np Bound State in Coordinate Space with a Simple Gaussian Potential

——Numerov Method

物理科学与工程学院

王翰林 刘昊

2022.06

目 录

1 问题概述和背景

问题概述

np束缚态

系统：一个质子(正电)和一个中子(不带电)

np束缚态：简化的核力的相互作用势的束缚态

问题：确定np和相互作用势?

求解结果： -72.173MeV

研究意义

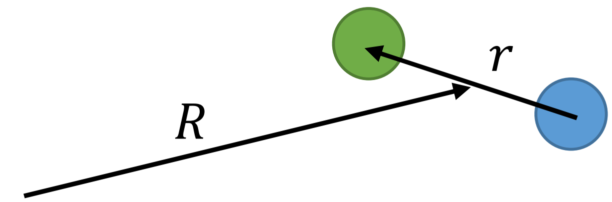
氘核(d,重氢的原子核)由一个质子p和一个中子n组成。

由d,n,p的质量计算得到结合能$E = 2224.52 \pm 0.20\ \mathrm{keV}$

2 问题分析

薛定谔方程

坐标表象，二体问题，6自由度



实验系 $(\boldsymbol{r}_n,\boldsymbol{r}_p,\boldsymbol{p}_n,\boldsymbol{p}_p)$

方程：

$$\mathrm{H}_{tot}\Psi(r_P,r_n,t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r_P,r_n,t)$$

定态方程：

$$\mathrm{H}_{tot}\Psi(r_P,r_n)=E_{tot}\Psi(r_P,r_n)$$

系统的哈密顿：

$$\mathrm{H}_{tot}=\frac{p_P^2}{2m_P}+\frac{p_n^2}{2m_n}+V(r_P-r_n)$$

质心系 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R},\boldsymbol{p},\boldsymbol{P})$

质心坐标$R=\frac{m_P r_P+m_n r_n}{m_n+m_P}$，动量$P=p_n+p_P$

质心系中相对坐标$r=r_P-r_n$，相对动量 $p=\frac{m_n p_P-m_P p_n}{m_n+m_P}$

哈密顿量

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

薛定谔方程

质心系中的分离变量

方程组:

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

$$\frac{P^2}{2M}\phi(R)=E_{CM}\phi(R)$$

总能量为结合能和质心动能

$$E_{tot}=E+E_{CM}$$

质心方程：解为平面波

$$\phi_{CM}(R)=Ae^{i\,P\cdot R}$$

径向相对运动方程：(角动量基下$u_l(r)=r\psi(r)$)

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

边界条件为:

$$u_{l(0)}=0$$

$$u_l(r)\propto W_{-\eta,l+\frac{1}{2}}(-2k_1r),\qquad r>a$$

归一化条件:

$$\int_0^{+\infty}|u_l(r)|^2\mathrm{d}r=1$$

小结

坐标表象，二体问题，6自由度

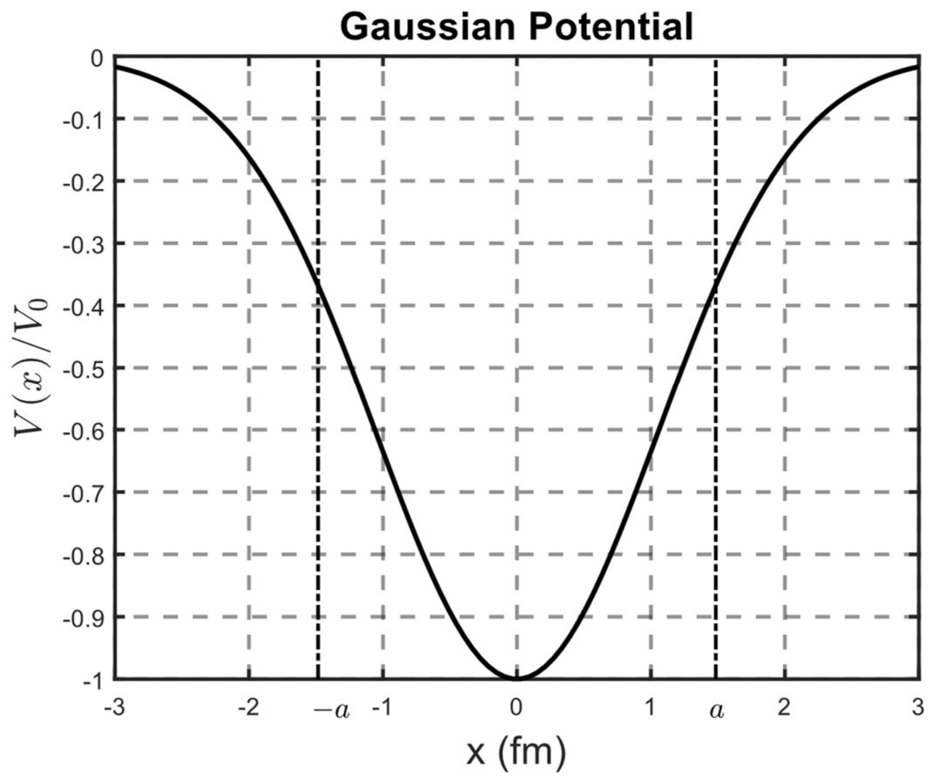
已知

n,p的质量
d的结合能$E = -2.224\text{MeV}$

假设

束缚态为s波

相互作用势为高斯型势
$V(r) = V_0 \exp(-r^2/a^2)$,
其中$a = 1.484$, $V_0 < 0$



问题

势阱深度V_0?

3 程序计算流程

程序计算流程

求解一维径向薛定谔方程(二阶常微分方程)

方程

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

s波，$l=0$

高斯型势 $V(r)=V_0\exp(-r^2/a^2)$, 其中$a=1.484$, $V_0<0$

结合能$E=-2.224\mathrm{MeV}$

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

数值求解方法

Numerov方法

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

对小量h泰勒展开:

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

解得:

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

原方程乘以系数$1+\frac{h^2}{12}\frac{d^2}{dx^2}$后与上式消去$\psi^{(4)}(x)$可解得:

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

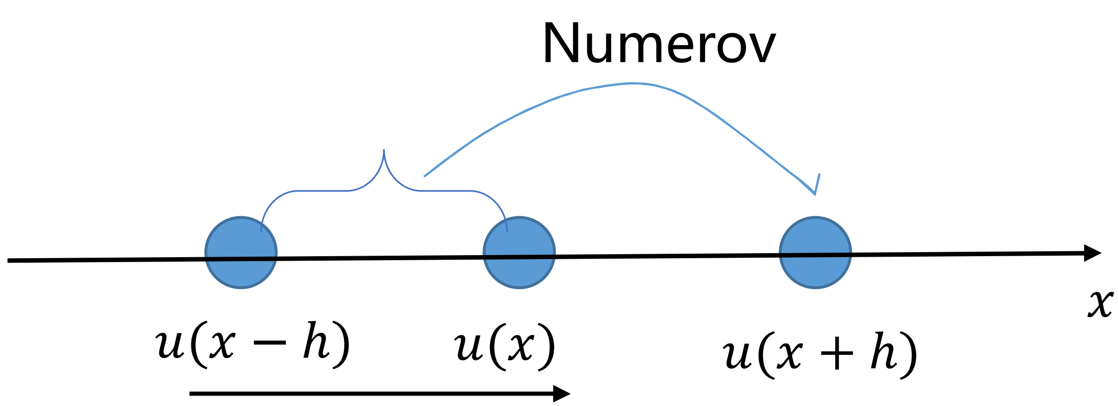
数值求解方法

Numerov方法

将二阶导展开，最终得到Numerov方法：

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

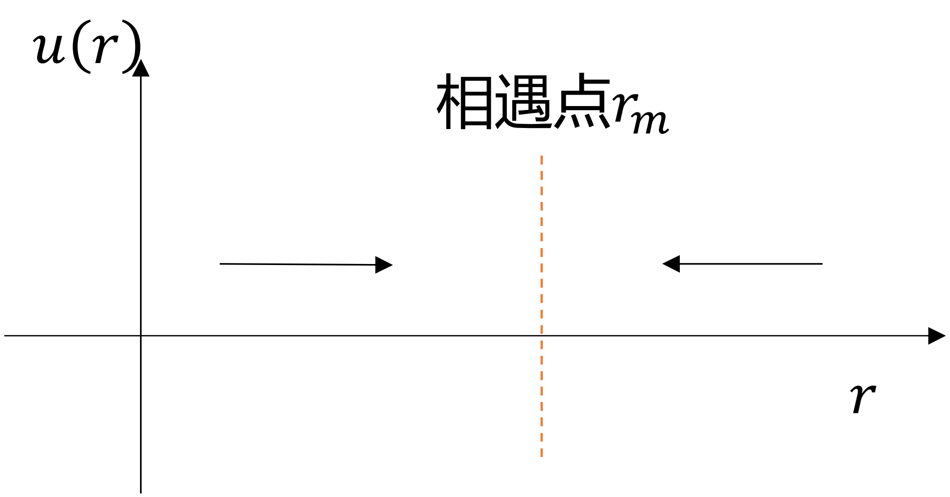
特点：从起始点开始**单向**递推求解



算法流程

思路

假定V_0为某一值，在求解区域的两端向中间求解$u(r)$，直至相遇点r_m，验证是否符合连续条件，否则改变V_0的值，重复，直到V_0收敛。



初始边界条件：

$$\begin{cases} u(R_{max}) = W_{-\eta,l+\frac{1}{2}}(-2k_1 R_{max}) \\ u(R_{max}-\delta R) = W_{-\eta,l+\frac{1}{2}}(-2k_1 R_{max}) \end{cases}$$

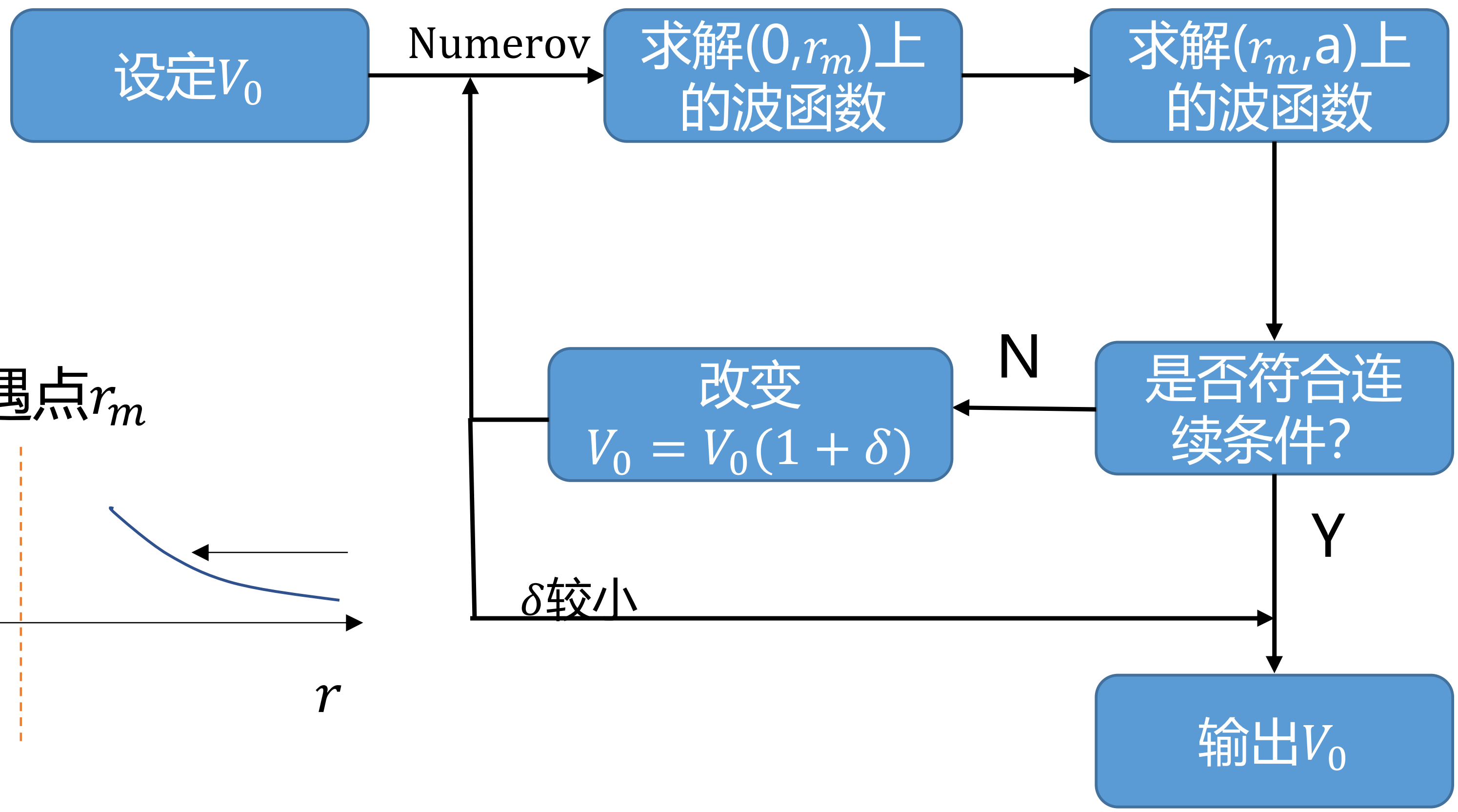
$$\begin{cases} u(0) = 0 \\ u(\delta R) = \delta R \end{cases}$$

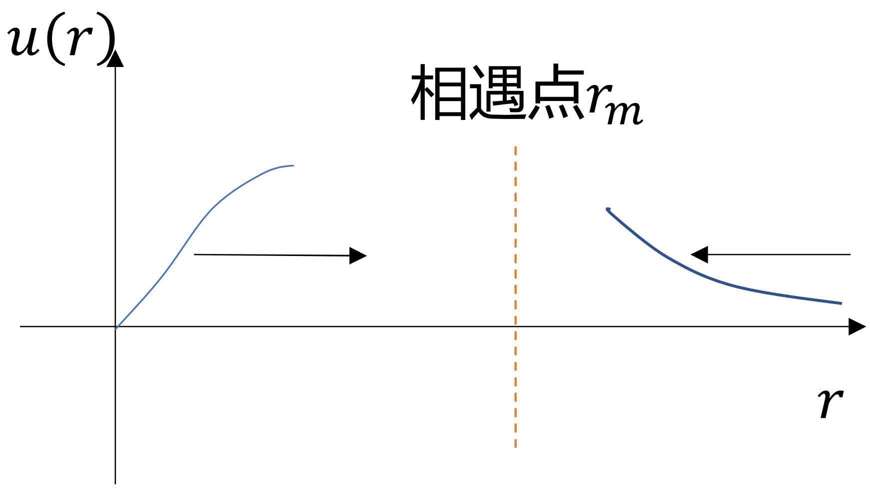
连续条件：(V_0合适时)

$$u(r<) = bu(r>)$$
$$u'(r<) = bu'(r>)$$

算法流程

流程





δ 由以下方程求出:

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

计算结果

```
!定义系统信息
z1=1.0
z2=0.0
mass1=1.0078
mass2=1.0086
be=-2.224 ! MeV
```

```
! 定义势能
! 请给定给定任意初始势能深度，注意V0为负数
V0=-100  ! !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! 请给定给定任意初始势能深度，注意V0为负数
```

```
      call WHIT(eta,hcm*(irmatch-1),knp,ecm,l,WK,WKD,IE)
      phi(irmatch-1)=WK(l)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      ir=irmatch;r=ir*hcm ! 初始条件
      kl(ir)=2.*mu*ecm/hbarc**2-2.*mu*vpot(ir)/hbarc**2
      ir=irmatch-1;r=ir*hcm
      kl(ir)=2.*mu*ecm/hbarc**2-2.*mu*vpot(ir)/hbarc**2
      do ir=irmatch-1,irmid-2,-1  ! 递归计算
        kl(ir-1)=2.*mu*ecm/hbarc**2-2.*mu*vpot(ir-1)/hbarc**2  ! k^2(x)函数
        phi(ir-1)=(2.*(1.-5.*const*kl(ir))*phi(ir)-
     &             (1.+const*kl(ir+1))*phi(ir+1))/(1.+const*kl(ir-1))  ! Numerov方法
      end do
```

C:\Users\v\Desktop\ubuntu_test\my_np_complete.exe

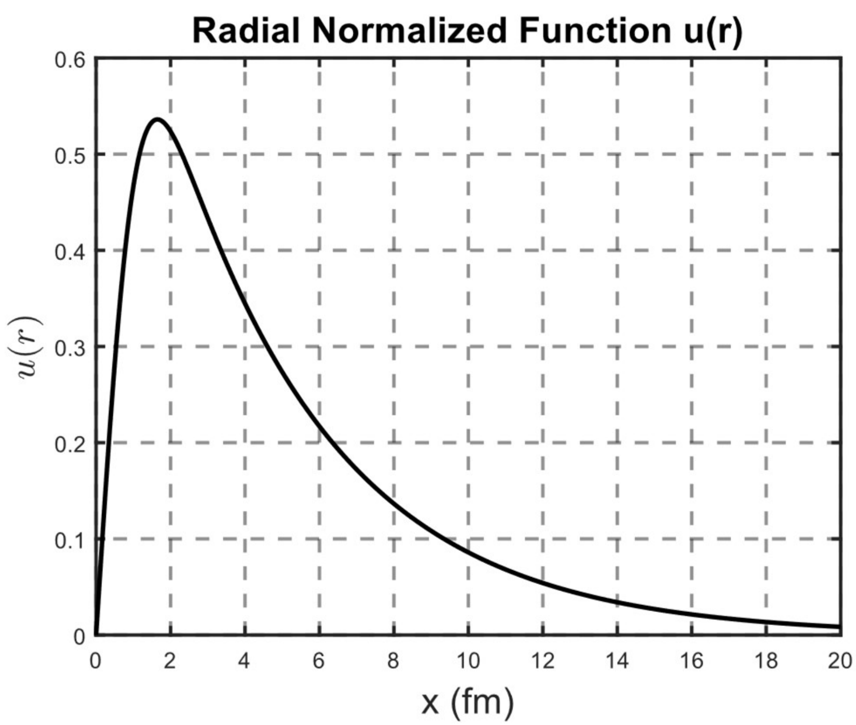
```
 Adjust potential depth from -100.000 to  -72.173 with scaling factor   0.722
PAUSE
To resume execution, type go.  Other input will terminate the job.
```

结果：束缚态为-2.224MeV时，设置初始$V_0 = -100\text{MeV}$，程序计算得到势阱深度为：-72.173MeV

分析：V_0初值较大时($V_0 > 160\text{MeV}$)，计算结果会收敛到-375.738MeV，对应-2.224MeV为第一激发态的能量

结果验证

结果对应的系统径向波函数为：



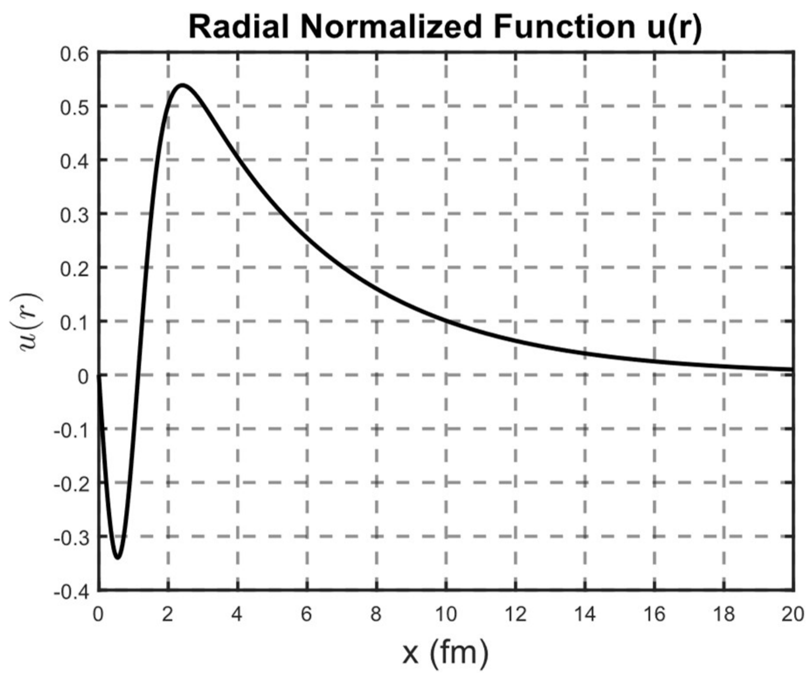
波函数对应的能量

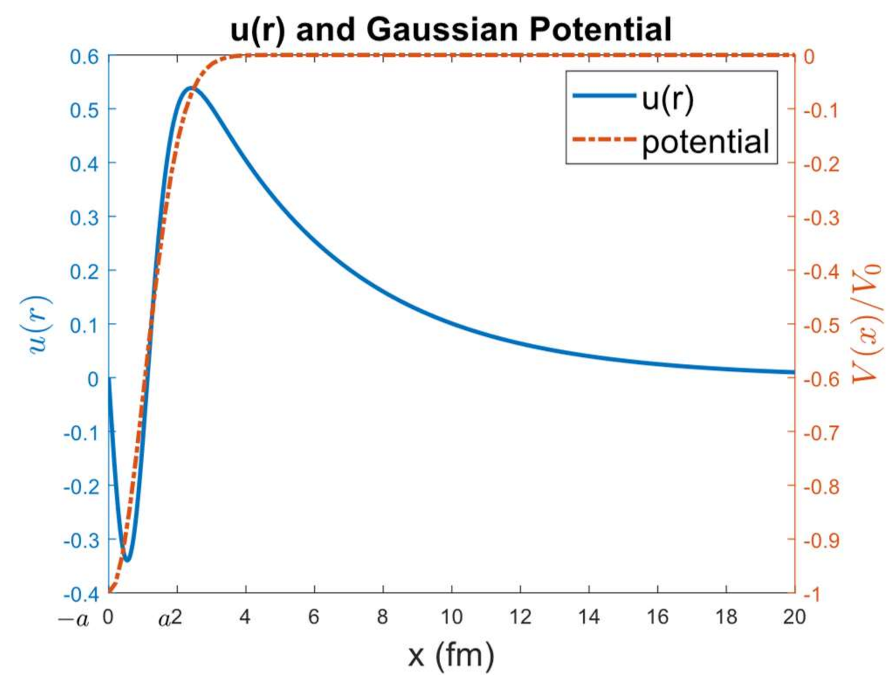
$$\langle E\rangle = \int_0^{\infty} u(r)\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)\right)u(r)\mathrm{d}r = -2.225\mathrm{MeV}$$

分析：波函数位于势阱的基态，由结果求得能量为-2.225MeV，符合实际结合能

结果验证

V_0初值较大时对应的系统径向波函数为：





-375.738MeV深度势阱的第一激发态(-2.224MeV)

4 总结和收获

总结和收获

总结

· 使用Numerov算法求解了高斯型势下质子中子二体相对运动的径向波函数。

· 根据氘核结合能得到了符合实际情况的波函数和势阱深度-72.173MeV

收获

· Fortran语言的使用

· 高阶常微分方程求解的算法

恳请指正

王翰林 刘昊

物理科学与工程学院