使用Numerov方法求解n-p束缚态

什么是束缚态？

存在势场
- 外界施加
- 其它粒子施加

粒子能量低于势场的能量

数学上可以用希尔伯特空间描述 ⟶ 内积空间

求解np束缚态

质子　　带正电　　1911年 Rutherford散射实验发现了质子

中子　　不带电　　1932年 Chadwick通过反应 $\alpha+{}_{5}^{10}B\rightarrow{}_{7}^{13}N+n$

氘核　　Urey在蒸发了大量液体氢之后，利用光谱检测的方法发现了重氢

通过测量d,n,p质量我们可以得到np的结合能为2224.52 ± 0.20 keV

核物理的一种重要研究方向就是如何确定np的相互作用势？

np相互作用的薛定谔方程（实验系）

n,p在坐标空间中各需要3个变量描述，那么如何求解2体具有6个自由度的薛定谔方程？

np相互作用满足薛定谔方程

$$\mathbf{H}_{\text{tot}}\Psi\left(\mathbf{r}_p,\mathbf{r}_n,t\right)=i\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\mathbf{r}_p,\mathbf{r}_n,t\right)$$

Htot为两体哈密顿量

$$\mathbf{H}_{\text{tot}}=\frac{\mathbf{p}_P^2}{2m_P}+\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m_n}+V\left(\mathbf{r}_P-\mathbf{r}_n\right)$$

同时

$$\Psi=\Psi\left(\mathbf{r}_P,\mathbf{r}_n\right)e^{-iE_{\text{tot}}t}$$

因此定态薛定谔方程为

$$\mathbf{H}\Psi\left(\mathbf{r}_n,\mathbf{r}_P\right)=E_{\text{tot}}\Psi\left(\mathbf{r}_n,\mathbf{r}_P\right)$$

np相互作用的薛定谔方程（质心系）

在质心系下

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_P - \mathbf{r}_n$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_P\mathbf{r}_P + m_n\mathbf{r}_n}{m_n + m_P}$$

折合质量与质心的质量为

$$\mu = \frac{m_n m_P}{m_n + m_P}, \quad M = m_n + m_P$$

相对应的动量为

$$\mathbf{p} \equiv \mathbf{k} = \frac{m_n\mathbf{p}_P - m_P\mathbf{p}_n}{m_n + m_P}$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_n + \mathbf{p}_P$$

哈密顿量变为

$$\mathbf{H}_{\text{tot}} = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})\right] + \frac{\mathbf{P}^2}{2M}$$

np相互作用的薛定谔方程（质心系）

质心系下系统波函数

$$\Psi\left(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_P\right) = \psi(\mathbf{r})\phi_{\mathrm{CM}}(\mathbf{R})$$

薛定谔方程可变为用来描述相对运动部分

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

以及质心运动部分

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2M}\phi_{\mathrm{CM}}(\mathbf{R}) = E_{\mathrm{CM}}\phi_{\mathrm{CM}}(\mathbf{R})$$

质心运动部分的解为平面波

$$\phi_{\mathrm{CM}}(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}}$$

其中

$$E_{\mathrm{tot}} = E + E_{\mathrm{CM}} \qquad E_{\mathrm{CM}} = \frac{P^2}{2M}$$

使用分波法求解一维径向薛定谔方程

角动量基 $|rlm\rangle$ $\quad \langle \vec{r}\,|\,r'l'm'\rangle = \dfrac{\delta(r-r')}{rr'} Y_{l'}^{m_l'}(\hat{r})$

在角动量基下 $\langle rlm\,|\,\Psi\rangle = \dfrac{u_l(r)}{r}$

其中 $u(r)$ 是一维径向薛定谔方程的解

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)+V(r)-E\right]u_l(r)=0$$

并满足

$$u_l(0)=0$$

$$u_l(r)\propto W_{-\eta,l+\frac{1}{2}}\left(-2k_I r\right) \quad \text{当} \quad r\geq a$$

Whittaker function

$$k_I^2 = 2\mu\left|E\right|/\hbar^2$$

$$\eta = z_1 z_2 e^2/(\hbar v)$$

波函数的归一化

$$\boxed{\int_0^\infty |u_l(r)|^2 dr = 1}$$

Numerov方法求解二阶微分方程

对于二阶微分方程

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2(x)\right)\psi(x)=0$$

根据泰勒展开

$$\psi(x+h)=\psi(x)+h\psi'(x)+\frac{h^2}{2}\psi^{(2)}(x)+\frac{h^3}{6}\psi^{(3)}(x)+\frac{h^4}{24}\psi^{(4)}(x)+\cdots$$

同样对$\psi(x-h)$同样进行泰勒展开，并相加得到

$$\psi(x+h)+\psi(x-h)=2\psi(x)+h^2\psi^{(2)}(x)+\frac{h^4}{12}\psi^{(4)}(x)+O\left(h^6\right)$$

二阶项可变为

$$\psi^{(2)}(x)=\frac{\psi(x+h)+\psi(x-h)-2\psi(x)}{h^2}-\frac{h^2}{12}\psi^{(4)}(x)+O\left(h^4\right)$$

二阶微分方程乘以系数$1+\left(h^2/12\right)d^2/dx^2$

$$\boxed{\psi^{(2)}(x)+\frac{h^2}{12}\psi^{(4)}(x)}+k^2(x)\psi(x)+\frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\psi(x)\right]=0$$

Numerov方法求解二阶微分方程

$$\psi(x+h)+\psi(x-h)-2\psi(x)+h^2k^2(x)\psi(x)+\frac{h^4}{12}\frac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\psi(x)\right]+O\left(h^6\right)=0$$

同时$\dfrac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\psi(x)\right]$还可以写成

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[k^2(x)\psi(x)\right]\simeq\frac{k^2(x+h)\psi(x+h)+k^2(x-h)\psi(x-h)-2k^2(x)\psi(x)}{h^2}$$

最终可以得到Numerov算法

$$\psi(x+h)=\frac{2\left(1-\frac{5}{12}h^2k^2(x)\right)\psi(x)-\left(1+\frac{1}{12}h^2k^2(x-h)\right)\psi(x-h)}{1+\frac{1}{12}h^2k^2(x+h)}+O\left(h^6\right)$$

求解np束缚态

已知

可以用薛定谔方程描述np之间相对运动

np的质量以及d的结合能

假设

np的束缚态处于s波

np的相互作用势可以用一个简单的高斯型势描述

$$V(r) = V_0 \exp(-r^2/a^2) \qquad a = 1.484$$

求势阱深度V_0

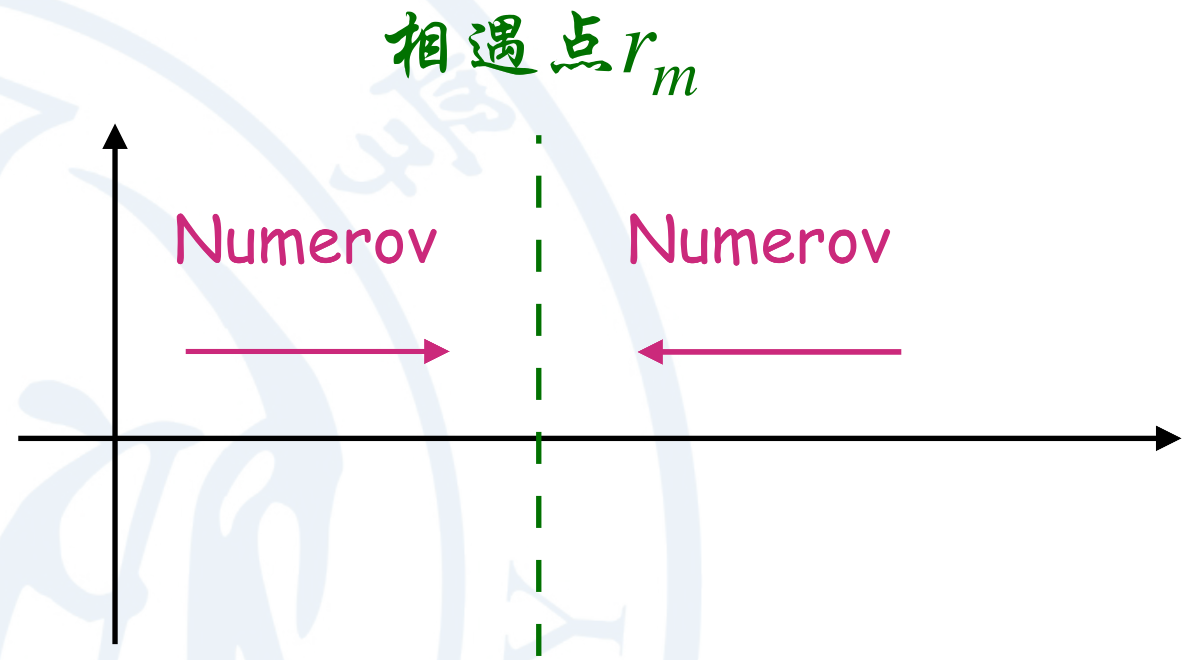
求解np束缚态

假定势阱深度V_0为一个值，比如−100MeV

初始边界条件

$$\begin{cases}\phi(R_{max}) = W_{-\eta,\ell+\frac{1}{2}}\left(-2kR_{max}\right) \\ \phi(R_{max}-\delta R) = W_{-\eta,\ell+\frac{1}{2}}\left(-2k(R_{max}-\delta R)\right)\end{cases}$$

$$\begin{cases}\phi(0) = 0 \\ \phi(\delta R) = \delta R\end{cases}$$



$$\phi(r<) = b\phi(r>)$$

只有在V_0合适，支持束缚态能量时

$$\phi'(r<) = b\phi'(r>)$$

否则

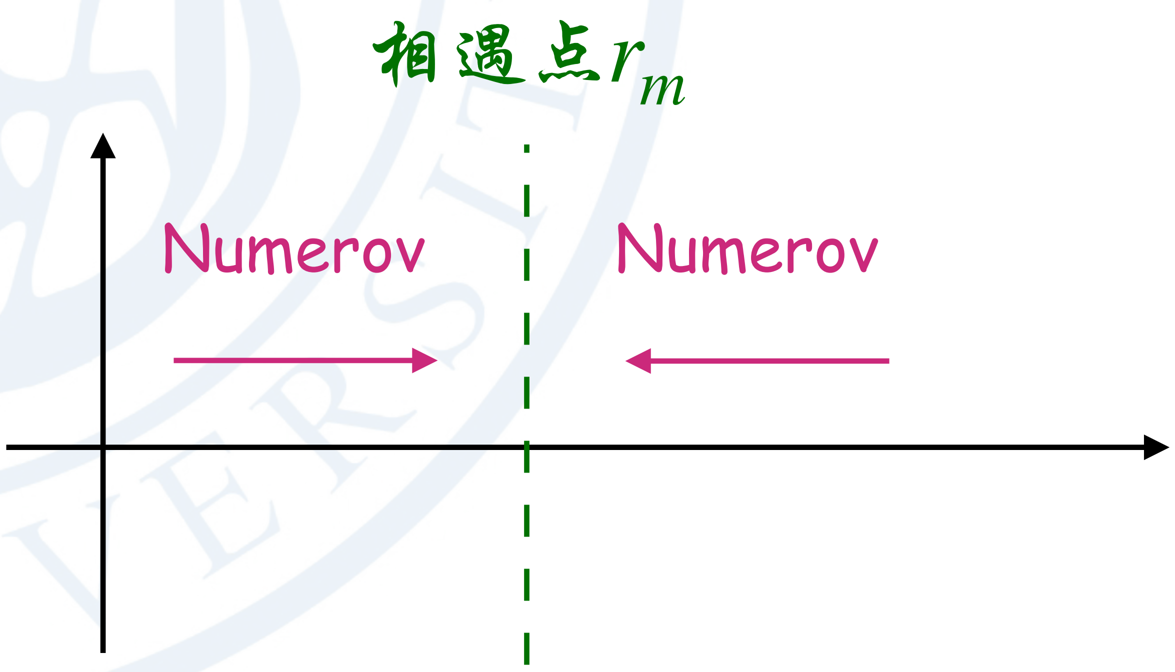
$$\delta V\int_0^\infty \phi(r)V(r)\phi(r)\mathrm{d}r = \phi\left(r_m\right)\left[\phi'_{\text{out}} - \phi'_{\text{in}}\right]V$$

$$V_{new} = V(1+\delta)$$

练习

编写Numerov程序

给定初始值V，求什么样的势阱深度支持np束缚态为2.224MeV



使用有限差分法进行数值微分

一阶数值微分

$$f'(x_0) = \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h}$$

更多关于数值微分内容
请扫描左侧二维码

程序说明

```
      ! 定义势能
      ! 请给定给定任意初始势能深度，注意V0为负数
      V0=   ! !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
      ! 请给定给定任意初始势能深度，注意V0为负数
```

初始化V0值

```
c       Numerov method to solve the differential radial equation
c       from zero
        phi(0)=0        ! boundary condition
        phi(1)=hcm      ! arbitrary value

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccc请完善Numerov方法cccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

```
c       from infinity
        IE=0
        call WHIT(eta,hcm*(irmatch),knp,ecm,l,WK,WKD,IE)
        phi(irmatch)=WK(l)

        call WHIT(eta,hcm*(irmatch-1),knp,ecm,l,WK,WKD,IE)
        phi(irmatch-1)=WK(l)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccc请完善Numerov方法cccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

编写Numerov算法