中 國 物 理 學 報
第七卷第六期，438—444頁，1950年12月

原子核 ^{6}Li 和 ^{7}Li 的結合能

第一部 公式

(近代物理研究所論文第三號)

金 星 南

(中國科學院近代物理研究所)

我們用彭桓武、張繼恆所求得的核子的作用位能公式，推算了計算原子核 ^{6}Li 和 ^{7}Li 結合能時所要用的公式。在這推算中，我們曾假定核子能形成殼的。

彭桓武、張繼恆[1] 曾求得原子核中核子作用位能公式，能使 ^{2}H, ^{3}H, ^{3}He 和 ^{4}He 的結合能同時和實驗的結果相符合。用這作用位能公式去計算原子核 ^{6}Li 和 ^{7}Li 的結合能，其結果嘗在一般想像之內。（見下第二部和第三部。）

如用摩勒羅森費德的核子作用位能公式計算 ^{6}Li 和 ^{7}Li 的結合能，則兩原子核皆不能結合。

^{6}Li 和 ^{7}Li 殼的形成，及其波函數的選擇法

原子核 ^{6}Li 是由三個中子和三個正子組成，^{7}Li 是由四個中子和三個正子組成。其中二個中子和二個正子結合成一"閉殼"，而其餘的核子，在另一殼內。原子核的總角動量，則由於不在閉殼內的核子所產生。

我們初步假定原子核中的核子能被單獨質點型波函數所表示；命其中第 i 個核子的波函數的位置部份爲 $a(\mathbf{r}_i)$ 或 $b(\mathbf{r}_i)$，按這個核子是在 a- 殼內（閉殼）或是在 b- 殼內（另一個殼內）。其電荷部份爲 $P(i)$ 或 $N(i)$，按核子 i 是正子或中子。其自旋部份爲 $\alpha(i)$ 或 $\beta(i)$，按其自旋爲 $\frac{1}{2}$ 或是 $-\frac{1}{2}$。

原子核 ^{6}Li 的兩個在 b- 殼內的核子，能像氫二一樣，形成總自旋爲一個單位的三態。用哈脫里近似法，知六個核子的波函數可寫爲

1 彭桓武、張繼恆；中國物理學報，7 (1950)，339.

$$\psi = \psi(1,\ldots 6) = \phi(\overline{r_1, r_2, r_3, r_4}; \overline{r_5, r_6})\,\chi(1,\ldots 6) = \phi\chi, \tag{1}$$

其中位置部份

$$\phi = a(r_1)\,a(r_2)\,a(r_3)\,a(r_4)\,b(r_5)\,b(r_6) \tag{2}$$

爲一對 r_1, r_2, r_3, r_4 和對 r_5, r_6 對稱的函數。其中電荷自旋部份 ($P\alpha(i)$ 爲 $P(i)\,\alpha(i)$ 的簡寫法)。

$$\chi = P\alpha(1)\,P\beta(2)\,N\alpha(3)\,N\beta(4)\,P(5)\,N(6)\begin{cases}\alpha(5)\,\alpha(6)\\ \dfrac{\alpha(5)\,\beta(6)+\beta(5)\,\alpha(6)}{\sqrt{2}}\\ \beta(5)\,\beta(6)\end{cases} \tag{3}$$

爲一只對 5. 6 二核子的自旋對稱的函數。

可是由於包里原則，波函數對所有核子說來起當爲反對稱的。把波函數 (1) 反對稱化之後，在夫克近似法下當爲

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6!}}\sum \pm \mathfrak{P}\,[\phi\chi]\,. \tag{4}$$

對 1, 2, ..., 6 六字的 6! 排列取和，依 $\mathfrak{P}$ 爲偶次排列或奇次排列而取正號或負號。

用單獨質點型對原子核講是不適合的，所以上述函數 $\phi(\overline{r_1, r_2, r_3, r_4}; \overline{r_5, r_6})$ 當爲一不能像 (2) 式一樣可分爲六個單獨質點的函數，但仍須保持其對稱性。

當我們假定 ^{7}Li 中的三個核子在同一殼內，則用同樣方法知 ^{7}Li 的波函數爲

$$\psi = \psi(1,\ldots 7) = \frac{1}{\sqrt{7!}}\sum \pm \mathfrak{P}\,[\phi\chi]\,. \tag{5}$$

其中 $\phi = \phi(\overline{r_1, r_2, r_3, r_4,}; \overline{r_5, r_6, r_7,})$ 爲一對 r_1, r_2, r_3, r_4 和對 r_5, r_6, r_7 對稱的函數，而.

$$\chi = \chi(1,\ldots 7) = P\alpha(1)\,P\beta(2)\,N\alpha(3)\,N\beta(4)\,P\alpha(5)\,N\alpha(6)\,N\beta(7) \tag{6}$$

正化積分，動能積分，位能積分

爲普遍起見，我們討論積分

$$I=\int \psi^* S(1,\ldots A)\,\psi\, d\tau\,, \qquad A=6 \text{ 或 } 7\,. \tag{7}$$

此中

$$\psi=\psi(1,\cdots A)=\frac{1}{\sqrt{A!}}\sum \pm \mathfrak{P}[\phi\chi]=-\frac{1}{\sqrt{A!}}\sum \pm \mathfrak{P}[\phi]\,\mathfrak{P}[\chi] \tag{8}$$

如上面的 (4) 式和 (5) 式。在 (8) 式中最後的二個 $\mathfrak{P}$ 表示同一排列，其中一個 $\mathfrak{P}$ 作用於 ϕ 上，另一個 $\mathfrak{P}$ 作用於 X 上。函數 $S(1,\ldots A)$ 對所有 A 個核子爲對稱的。積分號 $\int\ldots d\tau$ 爲對 A 個核子的位置取積分，對它們的電荷自旋位標取和。

用 (8) 式把 (7) 式中的 ψ 展開，但不展開 ψ^*。因 ψ^* 爲對 A 個核子的反對稱函數，$S(1,\ldots A)$ 爲對 A 個核子的對稱函數，故 ψ 的展開式 (8) 中的每一項，對積分 (7) 給出相等結果。展開式 (8) 內共有 $A!$ 項，故可得

$$I=\sqrt{A!}\int \psi^* S(1,\ldots A)\,\phi\chi\, d\tau\,. \tag{9}$$

再把 ψ^* 展開後，則得

$$I=\int \sum \pm \left\{\mathfrak{P}[\chi^*]\cdot S(1,\ldots A)\,\chi\right\}\phi\, P[\phi^*]\, d(r)\,. \tag{10}$$

在此式中，對電荷自旋之和，以一點表之。$\int\ldots d(r)$ 只對 A 個核子的位置取積分。

計算正化積分或動能積分時，我們命 $S=1$ 或 $S=-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{i=1}^{A}\nabla_i^2=T$，兩者皆爲對電荷自旋無關之運算子。至於計算 $\mathfrak{P}[\chi^*]\cdot\chi$ 時，我們利用下列的正一關係

$$P(i)\cdot P(i)=N(i)\cdot N(i)=1, \qquad P(i)\cdot N(i)=N(i)\cdot P(i)=0 \tag{11c}$$

$$\alpha(i)\cdot\alpha(i)=\beta(i)\cdot\beta(i)=1, \qquad \alpha(i)\cdot\beta(i)=\beta(i)\cdot\alpha(i)=0 \tag{11s}$$

來選擇使 $P\,[\chi^*]\cdot\chi \neq o$ 的排列。由此法得到

$$\int \psi^* \psi\, d\tau = \int \phi \Big[1-(15)-(36)+(15)\,(36) \Big] \phi^*\, d\tau \quad (\text{爲}\ ^6\text{Li 用}) \tag{12}$$

把 r_i 與 r_j 互換的 (i, j) 只作用於 ϕ^* 上。由於 $\phi\,(\overline{r_1, r_2, r_3, r_4}\,;\,\overline{r_5, r_6})$ 的對稱性質，(12) 可寫爲

$$\int \psi^* \psi\, d\tau = \int \phi \Big[1-2\,(16)+(16)\,(25) \Big] \phi^*\, d(r) \quad (\text{爲}\ ^6\text{Li 用}) \tag{13}$$

用同樣的方法可得

$$\int \psi^* \psi\, d\tau = \int \phi \Big[1-3\,(47)+3\,(15)\,(26)-(15)\,(26)\,(37) \Big] \phi^*\, d(r) \quad (\text{爲}\ ^7\text{Li 用}) \tag{14}$$

$$\int \psi^* T \psi\, d\tau = -\frac{\hbar^2}{2M} \int \Big\{ \sum_{i=1}^{6} \nabla_i^2\, \phi \Big\} \Big[1-2\,(16)+(16)\,(25) \Big] \phi^*\, d(r) \quad (\text{爲}\ ^6\text{Li 用}) \tag{15}$$

$$\int \psi^* T \psi\, d\tau = -\frac{\hbar^2}{2M} \int \Big\{ \sum_{i=1}^{7} \nabla_i^2\, \phi \Big\} \Big[1-3\,(47)+3\,(15)\,(26)-(15)\,(26)\,(37) \Big] \phi^*\, d(r) \quad (\text{爲}\ ^7\text{Li 用}) \tag{16}$$

我們計算位能積分時，在 (10) 式中命

$$S = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{A} V_{ij} = V \tag{17}$$

V_{ij} 爲彭桓武、張繼恆所得到的原子核中核子作用位能公式

$$V_{ij} = C_{ij} \Big\{ (g^2-f^2)+2\,f^2\, P_{ij} \Big\}\, \varphi_{ij} + N_{ij} \Big\{ (g_0^2-f_0^2)+2\,f_0^2\, P_{ij} \Big\}\, \varphi_{ij}^0 \tag{18}$$

其中

$$\varphi_{ij} = \frac{e^{-\lambda r_{ij}}}{r_{ij}}, \qquad \varphi_{ij}^0 = \frac{e^{-\lambda_0 r_{ij}}}{r_{ij}}, \tag{19}$$

$$P_{ij}=\frac{1}{2}\left\{1+(\sigma_i,\sigma_j)\right\}. \tag{20}$$

互換自旋的運算子 P_{ij} 的作用爲

$$\begin{aligned} &P_{ij}\,\alpha(i)\,\alpha(j)=\alpha(j)\,\alpha(i)\,, &&P_{ij}\,\beta(i)\,\beta(j)=\beta(j)\,\beta(i)\,,\\ &P_{ij}\,\alpha(i)\,\beta(j)=\alpha(j)\,\beta(i)\,, &&P_{ij}\,\beta(i)\,\alpha(j)=\beta(j)\,\alpha(i)\,. \end{aligned} \tag{21}$$

電荷運算子 C_{ij} 和 N_{ij} 的作用爲

$$\begin{aligned} &C_{ij}\,P(i)\,P(j)=0\,, &&N_{ij}\,P(i)\,P(j)=P(i)\,P(j)\,,\\ &C_{ij}\,N(i)\,N(j)=0\,, &&N_{ij}\,N(i)\,N(j)=N(i)\,N(j)\,,\\ &C_{ij}\,N(i)\,P(j)=N(j)\,P(i), &&N_{ij}\,P(i)\,N(j)=\Delta\,P(i)\,N(j)\,,\\ &C_{ij}\,P(i)\,N(j)=P(j)\,N(i)\,, &&N_{ij}\,N(i)\,P(j)=\Delta\,N(i)\,P(j)\,, \end{aligned} \tag{22}$$

$\Delta=-1$ 或 $+1$, 依 $N_{ij}=\tau_{3i}\tau_{3j}$ 或 1.

把 $C_{ij}\chi$, $C_{ij}P_{ij}\chi$ 和 $N_{ij}P_{ij}\chi$ 計算後，然後用 (21) 和 (22) 選擇相當的排列 $\mathfrak{P}$, 能使 $\mathfrak{P}\,[\chi^*]\cdot C_{ij}\chi$, $\mathfrak{P}\,[\chi^*]\cdot C_{ij}P_{ij}\chi$, $\mathfrak{P}\,[\chi^*]\cdot N_{ij}\chi$ 和 $\mathfrak{P}\,[\chi^*]\cdot N_{ij}P_{ij}\chi$ 不爲零。 由於 (10), (17), (18) 三式，我們把上面的結果加起來，再由於 ϕ 的對 r_1, r_2, r_3, r_4 和對 $r_5, \ldots r_A$ ($A=6$ 或 7) 對稱的性質，我們可以把結果化簡。

現在寫下其結果，略去中間的計算:

$$\begin{aligned}\int\psi^* V\psi\,d\tau=&\int\phi\,\varphi_{12}\Big\{(g^2+f^2)\,[-(16)\,(25)+2(16)\,(35)-(46)\,(35)]\\ &\qquad+2(g^2+3f^2)\,[-1+(16)+(35)-(16)\,(35)]\Big\}\phi^*\,d(r)\\ &+\int\phi\,\varphi_{56}\Big\{(g^2+f^2)\,[-1+2\,(16)-(16)\,(25)]\Big\}\phi^*\,d(r)\\ &+2\int\phi\,\varphi_{16}\Big\{(g^2+f^2)\,[(15)-(25)-(16)\,(25)+(26)\,(35)]\\ &\qquad+(g^2+3f^2)\,[-(16)+(26)+(16)\,(25)-(26)\,(35)]\Big\}\phi^*\,d(r)\\ &+\int\phi\,\varphi^0_{12}\Big\{\Delta\,(g_0^2+f_0^2)\,[(16)\,(25-2(16)\,(35)+(46)\,(35)]\end{aligned}$$

$$+2\left[(1+2\Delta)g_0^2-3f_0^2\right]\left[1-(16)-(35)+(16)(35)\right]\Big\}\phi^* d(r)$$

$$+\int\phi\,\varphi_{56}^0\Big\{\Delta(g_0^2+f_0^2)\left[1-2(16)+(16)(25)\right]\Big\}\phi^* d(r)$$

$$+2\int\phi\,\varphi_{16}^0\Big\{\Delta(g_0^2+f_0^2)\left[-(15)+(25)+(16)(25)-(26)(35)\right]$$

$$+\left[(1+2\Delta)g_0^2-3f_0^2\right]\left[1-(26)-(25)+(26)(35)\right]$$

$$+(g_0^2+3f_0^2)\left[1-(16)-(25)+(16)(25)\right]\Big\}\phi^* d(r) \qquad (\text{爲 }^6\text{Li 用}) \qquad (23)$$

$$\int\psi^* V\psi\,d\tau=-(g^2+3f^2)\Big\{\int\phi\,\varphi_{12}\Big[2-3(17)-3(47)+(15)(26)+4(15)(36)$$

$$+(35)(46)-(15)(26)(37)-(15)(36)(47)\Big]\phi^* d(r)$$

$$+\int\phi\,\varphi_{56}\Big[1-2(16)-(17)+(16)(25)+2(16)(27)$$

$$-(16)(25)(37)\Big]\phi^* d(r)$$

$$+\int\phi\,\varphi_{16}\Big[3(16)-3(26)-2(15)-2(25)-4(16)(25)$$

$$+4(26)(35)+2(15)(27)-2(25)(37)+(16)(25)(37)$$

$$-(25)(36)(47)\Big]\phi^* d(r)\Big\}$$

$$+\Big[(1+2\Delta)g_0^2-3f_0^2\Big]\Big\{\int\phi\,\varphi_{12}^0\Big[2-3(17)-3(47)+(15)(26)$$

$$+4(15)(36)+(35)(46)-(15)(26)(37)-(15)(36)(47)\Big]\phi^* d(r)$$

$$+\int\phi\,\varphi_{56}^0\Big[1-2(26)-(17)+(16)(25)+2(16)(27)$$

$$-(16)(25)(37)\Big]\phi^* d(r)$$

$$+\int\phi\,\varphi_{16}^0\Big[3-2(15)-3(26)-4(25)+2(15)(16)+4(26)(35)$$

$$+2(15)(27)+(25)(37)-2(15)(26)(37)$$

$$-(26)(35)(47)\Big]\phi^* d(r)\Big\}$$

$$+\left[-\frac{(1+2\Delta)g_0^2-3f_0^2}{2+\Delta}+\frac{3(1+\Delta)(g_0^2+f_0^2)}{2+\Delta}\right]$$

$$\left\{\int\phi\,\varphi_{16}^0\left[3-3(16)-6(47)+6(16)(25)+3(25)(37)\right.\right.$$

$$\left.\left.-3(16)(25)(37)\right]\phi^*d(r)\right\}\qquad(\text{爲 }^7\text{Li 用})\qquad(24)$$

在計算 ^{6}Li 的正化積分 (13) 式，動能積分 (15) 式，和勢能積分 (23) 式時，我們暫用 $\chi=P\alpha(1)\,P\beta(2)\,N\alpha(3)\,N\beta(4)\,P\alpha(5)\,N\alpha(6)$。但用 (3) 式中的其他兩 χ 式，我們也得到同樣的結果。

當 $\Delta=-1$, $\lambda=\lambda_0$, $g^2=2g_0^2$, $f^2=2f_0^2$ 時，(18) 式化成摩勒羅森費德的核子作用勢能。此時 (23)，(24) 兩式化爲用此核子作用勢能，爲 ^{6}Li 和 ^{7}Li 的勢能積分。

此工作由彭桓武先生之指導而成，特此誌謝。