笔记

马泽天

2023 年 4 月 11 日

1 整体思路

希望计算什么：

在滴线附近的核子处于弱束缚态或非束缚态，受到正能量态的影响，可以用散射态来描述。因此我们希望计算此时的本征值和本征态。

如何计算：

方法 1：选择合适的边界条件，直接对薛定谔方程积分。

方法 2：用一套平方可积函数作为基，对角化哈密顿矩阵。由于计算时基的截断会导致误差，此时本征态和本征值被称为伪态（PS）。

文章使用方法 2。首先需要找到一套波函数作为基。文中使用 transformed harmonic oscillator (THO) 。它由 harmonic oscillator (HO) 进行 local scale transformation (LST) 得到。

算法：stabilization method。

找到对基的大小或其它超参不敏感的本征值。（而且需要是最 localized 波函数，为什么）

如何验证其结果的正确性？

1. 与方法 1（直接薛定谔方程计算）做比较；

2. 与氘核和晕核反应实验做比较，与 standard binning method 符合地很好。

3.The dipole and quadrupole electric transition probabilities

2 THO 基和哈密顿量的矩阵形式（以一个一维体系为例）

考虑一维，且势能只是 x 的函数时的情况。

求解步骤如下：

1. 获取 THO 基的具体表达式： 有两种方法。

数值法： 需要已知基态波函数。令 0 阶的 HO 基通过一伸缩变换得到 $\phi_0^{THO}(x)$，使之与基态波函数相等；并将同样的伸缩变换运用到所有 HO 基上得到一整套 THO 基。

解析法： 选一个带参函数用于伸缩变换。参数可能直接选取，通过一些模型获取，或者变分法得到基态能量最小时的参数。

2. 写出哈密顿算符的形式；计算 THO 基下哈密顿量的矩阵元。

3. 对角化矩阵计算本征值和本征态。

4. 计算态密度。计算一些宏观量来验证算法的收敛性。

2.1 从 HO 到 THO

一维 HO 基为：

$$\phi_n^{HO}(s) = \mathcal{N}_n H_n(s) e^{-s^2/2}, \tag{1}$$

其中 H_n 为厄米特多项式，$\mathcal{N}_n = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2}$。由于它不能很好地描述波函数的渐进行为，我们希望以它为基础构造新的一组基：

$$\varphi_n^{THO}(x) = \sqrt{\frac{ds}{dx}} \phi_n^{HO}[s(x)] \tag{2}$$

它是正交归一并且完备的。$s(x)$ 其实就是表征两组基之间伸缩变换的一个函数。$s(x)$ 可以任意选择，使得新得到的函数 $\phi_n^{THO}(x)$ 满足我们想要的特征。现在问题的关键是获取 $s(x)$。

$s(x)$ 的获取有两种方法。

1. 直接使用带参函数（解析法）。

$s(x)$ 变换需要满足两个条件：

1）在 x 较小的范围内，尽量进行线性变换，和原来的基一致。

2)在 x 较大时,需要满足波函数的渐进行为。s 较大时 HO 基按 $e^{-s^2/2}$ 衰减；而实际上波函数应该按 e^{-qx} 衰减。因此在 s 较大时应满足 $s(x) \sim \gamma\sqrt{x}$。

可以构造函数满足以上两个条件：

$$s(x)=\frac{1}{\sqrt{2}b}\left[\frac{1}{\left(\frac{1}{x}\right)^{m}+\left(\frac{1}{\gamma\sqrt{x}}\right)^{m}}\right]^{\frac{1}{m}}, \tag{3}$$

这个函数中含三个参数：b（代表 oscillator length，在最原始的文献中用壳模型获取），γ 和 m。确定参数的方法如下：

- $s(x)$ 的渐进行为是 $s(x)\sim\frac{\gamma}{b}\sqrt{\frac{x}{2}}$。可以定义一个等效动量 $k_{\mathrm{eff}}=\gamma^2/2b^2$，它代表了使用 THO 基能够获得的最大动量。与之对应一个最大能量 $\varepsilon_{\max}$，k_{eff} 应该在 $\sqrt{2\mu\varepsilon_{\max}}/\hbar$ 的量级上。由此可以确定 γ/b。
- 确定 b：用变分法。找到使得基态波函数能量最小时的 b。
- m 对结果影响很小，取 4 或 8。

至此三个参数都被确定，得到 $s(x)$ 的表达式。

2. 由基态波函数得到（数值法）。

已知基态波函数。我们令

$$\varphi_0^{THO}(x)=\psi_B(x), \tag{4}$$

对其积分可以得到

$$\int_{-\infty}^{x}\left|\psi_B\left(x'\right)\right|^2dx'=\int_{-\infty}^{s}\left|\phi_0^{HO}\left(s'\right)\right|^2ds'=\frac{1+\operatorname{erf}(s)}{2}, \tag{5}$$

它可以确定 $s(x)$。得到 $s(x)$ 后则完全确定了 THO 的表达式。

2.2 THO 基下哈密顿量的矩阵元

接下来计算 THO 基下哈密顿量的矩阵元的表达式。 需要知道哈密顿算符的形式。

一维体系的哈密顿量为：

$$h=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+v(x) \tag{6}$$

假设系统只有一个束缚态 ψ_B，其能量为 e_B。本征方程为：

$$h\psi_B(x)=e_B\psi_B(x) \tag{7}$$

准确地说，下面计算的是 $h-e_B$ 的矩阵元，因此最后还需要 e_B 才能得到最终哈密顿量的矩阵元。如果之前 $s(x)$ 是用数值法求的，那么 e_B 容易得到，因为数值法需要已知 ψ_B。

$h-e_B$ 的矩阵元的表达式为：

$$\begin{aligned}&\langle \mathrm{THO}, n\left|(h-e_B)\right| \mathrm{THO}, m\rangle \\ &=\int dx \varphi_n^{THO}(x)\left(h-e_B\right) \varphi_m^{THO}(x).\end{aligned} \tag{8}$$

由 $\varphi_m^{THO}(x)=\pi^{1/4}\mathcal{N}_m H_m[s(x)]\varphi_0^{THO}(x)$，$\left(h-e_B\right)\varphi_0^{THO}(x)=0$ ，和 $h=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+v(x)$，可以推导出：

$$\begin{aligned}&\langle \mathrm{THO}, n\left|(h-e_B)\right| \mathrm{THO}, m\rangle \\ &=2n\mathcal{N}_n m\mathcal{N}_m\int ds \exp\left(-s^2\right) H_{n-1}(s)H_{m-1}(s)\left(\frac{ds}{dx}\right)^2\end{aligned} \tag{9}$$

它容易通过数值积分得到。

2.3 哈密顿矩阵的本征值和本征态

对角化得到本征值和本征态，得到态的数量等于 N。

将 THO 基截断到第 N 个，此时求出的第 i 个本征态记为 $|N,i\rangle$

2.4 一个表征计算误差的方法

由于我们使用的 THO 基为有限维，因此它并不是完备的，用它计算出的本征态和本征值不是准确值。在精确情况下，$(h-e_B)^2$ 在基 $|N,i\rangle$ 下的矩阵元在对角线上应为 $\left(E_i^N-e_B\right)^2$。因此描述误差大小的一个表达式为：

$$\Gamma_i^N=\sqrt{\left\langle N,i\left|(h-e_B)^2\right|N,i\right\rangle-\left(E_i^N-e_B\right)^2} \tag{10}$$

2.5 算符的矩阵元

设算符 $O(x)$ 只和坐标 x 有关。计算可得联系 $|N,0\rangle$ 和 $|N,i\rangle$ 的矩阵元为：

$$\langle N,i|O|N,0\rangle=\pi^{1/4}\int dx P_i^{N-1}[s(x)]O(x)\left|\varphi_0^{THO}(x)\right|^2. \tag{11}$$

由此可以定义三个宏观量：

1. 总强度（Total strength）

$$\mathcal{S}_T(O;N) = \sum_i |\langle N,i|O|N,0\rangle|^2 \tag{12}$$

N 趋于无穷时，有

$$\mathcal{S}_T(O) = \int dx O(x)^2 \psi_B(x)^2. \tag{13}$$

2.Energy weighted sum rule

$$\mathcal{E}_W(O;N) = \sum_i \left(e_i^N - e_B\right) |\langle N,i|O|N,0\rangle|^2 \tag{14}$$

N 趋于无穷时，有

$$\mathcal{E}_W(O) = \frac{1}{2}\int dx [dO(x)/dx]^2 \psi_B(x)^2. \tag{15}$$

3.Polarizability

$$\mathcal{P}(O;N) = \sum_{i\neq 0} \left(e_i^N - e_B\right)^{-1} |\langle N,i|O|N,0\rangle|^2. \tag{16}$$

这三个量随着 N 的增大应收敛，可用于验证算法正确性。

2.6 一些问题

（连续谱的本征态是什么？）根据 stabilization method，可以得到共振态。

以上计算的矩阵元是 $h - e_B$ 的，因此得到哈密顿矩阵需要得到 e_B。对于数值法容易得到，因为基态波函数是已知量。但对于解析法，基态波函数是未知的。(虽然在一篇文献中提到在这种方法中基态波函数和 $\phi_0^{THO}(x)$ 是非常接近的)。

此外哈密顿算符的形式可能也会更加复杂。

因此是否要自己推导新的 h 的矩阵元？能否得到解析式？

3 Fortran 编程

3.1 基本结构

- 声明 program

- 变量声明
- 内容
- end

3.2 outputting data

3.3 functions

4 HO 基求解 np 束缚态

4.1 HO 基下的矩阵元

$$H(i,j)=\int \mathrm{d}r\psi_i(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2r}+V(r))\psi_j \tag{17}$$

计算矩阵元：

1. 计算 ψ^{HO}

2. 计算数组在积分格点上的值，即 ψ，$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2r}\psi$，$V(r)$。储存到二维数组里。

3. 积分

需要讨论 ψ 和 V 的取点。积分使用高斯-勒让德积分，取点较少且不均匀。但表达式中含有对 ψ 的求导，需要大量均匀取点。两种格点一般不重合，因此需要对求出的导数线性插值，以计算出积分格点上的导数。因此 ψ 需要获取在均匀格点上的值，v 可以直接获取在积分格点上的值。

4.2

$\left\langle\psi_i|\hat{H}|\psi_j\right\rangle=\left\langle\psi_j|\hat{H}|\psi_i\right\rangle^*$, if $\hat{H}$ is Hermitian.

但 $\int_0^{+\infty}dr\psi_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)\right)\psi_j$ 不一定等于 $\int_0^{+\infty}dr\psi_j\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)\right)\psi_i$

因为 $\int_0^{+\infty}dr\psi_iV(r)\psi_j=\int_0^{+\infty}dr\psi_jV(r)\psi_i$

而

$$\begin{aligned}\int_0^{+\infty}\psi_i\frac{d^2\psi_j}{dr^2}&=\psi_i\frac{d\psi_j}{dr}\bigg|_0^{+\infty}-\int_0^{+\infty}\frac{d\psi_i}{dr}\frac{d\psi_j}{dr}dr\\\int_0^{+\infty}\psi_j\frac{d^2\psi_i}{dr^2}&=\psi_j\frac{d\psi_i}{dr}\bigg|_0^{+\infty}-\int_0^{+\infty}\frac{d\psi_j}{dr}\frac{d\psi_i}{dr}dr\end{aligned}$$

$\psi_i\frac{d\psi_j}{dr}=0$ 而 $\psi_j\frac{d\psi_i}{dr}\neq 0$。

ψ_i 是奇函数，ψ_j 是偶函数时，$\psi_i \frac{\mathrm{d}\psi_j}{\mathrm{d}r} = 0$，而 $\psi_j \frac{\mathrm{d}\psi_i}{\mathrm{d}r}$ 不为 0。

4.3

三维均向谐振子的势为

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

其中，ω 是角频率。用阶梯算符的方法，可以证明 N 维谐振子的能量是

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{N}{2}\right) \quad \text{with} \quad n = 0, 1, \ldots, \infty,$$

所以，三维均向谐振子的径向薛定谔方程式是

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 - \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right)\right] u(r) = 0$$

设定常数 γ ，

$$\gamma \equiv \frac{\mu\omega}{\hbar}$$

回想 $u(r) = rR(r)$ ，则径向薛定谔方程式有一个归一化的解答:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} r^l e^{-\frac{1}{2}\gamma r^2} L_{\frac{1}{2}(n-l)}^{\left(l+\frac{1}{2}\right)}\left(\gamma r^2\right)$$

其中，函数 $L_k^{(\alpha)}(\gamma r^2)$ 是广义拉盖尔多项式，N_{nl} 是归一化常数:

$$N_{nl} = \left[\frac{2^{n+l+2}\gamma^{l+\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\left[\frac{1}{2}(n-l)\right]! \left[\frac{1}{2}(n+l)\right]!}{(n+l+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

本征能级 E_n 的本征函数 R_{nl} ，乘以球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ，就是薛丁格方程式的整个解答:

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi);$$

其中 $l = n, n-2, \ldots, l_{\min}$ 。假若 n 是偶数，设定 $l_{\min} = 0$ ；否则，设定 $l_{\min} = 1$ 。