THO basis 对弱束缚系统的应用

薄纪铮

2023.3.14

- 假设一个弱束缚两体系统的 Hamiltonian

$$h = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + v(r)$$

- 其中 r 是两个粒子的相对坐标，μ 是约化质量，$v(r)$ 是相互作用
- 做无量纲化 $x = \frac{\sqrt{\mu}}{\hbar} r$ 后，Hamiltonian 写作

$$h = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + v(x)$$

- 然后假设系统只有一个束缚态，也就是基态，并写出其对应的 $Schrödinger$ 方程

$$h\psi_B(x) = e_B\psi_B(x)$$

- 考虑一维 HO basis

$$\phi_n^{HO}(s) = \mathcal{N}_n H_n(s) exp(-s^2/2)$$

- 然后开始考虑 THO 的变换，这里先考虑一个任意的坐标变换，由单调递增的函数 $x = x(s)$ 以及它的反函数（逆）$s = s(x)$
  于是有 THO basis 的初始形式

$$\varphi_n^{THO}(x) = \sqrt{\frac{ds}{dx}}\phi_n^{HO}[s(x)]$$

- 逻辑是：先知道了基态波函数（它是一个束缚态），然后让它等于基态（$n = 0$ 的）THO basis，就有了具体的 $x = x(s)$ 的变换，然后就有了所有具体的 THO basis。

- 已经知道了态 $\phi_0^{THO}(x) = \psi_B(x)$ 是 h 的本征态，但是这是 $n = 0$ 的情况，要知道 $n \geq 1$ 的情况，可以考虑以下矩阵元：

$$
\begin{aligned}
&\langle THO, n| (h - e_B) |THO, m\rangle \\
&= \int dx \varphi_n^{THO}(x)(h - e_B)\varphi_m^{THO}(x)
\end{aligned}
$$

- 又考虑到 $\varphi_m^{THO}(x) = \pi^{1/4}\mathcal{N}_m H_m[s(x)]\varphi_0^{THO}(x)$ 以及 $(h - e_B)\varphi_0^{THO}(x) = 0$

- 所以能把上面的矩阵元形式改写成：

$$
\begin{aligned}
&\langle THO,n|\,(h-e_B)\,|THO,m\rangle \\
&=\frac{\sqrt{\pi}\mathcal{N}_n\mathcal{N}_m}{2}\int dx\varphi_0^{THO}(x)[H_n[s(x)],[(h-e_B),H_m[s(x)]]]\varphi_0^{THO}(x)
\end{aligned}
$$

- 下面对上式进行证明

- 我们将上式（积分）展开（先不计入前面的系数）

$$
\begin{aligned}
&\langle THO,0|\,[H_n[s(x)],[(h-e_B),H_m[s(x)]]]\,|THO,0\rangle \\
&=\langle THO,0|\,\{H_n(s)[(h-e_B),H_m(s)]-[(h-e_B),H_m(s)]H_n(s)\}\,|THO,0\rangle \\
&=\langle THO,0|\,\{H_n(s)((h-e_B)H_m(s)-H_m(s)(h-e_B))-((h-e_B)H_m(s)-H_m(s)(h-e_B)) \\
&H_n(s)\}\,|THO,0\rangle
\end{aligned}
$$

- 然后使用 $(h-e_B)\,|THO,0\rangle=0$ 将上式约化

- 得到

$$\langle THO,0|\left\{H_n(s)(h-e_B)H_m(s)+H_m(s)(h-e_B)H_n(s)\right\}|THO,0\rangle$$

- 如果给该式前面乘一个系数 $\sqrt{\pi}\mathcal{N}_n\mathcal{N}_m$，就有：

$$\sqrt{\pi}\mathcal{N}_n\mathcal{N}_m\langle THO,0|\left\{H_n(s)(h-e_B)H_m(s)+H_m(s)(h-e_B)H_n(s)\right\}|THO,0\rangle$$
$$=(h-e_B)_{nm}+(h-e_B)_{mn}=2(h-e_B)_{mn}$$

- 对上式除以 2 即可

- 此外，为了简化计算，可以推导出这个双对易关系具体为：

$$[H_n[s(x)],[(h-e_B),H_m[s(x)]]]=\frac{dH_n[s(x)]}{dx}\frac{dH_m[s(x)]}{dx}$$

- 下面对它进行证明

- 我们先化简这个对易式

$$
\begin{aligned}
&[H_n[s(x)],[(h-e_B),H_m[s(x)]]] \\
&=[H_n(s),[(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+v(x)-e_B),H_m(s)]] \\
&=\frac{1}{2}[H_n(s),[H_m(s),\frac{d^2}{dx^2}]]
\end{aligned}
$$

- 然后再将其作用在一个任意依赖于 x 的标量函数 $\varphi(x)$，也就是 φ 上面，从而有如下过程：

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2}[H_n(s),[H_m(s),\frac{d^2}{dx^2}]]\varphi \\
&=\frac{1}{2}[H_n(s)(H_m(s)\frac{d^2}{dx^2}-\frac{d^2}{dx^2}H_m(s))-(H_m(s)\frac{d^2}{dx^2}-\frac{d^2}{dx^2}H_m(s))H_n(s)]\varphi \\
&=\frac{1}{2}\{H_n(s)H_m(s)\frac{d^2}{dx^2}-H_n(s)\frac{d^2}{dx^2}H_m(s)-H_m(s)\frac{d^2}{dx^2}H_n(s)+\frac{d^2}{dx^2}H_m(s)H_n(s)\}\varphi
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\{H_n(s)H_m(s)\frac{d^2}{dx^2}\varphi - H_n(s)(\varphi\frac{d^2}{dx^2}H_m(s) + 2\frac{dH_m(s)}{dx}\frac{d\varphi}{dx} + H_m(s)\frac{d^2\varphi}{dx^2}) \\
&- H_m(s)(\varphi\frac{d^2}{dx^2}H_n(s) + 2\frac{dH_n(s)}{dx}\frac{d\varphi}{dx} + H_n(s)\frac{d^2\varphi}{dx^2}) \\
&+ H_n(s)\varphi\frac{d^2}{dx^2}H_m(s) + H_m(s)\varphi\frac{d^2}{dx^2}H_n(s) + H_m(s)H_n(s)\frac{d^2\varphi}{dx^2} \\
&+ 2(\frac{dH_m(s)}{dx}\frac{dH_n(s)}{dx}\varphi + \frac{dH_m(s)}{dx}\frac{d\varphi}{dx}H_n(s) + \frac{dH_n(s)}{dx}\frac{d\varphi}{dx}H_m(s)\} \\
&= \frac{dH_m(s)}{dx}\frac{dH_n(s)}{dx}\varphi
\end{aligned}
$$

- 从而证明了对易关系

- 通过查询 HO basis 的波函数表，找到 HO basis 的基态 (且是 bound state) 波函数

$$\varphi_0^{THO}(x) = \psi_B(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} exp(-\frac{1}{2}x^2)$$

- 并利用 hermitian 多项式的递推公式 $H_n'(z) = 2nH_{n-1}(z)$ 得到

$$\begin{aligned}&\langle THO, n| (h - e_B) |THO, m\rangle \\ &= 2n\mathcal{N}_n m\mathcal{N}_m \int ds exp(-s^2) H_{n-1}(s) H_{m-1}(s) \left(\frac{ds}{dx}\right)^2\end{aligned}$$

- 该式只依赖于 $x(s)$ 的导数这样一个信息

- 因为 THO basis 并不是 Hamiltonian 的本征态，所以利用 THO basis 的（有限截断）完备性来生成 Hamiltonian 的本征态
- 首先是基态

$$|N,0\rangle = |THO,0\rangle$$

- 然后是 $n \geq 1$ 的态

$$|N,i\rangle = \sum_{j=1}^{N-1} |THO,j\rangle\langle THO,j|N,i\rangle$$

- 将 $|N,i\rangle$ 在位置表象下写出

$$\langle x|N,i\rangle = \psi_i^N(x) = \pi^{1/4} P_i^{N-1}[s(x)]\varphi_0^{THO}(x)$$

- 其中 P_i^{N-1} 是一个多项式，它的具体形式为

$$P_i^{N-1}(s) = \sum_{j=1}^{N-1} \mathcal{N}_j H_j(s) \langle THO, j|N,i\rangle$$

- 上面式子的证明只需要用到 THO basis 的定义式

$$\varphi_n^{THO}(x) = \sqrt{\frac{ds}{dx}}\phi_n^{HO}[s(x)]$$

- 以及 THO basis 里面基态和 continum states 之间的类似递推的关系

$$\varphi_m^{THO}(x) = \pi^{1/4}\mathcal{N}_m H_m[s(x)]\varphi_0^{THO}(x)$$

- 具体写出

$$\langle x|N,i\rangle = \sum_{j=1}^{N-1}\langle x|THO,j\rangle\langle THO,j|N,i\rangle$$

$$= \sum_{j=1}^{N-1}\pi^{1/4}\mathcal{N}_j H_j[s(x)]\varphi_0^{THO}(x)\langle THO,j|N,i\rangle$$

即可

Thank you!