

原子核结构

第二卷 核形变

第一分册

A. 玻尔 B. R. 莫特逊 著

科学出版社

原子核结构

第二卷 核形变

第一分册

A. 玻尔 著
B. R. 莫特逊

兰州大学物理系

近代物理研究所 译校

原子能研究所

科学出版社

1982

内 容 简 介

这一分册是 A. 玻尔和 B. R. 莫特逊著《原子核结构》第二卷的第四章和第五章。第二卷的主题是原子核的集体转动与振动以及单粒子运动与集体自由度的耦合。第四章主要阐述原子核的转动运动,分析了转动运动的出现,形变的对称性与转动自由度,轴对称核的能谱与跃迁强度,轴对称核的转动与内禀运动的耦合,非轴对称系统的能谱等。附录中介绍了粒子-转子模型。第五章叙述非球形核中的单粒子运动,描述椭球势中粒子的定态运动,奇 A 核能谱的分类以及矩与跃迁。附录中扼要介绍了非球形系统的散射。

本书不仅对所讨论的课题作了系统深入的阐述,而且反映了作者的许多深刻的观点。本书可供核物理研究人员、研究生及大学有关专业的高年级学生参考。

Aage Bohr, Ben R. Mottelson

NUCLEAR STRUCTURE

Vol. II Nuclear deformation

W. A. Benjamin, Inc., 1975

原 子 核 结 构

第二卷 核形变

第一分册

A. 玻尔, B. R. 莫特逊 著

兰州大学物理系

近代物理研究所 译校

原子能研究所

责任编辑 荣毓敏

科学出版社出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1982 年 5 月第 一 版 开本: 850×1168 1/32

1982 年 5 月第一次印刷 印张: 10 5/8

印数: 精 1—1,400

插页 精 2

平 1—1,800

字数: 279,000

统一书号: 13031·1820

本社书号: 2478·13—3

定价: 布面精装 2.95 元

平 装 2.00 元

科技新书目: 18-精31 平32

序 言

本书第一卷主要论述与单粒子运动相关的核性质；由于在原子核中还可能发生各种类型的集体形变，第二卷就处理与这种集体形变相关的核动力学问题。集体自由度和单粒子自由度构成原子核的元激发模式，它们是核动力学的两个相对立的侧面，在认识核结构的进程中，其中心课题就是如何协调地使用这两种概念。

关于原子核是由中子和质子构成的最初讨论，是根据独立粒子在一个集体中心场中的运动，这类似于描述原子结构所用的图象¹⁾，这种图象在描述原子结构时是非常成功的。由于在中子诱导反应中稠密窄共振谱的发现，使人们注意到核中各个粒子的运动之间有很强的耦合（见第一卷第二分册，174页），这导致人们用类似于液滴振动模式的集体自由度来描述核的动力学，由此出现了新的发展方向（Bohr and Kalckar, 1937）。几年以后，裂变过程的发现为这种集体运动提供了明显的例子。

通过对核结合能和核矩已积累起来的例证的分析，使人确信核的壳结构是存在的，从而导致了一个新的重大转折（Haxel, Jensen, and Suess, 1949; Mayer, 1949; 也见第一卷第二分册，209页）。人们面临的问题是如何调和单粒子自由度和集体自由度的同时出现，并且探索由它们之间的相互作用而引起的各种现象（Rainwater, 1950; Bohr 1952; Hill and Wheeler, 1953, Bohr and Mottelson, 1953）。

在用于描述核结构的框架的发展过程中，核密度和位场的形变概念是统一的元素。形变代表集体自由度，同时它又影响单个粒子的运动，因而它担负着集体运动本身的组织者的角色。在核

1) 在核结构的探索中，一个最早期的清晰的印象由第七次 Salvay 会议上的讨论给出的（Gamow, 1934; Heisenberg, 1934）。

系统中可能发生多种不同类型形变的作用,就构成了本卷的内容。

由于转动自由度特别简单,所以在分析原子核的集体运动时对转动的研究起了特殊的作用。(实际上,从天体力学到基本粒子谱,对于转动运动的回答一直是动力学概念发展的关键。)转动的特殊地位和关于转动谱的大量经验例证,促使我们把这种模式的处理作为本卷的第一个课题(第四章)。

转动谱的发生是平衡形状偏离了球对称的原子核的特征(集体模式与自发对称破缺相关的)。支配这些谱的简单定量关系,使我们有可能对非球形核中的单粒子运动作详尽的研究。在第五章中所讨论的这些分析,是对球形核所得到的单粒子运动的一个主要推广,同时也为探索转动和单粒子运动之间的耦合提供了基础。

第六章讨论了多种类型的集体振动模式和不同的元激发模式之间的多种耦合。写作这一章时经过了多次修改,反应了对这一广阔领域的了解不断增加和有可能借助于粒子-振动耦合得到高度统一的理论框架。

按原来计划,曾设想借助于单核子运动来对集体模式进行分析作为第三卷的内容,并拟通过研究组态中包含少数核子的相互作用效应而引入它。但第二卷的发展导致了在分析粒子-振动耦合之后直接引入集体运动微观理论。由于计划的这种改变,使得前两卷独立地自成系统,同时对于核动力学描述比原来设想的更为综合与全面²⁾。

和第一卷一样,第二卷的材料分为正文(文)、图例(图)和附录(附)。这些图例,特别是在第六章中,在某种程度上起到了扩充的作用,因为为了对许多问题展开讨论而又不打断正文叙述的连贯性,利用这些图例的篇幅是必要的。

在本卷准备过程中,我们得到了许多同事们的有益的批评、讨论和直接帮助。我们和读者都要特别感谢 Peter Axel,如果没有他的耐心和富于想象力的建议,本卷的叙述将是非常费解的。我

2) 当读者在第一卷中遇到参考第三卷时,应从第二卷的题目索引中查阅相关问题的讨论。

们和读者也应特别感谢 Ikuko Hamamoto, 她对本卷全部材料作了透彻的检查, 这既是对我们的一个鼓舞, 又是对问题的澄清和内容的一致性的一个巨大贡献。对于 Berter Lohmann Andersen, Sven Bjørnholm, Ricardo Broglia, Sven Gösta Nilsson, David Pines, John Resmussen, Vilen Strutinsky 和 Wlodek Swiatecki 的有益讨论和建议, 我们也在表示感谢。

在写作本书的十五年以上的艰苦奋斗的岁月中, 能有由 Lise Madsen, Henry Olsen 和 Sophie Hellmann 组成的出色小组一贯的、有力的支持, 对我们来说是莫大的幸运。我们要特别对 Sophie Hellmann 表示赞赏, 她虽然年过八十, 但仍以充沛的精力和巨大的热情而起了出色的作用; 为了表示我们的感激和敬佩, 对于和她在一起工作所给予我们的愉快和鼓舞, 在此再次深表感谢。

A. 玻尔

B. 莫特逊

1975 年 6 月于哥本哈根

目 录

序 言	i
第四章 转动谱	513
§ 4-1 量子体系中集体转动的发生	513
§ 4-2 形变的对称性、转动自由度	515
4-2a. 与空间转动相联系的自由度	516
4-2b. 轴对称的结果	518
4-2c. $\mathcal{R}$ 不变性	519
4-2d. $\mathcal{P}$ 和 $\mathcal{T}$ 对称性	523
4-2e. 破坏 $\mathcal{P}$ 或 $\mathcal{T}$ 对称性的形变	524
4-2f. $\mathcal{R}$, $\mathcal{P}$ 对称性的组合	525
4-2g. 同位旋空间中的转动	530
§ 4-3 轴对称核的能谱和强度关系	532
4-3a. 转动能量	533
4-3b. 在同一转动带中的 $E2$ -矩阵元	553
4-3c. 同一转动带中的 $M1$ 矩阵元	563
4-3d. 矩阵元的一般结构	567
§ 4-3 的示例	571
§ 4-4 轴对称核中转动与内禀运动的耦合	659
§ 4-4 的示例	668
§ 4-5 非轴对称体系的转动谱	691
4-5a. 偶 A 体系的对称分类	692
4-5b. 能谱	696
4-5c. 具有小的非轴对称体系	701
4-5d. 对于奇 A 核的对称性分类	703
4-5e. 具有大的 I 值的状态	705
§ 4-5 的示例	709
附录 4 A 粒子-转子模型	714
4A-1 耦合体系	714

4A-2	绝热近似	715
4A-3	非绝热效应	718
第五章	非球形核中的单粒子运动	728
§5-1	旋转椭球势中粒子的定态运动	728
5-1a.	原子核平衡形变的对称性和形状	728
5-1b.	形变势	729
5-1c.	单粒子波函数的结构	731
§5-1	的示例	734
§5-2	奇A核能谱的分类	755
§5-3	矩和跃迁	758
5-3a.	单粒子转移	758
5-3b.	单粒子矩和跃迁	759
5-3c.	对转移和 α 衰变	762
5-3d.	粒子与转动的耦合	763
§5-3	的示例	768
附录5A	非球形系统的散射	838
5A-1	利用耦合道的处理	838
5A-2	绝热近似	841

第四章 转动谱

§ 4-1 量子体系中集体转动的发生¹⁾

具有转动谱的体系的普遍特征是存在“形变”，它意味着各向异性，因而由它可以指明整个体系的取向。在分子的情形下，如同固体的情形一样，假若从原子核的平衡位置所定义的内禀坐标架中去看，则形变反映了质量分布的高度各向异性。在原子核中，转动自由度是与由壳层结构所决定的核平衡形状的形变相联系的。（关于这些形变的证据，将在第 646 页“ $E2$ 极矩”和第五章“变形单粒子势”中讨论。）类似转动的序列也曾在强子谱中观察到，并被称为 Regge 轨迹（例如，可参看第一卷第一分册第 69 页图 1-13），但是，这些形变的性质尚未被究明。

结构类似于空间转动的集体运动，可以在其他空间中，包括同位旋空间和粒子数空间中发生，只要系统在这些空间内具有确定

-
- 1) 从分子对红外光的吸收，首次确认了量子转动谱的存在 (Bjerrum 1912)。在解释核的激发谱的早期尝试中，提出了在原子核中发生转动的可能性问题。（例如，可参看 Teller 和 Wheeler, 1938）。当时所用的资料，如 α 衰变的精细结构，似乎给出不发生低能转动激发的结果，但是，这个讨论由于下面的两个想法而受到妨碍：第一，认为或者所有原子核都会发生转动，或者同原子一样，都不会发生转动；第二，认为转动惯量具有和刚性转子一样的经典值。随着认识到原子核转动是它的平衡形状具有大形变的必然结果后，这种运动形态才被确立 (Bohr, 1951)；而核形变的发生在早期就已经从原子光谱的超精细结构所确定的原子核电器极矩中推论出来 (Casimir, 1936)。 $E2$ 跃迁的分析给出了与核形状形变相联系的集体效应。另一证据 (Goldhaber 和 Sunyar, 1951; Bohr 和 Mottelson, 1953a)。由于观测到正比于 $I(I+1)$ 的能级序列 (Bohr 和 Mottelson, 1953b; Asaro 和 Perlman, 1953)、以及关于转动的强度关系 (Alaga 等, 1955)，确切地证明了原子核转动激发态的存在。库仑激发工作的进展则为系统研究转动谱提供了强有力的工具 (Huus 和 Zupančič, 1953; 也可以参看 Alder 等在 1956 年的评述)。

其取向的形变。于是，转动带中所包含的态的序列可以用相应的类似于角动量的量子数，例如同位旋和粒子数来标记。〔这些序列出现在超流体系(参看第§6-3)同时也可能作为核子的激发而出现(参看第 530 页)〕。

形变可能对坐标系的某些转动子群保持不变，例如轴对称形变。在这种情况下，形变仅仅部分地确定内禀坐标系的取向，转动自由度也相应地受到限制。所以，在分析转动谱时，首先分析形变的对称性和相应的转动自由度。在§4-2中，将讨论轴对称体系的情形，它对核谱的研究具有特殊的意义；非轴对称体系的情况则在§4-5中讨论。(在分子中，考虑到核的全同性后对转动态有所限制，形变对称性的结果就是这种熟知情况的推广；参看第 521 页和第 695 页。)

可以认为，转动自由度产生的根源是由于转动不变性受到了破坏。同样地，平移自由度是基于定域结构的存在。虽然一个给定物体的不同平移态是由洛伦兹不变性联系起来的，然而，对转动坐标架却没有类似的不变性。作用于转动坐标架上的科里奥利力和离心力会对转动物体的结构产生扰动。

在量子体系中，甚至是最低的转动激发频率也可能相当大，足以使科里奥利力和离心力对体系的结构产生较大影响。这些扰动是很小的这一条件(即绝热条件)和形变参数围绕其平衡值的零点涨落同它的平衡值相比是很小的这个条件，两者是密切相关的，因而，绝热条件提供了关于发生转动谱的判据的另一种表达方式(Born 和 Oppenheimer, 1927; Casimir, 1931)。

这种等价性的一个简单例子，可以考虑一个由两个粒子组成的体系，它们被相互作用势结合在一起，相应于势能极小值的平衡距离为 R 。这个体系的运动可以用转动和沿径向的振动来描述。对于最低态，转动频率为

$$\omega_{\text{rot}} \sim \frac{\hbar}{M_0 R^2}, \quad (4-1)$$

其中 M_0 是折合质量。振动频率则依赖于零点振动的振幅 ΔR ：

$$\omega_{\text{vib}} \sim \frac{\hbar}{M_0(\Delta R)^2}. \quad (4-2)$$

于是, 形状涨落远小于平均形变的条件 $\Delta R \ll R$, 就等价于绝热条件 $\omega_{\text{rot}} \ll \omega_{\text{vib}}$. 这一简单体系表明了, 在振动势能对于某种各向异性的形状有极小值时, 转动带如何呈现为振动谱的低能分支.

转动带中各个态之间的联系表现为能谱的规则性以及带中各个态之间跃迁的强度规则. 对于足够小的转动角动量, 可以把能量和跃迁振幅按转动频率或角动量作幂级数展开. 这些表达式对于轴对称体系特别简单, 而且这种形式提供了解释核转动谱大量资料的基础(参看 § 4-3).

矩阵元对于转动角动量的依赖性, 反映了内禀运动对科里奥利力和离心力的响应, 它可以用不同内禀结构的转动带之间的耦合来进行分析, 如在 § 4-4 中所讨论的(还可参看第 623 页和第 642 页). 在大角动量时, 转动所产生的扰动可以显著地改变体系的内禀结构. 在这种极端条件下, 核物质的结构是当前大家很感兴趣的课题(参看第 551 页).

在本章中, 我们是根据变形内禀结构的几何学来讨论转动带的. 而一个转动带中的各个态也可以用对称群的表示来表征; 于是, 群的结构表述了转动物体的对称性. 由紧致群表示所描述的转动带将只包含有限数目的态; 曾用 U 对称群来对处于谐振子势场中的粒子运动进行研究, 以阐明造成各向异性的有限核子数的体系的转动谱特征(Elliott, 1958; 还可参看第 603 页的讨论). 延伸到具有无限大角动量值的转动带, 则可以和非紧致对称群的表示相联系(参看第六章第 § 6-4 的讨论).

§ 4-2 形变的对称性、转动自由度

把运动分解为内禀运动与转动两部分, 相当于把哈密顿量分为

$$H = H_{\text{intr}}(q, p) + H_{\text{rot}, a}(P_a), \quad (4-3)$$

内禀运动用坐标 q 和共轲动量 p 来描述, 它们是在本体坐标架中量度的, 因此, 对于外部坐标系的转动, 它们是标量。由体系的形变所决定的本体坐标架的取向(参看第 513 页)可以用角变量 ω 来标记。如果没有外力作用于体系上, 则转动哈密顿量与 ω 取向无关, 而仅仅是共轲角动量 P_ω 的函数。(4-3)式中转动哈密顿量的下标 α 表示转动是同标记内禀态的量子数 α 有关的。

哈密顿量(4-3)式的本征态可写为乘积的形式:

$$\Psi_{\alpha, I} = \Phi_\alpha(q) \varphi_{\alpha, I}(\omega). \quad (4-4)$$

对于每一个内禀态 α , 都包含有一系列的转动能级, 在(4-4)式中, 用角动量量子数 I 来标记。

在本节中, 关于对称性结果的讨论是和用来表述分解的哈密顿量的坐标 q, p, ω, P_ω 及表述单个粒子的位置、动量与自旋的变量之间关系的显示式无关。这种显示式与集体转动的微观分析有关, 如在 §6-5h 中所讨论的(还可参看第 726 页), 它们已稳含在用内禀激发对转动所作的处理之中。

4-2a. 与空间转动相联系的自由度

二维转动(绕固定轴的转动)有非常简单的结构。取向由方位角 ϕ 表示, 运动状态由它的共轲角动量的本征值 M 来表征。相应的转动波函数为

$$\varphi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{iM\phi\}. \quad (4-5)$$

一个物体在三维空间中的取向涉及到三个角变量, 通常用三个欧勒角 $\omega = \phi, \theta, \psi$ 来表示(参看第一卷第一分册第 81 页图 1A-1), 因此, 需要用三个量子数来标记运动状态。总角动量 $\mathbf{I}$ 和它在空间坐标轴上的分量 $M = I_z$ 给出了其中的两个量子数, 而第三个量子数则可选总角动量 $\mathbf{I}$ 在取向角为 ω 的内禀坐标系(或本体坐标系)上的分量 ω (参看 §1A-6a)。由于内禀分量 $I_{1,2,3}$ 与空间坐标系的取向无关(即为标量), 所以 $I_{1,2,3}$ 与空间分量 $I_{x,y,z}$ 可以互易。内禀分量之间的互易关系与 $I_{x,y,z}$ 间的相似, 但相差一

个负号[参看(1A-91)式]。于是,作为可互易的角动量变量的集合,我们选取 $\mathbf{P}$ 、 I_z 和 I_3 。其中 I_3 的本征值记为 K (参看图 4-1), 并与 M 同样的一系列值:

$$K = I, I-1, \dots, -I \quad (4-6)$$

对于 I 、 K 、 M 三个量子数具有确定值时,转动波函数为[参看(1A-97)式]:

$$\varphi_{IKM}(\omega) = \left(\frac{2I+1}{8\pi^2} \right)^{1/2} \mathcal{D}_{MK}^I(\omega), \quad (4-7)$$

式中函数 $\mathcal{D}_{MK}^I(\omega)$ 是转动矩阵。(4-7)式的结果可以通过由空间坐标变换到与内禀坐标架重合的转动坐标系而得到(参看第一卷第一分册第 96 页)。当 $K=0$ 时, $\mathcal{D}$ 函数化为球谐函数[参看(1A-42)式]:

$$\begin{aligned} \varphi_{I,K=0,M}(\omega) \\ = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} Y_{IM}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (4-8)$$

它与 ϕ 角无关,但是归一化时同(4-7)式一样,要对三角欧勒角积分。

在 $K=0$ 时,转动波函数与无自旋的质点的角运动相同。对于有限值的 K ,转动相当于具有螺旋性 $\hbar = K$ 的粒子的角运动[参看(3A-5)式]。

虽然对于任意一个转动不变的哈密顿量, $\mathbf{P}$ 与 I_z 都是运动常数,但是 I_3 与 H 的互易关系则与体系的内禀性质有关。因此,体系的定态一般是不同 K 值分量的迭加:

$$\varphi_{\tau IM}(\omega) = \left(\frac{2I+1}{8\pi^2} \right)^{1/2} \sum_K c_{\tau I}(K) \mathcal{D}_{MK}^I(\omega). \quad (4-9)$$

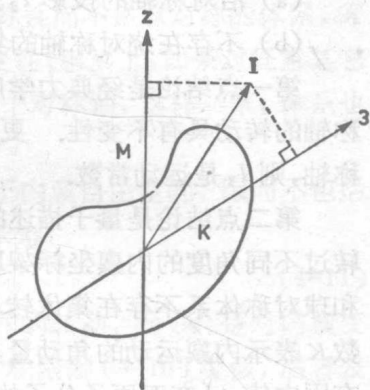


图 4-1 描述三维转动的角动量子数 z 轴属于实验室坐标系, 而 3 轴是本体坐标系的轴。[比较第一卷第 81 页图 1A-1 中的 $\mathcal{R}$ 和 $\mathcal{R}'$ 坐标系。]

第三个转动量子数记为 τ , 并且如同 § 4-5 所讨论的, 振幅 $c_{\tau i}(K)$ 依赖于转动惯量的相对大小.

4-2b. 轴对称的结果

假若体系是轴对称的, 直接有两个结果:

(a) 沿对称轴的投影 I_3 是运动常数.

(b) 不存在绕对称轴的集体转动.

第一点结论是经典力学所熟知的, 它表示哈密顿量对于绕对称轴的转动具有不变性. 更普遍地说, 如果 3 轴是惯量张量的对称轴, 则 I_3 是运动常数.

第二点结论是量子描述的特征, 它表示不可能区分绕对称轴转过不同角度的内禀坐标架取向间的差别. 轴对称的这一结论是和球对称体系不存在集体转动是同样的. 因此, 我们可以用量子数 K 表示内禀运动的角动量, 而且对根据给定内禀态的转动带, K 有固定值. (在双原子分子的运动中, 由于原子核可以被看成是质点, 而且电子在轴对称束缚场中不存在集体转动, 所以转动角动量是与对称轴相垂直的.)

由轴对称性所导致的对转动自由度的限制对应于约束

$$I_3 = J_3, \quad (4-10)$$

其中 J_3 是表示内禀角动量分量的算符. 条件 (4-10) 式意味着与 I_3 相应的绕对称轴的转动具有由内禀结构所决定的确定值.

既然轴对称性使得无法区分第三个欧勒角 ψ 取不同值的各种取向, 那末这一变量就成为多余的了. 由条件 (4-10) 式可知, 原子核由内禀波函数和转动波函数相乘的形式表示总波函数[参看 (4-4) 式]是与 ψ 无关的. 事实上, 当内禀坐标架绕着 3 轴转动 $\Delta\psi$ 角时, 内禀波函数乘以因子 $\exp\{-iJ_3\Delta\psi\}$ 、转动波函数乘上因子 $\exp\{iI_3\Delta\psi\}$, 所以, 当 $J_3 = I_3 (=K)$ 时, 总波函数保持不变. 如果不认为 ψ 是多余的变量, 也可令 ψ 具有某一固定值, 例如 $\psi = 0$ 或 $\psi = -\phi$; 这点可参看第一卷第 395 页附录 3 A 中关于螺旋性波函数的注记. 如果 ψ 取固定值, (4-7) 和 (4-8) 式中的归一化常数应乘以 $(2\pi)^{1/2}$.

4-2c. $\mathcal{R}$ 不变性

如果内禀哈密顿算符对于绕垂直于对称轴的某一轴转动 180° 而保持不变,则转动自由度将进一步受限制。由于绕垂直于对称轴的任意轴的转动是等价的,因而为了确定起见,我们选定绕2轴转动 $\mathcal{R} = \mathcal{R}_2(\pi)$ 。(对于具有轴对称性而不是球对称的体系, $\mathcal{R}$ 不变性是唯一可能的附加的转动不变性;事实上,如果对任意其它的转动保持不变,则意味着有无限多个对称轴,这样一来,体系也就成为球对称了。)

$\mathcal{R}$ 不变性意味着转动 $\mathcal{R}$ 是属于内禀自由度的, 因而不包括在转动自由度内。这个限制可以表示为

$$\mathcal{R}_e = \mathcal{R}_i, \quad (4-11)$$

$\mathcal{R}_e$ 是对集体取向角(外部变量)所作的转动, 而 $\mathcal{R}_i$ 是对内禀变量所作的同样的转动。条件(4-11)和限制(4-10)类似, 后者表示在绕对称轴做无限小转动下的不变性。

对于 $K=0$ 的内禀态, 可用 $\mathcal{R}_i$ 的本征值 r 来标记:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_i \Phi_{r,K=0}(q) &= r \Phi_{r,K=0}(q) \\ r &= \pm 1 \end{aligned} \quad (4-12)$$

对于具有整数角动量的体系, $\mathcal{R}_i$ 的本征值是 ± 1 , 因为 $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}_2(2\pi) = +1$ 。

算符 $\mathcal{R}_e$ 作用于转动波函数(4-8)上, 相当于把对称轴反向($\theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \phi + \pi$), 故可得:

$$\mathcal{R}_e Y_{IM}(\theta, \phi) = (-)^I Y_{IM}(\theta, \phi). \quad (4-13)$$

于是, 限制 $\mathcal{R}_e = \mathcal{R}_i$ 意味着

$$(-)^I = r. \quad (4-14)$$

转动谱或者只包含偶数 I 的态, 或者只含奇数 I 的态,

$$\begin{aligned} \Psi_{r,K=0,IM} &= (2\pi)^{-1/2} \Phi_{r,K=0}(q) Y_{IM}(\theta, \phi), \\ I &= 0, 2, 4, \dots, \quad r = +1 \\ I &= 1, 3, 5, \dots, \quad r = -1 \end{aligned} \quad (4-15)$$

限制 $\mathcal{R}_e = r$ 使得独立取向角的变化范围缩减一半, 从转动谱中

排除了 I 的奇数(或偶数)态。

作为 $\mathcal{R}$ 不变性的结果, 对于 $K \neq 0$ 的内禀态是二重简并的。我们引进下述记号: 使 K 取正值, 而相应于 J_3 的负本征值的转动态则记为 $\bar{K}$:

$$\Phi_{\bar{K}}(q) = \mathcal{R}_i^{-1} \Phi_K(q). \quad (4-16)$$

如果将内禀态按总角动量 J 展开, 则(4-16)式的相位约定意味着[参看(1A-47)式]:

$$\begin{aligned} \Phi_K &= \sum_J c_J \Phi_{J,K}, \\ \Phi_{\bar{K}} &= \exp\{i\pi J_2\} \Phi_K = \sum_J (-)^{I+K} c_J \Phi_{J,-K}. \end{aligned} \quad (4-17)$$

其中 $\Phi_{J,\pm K}$ 是 J 的多重态中具有 $J_3 = \pm K$ 的分量。

$\mathcal{R}_e$ 作用在转动波函数上的结果为:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_e \mathcal{D}_{MK}^I(\omega) &= \exp\{-i\pi I_2\} \mathcal{D}_{MK}^I(\omega) \\ &= (-)^{I+K} \mathcal{D}_{M-K}^I(\omega). \end{aligned} \quad (4-18)$$

在(4-18)式的推导中用到了关系式(1A-47), 并且用到了 I_2 的矩阵元具有与 I_y 矩阵元符号相反[参看(1A-93)式]这一事实。为了满足条件(4-11), 核的波函数应有如下形式:

$$\begin{aligned} \Psi_{KIM} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \mathcal{R}_i^{-1} \mathcal{R}_e) \left(\frac{2I+1}{8\pi^2} \right)^{1/2} \Phi_K(q) \mathcal{D}_{MK}^I(\omega) \\ &= \left(\frac{2I+1}{16\pi^2} \right)^{1/2} \{ \Phi_K(q) \mathcal{D}_{MK}^I(\omega) \\ &\quad + (-)^{I+K} \Phi_{\bar{K}}(q) \mathcal{D}_{M,-K}^I(\omega) \}, \\ I &= K, K+1, \dots, (K > 0) \end{aligned} \quad (4-19)$$

(注意: $\mathcal{R}_i^2 = \mathcal{R}_e^2 = (-)^{2I}$.) 由于形变的 $\mathcal{R}$ 不变性对转动自由度所加的限制, 从 Φ_K 与 $\Phi_{\bar{K}}$ 这两个内禀态出发, 对于每一个 I 值, 只能构成一个转动态。

波函数(4-19)并不是(4-4)式的简单乘积, 而是包含了与简并的内禀态相联系的两项的迭加。这两部分的迭加表示内禀自由度和转动自由度的交织, 从而引起了在经典物理所没有的干涉效

应。(4-19)式所示对称化状态之间的算符 F 的矩阵元可用非对称化状态之间的矩阵元写出来:

$$\begin{aligned} \langle K_2 I_2 M_2 | F | K_1 I_1 M_1 \rangle &= \langle K_2 I_2 M_2 | F | K_1 I_1 M_1 \rangle_{\text{unsym}} \\ &+ (-)^{I_1+K_1} \langle K_2 I_2 M_2 | F | \bar{K}_1 I_1 M_1 \rangle_{\text{unsym}}, \end{aligned} \quad (4-20)$$

($K_1 > 0, K_2 > 0$)

其中:

$$\begin{aligned} (\Psi_{KIM})_{\text{unsym}} &= \left(\frac{2I+1}{8\pi^2} \right)^{1/2} \Phi_K(q) \mathcal{D}'_{MK}(\omega), \\ (\Psi_{\bar{K}IM})_{\text{unsym}} &= \left(\frac{2I+1}{8\pi^2} \right)^{1/2} \Phi_{\bar{K}}(q) \mathcal{D}'_{M-K}(\omega). \end{aligned} \quad (4-21)$$

在推导(4-20)时,用了关系式:

$$\mathcal{R}_i^{-1} \mathcal{R}_e F \mathcal{R}_e^{-1} \mathcal{R}_i = F. \quad (4-22)$$

它表示任一物理算符在等价的算符 $\mathcal{R}_e$ 和 $\mathcal{R}_i$ 的作用下以相同的方式变换。

(4-20)式的第二项包含有相因子:

$$\sigma = (-)^{I+K}, \quad (4-23)$$

称之为正负记号因子(这是在 Regge 轨迹中所用的术语)。对于相继变化的 I 值,这一项目交替变更矩阵元的符号(假定算符 F 本身为取向角和角动量的平滑函数)。矩阵元中与正负记号因子有关的项意味着在一个具有轴对称性和 $\mathcal{R}$ 不变性的体系中, $K \neq 0$ 的转动带趋向于分成对应于不同量子数 σ 的两组。

在矩阵元(4-20)式中出现两个干涉项是特有的量子效应。如果算符 F 能够改变 I_3 的符号,从而产生等价于整个体系作 $\mathcal{R}$ 转动的效应,那么与正负记号因子有关的项对于同一带中两个态之间的矩阵元有贡献。

在由相同原子核所组成的双原子分子光谱中,最先碰到这种具有 $\mathcal{R}$ 对称性的转子(例如,可参看 Herzberg, 1950;第 130 页)。对于这种体系,描述电子沿对称轴的角动量分量为零的总的量子数 r 可表为 $r = r_{el}P(12)$, 这里 r_{el} 表示电子波函数的 r 量子数,而 $P(12)$ 表示原子核的空间交换。由于全