

少体束缚态的低能态和简谐振子混合 基矢展开方法*

段宜武 吴为平 鲍诚光

(湘潭师范学院物理系,湖南 411100) (中山大学物理系,广州 510275)

安伟科

(娄底师范专科学校物理科,湖南 417000)

摘要

本文发展了少体物理中的简谐振子展开方法,引入了低能态波函数并将其与简谐振子波函数混合作为基矢,在这组基矢上,对 $3-\alpha$ 系统和超核 ^9Be 的束缚态能级进行了计算并与实验和前人的工作进行了比较,结果是令人满意的。

简谐振子形式是少体物理学中解决少体束缚态问题的有力工具之一^[1-3]。为了计算少体系统的束缚能级,我们可以选取一组数目足够大的简谐振子乘积波函数作为基矢,将少体系统的总波函数在这组基矢上展开,然后利用广义 Talmi-Moshinsky^[2,3] 变换系数计算体系的哈密顿矩阵元并将该矩阵对角化,就可以得到该体系的能级和相应的态函数。例如,对于一个三体系统,可采用:

$$|\Phi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{R})\rangle = |[\phi_{nl}(\mathbf{r})\phi_{NL}(\mathbf{R})]\rangle \quad (1)$$

作为基矢,式中 (\mathbf{r}, \mathbf{R}) 是该三体系统的一组 Jacobi 坐标, ϕ 为简谐振子波函数, ν 代表简谐振子的一组量子数 (nl, NL) , 由 (l, L) 构成体系的空间总角动量。在这样的基矢下,体系的空间波函数 $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ 可以展开成:

$$|\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})\rangle = \sum_\nu a_\nu |\Phi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{R})\rangle. \quad (2)$$

上式的级数中的截断条件为 $2n + l + 2N + L \leq N_0$, N_0 为一给定的正整数, N_0 越大基矢的数目就越大。当简谐振子的本征频率按变分法的要求选择为使基态能量最低时,计算结果就与所采用的简谐振子波函数的数目有关, N_0 越大, 其结果的精确度就越高。因此,人们力求采用尽可能多的基矢来展开体系的波函数,但随之而来的问题是哈密顿矩阵元的大量计算和矩阵对角化的困难,因计算所带来的计算误差也会相应增加。

为了解决这一矛盾,本文在简谐振子近似方法的基础上,引进了一种新的方案,即在采用一组数目不太大的简谐振子基矢对体系的哈密顿矩阵对角化以后,可以得到体系的

本文 1990 年 4 月 2 日收到。

* 国家自然科学基金资助课题。

初步近似能级和波函数，从中引入一些对应较低能量的近似波函数作为一部分基矢（可称为低能态基矢），与一部分尚未采用过的简谐振子乘积波函数一起，构成混合基矢，然后在此混合空间中再次计算体系哈密顿矩阵元并将其对角化，就可得到体系的另一组近似束缚能级和波函数，这组能级中的基矢能量要比前一组的低。欲求得更低的基态能量，可重复使用上述方法，直到结果令人满意为止。由于所采用的低能态基矢并不太多，本方法计算得到的结果却与单纯使用简谐振子基矢所得的结果基本一致，从而可以简化矩阵元的计算，也给矩阵对角化带来了很多方便。

以三体系统为例。对于一个 $3-\alpha$ 系统，若考虑其 0^+ 态，当选取 $N_0 = 12$ ，此时相应总角动量等于 0 的正宇称偶偶谐振子基数目为 50，对体系束缚态问题作一初步计算后，可得到对应于能量：

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_2 \leqslant \varepsilon_3 \leqslant \cdots \leqslant \varepsilon_{50} \quad (3)$$

的 50 个近似波函数 $|\psi_k\rangle$

$$|\psi_k\rangle = \sum_{\nu=1}^{50} a_{\nu}^k |\Phi_{\nu}\rangle \quad (k = 1, 2, \dots, 50). \quad (4)$$

若将这 50 个 $|\psi_k\rangle$ 作为基矢，则在这个子空间内，体系的哈密顿矩阵可以近似看成对角化的。为了更精确地求得体系的束缚态能级，我们还应选择更多的简谐振子基矢（例如，取 $N_0 = 14$ ，此时，正宇称偶偶谐振子基为 70 个）。用这 70 个偶偶基计算出体系的束缚态 $|\Psi_k'\rangle$ ，在由 50 个 $|\psi_k\rangle$ 构成的小子空间中的对应较高能量的高能态基矢 $|\psi_k\rangle$ 上的投影可近似等于零：

$$\begin{aligned} \langle \psi_k | \psi_k' \rangle &= \left(\sum_{\nu=1}^{50} \langle \Phi_{\nu} | a_{\nu}^{k*} \right) \cdot \left(\sum_{\nu'=1}^{70} a_{\nu'}^{k'} | \Phi_{\nu'} \rangle \right) \\ &= \sum_{\nu=1}^{50} \sum_{\nu'=1}^{70} a_{\nu}^{k*} a_{\nu'}^{k'} \delta_{\nu\nu'} \\ &= \sum_{\nu=1}^{50} a_{\nu}^{k*} a_{\nu}^{k'} \approx 0. \end{aligned} \quad (5)$$

因此，对于要计算的束缚态能级，我们可以只选取 K 个对应于较低能量（例如，可取 ε_K 满足 $\varepsilon_K \leqslant \frac{1}{\sqrt{2}} |\varepsilon_1|$ 或更大一些）的低能态 $|\psi_k\rangle$ ($k = 1, 2, \dots, K$) 作为低能态基矢，与那些尚未采用过的剩余谐振子基（即 $\nu = 51, \dots, 70$ ）混合起来，构成低能态—简谐振子混合基矢，其数目仅有 35 左右。在这组混合基矢上再将体系的哈密顿矩阵对角化，可得到与单纯采用简谐振子基矢计算基本一致的结果（见表 1）。必须指出，尽管用混合基展开方法得到的体系态函数从形式上与谐振子形式不尽相同，但本质上仍然是一致的，因为：

$$\begin{aligned} |\Psi_{K_0}\rangle &= \sum_{k=1}^K C_k^{K_0} |\psi_k\rangle + \sum_{\nu=51}^{70} a_{\nu}^{K_0} |\Phi_{\nu}\rangle \\ &= \sum_{k=1}^K C_k^{K_0} \sum_{\nu=1}^{50} a_{\nu}^k |\Phi_{\nu}\rangle + \sum_{\nu=51}^{70} a_{\nu}^{K_0} |\Phi_{\nu}\rangle \end{aligned}$$

表1 $3-\alpha$ 系统较低能级的结果(单位: MeV)

态	0_1^+	0_2^+	0_3^+	2_1^+	2_2^+
文[1]的计算结果	-1.42	5.50	9.81	3.63	6.59
本文计算结果	-1.43	5.52	9.84	3.53	6.50

$$= \sum_{\nu=1}^{50} a_{\nu}^{K_0'} |\Phi_{\nu}\rangle + \sum_{\nu=51}^{70} a_{\nu}^{K_0} |\Phi_{\nu}\rangle \quad (6)$$

式中,

$$a_{\nu}^{K_0'} = \sum_{k=1}^K C_k^{K_0} a_{\nu}^k \quad (7)$$

为了得到更加满意的结果,在以上混合基矢的基础上,可将所得到的新的近似态函数中的低能态,第二次使用上述方案,引入新的低能态——简谐振子基进行计算。重复使用本方法,可以得到很好的结果。

为验证本文提出的方法,我们以 $3-\alpha$ 系统为例,选择了 Ali-Bodmer 势^[4]进行了计算,与文献[1]的结果相当一致[表1]。另外,采用 $\alpha-\alpha-\Lambda$ 模型和 Ali-Bodmer 的 $\alpha-\alpha$ 势及 Y.-C. Tang 的 $\alpha-\Lambda$ 势^[5]对超核 ${}^9\text{Be}$ 的束缚态能级及较低能级进行计算结果,与实验比较也是令人满意的(见表2)。

表2 ${}^9\text{Be}$ 超核能级(单位: MeV)

态	0^+	2^+	1^-
实验能级	-6.61	-3.53	
本文结果	-6.999	-3.77	0.18

本文的目的在于简化简谐振子形式。由于本方法中的混合基矢数目大大减少,在计算哈密顿矩阵元和将哈密顿矩阵对角化时给我们带来了很大方便,特别适用于在小型计算机和微机上进行计算,同时,由于计算带来的误差也相应有所减少。

显然,低能态展开方法也同样适用于少体物理中的另一种变分计算——超球谐函数方法。

参 考 文 献

- [1] C. G. Bao, *Nucl. Phys.*, **A373**(1982), 1.
- [2] W. Tobocman, *Nucl. Phys.*, **A357**(1981), 293.
- [3] Y. P. Gan, et al., *Computer Physics Communications*, **34**(1985), 387.
- [4] A. R. Bodmer, et al., *Nucl. Phys.*, **56**(1964), 657.
- [5] Y. C. Tang, et al., *Phys. Rev.*, **B138**(1965), 637.

The Expansion Method of Mixed Basis Vectors of Lower-energy States and Harmonic Oscillators in Calculation of Bound States of Few-Body Systems

DUAN YIWU WU WEIPING

(Department of Physics, Xiangtan Normal College, Hunan 411100)

BAO CHENGGUANG

(Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275)

AN WEIKE

(Department of Physics, Loudi Teachers' College Hunan 417000)

ABSTRACT

In this paper, the harmonic oscillator approach to the bound states of few-body systems is developed and the lower-energy states are introduced as basis vectors and mixed with a part of harmonic oscillator vectors to calculate the binding energy. The lower energy levels of $3-\alpha$ system and ^9Be are presented and compared with experiments or other calculations. The results are satisfactory.