



使用 Numerov 方法求解 $n-p$ 束缚态

任中洲教授课题组
2020.12.10 组会

什么是束缚态？

2

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

3

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）

4

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

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

H_{tot} 为两体哈密顿量

$$\mathbf{H}_{\text{tot}} = \frac{\mathbf{p}_p^2}{2m_p} + \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m_n} + V(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n)$$

同时

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

因此定态薛定谔方程为

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

np相互作用的薛定谔方程（质心系）

5

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）

6

质心系下系统波函数

$$\Psi(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_p) = \psi(\mathbf{r})\phi_{\text{CM}}(\mathbf{R})$$

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

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

质心运动部分的解为平面波

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

其中

$$E_{\text{tot}} = E + E_{\text{CM}} \quad E_{\text{CM}} = \frac{P^2}{2M}$$

使用分波法求解一维径向薛定谔方程

7

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

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

其中 $u(r)$ 是一维径向薛定谔方程的解

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

并满足

$$u_l(0) = 0$$

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

Whittaker function

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

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

波函数的归一化

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

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

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

同样对 $\psi(x-h)$ 同样进行泰勒展开，并相加得到

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

二阶项可变为

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

二阶微分方程乘以系数 $1 + (h^2/12) d^2/dx^2$

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

Numerov方法求解二阶微分方程

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

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

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

最终可以得到Numerov算法

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

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

np的束缚态处于s波

假设

np的相互作用势可以用一个简单的高斯型势描述

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

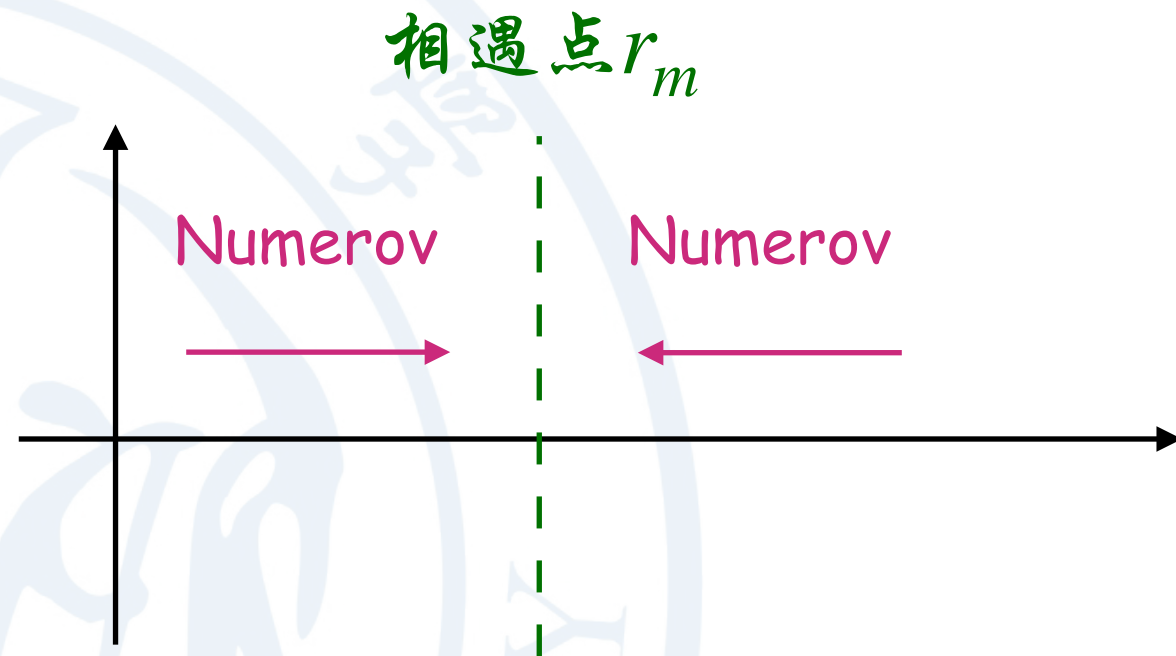
求势阱深度 V_0

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

$$\begin{cases} \phi(R_{max}) = W_{-\eta, \ell + \frac{1}{2}}(-2kR_{max}) \\ \phi(R_{max} - \delta R) = W_{-\eta, \ell + \frac{1}{2}}(-2k(R_{max} - \delta R)) \\ \phi(0) = 0 \\ \phi(\delta R) = \delta R \end{cases}$$



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

只有在 V_0 合适，支持束缚态能量时

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

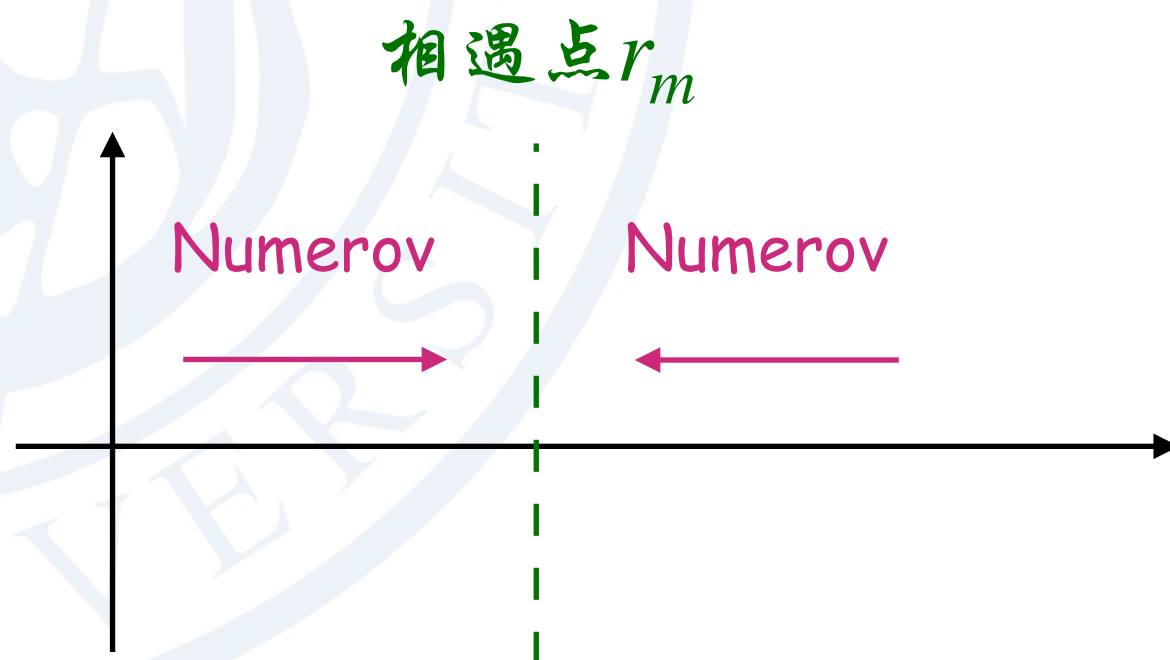
否则

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

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

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

校内网访问 <http://100.64.179.78/>

任中洲教授课题组 @ 同济大学

[主页](#)

[团队](#)

[招生](#)

[发表文章](#)

[研究方向](#)

[参考书籍](#)

[组会](#)

[\(图库\)](#)

组会信息

2020.12.10 用Numerov方法求解np束缚态 [课件](#), [程序](#)

或扫描下面二维码通过github下载



```
102      ! 定义势能
103      ! 请给定给定任意初始势能深度, 注意v0为负数
104      v0=  ! !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
105      ! 请给定给定任意初始势能深度, 注意v0为负数
```

初始化V0值

```
133      c      Numerov method to solve the differential radial equation
134      c      from zero
135      phi(0)=0      ! boundary condition
136      phi(1)=hcm    ! arbitrary value
137
138      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
139      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
140      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
141      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
142      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
143      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
144      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
145      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
146
```

```
157      c      from infinity
158      IE=0
159      call WHIT(eta,hcm*(irmatch),knp,ecm,l,WK,WKD,IE)
160      phi(irmatch)=WK(1)
161
162      call WHIT(eta,hcm*(irmatch-1),knp,ecm,l,WK,WKD,IE)
163      phi(irmatch-1)=WK(1)
164      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
165      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
166      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
167      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
168      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
169      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
170      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
171      !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
172
```

编写Numerov算法

如果遇到程序上的问题请联系

