

计算 j^n 组态总角动量 J 允许值的递推方法

陈 健 华

(应用物理系)

摘 要 计算 j^n 组态总角动量 J 的允许值通常采用列举法[1], 对 j, n 大的组态计算十分繁琐。本文提出计算 j^n 组态 J 的允许值的递推方法, 使计算大为简化。在 VAX-11/730 机上完成 $j=1/2 \sim 15/2$ 分类的 CPU 时间, 用本文方法为 3 秒, 用列举法[1]为 1 分 50 秒。列出了 $j=1/2 \sim 15/2$ 分类结果, 并发现文献[2]表 6 有三处差错。

关键词 原子物理, 核物理, 角动量, 递推公式; j^n 组态

分类法 O571.24, O571.414

引 言

计算 j^n 组态总角动量 J 允许值是个重要而复杂的数学问题, 其结果在原子物理、原子核物理的理论计算中有广泛的应用[1][2]。目前解决这个问题的方法有列举法[1]和群论方法[3][4], 列举法概念简单但计算量随 j, n 增大而增大极快, 变得十分繁琐; 群论方法可使计算简化但需有较深的群论基础。作者根据角动量的基本概念和泡利原理, 不引用群论知识, 导出从 j 壳层状态分类得到 $j+1$ 壳层状态分类的递推公式, 使 j 壳层状态分类的计算大为简化。为了对比方便, 在讨论递推方法之前, 先简述一下列举法。

1 列举法

列举法[1]计算 j^n 组态总角动量 J 允许值的主要步骤是:

(1) 列举 j^n 组态所有独立的非耦合态, 共有 $C_{2j+1}^n = \frac{(2j+1)!}{n!(2j+1-n)!}$ 个;

(2) 对每个独立的非耦合态计算总角动量 z 分量, $J_z = \sum_{i=1}^n m_i$, m_i 为单粒子角动量 z 分量;

(3) 统计 j^n 组态同一 J_z 出现的次数 K , K 是 j, n, J_z 的函数, 记为 $K(j, n, J_z)$;

(4) j^n 组态中同一角动量 J 出现的次数 M 是 j, n, J 的函数, 记为 $M(j, n, J)$, 根据角动量的基本性质, $M(j, n, J)$ 可用 $K(j, n, J_z)$ 表达, 即

$$M(j, n, J) = K(j, n, J) - K(j, n, J+1) \quad (1)$$

函数 $M(j, n, J)$ 给出 j^n 组态总角动量 J 的允许值的全部知识: 对某些 J 值, $M(j, n, J) = 0$, 表示 j^n 组态该 J 值不允许出现; 对某些 J 值, $M(j, n, J) = 1$, 表示 j^n 组态该 J 值出现一次, 即有一个独立耦合态; $M(j, n, J) = 2$, 表示 j^n 组态该 J 值出现 2 次, 即有两组独立耦合态; 余类推。

上述方法对小的 j, n 简单易行 (见 [1]p126, 表 4.4), 但对大的 j, n 则变得十分繁琐, 例如 $(15/2)^8$ 组态, 有 $C_{2j+1}^n = C_{16}^8 = 12870$ 个独立的非耦合态, $(11/2)^8$ 组态有 924 个独立的非耦合态, 要列举这么多态按步骤 (1) (2) (3) 计算 $K(j, n, J_z)$, 再按 (1) 式计算 $M(j, n, J)$, 其运算量是非常大的。

2 递推法

我们首先证明 $K(j, n, J_z)$ 的递推公式, 再证明 $M(j, n, J)$ 的递推公式。

2.1 $K(j, n, J_z)$ 递推公式

定理 从 j 壳层到 $j+1$ 壳层, 有递推公式

$$K(j+1, n, J_z) = K(j, n, J_z) + K(j, n-2, J_z) + K(j, n-1, J_z+j+1) + K(j, n-1, J_z-j-1) \quad (2)$$

证明 $(j+1)^n$ 组态比 j^n 组态多 2 个单粒子态角动量 z 分量为 $m = \pm(j+1)$ 的态, 这两个单粒子态由于泡利原理, 有四种占据情况, 正对应 (2) 式右端的四项: $m = \pm(j+1)$ 均未被占据, n 个电子的占据情况与 j^n 相同, 其贡献为 (2) 式右端第一项; $m = \pm(j+1)$ 均被占据, 余下 $(n-2)$ 个电子占据情况与 j^{n-2} 相同, 其贡献为 (2) 式右端第二项; $m = -(j+1)$ 被占据, $m = j+1$ 未被占据, 又 n 个电子总角动量 z 分量为 J_z , 余下 $n-1$ 个电子对总角动量 z 分量的贡献应为 $J_z + j + 1$, 其贡献为 (2) 式右端第三项; $m = j+1$ 被占据, $m = -j-1$ 未被占据, 其贡献为 (2) 式右端第四项。(2) 式证毕。

(2) 式给出从 j 壳层 J_z 分类得到 $j+1$ 壳层 J_z 分类的递推关系。

对 $j=1/2$, 易知

$$K(1/2, 0, 0) = 1, K(1/2, 1, \pm 1/2) = 1, K(1/2, 2, 0) = 1 \quad (3)$$

其余为 0。以 (3) 式为初值, 反复利用递推公式 (2), 即得 $j=3/2, 5/2, \dots$ 时的 $K(j, n, J_z)$ 。

$K(j, n, J_z)$ 具有下列性质:

n 的取值范围为 $0 \leq n \leq 2j+1$, j^n 组态与 j^{2j+1-n} 组态具有粒子与空穴的对称性, 则

$$K(j, n, J_z) = K(j, 2j+1-n, J_z) \quad (4a)$$

$K(j, n, J_z)$ 是 J_z 的偶函数,

$$K(j, n, J_z) = K(j, n, -J_z) \quad (4b)$$

由于上述性质, $K(j, n, J_z)$ 只需对

$$0 \leq n \leq j+1/2, J_z \geq 0$$

进行计算。

用 (2), (3) 式计算 $K(j, n, J_z)$ 的运算量比用列举法按步骤 (1)、(2)、(3) 计算 $K(j, n, J_z)$ 的运算量要小得多, j, n 愈大, 效果愈明显。

2.2 $M(j, n, J)$ 递推公式

由(1)式, (2)式易证 $M(j, n, J)$ 的递推公式, 分 $J \geq j+1$, $J \leq j$ 和 $J = j+1/2$ 三种情况:

(1) 当 $J \geq j+1$, 有

$$M(j+1, n, J) = M(j, n, J) + M(j, n-2, J) + M(j, n-1, J+j+1) + M(j, n-1, J-j-1) \quad (5a)$$

(2) 当 $J \leq j$, 有

$$M(j+1, n, J) = M(j, n, J) + M(j, n-2, J) + M(j, n-1, J+j+1) - M(j, n-1, j-J) \quad (5b)$$

(3) 当 $J = j+1/2$ 时, 右端无第四项。

(5a), (5b) 式给出从 j 壳层到 $j+1$ 壳层按总角动量分类的递推公式。

当 $j=1/2$ 时, 易知

$$M(1/2, 0, 0) = 1, \quad M(1/2, 1, 1/2) = 1, \quad M(1/2, 2, 0) = 1 \quad (6)$$

其余为 0。以(6)式为初值, 反复利用(5)式, 得 $j=3/2, 5/2, \dots$ 时的 $M(j, n, J)$ 。

$M(j, n, J)$ 具有下列性质:

$$0 \leq n \leq 2j+1, \quad J \geq 0$$

$$M(j, n, J) = M(j, 2j+1-n, J) \quad (7a)$$

$$M(j, 0, J) = \delta_{J,0} \quad (7b)$$

$$M(j, 1, J) = \delta_{J,j} \quad (7c)$$

因此, 只需对 $2 \leq n \leq j+1/2$ 计算 $M(j, n, J)$ 。

(5) 式是递推法计算 j^n 组态总角动量允许值的基本公式, 其特点是不必经过中间步骤计算 $K(j, n, J_z)$, 而是直接计算 $M(j, n, J)$ 。

3 结果与讨论

3.1 $M(j, n, J)$ 计算结果

表 1 列出了 $j=3/2 \sim 15/2$ 时 $M(j, n, J)$ 的计算结果。为节省篇幅, 只列了 $2 \leq n \leq j+1/2$ 的数据。 $n=0, 1$ 及 $n > j+1/2$ 的结果由(7)式易得。

表 1 的结果与文[1]中表 4-5 ($j=1/2 \sim 9/2$) 一致, 并发现文[2]中表 6 有三处差错, 其余一致。三处差错勘误如下:

	误	正
$M(9/2, 3, 13/2)$	0	1
$M(9/2, 4, 8)$	1	2
$M(11/2, 4, 7)$	0	2

这三处差错已与有关专家作了核对。 $j=13/2, 15/2$ 数据未见发表, 而在原子核中 $(13/2)^n, (15/2)^n$ 组态是存在的 (见文[2]俄文版第 100 页单粒子能级图), 因而 $j=13/2, 15/2$ 的数据是有实际意义的。

3.2 j^n 组态的进一步分类

从表 1 看出, 对 $j \leq 5/2$, j^n 组态按 J 分类是完全的, 即不出现 $M(j, n, J) > 1$ 的情况; 但当 $j \geq 7/2$ 时, 出现 $M(j, n, J) \geq 2$ 的情况, 这时需要引进新的量子数对耦合态加

以区分。

从表1容易看出, 恒有 $M(j, n, J) \geq M(j, n-2, J)$, 其物理意义是对 $n \leq j+1/2$, j^{n-2} 组态中出现的光谱项在 j^n 组态中全部出现。定义

$$N(j, v, J) = M(j, v, J) - M(j, v-2, J) \quad (8)$$

N 是 j, v, J 的函数, 取 0 或正整数。由 (8) 式易见, $N(j, v, J)$ 的物理意义是 j^v 组态比 j^{v-2} 组态多出的总角动量为 J 的谱项的项数, v 称为先行数 (Seniority)^{[3][4]}, 是 G Racah^[5] 首先引入的。引入先行数, 可对 $j=7/2$ 壳层进行完全分类^[3]。

(8) 式代入 (5) 式得 $N(j, v, J)$ 的递推公式, 其形式与 (5) 式完全相同。当 $j=1/2$ 时,

$$N(1/2, 0, 0) = 1, \quad N(1/2, 1, 1/2) = 1 \quad (9)$$

其余为 0。因而计算 $N(j, v, J)$ 与计算 $M(j, n, J)$ 同样简单。为节省篇幅, $N(j, v, J)$ 数据表不再列入。需要时, 可由表 1 按 (8) 式计算。

3.3 计算时间

按 (5), (6) 式, 编制计算程序, 在 VAX-11/730 机上完成 $j=1/2 \sim 15/2$ 的 $M(j, n, J)$ 全部计算的 CPU 时间约 3 秒, 作为对比, 按列举法也编制了计算程序, 在同一机器上完成同一计算的 CPU 时间约 290 秒, 其中 $j=1/2 \sim 11/2$ 花 15 秒, $j=13/2$ 花 45 秒, $j=15/2$ 花 230 秒。递推法比列举法节省计算时间的效果是明显的。且 j, n 愈大, 效果愈明显。

3.4 比较

列举法必须先算 $K(j, n, J_z)$, 再算 $M(j, n, J)$, 最后算 $N(j, v, J)$ 。递推法对 $K(j, n, J_z)$, $M(j, n, J)$, $N(j, v, J)$ 分别建立递推公式和初值。不必经过中间环节, 因而计算 $M(j, n, J)$ 不比计算 $K(j, n, J_z)$ 费时间, 计算 $N(j, v, J)$ 也不比计算 $K(j, n, J_z)$ 费时间。

参 考 文 献

- [1] Cowan R D. The Theory of Atomic Structure and Spectra. Berkeley. Los Angeles London: University of California Press, 1981: 127
- [2] Mager M G, Jensen J H D. Elementary Theory of Nuclear Shell Structure, New York: Jhon Wiley & Sons, Inc. London: Chaoman & Hall, LTD. 1955: 106
- [3] B.G. 怀邦著, 冯承天等译. 典型群及其在物理学上的应用. 北京: 科学出版社, 1982: 377
- [4] 自铭复. 物理学中的群论方法. 下册. 长沙: 国防科大出版社, 1986: 395
- [5] Racah G Phys Rev, 1942; 61:186
 Phys Rev, 1942; 62:438
 Phys Rev, 1943; 63:367
 Phys Rev, 1949; 76:1353

A Recurrence Method for Calculating the Permitted J Terms of j^n Configuration

Chen Jianhua

Abstract

The enumeration method is usually used to calculate the permitted J terms of j^n configuration, but it becomes too complex to be used when the values of j , n become large enough. In this paper, a recurrence method instead of the conventional one is suggested, thus greatly simplifying the calculation. For example, using this method it takes only 3 seconds of CPU time of the VAX-11/730 Computer to finish the classification of $j=1/2\sim 15/2$, Whereas about 290 seconds are needed if the enumeration method is used. The classification results of $j=1/2\sim 15/2$ have been listed in a table, and it is pointed out that there are 3 errors in the table of res.[2].

Key Words, atomic physics, nuclear physics, angular momentum, recursion formula; j^n configuration