

基于 Schrödinger 方程的耦合常数解析延拓方法*

张时声¹ 孟杰^{1,2,3;1)} 郭建友^{1,4}

1 (北京大学物理学院 北京 100871)

2 (中国科学院理论物理研究所 北京 100080)

3 (兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心 兰州 730000)

4 (安徽大学物理系 合肥 230039)

摘要 基于 Schrödinger 方程, 利用耦合常数解析延拓方法研究了球对称的方势阱、Woods-Saxon 势和谐振子势中的单粒子共振态的能量与宽度. 分析了耦合常数的取值区间和 Padé 多项式阶数对计算结果的影响. 结果发现, 在适当的耦合常数取值范围内, 随着 Padé 多项式阶数的增加可以得到稳定和收敛的单粒子共振态能量与宽度.

关键词 解析延拓 耦合常数 Padé 多项式 共振态 能量和宽度 Schrödinger 方程

1 引言

近年来, 随着放射性核束实验装置和技术的发展, 大批远离 β 稳定线的新核素相继诞生. 继而促进了放射性核束物理的实验和理论研究, 使得对具有极端中子和质子数比的奇特核的研究成为国际上核物理领域的热门课题^[1-5]. 由于奇特核的费米面接近连续态的阈值, 价核子很容易被散射到连续谱的共振能级^[3,6-8]. 另外, 阈值附近能级的性质对于天体物理中低能(质心能量在 $\sim 300\text{keV}$) 散射截面比较重要, 而在实验室里还不能实现如此低的能量下的散射截面的测量, 只能靠已有的核结构信息外推得到^[9]. 因此, 关于共振态的研究无论对核物理还是天体物理都有非常重要的意义. 研究共振态的理论方法包括 FPW (Feshach-Peaslee-Wdisskopf) 理论^[10]、Wigner 的 R 矩阵理论^[11]、扩展的 R 矩阵理论^[12]、S 矩阵理论^[13]、K 矩阵理论^[14] 和复标度方法 (Complex Scaling Method)^[15]、耦合常数解析延拓 (ACCC) 方法^[16] 等. 比较而言, ACCC 方法简单直观, 对于平均场理论, 易于通过解析延拓方法研究非束缚态. ACCC 方法最初由 Kukulín 等人提出并用于研究非束缚态^[16]. 它的基本思想是: 在多体系统中, 增强

平均场的吸引势, 使非束缚态成为束缚态进行求解, 再利用能量或动量与耦合常数的解析关系, 把非束缚态问题作为束缚态的解析延拓来处理. 在非相对论框架下, Tanaka 等人将 ACCC 方法应用于轻核共振态的研究, 给出了 ^3He , ^3Li , ^6He , ^6Li 的共振态能量和宽度^[17,18]. Cattapan 等人通过求解含 Woods-Saxon 势的 Schrödinger 方程, 用 ACCC 方法研究了球形核 ^{154}Sm 和变形核 ^{131}Eu 的共振态^[19]. Aoyama 将 ACCC 方法与结团模型结合起来, 研究了 $^8\text{He} + n + n$ 共振, 预言了 ^{10}He 的非束缚态信息^[20]. 在相对论框架下, 杨泗春等人将 ACCC 方法与相对论平均场理论结合起来, 用于球形核单粒子共振态的能量与宽度的研究, 讨论了 ^{16}O 和 ^{48}Ca 的共振态^[21].

考虑到 ACCC 对于共振态研究的广泛性, 有必要对其解的稳定性和收敛性进行研究. 为此本文将基于 Schrödinger 方程, 利用 ACCC 方法研究球方势阱、Woods-Saxon 势和谐振子势下的共振态能量和宽度, 以及它们对耦合常数取值区间及 Padé 多项式阶数的依赖性等. 在第二节, 将简单介绍基于 Schrödinger 方程, 结合 ACCC 方法求解球对称势的理论公式. 随后是计算结果与讨论, 最后给出文章小结.

2003-05-20 收稿

* 国家重点基础研究发展规划项目 (G2000077407) 和自然科学基金 (10025522, 19935030, 10047001) 资助

1) E-mail: mengj@pku.edu.cn

2 理论框架

在核物理或原子分子物理中,经常需要求解粒子在中心势场中的运动方程. 质量为 m 的无自旋粒子,在中心势场 $V(r)$ 下的 l 分波径向 Schrödinger 方程可写为

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] \chi_l(k, r) = 0, \quad (1)$$

其中波数 $k = \sqrt{2m\varepsilon_l}/\hbar$, ε_l 为本征能量, $V(r) < 0$ 表示吸引势. 对于非束缚态,在 $V(r)$ 中引入势强度因子 λ (即耦合常数): $V(r) \rightarrow \lambda V(r)$. 则吸引势随 λ 增大而增强,当 λ 足够大时,非束缚态将会变为束缚态,上述方程有解. 其具体求解过程可以从标准的教科书中找到^[22].

在阈值 ($k(\lambda_0) = 0$) 附近^[16], 波数 k 可表示为 λ 的函数,近似地有

$$k(\lambda) \sim \begin{cases} i\sqrt{\lambda - \lambda_0}, & l > 0 \\ i(\lambda - \lambda_0), & l = 0. \end{cases} \quad (2)$$

其中 λ_0 是分支点. 引入第二类 Padé 逼近^[16] 实现波数 k 在复平面上的解析延拓,

$$k(x) \approx k^{[M, N]}(x) = \frac{i \frac{c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \dots + c_M x^M}{1 + d_1 x + d_2 x^2 + \dots + d_N x^N}}, \quad (3)$$

这里

$$x = \begin{cases} \sqrt{\lambda - \lambda_0}, & l > 0 \\ \lambda - \lambda_0, & l = 0. \end{cases} \quad (4)$$

其中 Padé 多项式的系数 $c_0, c_1, c_2, \dots, c_M; d_1, d_2, \dots, d_N$, 由 $M + N + 1$ 个数值对 $\{x_i, k(x_i)\}, i = 1, 2, \dots, M + N + 1$, 惟一确定. 若 $M = N$, Padé 逼近称为对角的. 若 $M \neq N$, 则 Padé 逼近称为非对角的. 在具体计算中,将采用对角的 Padé 逼近.

为了实现解析延拓,首先确定支点 λ_0 , 然后通过求解对应不同 $M + N + 1$ 个耦合常数 $\lambda_i (> \lambda_0)$ 的 Schrödinger 方程,得到 $M + N + 1$ 个波数值 $k(\lambda_i)$. 再构造 $M + N + 1$ 维线性方程组,解出 Padé 多项式的系数 ($c_0, c_1, c_2, \dots, c_M; d_1, d_2, \dots, d_N$). 这样就可以给出波数与耦合常数的函数关系 $k(\lambda)$. 而 $\lambda = 1$ 时的复波数即为所求的共振态的波数,再利用关系

$$\frac{\hbar^2 k^2(\lambda = 1)}{2m} = E - i \frac{\Gamma}{2}, \quad (E, \Gamma \in \mathbb{R}), \quad (5)$$

得到共振态的能量 E 和宽度 Γ

3 结果讨论

对给定势场求解径向 Schrödinger 方程(1)时,可以根据波函数边界条件及其微商连续条件和全空间归一化条件,采用通常求解微分方程的 Runge-Kutta 算法,在盒子大小为 20fm,步长为 0.05fm 的坐标空间进行求解,从而得到粒子的本征能量及波函数.

原则上, $M + N + 1$ 个耦合常数 λ 可以取大于支点 λ_0 的任意值. 计算中,取定某个耦合常数区间 $[\lambda_a, \lambda_b]$, 然后通过 $M + N$ 等分区间 $[x(\lambda_a), x(\lambda_b)]$ 得到 $M + N + 1$ 个耦合常数,求解径向 Schrödinger 方程(1)得到 $\{x_i, k(x_i)\}, i = 1, 2, \dots, M + N + 1$, 将其代入方程(3)解线性方程组确定 Padé 多项式的系数,从而可以得到共振能量和宽度. 考虑到从束缚态解析延拓到非束缚态要穿过分支点 λ_0 , 区间的左端点 λ_a 通常取在 λ_0 附近. 通过改变 λ_b 考察复波数对 λ_b 的依赖性. 如果随着 λ_b 增大,共振态的能量和宽度没有变化,则认为耦合常数在区间 $[\lambda_0, \lambda_b]$ 内取值得到的结果是稳定的.

另外,在数学上 Padé 序列的收敛性定义如下,如果在某区域内有

$$f(z) = \lim_{\substack{M, N \rightarrow \infty \\ M/N \rightarrow \alpha}} f^{[M, N]}(z) \quad (6)$$

则称 $f^{[M, N]}(z)$ 在该区域收敛于函数 $f(z)$. 在这里,若共振态的能量和宽度随着阶数的增加而趋于定值,则认为满足收敛性.

下面将用基于 Schrödinger 方程的 ACCC 方法分别计算球方势阱、Woods-Saxon 势和谐振子势中运动的单粒子共振态的能量与宽度.

(a) 球方势阱:

$$V = \begin{cases} V_0, & r \leq 3.3\text{fm}, \\ 0, & r > 3.3\text{fm}, \end{cases} \quad (7)$$

其中 $V_0 = -60\text{MeV}$. 图 1(a) 给出了方势阱中求解 Schrödinger 方程得到的束缚态以及结合 ACCC 方法得到的共振态 1f 能级;图中还给出了相应的方势阱和离心位垒之和. 横坐标表示径向坐标 r , 纵坐标为能量. (b) 给出了对角 Padé 逼近序列的阶数分别取 3 阶、4 阶、5 阶和 6 阶时,共振态 1f 能级的能量和宽度随耦合常数取值区间右端点 λ_b 的变化. 其中,分支点 $\lambda_0 = 1.0701137$. 纵坐标的左侧表示共振态能量 E , 右侧为其宽度 Γ , 均以 MeV 为单位. 可以看到

Padé 多项式阶数从 3 阶取到 6 阶,共振态 1*f* 能级的能量随 λ_b 增大基本没有变化,在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.1, 1.8]$ 范围,能量的稳定性和收敛性都很好,约为 3.5MeV. 宽度在 Padé 多项式阶数取 3 阶时,在耦合常数取值区间右端点增加到 1.0 后有上升趋势;4 阶时上升的趋势减弱;6 阶时宽度值在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.6, 1.6]$ 的大范围内比较稳定,约为 0.13MeV. 而且当阶数由 3 阶增加到 6 阶时,收敛性得到满足. 需要指出的是耦合常数右端点 λ_b 如果离支点 λ_0 太近,宽度也不稳定. 在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.6, 1.6]$ 的区间内,取 6 阶 Padé 多项式得到的共振态 1*f* 能级在方势阱中的位置如图 1(a)所示.

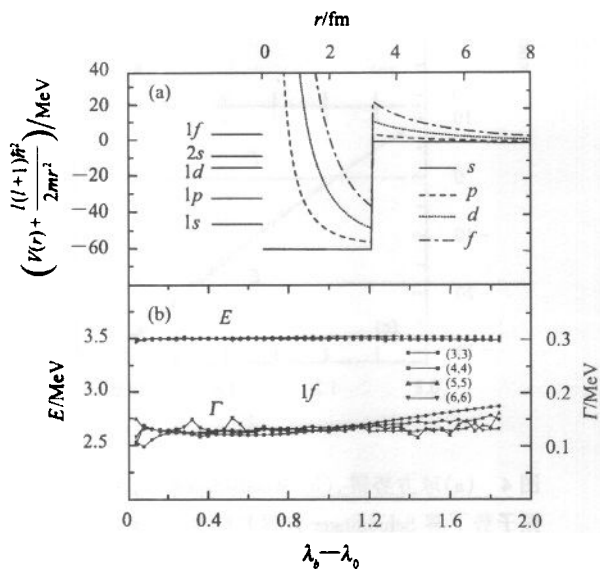


图 1 (a)方势阱中求解 Schrödinger 方程得到的束缚态以及结合 ACCC 方法得到的共振态 1*f* 能级;(b)对角 Padé 逼近序列的阶数分别取 3 阶(实心圈)、4 阶(方块)、5 阶(上三角)、6 阶(下三角)时,1*f* 能级的能量和宽度随耦合常数取值区间右端点 λ_b 的变化

(b) Woods-Saxon 势:

$$V = \frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}}, \quad (8)$$

其中 $V_0 = -65\text{MeV}$, $R = 3.09\text{fm}$, $a = 0.6\text{fm}$. 图 2(a) 给出了 Woods-Saxon 势中求解 Schrödinger 方程得到的束缚态以及结合 ACCC 方法得到的共振态 1*f* 能级;图中还给出了相应的 Woods-Saxon 势和离心位垒之和. (b)给出了对角 Padé 逼近序列的阶数分别取 3 阶、4 阶、5 阶、6 阶时,1*f* 能级的能量和宽度随耦合常数取值区间右端点 λ_b 的变化. 其中,分支点 $\lambda_0 = 1.2465849$. 可以看到 Padé 多项式阶数从 3 阶取到 6 阶,共振态 1*f* 能级的能量随 λ_b 增大基本没有变化,

在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.1, 1.8]$ 范围,能量的稳定性和收敛性都很好,约为 5.8MeV. 宽度在 Padé 多项式阶数取 3 阶时,随耦合常数区间增大略有降低;4 阶、5 阶和 6 阶的宽度结果相近,在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.3, 1.6]$ 的大范围内比较稳定,约为 1.3MeV. 而且当阶数由 3 阶增加到 6 阶时,收敛性得到满足. 在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.3, 1.6]$ 区间内,取 6 阶 Padé 多项式得到的共振态 1*f* 能级在 Woods-Saxon 势中的位置如图 2(a)所示.

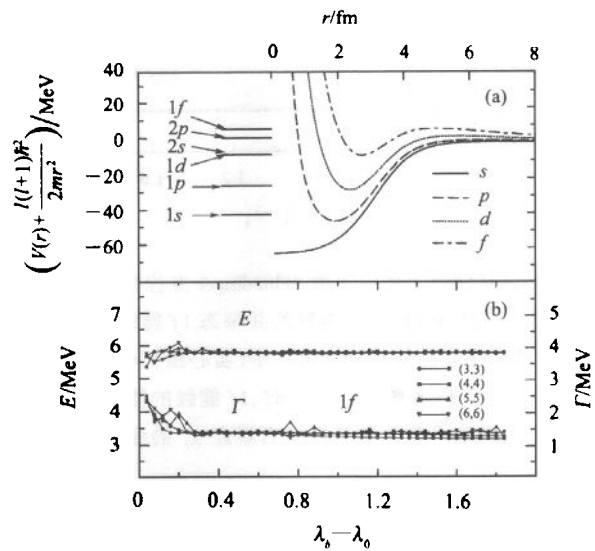


图 2 (a)Woods-Saxon 势中求解 Schrödinger 方程得到的束缚态以及结合 ACCC 方法得到的共振态 1*f* 能级;(b)对角 Padé 逼近序列的阶数分别取 3 阶(实心圈)、4 阶(方块)、5 阶(上三角)、6 阶(下三角)时,1*f* 能级的能量和宽度随耦合常数取值区间右端点 λ_b 的变化

(c) 谐振子势:

$$V = V_0 + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2, \quad (9)$$

其中 $V_0 = -60\text{MeV}$, $\frac{1}{2} m\omega^2 = 2.5\text{MeV/fm}^2$. 图 3 中 (a)给出了谐振子势中求解 Schrödinger 方程得到的束缚态以及结合 ACCC 方法得到的共振态 1*f* 能级;图中还给出了相应的谐振子势和离心位垒之和. (b)给出了对角 Padé 逼近序列的阶数分别取 3 阶、4 阶、5 阶、6 阶时,1*f* 能级的能量和宽度随耦合常数取值区间右端点 λ_b 的变化. 其中,分支点 $\lambda_0 = 1.1662868$. 可以看到,在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.1, 1.8]$ 范围,正能量态 1*f* 能级的能量稳定性和收敛性都很好,约为 4.8MeV. 相应的宽度为零.这是符合谐振子势下所有结果是束缚态这一事实的.在 $\lambda_b - \lambda_0 \in [0.1, 1.6]$ 区间内,取 6 阶 Padé 多项式得到的共振态 1*f* 能级在谐振子势中的位置如图 3(a)所示.

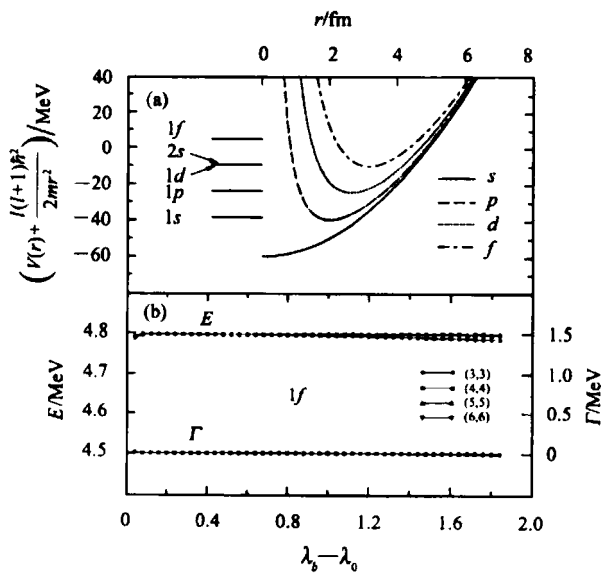


图 3 (a) 谐振子势中求解 Schrödinger 方程得到的束缚态以及结合 ACCC 方法得到的共振态 1f 能级; (b) 对角 Padé 逼近序列的阶数分别取 3 阶(实心圆)、4 阶(方块)、5 阶(上三角)、6 阶(下三角)时, 1f 能级的能量和宽度随耦合常数取值区间右端点 λ_0 的变化

总体上看, 固定 Padé 多项式的阶数, 增大 λ_0 , 总存在使共振态能量和宽度相对稳定的耦合常数取值区间. 高阶 Padé 近似的稳定区间范围比低阶大些, 且随着 Padé 多项式阶数的增加满足收敛性. 对于本文采用的势, 6 阶 Padé 逼近的结果既满足稳定性又满足收敛性.

取定耦合常数的取值区间, 并用 6 阶 Padé 多项式进行解析延拓, 得到能量和宽度随耦合常数变化的曲线 $E(\lambda)$ 和 $\Gamma(\lambda)$. 如上所述, 我们最关心的是 $\lambda = 1$ 时所对应的共振态的能量和宽度. 而且解析延拓得到的 $E(\lambda)$ 在 $\lambda > \lambda_0$ 时还可以与解 Schrödinger 方程得到的单粒子束缚态能量 $\epsilon(\lambda)$ 比较, 检验解析延拓结果的可靠性. 球方势阱、Woods-Saxon 势、谐振子势下解 Schrödinger 方程并结合 ACCC 方法得到 1f 能级的能量和宽度随耦合常数 λ 变化的曲线, 分别如图 4(a), (b), (c) 所示. E 和 Γ 分别是解析延拓得到的能量和宽度. $\epsilon(\lambda) = 0$ 对应的耦合常数为分支点. 显然实心圆圈点在实线上, 因为实线是通过实心圆圈点解析延拓得到的. 而且用解析势求解 Schrödinger 方程得到的解和 Padé 多项式计算的结果十分吻合, 偏差在 $10^{-5} - 10^{-6}$ 左

右. 这在一定程度上表明进行解析延拓数值计算的可靠性.

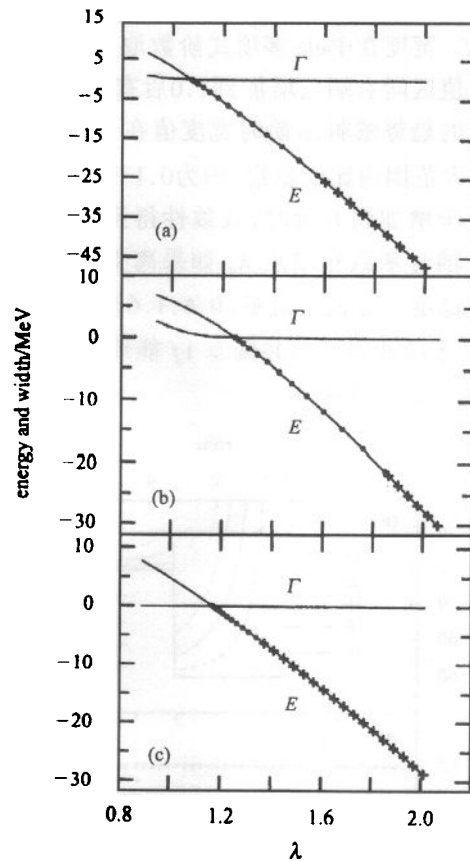


图 4 (a) 球方势阱, (b) Woods-Saxon 势, (c) 谐振子势下解 Schrödinger 方程并结合 ACCC 方法得到 1f 能级的能量和宽度随耦合常数 λ 变化的曲线
 • : 用于解析延拓的输入量, × : $\lambda > \lambda_0$ 时相应 Schrödinger 方程束缚态的数值解, — Padé 逼近的输出结果.

4 小结

基于 Schrödinger 方程, 结合耦合常数解析延拓方法研究了球对称的方势阱、Woods-Saxon 势和谐振子势中运动的单粒子共振态的能量与宽度, 并讨论了它们随耦合常数取值区间以及 Padé 多项式阶数增加的变化情况. 结果表明, 对于球对称势下的 Schrödinger 方程, 总存在合理的耦合常数取值范围使计算结果满足稳定性和 Padé 逼近序列的收敛性.

参考文献 (References)

- 1 Tanihata I. Prog. Part. and Nucl. Phys., 1995, **35**:505
- 2 Müller A C. Prog. Part. and Nucl. Phys., 2001, **46**:359
- 3 MENG J. Nucl. Phys., 1998, **A635**:3
- 4 YANG Si-Chun, MENG Jie. Nucl. Phys. Rev., 1999, **16**:187 (in Chinese)
(杨泗春, 孟杰. 原子核物理评论, 1999, **16**:187)
- 5 CAI Xiang-Zhou, SHEN Wen-Qing. Prog. Phys., 2001, **21**:373 (in Chinese)
(蔡翔舟, 沈文庆. 物理学进展, 2001, **21**:373)
- 6 MENG J, Ring P. Phys. Rev. Lett., 1996, **77**:3963
- 7 MENG J, Ring P. Phys. Rev. Lett., 1998, **80**:460; MENG J, Toki H, ZENG J Y et al. Phys. Rev., 2002, **C65**(4):R041302
- 8 LU H F, MENG J, ZHANG S Q. HEP & NP, 2003, **27**(5): 324 (in Chinese)
(吕洪凤, 孟杰, 张双全. 高能物理与核物理, 2003, **27**(5):324)
- 9 Azuma R F, Buchmann I, Barker F C et al. Phys. Rev., 1994, **C50**:1194
- 10 Feshbach H, Peaslee D C, Weisskopf V. Phys. Rev., 1947, **71**:145
- 11 Wigner E, Eisenbud L. Phys. Rev., 1974, **72**:29
- 12 Hale G M, Brown R E, Jarmie N. Phys. Rev. Lett., 1987, **59**:763
- 13 Taylor J R. Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions. New York: John Wiley & Sons, 1972. 240
- 14 Humblet J, Filippone B W, Koonin S E. Phys. Rev., 1991, **C44**:2530
- 15 Ho Y K. Phys. Rep., 1983, **99**:1
- 16 Kukulin V I, Krasnopl'sky V M, Horáček J. Theory of Resonances: Principles and Applications. Dordrecht: Kluwer Academic, 1989. 219
- 17 Tanaka N, Suzuki Y, Varga K. Phys. Rev., 1997, **C56**:562
- 18 Tanaka N, Suzuki Y, Varga K et al. Phys. Rev., 1999, **C59**:1391
- 19 Cattapan G, Maglione E. Phys. Rev., 2000, **C61**:067301
- 20 Aoyama S. Phys. Rev. Lett., 2002, **89**:052501
- 21 YANG S C, MENG J, ZHOU S G. Chin. Phys. Lett., 2001, **18**:196
- 22 ZENG Jin-Yan. Quantum Mechanics. (Third Edition) Beijing: Science Publishing House, 2000. 77 (in Chinese)
(曾谨言. 量子力学. 第三版. 北京: 科学出版社, 2000. 77)

Method of the Analytical Continuation of the Coupling Constant in Schrödinger Equations

ZHANG Shi-Sheng¹ MENG Jie^{1,2,3,1)} GUO Jian-You^{1,4}

1 (School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China)

2 (Institute of Theoretical Physics, CAS, Beijing 100080, China)

3 (Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator, Lanzhou 730000, China)

4 (Department of Physics, Anhui University, Hefei 230039, China)

Abstract Based on Schrödinger equation, the method of analytical continuation in the coupling constant (ACCC) is employed to investigate the energy and width of single-particle resonance in spherically symmetric square well, harmonic oscillator potential and Woods-Saxon potential. The influences of the interval for the coupling constant values and the order of Padé polynomial are analyzed. It has been shown that, by properly chosen interval for the coupling constant values and the order of Padé polynomial, stable and convergent energy and width of single-particle resonance can be obtained.

Key words analytical continuation, coupling constant, Padé polynomial, resonance, energy and width, Schrödinger equation

Received 20 May 2003

* Supported by Major State Basic Research Development Program (G2000077407) and the National Natural Science Foundation of China (10025522, 19935030, 10047001)

1) E-mail: mengj@pku.edu.cn