

快报

量子力学五体问题的求解*

鲍 诚 光

(中山大学, 广州)

林 德 佳

(泽列索尔大学, 美国)

摘 要

文中提出了解五体薛定谔方程的一种变分方法, 求得基态波函数后对其作出分析, 并得到其几何结构和内部运动的特征.

本文推广了对三体、四体系统的研究^[1], 提出一种求解量子力学五体问题的方法. 并在找出薛定谔方程的解的基础上, 探讨基态的几何结构及其内部运动形态的特征.

设想一个由五个 α 粒子组成的系统, α 粒子间的相互作用力为一种经过调整的 Ali-Bodmer 力^[2]及库伦力之和, 即(能量单位和长度单位分别为 MeV 或 fm, 下同)

$$V_{ij} = -130 e^{-\left(\frac{r_{ij}}{2.105}\right)^2} + \alpha V_l e^{-\left(\frac{r_{ij}}{1.428}\right)^2} + V_c. \quad (1)$$

其中第一项是力程稍长的吸引势; 第二项是排斥心, 其高度依赖于粒子的相对角动量 l ; 当 l 依次为 0、2、4 时, V_l 依次为 475、320 和 10 MeV; 第三项是库伦力. 由于复合粒子间的相互作用中具有泡里排斥, 而第二项的强弱显然与相对角动量有关, 这是 Ali-Bodmer 力中 V_l 随 l 而变化的物理依据. 又由于 Ali-Bodmer 力是从两个 α 粒子散射中定出来的两体力, 不完全适用于多于两个 α 粒子的系统. 事实上核子在多集团间的重排列, 会贡献多体力. 其中较重要的三体力是一种短程吸引力, 有降低排斥心的作用. 因而我们引进一个小于 1 的参数 α . α 的值由基态理论值与实验值相一致的条件定出为 0.73.

在质心系内, 系统的哈密顿量为:

$$H = T + \sum_{i>j} V_{ij} = \sum_k H_k + \sum_{i>j} U_{ij}. \quad (2)$$

其中 H_k 为对应于雅可比坐标 \mathbf{r}_k 的谐振子哈密顿量

$$H_k = T_k + \frac{1}{2} \mu_k \omega^2 r_k^2, \quad (3)$$

T_k 和 μ_k 分别为对应于 \mathbf{r}_k 的动能算子和约化质量, 频率 ω 作为待定参数;

$$U_{ij} = V_{ij} - \frac{m}{10} \omega^2 r_{ij}^2, \quad (4)$$

其中 m 为 α 粒子的质量.

* 国家自然科学基金资助的课题
本文 1987 年 5 月 22 日收到.

为了求得薛定谔方程的解,先引进 $\sum_k H_k$ 的本征态(即谐振子的乘积态):

$$\Phi_{[\alpha]}(Q_1) = ([\varphi_{n_a l_a}(\mathbf{r}_a)\varphi_{n_b l_b}(\mathbf{r}_b)]_{l_1} [\varphi_{n_c l_c}(\mathbf{r}_c)\varphi_{n_d l_d}(\mathbf{r}_d)]_{l_2})_{\mathbf{L}} \quad (5)$$

作为基矢,其中 $[\alpha]$ 表示(5)式右方的一串量子数,而 Q_1 表示一套雅可比坐标,见图 1(a)

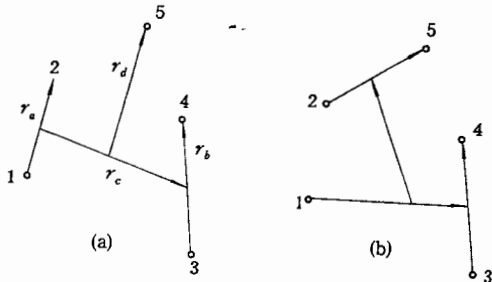


图 1

利用(6)式,我们可以方便地算出 H 量的矩阵元,例如当计算 U_{25} (即第二和第五粒子的等效相互作用)时,可使用如图 1(b)所示的一套雅可比坐标 Q_2 ,而从 Q_1 到 Q_2 的变换只涉及到一个由第一、第二、第五和第三第四粒子的质心所构成的四体子系统,因而相应的 $D_{[\beta]}^{[\alpha]}(Q_1, Q_2)$ 易于用四体泰米系数及角动量重耦合系数表出。

求得 H 量在基矢间的矩阵元后,就可以把 H 量对角化,求出本征矢和本征值;并通过调节参数 ω 使基态达到最优值。在实际的计算中,只选择正宇称且满足

$$2(n_a + n_b + n_c + n_d) + l_a + l_b + l_c + l_d \leq 8 \quad (7)$$

的基矢,当 $\mathbf{L} = 0$ 时,其数目为 560 个。显然,所选择的空对粒子变换是封闭的。因而所有本征矢都具有纯的置换对称性(只属于一种杨图)。由于我们只对正宇称和全对称的态有兴趣,所以在实际计算中仅需取 l_a, l_b, l_c, l_d 均为偶数的基。其数目减为 174 个。这样大的空对计算激发态来说还是不够的,但对计算基态来说,足以得到可信的定性结果。

利用基态的本征波函数 Ψ , 可求得单体密度,再利用 α 粒子自身的形状因子,可算出 Ne^{20} 的形状因子,这一结果与实验的比较由图 2 给出,从中可以看出我们对基态波函数的计算是合理的。

五个粒子(每一个作为一个顶点)围绕其质心构成一种几何体(例如若无四点共面的情况,则构成一六面体)简称为该系统的形状。显然系统处于不同形状的几率,一般是不同的。注意到如果把系统作一个整体的转动,其形状不会改变。又如果把粒子在五个顶点上重新排列一下(例如把第一个粒子排在原先第二个粒子所处的位置,如是等等),形状也不会改变。因而可利用 Ψ 定义形状几率密度如下

$$\rho_i = 8\pi^2 \cdot 5^3 \sum_P |\Psi|^2 x_i^j x_i^k x_i^l x_i^m \quad (8)$$

其中 \mathbf{x}_i 是从质心到第 i 粒子的矢径, i, j, k, l 是 1 至 5 中任取 4 个数的一种排列。 $8\pi^2$ 来自对方位角的积分(注意 $\mathbf{L} = 0$ 的态是各向同性的), 5^3 来自从雅可比坐标到 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4$ 坐标变换的函数行列式, \sum_P 表示对粒子的排列求和。(8) 式意味着形状的无穷小改变

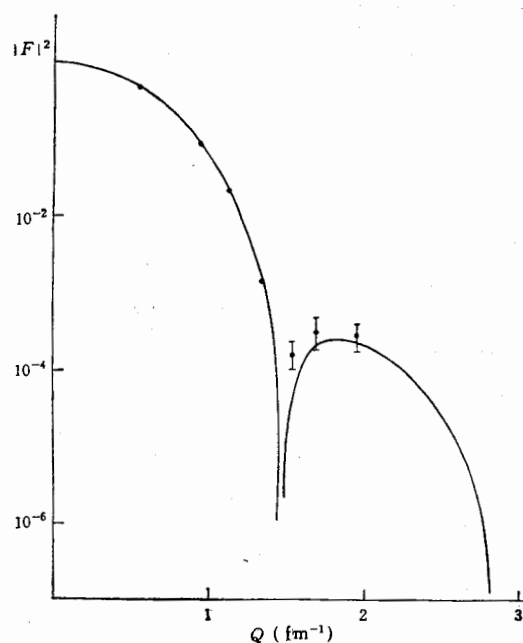


图 2

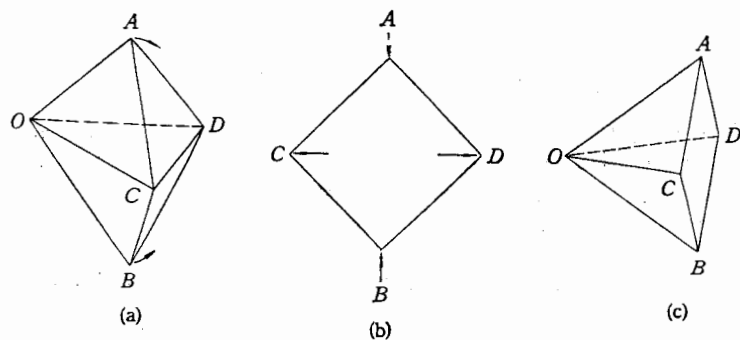


图 3

量由 $\prod_i dx_i dQ_i$ 来衡量,而不是由 $\prod_i d^3x_i$ 衡量,这是因为同样的 dx_i 当 x_i 很大时仅引起很小的变形,而当 x_i 很小时,却引起很大的变形,因而 dx_i 不宜作为形状改变变量的度量。

计算表明基态的 ρ_0 有两个峰,一个对应于正六面体(见图 3(a)),另一个为正方锥(见图 3(c) 其中 $ACBD$ 为正方形),相应的 ρ_0 的值分别为 1.27 和 1.19。这表明五体系统基态的最可几形状有两个。过去在我们关于粒子数 $N < 5$ 的系统的计算中^[1],发现基态都具有单一的几何结构。而不同几何结构共存的现象只出现于激发态。与此相反,现在的结果表明当 $N = 5$ 时,基态已经是不同几何结构的共存,其中正六面体略占优势。

为了研究内部运动形态的特征,需要研究 ρ_0 在它的峰值附近的分布,我们发现两个峰之间有一个山脊相连,沿着这个山脊运动的轨迹相当于正六面体以其一棱边为轴线的折叶运动。如图 3(a) 至 c 所示:

i) A 与 B 分别绕 CD 轴作顺时针和逆时针的转动(折叶模式, 见图 3(a));

ii) 与此同时连线 AB 略为收缩, 而 CD 略为伸长使 $ABCD$ 逐渐成为一个正方形(见图 3(b));

iii) 整个系统也随之从正六面体转变为正方锥

据此可以认为这一系统的主要运动模式是从正六面体通过折叶运动到正方锥的相互转换. 回顾以前对三体、四体系统的研究^[1], 当时发现其基态并不偏爱特定的运动模式, 能量似乎均分到各个自由度上(即所谓遵从等配分原则 equipartition principle). 与此相反, 当 $N=5$ 时, 系统的基态有明显偏爱的运动模式, 等配分原则不再成立.

一般说来, 任一系统的几何结构和内部运动形态都和总位能 $V = \sum V_{ij}$ 在相空间的拓扑结构有关, 对于一个五体系统, 只要其粒子-粒子相互作用力为有排斥心的吸引势, 则其总位能必有两个能量差别很小的极小值(分别对应于正六面体和正方锥), 这是一个共同的特征. 以上得到的定性结果是由这一基本特征决定的. 由于几种几何结构在基态的共存以及“非等配分原则”的根源是几何对称性, 可以预期对于某些 $N > 5$ 的系统也会出现这种现象.

如果把 Ne^{20} 看成是一个由五个没有结构的 α 粒子组成的系统, 这种设想未免过于简单了, 本文的用意不在于对 Ne^{20} 进行精确的计算, 只是借助于这一模型, 对量子力学五体问题进行初步的探讨. 由于所选择的相互作用的主要特征具有普遍性, 预期所得到的结论从定性上来说也有普遍性.

参 考 文 献

- [1] C. G. Bao, *Nucl. Phys.*, **A373**(1982), 1; C. G. Bao, T. K. Lim and W. Q. Chao, *Nucl. Phys.*, **A439**(1985), 456; C. G. Bao, in "Few-body Methods: Principles and Applications", World Sci. Pub. Co., 1986; C. G. Bao, G. C. Qiu, H. D. Cao, Y. P. Gan, L. X. Luo and T. K. Lim, *Few-Body Systems*, Vol. 2(1987), No. 2.
- [2] S. Ali and A. R. Bodmer, *Nucl. Phys.*, **80**(1966), 99.
- [3] W. Tobocman, *Nucl. Phys.*, **A357**(1981), 293.
- [4] Y. P. Gan, M. Z. Gong, C. E. Wu and C. G. Bao, *Computer Physics Communications* **34**(1985), 387.

SOLVING THE QUANTUM MECHANIC 5-BODY PROBLEMS

BAO CHENGGUANG

(Zhongshan University, Guangzhou)

T. K. LIM

(Drexel University, Philadelphia, U.S.A.)

ABSTRACT

A variational approach is proposed to solve the 5-body Schrödinger equation and an analysis of the ground state wave function is made to extract qualitative features of geometric structure and internal motion of that state.

成
止
弱
的
球
数

于
这
的
一