SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica

phys.scichina.com



评 述 原子核协变密度泛函理论及其应用专辑

费米海与狄拉克海中的单粒子态 —— 从球形核狄拉克方程说起

周善贵102*

①中国科学院理论物理研究所,理论物理国家重点实验室,北京100190;

- ②兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心, 兰州 730000
- * 联系人, E-mail: sgzhou@itp.ac.cn

收稿日期: 2015-11-09; 接受日期: 2015-11-12; 网络出版日期: 2015-12-14

国家重点基础研究发展计划 (编号: 2013CB834400)、国家自然科学基金 (批准号: 11120101005, 11275248, 11525524) 和中国科学院知识创新工程重要方向项目 (编号: KJCX2-EW-N01) 资助

摘要 在原子核的协变密度泛函理论中,核子的运动方程—— 狄拉克方程是核心内容之一.本评述结合球形核中核子狄拉克方程的数值求解,讨论费米海与狄拉克海中单粒子态及若干相关的物理问题.首先以打靶法为例较为详细地介绍在坐标空间中求解狄拉克方程的过程,以伍兹-萨克森基(包括薛定谔-伍兹-萨克森基和狄拉克-伍兹-萨克森基)展开方法为例介绍在基空间中狄拉克方程的求解方法.完备性的条件要求狄拉克-伍兹-萨克森基空间不仅要包括费米海中的正能量态,而且要包括狄拉克海中的负能量态.因此,需要把单粒子态的研究从正能量态拓展到负能量态.结合负能量态的研究,介绍与这些负能量态对应的反核子谱中存在的自旋对称性及其起源.

关键词 协变密度泛函理论, 狄拉克方程, 自旋对称性, 赝自旋对称性

PACS: 21.60.Jz, 21.10.Pc, 03.65.Pm, 03.65.Ge

1 引言

当前,在相对论性框架下描述原子核结构性质成为核物理研究的一个重要前沿领域.协变密度泛函理论是原子核的相对论性描述中的重要方法之一 [1-12].与传统的非相对论性描述相比,协变密度泛函理论具有更好的微观基础.例如,在基于介子交

换的协变密度泛函理论中,核子之间的相互作用通过交换介子来实现.相应地,核子在介子场提供的标量势 (~ -400 MeV)和矢量势 (~ 350 MeV)中运动,这对于正确地给出核物质的饱和性质、解释原子核的自旋-轨道耦合、理解单粒子谱中赝自旋对称性的起源至关重要.此外,协变密度泛函理论还具有参数较少、能自洽包含奇时间场的贡献等优点.基于上

引用格式: 周善贵. 费米海与狄拉克海中的单粒子态 —— 从球形核狄拉克方程说起, 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2016, 46: 012003 Zhou S G. Single particle states in the Fermi sea and Dirac sea in spherical nuclei (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2016, 46: 012003, doi: 10.1360/SSPMA2015-00566

© 2015《中国科学》杂志社 www.scichina.com

述特点,协变密度泛函理论在描述从轻到重、从稳定 线到滴线的原子核基态与激发态性质方面取得了很 大成功.

近些年来,原子核协变密度泛函理论自身的发展也取得了重要进展,包括:从球形核扩展到变形核、从正常原子核扩展到超核、从稳定核扩展到滴线核、从介子的非线性自耦合到引入耦合常数的密度依赖、从介子交换框架到点耦合框架、从相对论Hartree 模型扩展到相对论Hartree-Bogoliubov模型、从相对论Hartree 模型扩展到相对论Hartree-Fock模型并进而扩展到相对论Hartree-Fock模型,从平均场近似到超越平均场近似,等等.

在原子核的协变密度泛函理论的数值实现过程中,求解核子的运动方程—— 狄拉克方程通常占据非常重要的地位. 随着计算技术的发展和计算机能力的提高,已经实现了利用基展开方法在多维形状空间 [13] 或者在三维坐标格点空间 [14] 求解狄拉克方程. 求解这些极其复杂的狄拉克方程,一方面可以推动计算物理的发展,另一方面能够用来研究重要的物理问题. 实际上,即使是针对非常简单的情形—— 球形核狄拉克方程进行深入研究,也能够揭示丰富的物理内容,有时甚至会取得出乎意料的新进展 [15,16].

本评述将结合球形核中核子狄拉克方程的数值 求解,讨论费米海与狄拉克海中的单粒子态以及几个相关的物理问题:给出协变密度泛函理论的拉氏量密度和狄拉克方程;如何在坐标空间和基空间中求解狄拉克方程;讨论在狄拉克-伍兹-萨克森基空间求解狄拉克方程的过程中揭示出的反核子谱中的自旋对称性.

2 相对论平均场模型和狄拉克方程

协变密度泛函理论框架有两类,分别是介子交换与点耦合;耦合方式也有两类,分别是非线性自耦合与密度依赖的耦合.因此,相对论密度泛函可以有4种形式:(1)非线性自耦合的介子交换密度泛函;(2)耦合常数密度依赖的介子交换密度泛函;(3)非线性自耦合的点耦合密度泛函;(4)耦合常数密度依赖的点耦合密度泛函.不论从哪种形式的相对论密度泛

函出发,都可以用类似的方式推导出核子的运动方程 —— 狄拉克方程.下面,仅以非线性自耦合的介子交换密度泛函为例给出简要的讨论.拉氏量密度写为

$$\mathcal{L} = \overline{\psi}_{i}(i\partial \!\!\!/ - M)\psi_{i} + \frac{1}{2}\partial_{\mu}\sigma\partial^{\mu}\sigma - U(\sigma) - g_{\sigma}\overline{\psi}_{i}\sigma\psi_{i}$$

$$-\frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_{\omega}^{2}\omega_{\mu}\omega^{\mu} - g_{\omega}\psi_{i}\phi\psi_{i}$$

$$-\frac{1}{4}R_{\mu\nu}R^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_{\rho}^{2}\rho_{\mu}\rho^{\mu} - g_{\rho}\overline{\psi}_{i}\phi\tau\psi_{i}$$

$$-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - e\overline{\psi}_{i}\frac{1-\tau_{3}}{2}A\psi_{i}. \tag{1}$$

其中,

$$U(\sigma) = \frac{1}{2}m_{\sigma}^{2}\sigma^{2} + \frac{1}{3}g_{2}\sigma^{3} + \frac{1}{4}g_{3}\sigma^{4}, \qquad (2)$$

为 σ 介子的自耦合项,

$$\Omega_{\mu\nu} = \partial_{\mu}\omega_{\nu} - \partial_{\nu}\omega_{\mu},\tag{3}$$

$$\mathbf{R}_{\mu\nu} = \partial_{\mu} \mathbf{\rho}_{\nu} - \partial_{\nu} \mathbf{\rho}_{\mu} - g_{\rho} (\mathbf{\rho}_{\mu} \times \mathbf{\rho}_{\nu}), \tag{4}$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu}, \tag{5}$$

为各类场张量算符. 从拉氏量密度出发, 分别对核子、介子和光子场做变分, 可以推导出核子的狄拉克方程.

$$[\alpha \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) + \beta (M + S(\mathbf{r}))] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (6)$$

以及介子和光子的运动方程,

$$(-\nabla^2 + m_{\sigma}^2) \sigma = -g_{\sigma} \rho_S - g_2 \sigma^2 - g_3 \sigma^3, \tag{7}$$

$$(-\nabla^2 + m_\omega^2) \omega = g_\omega \rho_V - c_3 \omega^3, \tag{8}$$

$$\left(-\nabla^2 + m_\rho^2\right)\rho = g_\rho \rho_3,\tag{9}$$

$$-\nabla^2 A = e\rho_C. \tag{10}$$

这些方程耦合在一起,需要自治迭代求解.

对于球形原子核, 狄拉克波函数的径向和角度部分可分离,

$$\psi_{\alpha\kappa m}(\mathbf{r},s) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} iG_{\alpha}^{\kappa}(r)Y_{jm}^{l}(\theta,\varphi) \\ -F_{\alpha}^{\kappa}(r)Y_{jm}^{\tilde{l}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}, \quad j = l \pm \frac{1}{2},$$
(11)

其中,

$$\kappa = (-1)^{j+l+1/2} (j+1/2), \quad \tilde{l} = l + (-1)^{j+l-1/2}.$$
(12)

将式 (11) 代入到狄拉克方程 (6) 中, 对角度部分做积分, 得到一维径向狄拉克方程,

$$\begin{cases} \varepsilon_{\alpha} G_{\alpha}^{\kappa} = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\kappa}{r} \right) F_{\alpha}^{\kappa} + \left[M + S(r) + V(r) \right] G_{\alpha}^{\kappa}, \\ \varepsilon_{\alpha} F_{\alpha}^{\kappa} = \left(+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\kappa}{r} \right) G_{\alpha}^{\kappa} - \left[M + S(r) - V(r) \right] G_{\alpha}^{\kappa}, \end{cases}$$

$$(13)$$

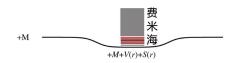
其中,未知量是本征能量 ε_{α} 和波函数的上下径向分量. S(r) 和 V(r) 分别是标量势和矢量势,前者由交换 σ 介子给出,后者主要由 ω 介子场决定. 它们的深度 大致为, $S(r=0)\sim -400$ MeV, $V(r=0)\sim 350$ MeV. 标量势和矢量势的和 V(r)+S(r) 对应着非相对论框架下的核子平均势,标量势和矢量势的差 V(r)-S(r) 决定自旋 - 轨道耦合性质. 本征能量 ε_{α} 既可以取正值,又可以取负值. 如图 1 所示,正能量态分布在囿于下、较浅的费米海 (用黑色实线表示的 M+V(r)+S(r) 以上的区域)中,负能量态分布在囿于上、较深的狄拉克海 (用黑色实线表示的 -M+V(r)-S(r) 以下的区域)中.

不论是在费米海还是在狄拉克海中,都既有束缚态,又有连续谱.在连续谱中,存在一些共振态.对于束缚态,能量是分立的,且 $|\epsilon_{\alpha}| < M$. 束缚态的波函数会延伸到经典禁区里:对于正能量态,经典禁区为图 1 中费米海以外、从费米海底部到 +M 的区域;对于负能量态,经典禁区为图 1 中狄拉克海以外、从狄拉克海顶部到 -M 的区域;在 $|\epsilon_{\alpha}| > M$ 的区域,存在着连续态,它们的波函数是振荡的.对于连续态,我们更关注其中的共振态 [17].

3 单粒子分立态

求解狄拉克方程主要有两类方法: 一类是解析或者近似解析的方法, 一类是数值方法. 对于某些特定的势场下的狄拉克方程, 可以得到解析解. 例如, 氢原子问题 [18]、谐振子势 [19] 等.

原子核中,核子运动的平均势场与伍兹-萨克森势很接近.因此,很多研究工作直接采用伍兹-萨克森势.一般情况下,伍兹-萨克森势没有解析解.郭等人 [20] 做了一些近似,曾给出了伍兹-萨克森势下狄拉克方程的近似解析解.目前,尚没有得到伍兹-萨



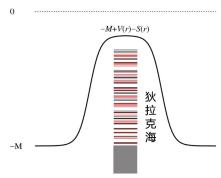


图 1 (网络版彩图) 协变密度泛函理论框架下核子运动的平均势场、费米海和狄拉克海及其中的束缚能级与连续谱

Figure 1 (Color online) Nuclear potentials and discrete levels and continuum states in the Fermi sea and Dirac sea within the covariant density functional theory for atomic nuclei.

克森势下狄拉克方程的严格解析解.

协变密度泛函理论框架下, 狄拉克方程主要采用数值方法求解. 这既可以在坐标空间中实现, 也可以在基空间中实现. 本节首先介绍如何在坐标空间求解球形核中核子运动的狄拉克方程, 之后以伍兹-萨克森基为例, 介绍在基空间中求解狄拉克方程的数值方法.

3.1 坐标空间求解径向狄拉克方程

采用散射态边界条件,利用格林函数方法在坐标空间中求解径向狄拉克方程,既可以得到分立的束缚态,也可以得到连续谱和共振态 ^[21,22].如果只关心束缚态,则常常采用"盒子"边界条件,这样,连续谱被分立化.通过改变"盒子"的大小,可以得到单粒子共振态,这就是实稳定方法 ^[23,24].

采用"盒子"边界条件数值求解径向狄拉克方程是一个两点边界条件问题. 对于这类问题, 通常利用的数值方法有打靶法 (Shooting Method) 和松弛法

(Relexation Method) [25]. 本文主要介绍打靶法.

由于原子核是一个有限体系, 所以它的密度和波函数在 r 趋于无穷的时候都会趋于 0. 因此, 可以把原子核放在一个半径为 R 的球形 "盒子" 里, 这相当于当 r > R 时, 令 V(r) = 0, S(r) = 0. 当 R 足够大时, 束缚态解受 "盒子" 影响很小, 我们可以得到符合要求精度的单粒子能量和波函数.

在"盒子"边界条件下,连续态因为边界 R 的存在而分立化. 所以,不论是束缚态,还是分立化后的"连续态",它们的波函数最远也只能到 r=R,即当 $r \ge R$ 时, G(r)=0, F(r)=0. 进一步,我们必须将坐标空间 [0,R] 离散化,最常用的方法是取等间距格点.若取 N+1 个格点,则格点间距为 $\Delta r=R/N$. 这样,数值算法带给我们两个额外的参数, R 和 Δr . 这两个参数都需要适当选取:一方面, R 要足够大, Δr 要足够小,以保证计算精度;另一方面, R 也不能太大, Δr 不能过小,以控制计算时间. 此外, Δr 过小时, 做差分计算时也可能带来计算误差,影响计算精度. 选取适当的 R 和 Δr 后,这两个参数便完整地刻画出了一个一维格点空间,

$$r_i = (i-1)\Delta r, i = 1, 2, 3, \dots, N+1,$$
 (14)

i=1 对应原子核的中心, i=N+1 对应盒子的边界 R. 相应地, 微分 d/dr 也变成了差分 $\Delta/\Delta r$, 势场 V(r), S(r) 也被分立化为 $V_i=V(r_i)$, $S_i=S(r_i)$. 我们需要求得每个格点上波函数的值, 即 $G_i=G(r_i)$ 和 $F_i=F(r_i)$.

为了求解方便, 我们把V和S重新组合一下, 组合成它们的和与差, 再用核子质量重新标度一下单粒子能量, 径向狄拉克方程写为

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}G(r)}{\mathrm{d}r} + \frac{\kappa}{r}G(r) - [E - \Lambda(r)]F(r) = 0, \\ \frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r} - \frac{\kappa}{r}F(r) + [E - \Sigma(r)]G(r) = 0. \end{cases}$$
 (15)

其中,

$$E = \varepsilon - M,$$

$$\Lambda(r) = V(r) - S(r) - 2M,$$

$$\Sigma(r) = V(r) + S(r).$$
(16)

令 $F_i = F(r_i)$, $G_i = G(r_i)$, 从式 (15) 可得边界条件 如下:

$$r = r_1 = 0,$$
 $G_1 = F_1 = 0,$ (17)

$$r = r_2 = \Delta r, \qquad F_2 = \begin{cases} \frac{\kappa + 1}{E - \Lambda_2} G_2 / \Delta r, \\ \frac{E - \Sigma_2}{\kappa - 1} G_2 \Delta r. \end{cases}$$
(18)

$$r = r_{N+1} = R, G_{N+1} = 0.$$
 (19)

对于球形原子核, κ 是好量子数. 给定 κ 后, 对于未知的本征能量 E, 我们可以猜测一个初值 E_0 . 之后就可以开始"打靶"了, 即, 波函数从两个边界出发, 在中间对接.

首先, 在 $r = r_1 = 0$ 处, 对应的波函数 G_1 和 F_1 一定是 0. 在 $r = r_2 = \Delta r$ 处, 我们知道波函数 F_2 和 G_2 的关系 (见式 (18)), 但不知道具体数值. 先令 G_2 取一个任意值, 则可得 F_2 , 见图 2(a). 从 $r = r_2 = \Delta r$ 出发, 根据 F(r) 与 G(r) 之间的关系 (见式 (15)), 利用龙格 - 库塔 (Runge-Kutta) 方法 $[^{25]}$ 或者代数动力学算法 $[^{26-30]}$ 向外打靶, 依次得到 F_3 与 G_3 (见图 2(b))、 F_4 与 G_4 (见图 2(c)) …… 一直到 "对接点"的前一点 $F_{i_{match}-1}$ 与 $G_{i_{match}-1}$ (见图 2(d)) 和 "对接点" $F_{i_{match}}$ 与 $G_{i_{match}}$ (见图 2(e)). 图 2 展示了上述过程. 为了看起来更直观, 图 3(a) 把图 2(e) 中得到的各格点上的狄拉克波函数用 线连接起来.

在 r = R 处, $G_{N+1} = 0$, 但波函数的小分量不能为 0, 否则将得到 $F(r_i) = G(r_i) = 0$ 这一平庸解. 这里, 先 令 F_N 取一个任意值. 根据 F(r) 与 G(r) 之间关系 [见式 (15)] 向内打靶, 依次得到 F_i 与 G_i ($i_{match} \le i < N$), 一直到 "对接点" r_{match} ,图 3(b) 展示了这样得到的狄拉克波函数.

至此,我们有 3 个未知量: 本征能量 E_0 , $r=r_2=\Delta r$ 处的大分量波函数值 G_2 , r=R 处的小分量波函数值 F_N . 按照量子力学的要求,在对接点,波函数的大、小分量都要连续,整个波函数要归一. 因此求解径向 狄拉克方程的过程就是利用这三个条件确定以上三个未知量的过程. 一般情况下,波函数从两个边界出发到达对接点后,其大、小分量是不连续的,也就是没有对接上,如图 3(c) 所示. 左右两边的波函数各有一个待定常数 G_2 和 F_N . 可以通过改变其中的一个,使波函数大分量对接上. 例如,在图 3(d) 中,改变 F_N ,使波函数大分量(图中的红色实线)连续. 这时如果小分量也恰巧对接上,就说明我们得到了对应于当前能量 E_0 的本征波函数. 但是,一般情况下,波函数

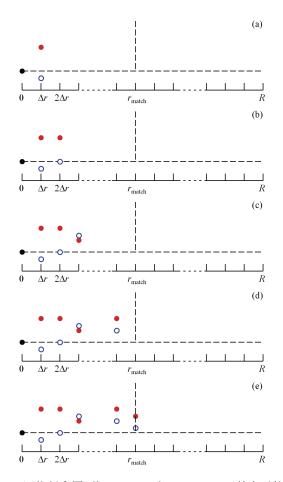


图 2 (网络版彩图) 从 $r = r_1 = 0$ 和 $r = r_2 = \Delta r$ 开始向对接点打靶. 其中, 实心红点表示某个格点 i 处大分量波函数 G_i , 空心蓝点表示某个格点 i 处小分量波函数 F_i

Figure 2 (Color online) Shooting from $r = r_1 = 0$ and $r = r_2 = \Delta r$ to the matching point. Red solid dots represent G_i and blue open dots represent F_i .

小分量在对接点是不连续的,如图 3(d) 所示. 这说明 E_0 并非狄拉克方程的本征值,我们需要从一个新的 能量 $E = E_0 + \Delta E$ 出发,重新开始上述打靶过程.如此迭代,直到波函数的大、小分量都对接上. 其中,在节点的数目正确的情况下, ΔE 由波函数小分量在对接点的差决定. 在上述迭代过程中,须注意本征能量初值的选取和波函数节点数的考察.

3.2 伍兹 - 萨克森基空间中求解径向狄拉克方程

狄拉克方程也可以在完备基空间中求解. 常用的基空间包括谐振子基 (Harmonic Oscillator

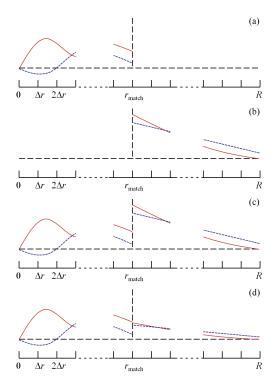


图 3 (网络版彩图) 波函数大分量 (红色实线) 和小分量 (蓝色 虚线) 在 r_{match} 点的对接过程

Figure 3 (Color online) Matching of the upper (red solid curve) and lower (blue dashed curve) components of the Dirac wave function.

Basis) [31,32]、改善渐近行为的谐振子基 (Transformed Harmonic Oscillator Basis) [33–37]、Pöschl-Teller-Ginocchio 基[38] 和伍兹 - 萨克森基 (Woods-Saxon Basis) [39]. 得到一组完备的基矢之后, 求解径向狄拉克方程就 化为对角化单粒子哈密顿量矩阵的过程. 下面主要介绍如何基于伍兹 - 萨克森基 [39] 求解狄拉克方程.

我们提出了两类伍兹-萨克森基——薛定谔-伍兹-萨克森基和狄拉克-伍兹-萨克森基.前者是先求解伍兹-萨克森势下的薛定谔方程,得到一组完备的薛定谔-伍兹-萨克森基,之后把狄拉克波函数的大、小分量分别在该基底上展开,求出狄拉克哈密顿量矩阵.后者是直接求解伍兹-萨克森势下的狄拉克方程,得到一组完备的狄拉克-伍兹-萨克森基,之后把狄拉克波函数直接在该基底上展开,求出狄拉克哈密顿量矩阵.

与非相对论框架相比, 在相对论框架下描述原子核, 一个最重要的特点是狄拉克方程的负能量态,

这些负能量态对应着反粒子自由度 [40,41]. 在薛定谔-伍兹-萨克森基展开方法中, 反粒子自由度体现在 狄拉克波函数小分量的展开中. 而在狄拉克-伍兹-萨克森基展开方法中, 完备性的条件要求基空间不仅要包括费米海中的正能量态, 而且要包括狄拉克海中的负能量态, 后者即对应着反粒子自由度.

3.2.1 薛定谔 - 伍兹 - 萨克森基

利用数值方法,可以比较方便地得到伍兹-萨克森下的单粒子能级和波函数,用来构成一组完备的基底.三维各向同性伍兹-萨克森势为

$$V_{\text{WS}}(r) = \begin{cases} \frac{V_0}{1 + e^{(r-R_0)/a_0}}, & r < R, \\ \infty, & r \ge R, \end{cases}$$
 (20)

其中, R 就是盒子边界. 把本征函数写为 $\phi_{nlm_l}(r) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$, 对应的径向薛定谔方程为

$$\left[-\frac{1}{2M} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V_{WS}(r) \right] R_{nl}(r)
= E_{nl} R_{nl}(r).$$
(21)

在坐标空间中求解这个薛定谔方程,得到一组 完备基 ^[39],

$${R_{nl}(r); n = 0, 1, ...; l = 0, 1, ..., n},$$
 (22)

狄拉克波函数的上下分量可以分别通过这组完备的 基矢来展开,

$$\begin{cases}
G_{\alpha}^{\kappa}(r) = -i \sum_{n=0}^{n_{\text{max}}} g_{\alpha n} r R_{nl}(r), \\
F_{\alpha}^{\kappa}(r) = -i \sum_{\tilde{n}=0}^{\tilde{n}_{\text{max}}} f_{\alpha \tilde{n}} r R_{\tilde{n}\tilde{l}}(r),
\end{cases} (23)$$

这样, 径向狄拉克方程化为一个矩阵,

$$\begin{pmatrix} A_{mn} & B_{m\tilde{n}} \\ C_{\tilde{m}\tilde{n}} & D_{\tilde{m}\tilde{n}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{\alpha n} \\ f_{\alpha\tilde{n}} \end{pmatrix} = \varepsilon_{\alpha} \begin{pmatrix} g_{\alpha n} \\ f_{\alpha\tilde{n}} \end{pmatrix}. \tag{24}$$

矩阵元分别为

$$A_{mn} = \int_{0}^{R} r^{2} dr R_{ml}(r) (V(r) + S(r) + M) R_{nl}(r),$$

$$B_{m\tilde{n}} = \int_{0}^{R} r^{2} dr R_{ml}(r) \left(+ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa_{\alpha} - 1}{r} \right) R_{\tilde{n}\tilde{l}}(r),$$

$$C_{\tilde{m}\tilde{n}} = \int_{0}^{R} r^{2} dr R_{\tilde{m}\tilde{l}}(r) \left(- \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa_{\alpha} + 1}{r} \right) R_{nl}(r),$$

$$D_{\tilde{m}\tilde{n}} = \int_{0}^{R} r^{2} dr R_{\tilde{m}\tilde{l}}(r) (V(r) - S(r) - M) R_{\tilde{n}\tilde{l}}(r).$$
(25)

在实际计算中, 需要取一个能量截断, 从而确定对于每一个矩阵块所对应的基矢的截断 n_{max} .

3.2.2 狄拉克 - 伍兹 - 萨克森基

与求解伍兹 - 萨克森势下的薛定谔方程得到薛定谔 - 伍兹 - 萨克森基类似, 求解伍兹 - 萨克森势形式的 $V_0(\mathbf{r})$ 和 $S_0(\mathbf{r})$ 下的狄拉克方程也可以得到一组基, 即狄拉克 - 伍兹 - 萨克森基 [39],

$$\{ [\varepsilon_{n\kappa m}^{0}, \psi_{n\kappa m}^{0}(r, s, t)]; \varepsilon_{n\kappa m}^{0} \ge 0 \}, \tag{26}$$

对应的量子数分别为 n=0,1,..., $\kappa=\pm 1,\pm 2,...$ 以及 $m=-j_\kappa,...,j_\kappa$ 。 $\psi^0_{n\kappa m}(r,s,t)$ 的形式与式 (11) 相同. 狄拉克 - 伍兹 - 萨克森基空间不仅包含费米海中正能量单粒子态,也应包含狄拉克海中的负能量单粒子态,这样才满足完备性的要求. 需要指出的是, 在协变密度泛函理论中,一般不考虑狄拉克海中的负能量态的贡献, 此即 "无海近似".

将核子的波函数在这组完备基上展开

$$\psi_{\alpha\kappa m}(r,s,t) = \sum_{n=0}^{n_{\text{max}}} c_{\alpha n} \psi_{n\kappa m}^{0}(r,s,t), \qquad (27)$$

狄拉克方程(6)化为矩阵形式

$$c_{\alpha m} \varepsilon_m^0 + \sum_{n=0}^{n_{\text{max}}} c_{\alpha n} H'_{mn} = \varepsilon_{\alpha} c_{\alpha m}, \ m = 1, ..., n_{\text{max}}, \quad (28)$$

矩阵元为

$$H'_{mn} = \langle \psi_m^0(\mathbf{r}) | [\Delta V(\mathbf{r}) + \beta \Delta S(\mathbf{r})] | \psi_n^0(\mathbf{r}) \rangle$$

$$= \int_0^R d\mathbf{r} G_m^0(\mathbf{r}) [\Delta V(\mathbf{r}) + \Delta S(\mathbf{r})] G_n^0(\mathbf{r})$$

$$+ \int_0^R d\mathbf{r} F_m^0(\mathbf{r}) [\Delta V(\mathbf{r}) - \Delta S(\mathbf{r})] F_n^0(\mathbf{r}), \qquad (29)$$

其中, $\Delta V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})$, $\Delta S(\mathbf{r}) = S(\mathbf{r}) - S_0(\mathbf{r})$. 对角 化上述单粒子哈密顿量矩阵就可以得到狄拉克方程的本征态能量和波函数.

3.2.3 伍兹 - 萨克森基下的协变密度泛函理论

对于球形核, 在狄拉克 - 伍兹 - 萨克森基下求解 狄拉克方程, 使得问题变得更复杂了. 因为, 求得狄拉克 - 伍兹 - 萨克森基函数的过程, 就是求解狄拉克方程的过程. 实际上, 提出伍兹 - 萨克森基的初衷是将伍兹 - 萨克森基用于更复杂的情况, 包括变形核的 狄拉克方程或相对论 Hartree-Bogoliubov 方程 [42-45] 等, 以用于描述奇特原子核现象, 例如晕现象.

在稳定原子核中, 费米面距连续谱较远, 因此连续态对稳定核性质的贡献不大. 对于奇特原子核, 其中子或质子的费米能级与零势能面非常接近. 核子-核子之间的剩余相互作用, 如对相互作用等, 可使成对的核子散射到连续谱能区, 因而连续谱对奇特核性质的影响不能忽略. 当价核子占据弱束缚能级或连续态, 且该能级的轨道角动量较小时 (如 s 态或 p 态), 离心位垒为零 (s 态) 或较低 (p 态), 则核子的波函数可以扩展到经典禁区以外很远, 从而可能产生晕现象 [7.12,46-50].

谐振子势和谐振子基在核结构模型中的应用非常广泛. 但是, 由于谐振子势具有局域性, 谐振子基对于奇特核不再适用; 例如, 在谐振子基下求解平均场模型, 很难正确给出晕核较大的核子密度分布. 在坐标空间求解 Hartree-Fock-Bogoliubov 方程可以自洽考虑连续态的贡献 [51,52]. 然而, 对于变形原子核, 在坐标空间求解狄拉克方程或相对论 Hartree-Bogoliubov方程非常复杂. 利用在坐标空间求解的伍兹 - 萨克森波函数作为基底, 通过 Bogoliubov 准粒子变换考虑对关联, 能自洽考虑原子核的形变、对关联、连续态的贡献, 可以给出较大的空间密度分布, 适于描述滴线附近的原子核及其形变效应 [42-45].

在文献 [39] 中, 我们在伍兹-萨克森基下求解了球形核的相对论平均场方程, 详细研究了所得结果对于伍兹-萨克森基相关参数的依赖性, 并论证了利用伍兹-萨克森基描述具有大的空间分布的原子核的可行性. 对于稳定核, 伍兹-萨克森基、谐振子基和坐标空间求解球形核相对论平均场方程得到的结果如结合能、均方根半径以及密度分布等都是相同的. 对于奇特核, 尤其是密度具有较大的空间分布的原子核例如72Ca, 伍兹-萨克森基可以给出与坐标空间非常

接近的结果,而谐振子基则不能,见图 4. 进一步,我们比较了薛定谔-伍兹-萨克森基与狄拉克-伍兹-萨克森基展开方法. 我们发现,利用后者求解相对论平均场方程,采用较小的基空间即能得到足够精确的结果,因而数值求解相对于前者更容易一些.

总的来说, 伍兹-萨克森基具有如下优点: (1) 伍兹-萨克森势更接近真实的核势; (2) 伍兹-萨克森势没有局域性的缺点; (3) 与在坐标空间求解类似, 可以通过"盒子"边界条件使连续态分立化, 把连续态贡献考虑进来; (4) 求解狄拉克方程归结于矩阵对角化, 相对较为容易. 因此, 伍兹-萨克森基在很大程度

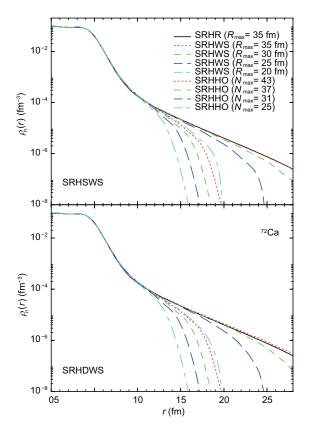


图 4 (网络版彩图) 相对论平均场模型给出的 ⁷²Ca 的中子密度分布. SRHR: 坐标空间求解; SRHSWS: 薛定谔 - 伍兹 - 萨克森基求解 (括号中给出了盒子的大小); SRHDWS: 狄拉克 - 伍兹 - 萨克森基求解 (括号中给出了盒子的大小); SRHHO: 谐振子基求解 (括号中给出了基空间包含的最大主量子数). 取自文献 [39]

Figure 4 (Color online) Comparison of density distributions for ⁷²Ca from spherical relativistic Hartree (SRH) model in the coordinate space (SRHR), in the Schrödinger Woods-Saxon basis (SRHWS), the Dirac-Woods-Saxon basis (SRHDWS) and the harmonic oscillator basis (SRHHO). Taken from ref. [39].

上克服了坐标空间和谐振子基的的缺点并结合了二者的优点.

近年来, 伍兹 - 萨克森基已经成功用于求解了球形核的非相对论 Hartree-Fock-Bogoliubov 方程 ^[53]、相对论 Hartree-Fock-Bogoliubov 方程 ^[54–56] 以及变形核的相对论 Hartree-Bogoliubov 方程 ^[42–45].

4 反核子谱中的自旋对称性

引言中提到,即使是针对非常简单的球形核狄拉克方程进行深入研究,也能够揭示丰富的物理内容,有时甚至会取得出乎意料的新进展.本节给出一个具体的例子——反核子谱中的自旋对称性.

原子核的对称性及对称性的破缺是核物理研究中最重要的研究领域之一. 20 世纪 50 年代, Jansen 等人和 Mayer 分别利用原子核中大的自旋 - 轨道耦合效应解释了原子核的幻数, 为原子核的壳层模型提供了坚实的基础. 1969 年, 在研究原子核的单粒子能谱时, Arima 等人 $^{[57]}$ 和 Hecht 等人 $^{[58]}$ 分别发现了原子核的赝自旋对称性: 对于总角动量 j 相差 j 和差 j 和 为量 j 相差 j 的两条单粒子能级, 若引入赝量子数 j j

原子核的赝自旋对称性发现以后,人们一直在探索这种对称性的起源. 但直到 20 世纪末期,才认识到赝自旋对称性是核子狄拉克哈密顿量的一种相对论性对称性 [59-61]. 赝量子数实际上是核子狄拉克波函数的小分量对应的量子数. 在核子的狄拉克方程中,当吸引的标量势 S(r) 和排斥的矢量势 V(r) 完全抵消时,这种赝自旋对称性是严格的. 但是在这个条件下,核势消失,原子核不再束缚. 所以在实际的原子核中,标量势和矢量势并不能严格抵消,导致赝自旋对称性有破缺. 但由于这两种势的大小接近、符号相反,它们的和很小,因此赝自旋对称性的破缺很小. 文献 [59-61] 给出了真实原子核中赝自旋对称性的破缺很小. 文献 [59-61] 给出了真实原子核中赝自旋对称性的破缺条件.

由于协变密度泛函理论中多采用"无海近似", 人们很少关注狄拉克海中的负能量态. 然而, 在狄 拉克 - 伍兹 - 萨克森基展开方法中, 基的完备性要求, 基空间既要包括正能量态, 又要包括负能量态. 因此, 我们在提出和利用狄拉克 - 伍兹 - 萨克森基求解相对论平均场方程时, 仔细研究了狄拉克方程的负能量态 [39]. 我们发现, 这些负能量态的几乎保持严格的赝自旋对称性. 狄拉克方程的负能量态与反核子态通过电荷共轭变换相联系. 该变换将赝自旋量子数变换为自旋量子数. 负能量态的赝自旋对称性对于着反核子谱的自旋对称性 [15.62].

式 (15) 所示的耦合、一阶狄拉克方程可以写为两个退耦合、二阶的类薛定谔方程,

$$\left\{ -\frac{1}{M_{+}} \frac{d^{2}}{dr^{2}} + \frac{1}{M_{+}^{2}} \frac{dM_{+}}{dr} \frac{d}{dr} + \left[(M + \Sigma) + \frac{1}{M_{+}} \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^{2}} + \frac{1}{M_{+}^{2}} \frac{dM_{+}}{dr} \frac{\kappa}{r} \right] \right\} G = \varepsilon G,$$
(30a)

$$\left\{ -\frac{1}{M_{-}} \frac{d^{2}}{dr^{2}} + \frac{1}{M_{-}^{2}} \frac{dM_{-}}{dr} \frac{d}{dr} + \left[(M + \Lambda) + \frac{1}{M_{-}} \frac{\kappa(\kappa - 1)}{r^{2}} - \frac{1}{M_{-}^{2}} \frac{dM_{-}}{dr} \frac{\kappa}{r} \right] \right\} F = \varepsilon F.$$
(30b)

其中 $M_+(r) = -M - \Lambda(r) + \varepsilon$, $M_-(r) = -M - \Sigma(r) + \varepsilon$. \tilde{l} , $\tilde{\kappa}$ 为赝量子数, 满足关系 $\kappa(1-\kappa) = \tilde{l}(\tilde{l}+1)$ 和 $\kappa(1+\kappa) = l(l+1)$. 如果式 (30a) 中 $dM_+(r)/dr = d\Lambda(r)/dr = 0$, 该式只依赖于轨道量子数 l, 而与 κ 无关. 因此, 核子谱中有严格的自旋对称性, 在反核子谱中有严格的赝自旋对称性. 如果式 (30b) 中 $dM_-(r)/dr = d\Sigma(r)/dr = 0$, 该式只依赖于赝轨道量子数 \tilde{l} , 而与 $\tilde{\kappa}$ 无关. 因此, 在核子谱中会有严格的赝自旋对称性, 在反核子谱中有严格的自旋对称性.

如果 $d\Sigma(r)/dr \neq 0$, 而是一个很小的数值, 那么在核子谱中就会存在很小的赝自旋 - 轨道劈裂, 也就是说, 赝自旋对称性近似保持, 同时在反核子谱中的自旋 - 轨道劈裂也很小, 即存在近似的自旋对称性. 文献 [15] 揭示出, 因为反核子态中的自旋 - 轨道劈裂项中的分母比核子态中的赝自旋 - 轨道劈裂项的分母大得多, 所以反核子谱中的自旋 - 轨道劈裂比核子谱中赝自旋 - 轨道劈裂要小得多. 如图 5 所示, 在 16 O中, 反中子的自旋轨道劈裂非常小. 图 6 给出了 16 O

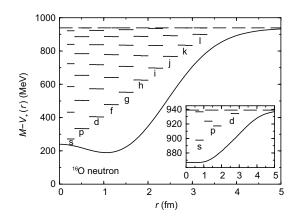


图 5 ¹⁶O 的反中子谱. 取自文献 [15]

Figure 5 Anti-neutron spectra of ¹⁶O. Taken from ref. [15].

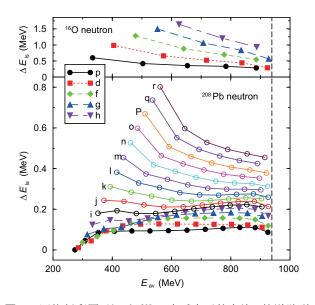


图 6 (网络版彩图) 16 O 和 208 Pb 中反中子的自旋 - 轨道劈裂. 取自文献 [15]

Figure 6 (Color online) Spin-orbit splittings of anti-neutron in 16 O and 208 Pb. Taken from ref. [15].

和 208 Pb 中反核子自旋双重态的自旋轨道劈裂. 从图中可以看出, 208 Pb 反中子谱中, 即使是对于轨道角动量 l=10 的单粒子态, 自旋 - 轨道劈裂也只有 0.5 MeV 左右. 利用波函数对这种自旋对称性进行验证表明, 一对自旋双重态, 其狄拉克波函数的大分量几乎相同 $^{[15]}$, 小分量也几乎完全满足自旋对称性条件 $^{[63]}$.

值得指出的是,早在1975年,Bell和Ruegg ^[64]就已经研究了狄拉克方程的 *SU*(2)对称性.正如文献 [65]所指出的,原子核的赝自旋对称性是 Bell-Ruegg 对称性中的一类.在文献 [66]中,基于电荷共轭变换,已经讨论了反核子谱的自旋对称性.但是,只是在经过深入、详细研究狄拉克方程的负能量态后 ^[39],才揭示出在反核子谱中,自旋对称性几乎严格保持.

5 结论

本评述结合球形核中核子狄拉克方程的数值求解,讨论了费米海与狄拉克海中的单粒子态相关的若干物理问题.以打靶法为例介绍了在离散格点空间中求解狄拉克方程的过程,以伍兹-萨克森基展开方法为例介绍了在基空间中狄拉克方程的求解方法.针对后者,进一步讨论了狄拉克-伍兹-萨克森基空间的完备性以及狄拉克海中的负能量态.在把单粒子态的研究从正能量态拓展到负能量态时,我们揭示出与负能量态对应的反核子谱存在自旋对称性,其起源与核子谱的赝自旋对称性相同.这些研究工作表明,即使是针对简单的球形核狄拉克方程进行深入研究,也能够揭示丰富的物理内容,并取得新进展.

致谢 感谢贺晓涛、孟杰、Ring P、Scheid W 和赵恩广等的合作. 感谢王琨和孙向向为完成本文所做的整理工作. 本文部分计算工作得到中国科学院理论物理研究所及理论物理国家实验室高性能计算平台和中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心的支持.

参考文献

- 1 Serot B D, Walecka J D. The relativistic nuclear many-body problem. Adv Nucl Phys, 1986, 16: 1-327
- 2 Reinhard P G. The relativistic mean-field description of nuclei and nuclear dynamics. Rep Prog Phys, 1989, 52: 439–514
- 3 Ring P. Relativistic mean field theory in finite nuclei. Prog Part Nucl Phys, 1996, 37: 193-263

- 4 Bender M, Heenen P H, Reinhard P G. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. Rev Mod Phys, 2003, 75: 121–180
- 5 Vretenar D, Afanasjev A V, Lalazissis G A, et al. Relativistic Hartree-Bogoliubov theory: Static and dynamic aspects of exotic nuclear structure. Phys Rep, 2005, 409: 101–259
- 6 Zhou S G. Relativistic mean field description of nuclear structure (in Chinese). High Ener Phys Nucl Phys, 2004, 28: 21–26 [周善贵. 原子核 结构的相对论平均场描述. 高能物理与核物理, 2004, 28: 21–26]
- 7 Meng J, Toki H, Zhou S G, et al. Relativistic continuum Hartree Bogoliubov theory for ground-state properties of exotic nuclei. Prog Part Nucl Phys, 2006, 57: 470–563
- 8 Paar N, Vretenar D, Colo G. Exotic modes of excitation in atomic nuclei far from stability. Rep Prog Phys, 2007, 70: 691–793
- 9 Nikšić T, Vretenar D, Ring P. Relativistic nuclear energy density functionals: Mean-field and beyond. Prog Part Nucl Phys, 2011, 66: 519-548
- 10 Meng J, Guo J Y, Li J, et al. Covariant density functional theory in nuclear physics (in Chinese). Prog Phys, 2011, 31: 1–139 [孟杰, 郭建友, 李剑, 等. 原子核物理中的协变密度泛函理论. 物理学进展, 2011, 31: 1–139]
- 11 Liang H, Meng J, Zhou S G. Hidden pseudospin and spin symmetries and their origins in atomic nuclei. Phys Rep, 2015, 570: 1-84
- 12 Meng J, Zhou S G. Halos in medium-heavy and heavy nuclei with covariant density functional theory in continuum. J Phys G-Nucl Part Phys, 2015, 42: 093101–52
- 13 Lu B N, Zhao J, Zhao E G, et al. Multidimensionally-constrained relativistic mean-field models and potential-energy surfaces of actinide nuclei. Phys Rev C, 2014, 89: 014323–15
- 14 Tanimura Y, Hagino K, Liang H Z. 3D mesh calculations for covariant density functional theory. Prog Theor Exp Phys, 2015, 2015: 073D01
- 15 Zhou S G, Meng J, Ring P. Spin symmetry in the antinucleon spectrum. Phys Rev Lett, 2003, 91: 262501
- 16 Lu B N, Zhao E G, Zhou S G. Pseudospin symmetry in single particle resonant states. Phys Rev Lett, 2012, 109: 072501
- 17 Liu Q, Shi M, Guo J Y. Progress in research of the complex scaling method (in Chinese). Sci Sin Phys Mech Astron, 2016, 46: 012007 [刘泉, 仕敏, 郭建友. 复标度方法研究共振态的进展. 中国科学: 物理学力学天文学, 2016, 46: 012007]
- 18 Zeng J Y. Quantum Mechanics (in Chinese). Vol. II (5th ed). Beijing: Science Press, 2013 [曾谨言. 量子力学. 卷 II(第五版). 北京: 科学出版社, 20131
- 19 Chen T S, Lü H F, Meng J, et al. Pseudospin symmetry in relativistic framework with harmonic oscillator potential and Woods-Saxon potential. Chin Phys Lett, 2003, 20: 358–361
- 20 Guo J Y, Sheng Z Q. Solution of the Dirac equation for the Woods-Saxon potential with spin and pseudospin symmetry. Phys Lett A, 2005, 338: 90–96
- 21 Sun T T, Zhang S Q, Zhang Y, et al. Green's function method for single-particle resonant states in relativistic mean field theory. Phys Rev C, 2014, 90: 054321–9
- 22 Sun T T. Green's Function Method in Covariant Density Functional Theory (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2016, 46: 012006 [孙亭亭. 格林函数协变密度泛函理论及其应用. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2016, 46: 012006]
- 23 Zhang L, Zhou S G, Meng J, et al. Real stabilization method for nuclear single-particle resonances. Phys Rev C, 2008, 77: 014312–6
- 24 Zhou S G, Meng J, Zhao E G. A spherical-box approach for resonances in the presence of the Coulomb interaction. J Phys B-At Mol Phys, 2009, 42: 245001
- 25 Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, et al. Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing (Vol. 1 of Fortran Numerical Recipes). 2nd ed. Cambridge, New York, and Melbourne: Cambridge University Press, 1992
- 26 Wang S J, Zhang H. Algebraic dynamics solutions and algebraic dynamics algorithm for nonlinear ordinary differential equations. Sci China Ser G-Phys Mech Astron, 2006, 49: 716–728 [王顺金, 张华. 物理计算的保真与代数动力学算法 (I). 动力学系统的代数动力学解法与代数动力学算法. 中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学, 2005, 35: 573–608]
- 27 Wang S J, Zhang H. Algebraic dynamics algorithm: Numerical comparison with Runge-Kutta algorithm and symplectic geometric algorithm. Sci China Ser G-Phys Mech Astron, 2007, 50: 53–69 [王顺金, 张华. 物理计算的保真与代数动力学算法 (II). 代数动力学算法与其他算法计算结果的比较. 中国科学 G 辑: 物理学力学天文学, 2006, 36: 14–37]
- 28 Wang S J, Zhang H. Symplectic algebraic dynamics algorithm. Sci China Ser G-Phys Mech Astron, 2007, 50: 133–143 [王顺金, 张华. 物理 计算的保真与代数动力学算法 (III). 辛代数动力学算法. 中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学, 2006, 36: 561–578]
- 29 Wang S J, Zhang H. Algebraic dynamics solutions and algebraic dynamics algorithm for nonlinear partial differential evolution equations of dynamical systems. Sci China Ser G-Phys Mech Astron, 2008, 51: 577–590 [王顺金, 张华. 物理计算的保真与代数动力学算法 (IV). 偏微分演化方程的代数动力学解法与算法. 中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学, 2008, 38: 178–193]
- 30 Zhang H, Lu W T, Wang S J. Algebraic dynamics solution to and algebraic dynamics algorithm for nonlinear advection equation. Sci China Ser G-Phys Mech Astron, 2008, 51: 1470–1478 [张华, 卢伟涛, 王顺金. 物理计算的保真与代数动力学算法 (V). 非线性对流方程的代数动力学解法与算法. 中国科学 G 辑: 物理学 力学 天文学, 2008, 38: 1028–1037]

- 31 Gambhir Y K, Ring P, Thimet A. Relativistic mean field theory for finite nuclei. Ann Phys (NY), 1990, 198: 132-179
- 32 Ring P, Gambhir Y K, Lalazissis G A. Computer program for the relativistic mean field description of the ground state properties of even-even axially deformed nuclei. Comput Phys Commun, 1997, 105: 77–97
- 33 Stoitsov M V, Nazarewicz W, Pittel S. New discrete basis for nuclear structure studies. Phys Rev C, 1998, 58: 2092-2098
- 34 Stoitsov M, Ring P, Vretenar D, et al. Solution of relativistic Hartree-Bogoliubov equations in configurational representation: Spherical neutron halo nuclei. Phys Rev C, 1998, 58: 2086–2091
- 35 Stoitsov M V, Dobaczewski J, Ring P, et al. Quadrupole deformations of neutron-drip-line nuclei studied within the Skyrme Hartree-Fock-Bogoliubov approach. Phys Rev C, 2000, 61: 034311
- 36 Stoitsov M V, Dobaczewski J, Nazarewicz W, et al. Systematic study of deformed nuclei at the drip lines and beyond. Phys Rev C, 2003, 68: 054312-
- 37 Stoitsov M, Schunck N, Kortelainen M, et al. Axially deformed solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov equations using the transformed harmonic oscillator basis (II) HFBTHO v2.00d: A new version of the program. Comput Phys Commun, 2013, 184: 1592–1604
- 38 Stoitsov M, Michel N, Matsuyanagi K. New efficient method for performing Hartree-Fock-Bogoliubov calculations for weakly bound nuclei. Phys Rev C, 2008, 77: 054301
- 39 Zhou S G, Meng J, Ring P. Spherical relativistic Hartree theory in a Woods-Saxon basis. Phys Rev C, 2003, 68: 034323-12
- 40 Wang S J, Zhou S G, Pauli H C. Particle-antiparticle degrees of freedom and related quantum numbers (in Chinese). Nucl Phys Rev, 2004, 21: 294–297 [王顺金, 周善贵, Pauli H C. Dirac 粒子的正 反粒子自由度和正 反粒子量子数. 原子核物理评论, 2004, 21: 294–297]
- 41 Wang S J, Zhou S G, Pauli H C. Retrieving the missed particle-antiparticle degrees of freedom of Dirac particles. arXiv:hep-th/0501250
- 42 Zhou S G, Meng J, Ring P. Toward a deformed relativistic Hartree Bogoliubov model for exotic nuclei. AIP Conf Proc, 2006, 865: 90-95
- 43 Zhou S G, Meng J, Ring P, et al. Neutron halo in deformed nuclei. Phys Rev C, 2010, 82: 011301(R)
- 44 Li L, Meng J, Ring P, et al. Deformed relativistic Hartree-Bogoliubov theory in continuum. Phys Rev C, 2012, 85: 024312
- 45 Chen Y, Li L, Liang H, et al. Density-dependent deformed relativistic Hartree-Bogoliubov theory in continuum. Phys Rev C, 2012, 85: 067301
- 46 Meng J, Ring P. Relativistic Hartree-Bogoliubov description of the neutron halo in ¹¹Li. Phys Rev Lett, 1996, 77: 3963–3966
- 47 Dobaczewski J, Nazarewicz W, Werner T R, et al. Mean-field description of ground-state properties of drip-line nuclei: Pairing and continuum effects. Phys Rev C, 1996, 53: 2809–2840
- 48 Meng J, Zhou S G. Halos in atomic nuclei (in Chinese). In: 10000 Selected Problems in Sciences: Physics. Beijing: Science Press, 2009. 155–162 [孟杰, 周善贵. 原子核的晕现象. 10000 个科学难题 物理学卷. 北京: 科学出版社, 2009. 155–162]
- 49 Zhou S G. Weakly bound nuclei and continuum states (in Chinese). In: 10000 Selected Problems in Sciences: Physics. Beijing: Science Press, 2009. 694–695 [周善贵. 弱束缚原子核与连续态. 10000 个科学难题 物理学卷. 北京: 科学出版社, 2009. 694–695]
- 50 Zhou S G. Halo phenomena in deformed nuclei (in Chinese). In: 10000 Selected Problems in Sciences: Physics. Beijing: Science Press, 2009. 682–683 [周善贵. 形变原子核中的晕现象. 10000 个科学难题 物理学卷. 科学出版社, 2009. 682–683]
- 51 Bulgac A. Hartree-Fock-Bogoliubov Approximation for Finite systems. arXiv: nucl-th/9907088
- 52 Dobaczewski J, Flocard H, Treiner J. Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line. Nucl Phys A, 1984, 422: 103-139
- 53 Schunck N, Egido J L. Nuclear halos and drip lines in symmetry-conserving continuum Hartree-Fock-Bogoliubov theory. Phys Rev C, 2008, 78: 064305–14
- 54 Long W H, Ring P, Giai N V, et al. Relativistic Hartree-Fock-Bogoliubov theory with density dependent meson-nucleon couplings. Phys Rev C, 2010, 81: 024308–10
- 55 Long W H, Ring P, Meng J, et al. Nuclear halo structure and pseudospin symmetry. Phys Rev C, 2010, 81: 031302(R)-5
- 56 Long W H, Yang S, Li J J. Pairing phase transition within finite-temperature relativistic Hartree-Fock-Bogoliubov approach (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2016, 46: 012009 [龙文辉, 杨申, 李佳杰. 基于有限温相对论 Hartree-Fock-Bogoliubov 理论的对相变研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2016, 46: 012009]
- 57 Arima A, Harvey M, Shimizu K. Pseudo LS coupling and pseudo SU(3) coupling schemes. Phys Lett B, 1969, 30: 517-522
- 58 Hecht K T, Adler A. Generalized seniority for favored J ≠ 0 pairs in mixed configurations. Nucl Phys A, 1969, 137: 129–143
- 59 Ginocchio J N. Pseudospin as a relativistic symmetry. Phys Rev Lett, 1997, 78: 436–439
- 60 Meng J, Sugawara-Tanabe K, Yamaji S, et al. Pseudospin symmetry in relativistic mean field theory. Phys Rev C, 1998, 58: R628–R631
- 61 Meng J, Sugawara-Tanabe K, Yamaji S, et al. Pseudospin symmetry in Zr and Sn isotopes from the proton drip line to the neutron drip line. Phys Rev C, 1999, 59: 154–163
- 62 Zhou S G, Meng J. Spin symmetry in anti-nucleon spectra in atomic nuclei (in Chinese). Nucl Phys Rev, 2005, 22: 391–394 [周善贵, 孟杰. 原子核反核子谱的自旋对称性. 原子核物理评论, 2005, 22: 391–394]
- 63 He X T, Zhou S G, Meng J, et al. Test of spin symmetry in anti-nucleon spectra. Eur Phys J A, 2006, 28: 265-269

- 64 Bell J S, Ruegg H. Dirac equations with an exact higher symmetry. Nucl Phys B, 1975, 98: 151-153
- 65 Ginocchio J N. Relativistic symmetries in nuclei and hadrons. Phys Rep, 2005, 414: 165–261
- 66 Ginocchio J N. A relativistic symmetry in nuclei. Phys Rep, 1999, 315: 231–240

Single particle states in the Fermi sea and Dirac sea in spherical nuclei

ZHOU ShanGui^{1,2*}

State Key Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;
Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator, Lanzhou 730000, China

The Dirac equation sits in the center of nuclear covariant density functional theories. In this review, we will introduce briefly the numerical methods of solving the Dirac equation for spherical nuclei and discuss several relevant topics. We introduce the shooting method which is used in solving the radial Dirac equation in the coordinate space and the Woods-Saxon basis expansion approach including the Schrödinger-Woods-Saxon basis and the Dirac-Woods-Saxon basis. For the Dirac-Woods-Saxon basis, the completeness of the basis requires that not only the positive energy states in the Fermi sea but also the negative energy states in the Dirac sea should be included in the basis. The pseudospin symmetry of those negative energy states, or equivalently, the spin symmetry in the anti-nucleon spectra are discussed.

covariant density functional theory, Dirac equation, spin symmetry, pseudo-spin symmetry

PACS: 21.60.Jz, 21.10.Pc, 03.65.Pm, 03.65.Ge

doi: 10.1360/SSPMA2015-00566