2^{2j} 为粒子数为偶(或奇)数的状态数, $U(2^{2j})$ 为不改变粒子数奇偶性的么正变换, $Y(x,k)$ 为准旋-角动量算子, $SU^Q(2)$ 为准旋算子, $SO(3)$ 为角动量算子,这三个算子彼此对易,不改变粒子奇偶性,故(10)式成立. 本文按此群链分类,属严格的分类方法.

2.与文献[3]比较 文献[3]通过引入准粒子算符实现对 $l\leqslant 8$ 壳层完全分类,但该方法依赖于 l 取整数值. 当以半奇数 j 代替 l 时,该文(2),(3)式不再成立,因此难以应用于 j 壳层分类. 其次,用该方法,粒子数、准旋、总自旋均不再是好量子数,而本文则在保持粒子数、准旋为好量子数条件的分类.

3.本文已给出 $j\leqslant 13/2$ 的完全分类方法,适于 $j>13/2$ 耦合态的进一步分类.

$j>13/2$ 的具体结果尚待计算.

本文引入的准旋-角动量标量算符 $Y(x,k)$ 具有很强的分类功能，$Y(x,k)$ 本身或与准旋、角动量算符联合能对 $j=9/2,11/2,13/2$ 的费密子 j-j 耦合态完全分类.

[1] B. G. 怀邦著，典型群及其在物理学上的应用，冯承天等译(北京：科学出版社，1982).
[2] 陈健华、况蕙孙，二次量子化方法在原子结构计算中的应用（计算物理丛书）(长沙：湖南科学技术出版社，1992)第 10 页.
[3] L. Armstrong, Jr. and B. R. Judd, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A315** (1970), 27 and **A 315** (1970), 39.

THE EIGENVALUE OF QUASI-SPIN-ANGULAR MOMENTUM SCALAR OPERATOR AND THE COMPLETE CLASSIFICATION OF j-j COUPLED STATES FOR FERMIONS

CHEN JIAN-HUA　　CHENG XIANG-AI
(*Department of Applied Physics, National University of Defense and Technology, Changsha* 410073)

(Received 24 April 1994)

ABSTRACT

By using the formalism of second quantization and irreducible tensor, a creation-annihilation operator $b_{qm}^{1/2j}$ is introduced which is a irreducible tensor of rank (1/2, j) for quasi-spin-angular momentum. Furthermore, quasi-spin-angular momentum scalar operator $Y(x,k)=(bb)^{x,k}\cdot(bb)^{x,k}$ is construted, and j-j coupled states for fermions are classified by its eigenvalues. It can be shown from calculation: for $j=9/2,11/2,13/2$, and $x+k\geqslant 3$, the coupled states are completely classified by the co-eigenstates of $Y(x,k)$、quasi-spin and angular-momentum. For most of (x,k), $Y(x,k)$ itself can completely classify the coupled states. The main results for $j=9/2$ are shown in this paper, and the results for $j\geqslant 11/2$ will be reported in another.

PACC: 0365