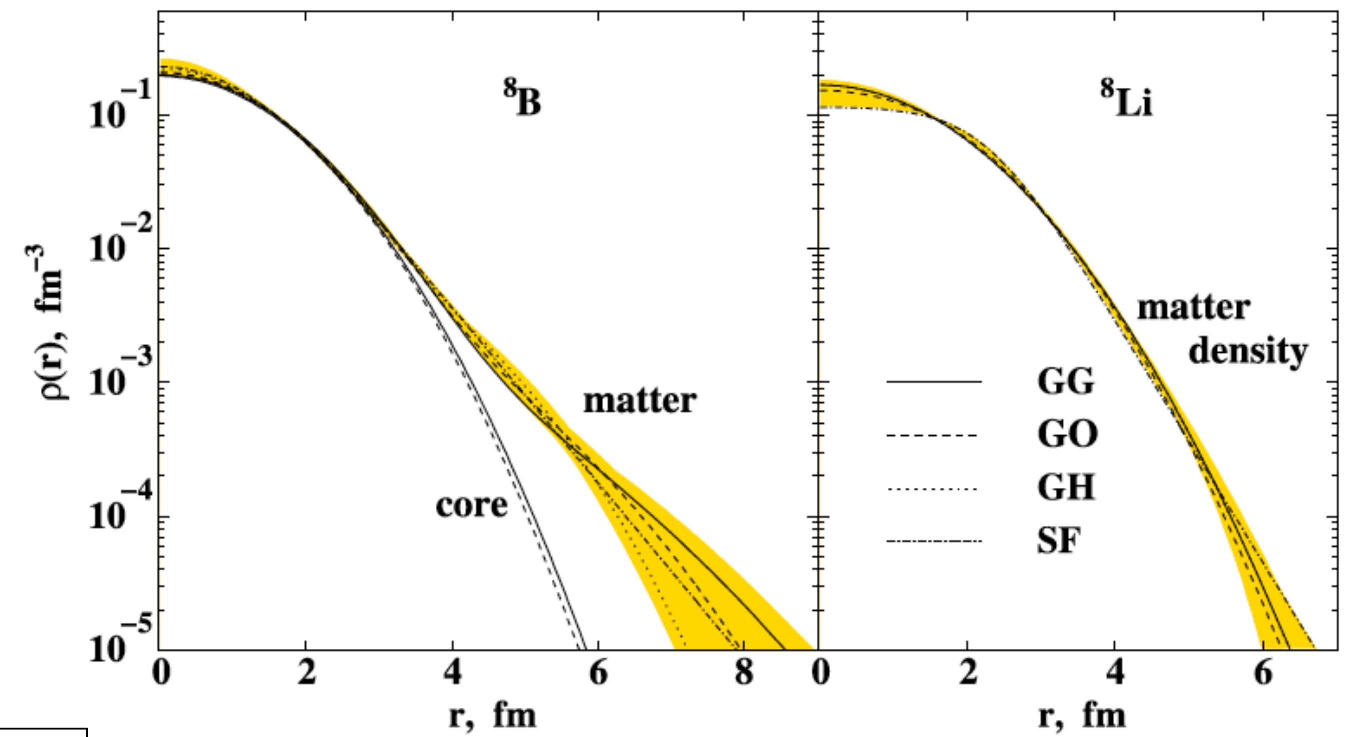
在动量表象下求解n-p束缚态

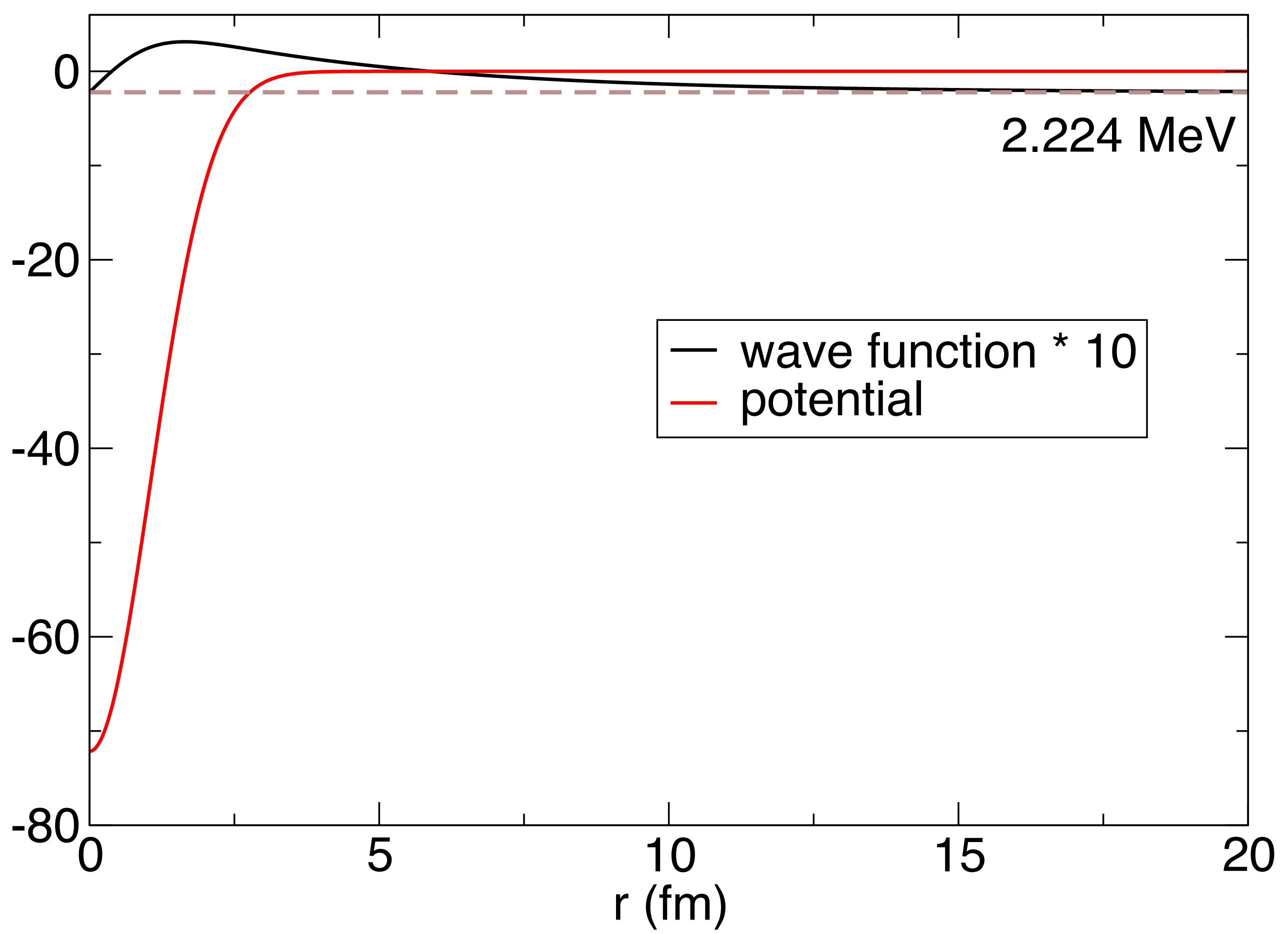
任中洲教授课题组

2020.12.17组会

晕现象

量子多体角度
密度分布





量子少体角度
波函数与势相对空间分布

角动量基下的傅里叶变换

束缚态波函数是束缚态在坐标表象下的投影

上周求解的是径向波函数

$$\phi(\vec{r}) = \langle \vec{r} \,|\, \phi \rangle \qquad \phi_l^m(r) = \langle rlm \,|\, \phi \rangle$$

同样的束缚态可以投影到动量表象下

$$\phi(\overrightarrow{k}) = \langle \overrightarrow{k} \,|\, \phi \rangle$$

通过傅里叶变化可以实现坐标表象与动量表象之间的变换

归一化条件

$$\langle \vec{r} \,|\, \overrightarrow{k} \rangle = \frac{1}{N_1}(2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\int d^3k\, e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} = (2\pi)^3\, \delta(\vec{r} - \overrightarrow{r'})$$

$$\langle \overrightarrow{k'} \,|\, \overrightarrow{k} \rangle = N_2\, \delta(\overrightarrow{k'} - \overrightarrow{k})$$

$$\langle \overrightarrow{r'} \,|\, \vec{r} \rangle = N_3\, \delta(\overrightarrow{r'} - \vec{r})$$

N_1, N_2, N_3 满足

$$N_1^2\, N_2\, N_3 = 1$$

我们选取

$$N_1 = N_2 = N_3 = 1$$

角动量基下的傅里叶变换

分波展开

$$\langle \vec{r} \,|\, \vec{k} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{lm} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{kr} i^l F_l(kr) Y^*_{lm}(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{r})$$

Bessel函数

Spherical Bessel函数与Bessel函数的关系?

角动量基下的傅里叶变换

$$\langle rlm \,|\, klm \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{kr} i^l F_l(kr)$$

动量表象下的势

坐标表象下的势 $V(r) = V_0 \exp(-r^2/a^2)$ $a = 1.484$

上周我们解得 $V_0 = -72.167\ MeV$

实际上“势”是算符 $\langle r'lm | V | rlm \rangle = \dfrac{\delta(r-r')}{r^2} V(r)$

非定域

定域

动量表象下的势

$$\langle k'lm | V | klm \rangle = \int_0^\infty r^2 r'^2\, dr dr'\, \langle k'lm | r'lm \rangle \langle r'lm | V | rlm \rangle \langle rlm | klm \rangle$$

$$= \int_0^\infty r^2 r'^2\, dr dr'\, \langle k'lm | r'lm \rangle \frac{\delta(r-r')}{r^2} V(r) \langle rlm | klm \rangle$$

$$= \frac{2}{\pi} \frac{1}{k'k} \int_0^\infty F_l(k'r) V(r) F_l(kr) dr$$

动量空间下求解np束缚态

束缚态薛定谔方程 $(E-H)|\phi\rangle = 0$

变换得 $(E-T)|\phi\rangle = V|\phi\rangle \longrightarrow |\phi\rangle = \frac{1}{E-T}V|\phi\rangle$

投影到动量空间下

$$\langle klm|\phi\rangle = \int_0^\infty \frac{1}{E-\frac{(\hbar k)^2}{2\mu}} V_l(k,k')\langle k'lm|\phi\rangle k'^2\, dk'$$

取 $\hbar k = k$ 注意单位的变换

积分运算在数值运算中为求和运算

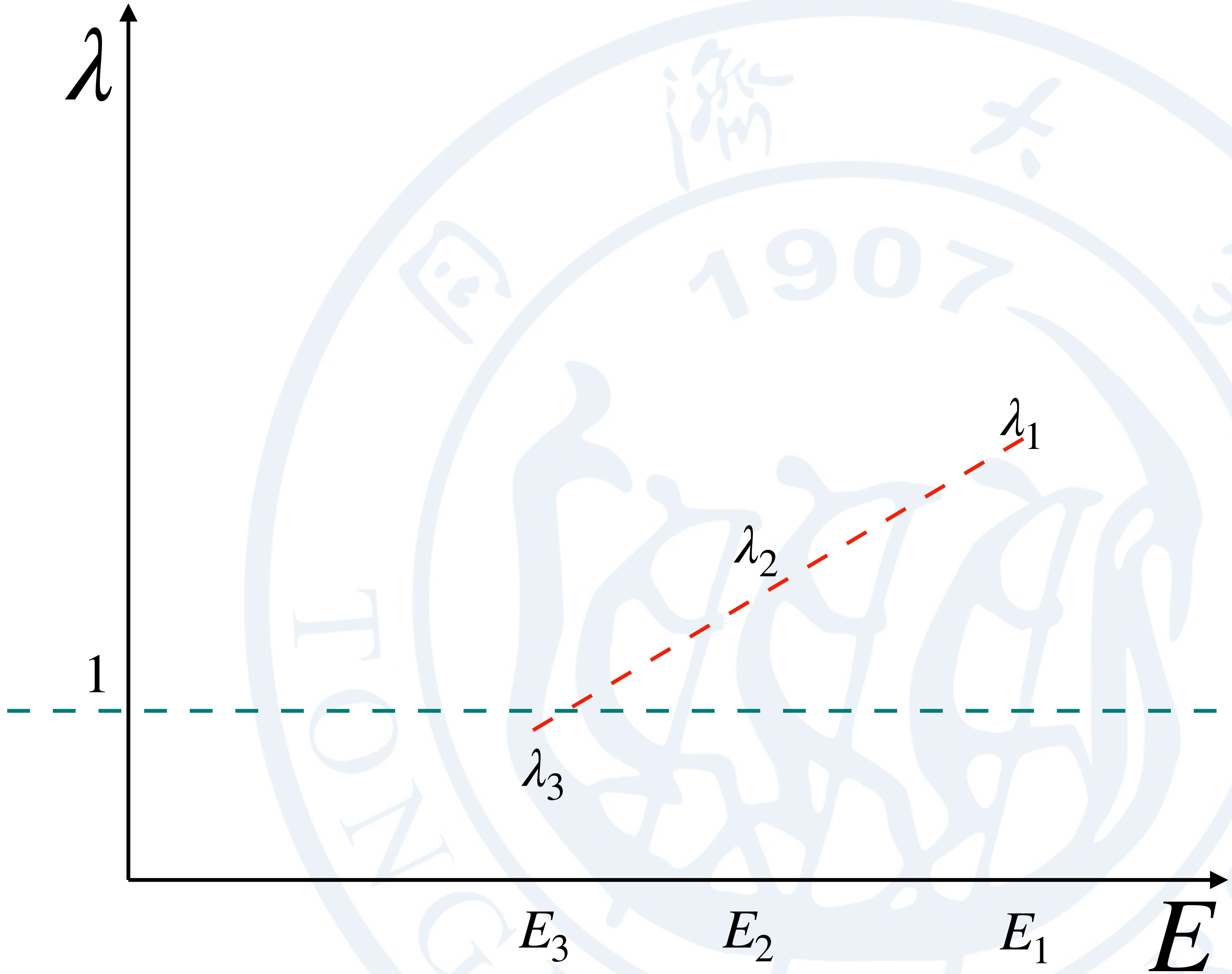
$$\phi(k_i) = \sum_j \underbrace{k_j^2\omega_j \frac{1}{E-\frac{k_i^2}{2\mu}} V_l(k_i,k_j)}_{A_{ij}}\phi(k_j)$$

求解束缚态变成求解本征值问题

$$\lambda\phi = \mathbf{A}\phi$$

当E值合适时 $\lambda = 1$

Secant method



$$E_3 = E_2 - \frac{E_1 - E_2}{\lambda_1 - \lambda_2}(\lambda_2 - 1)$$

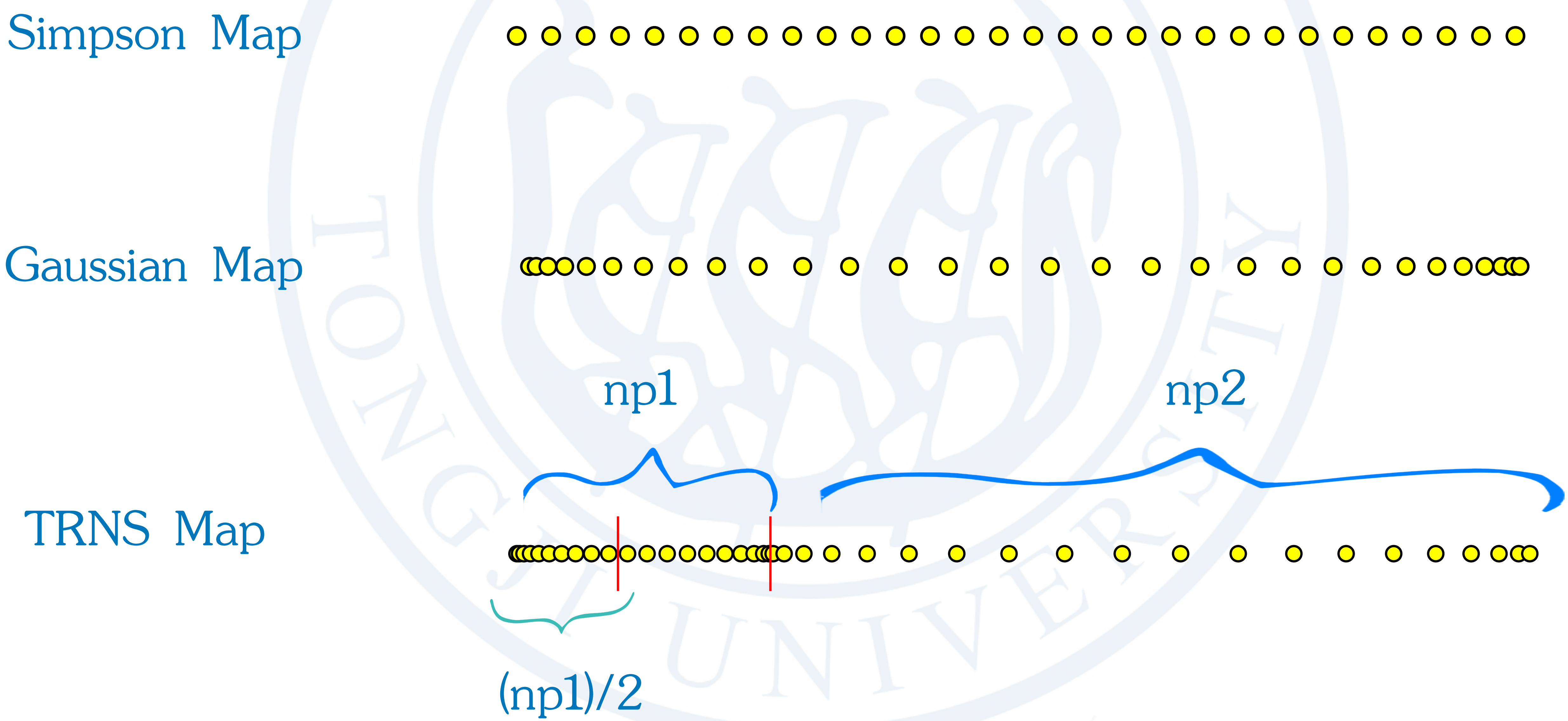
迭代下去直到

$|E_n - E_{n-1}|$足够小

MAP

积分变求和

$$\int f(x)dx \approx \sum_i f(x_i)\omega_i$$



计算用单位

为了方便起见，把MeV统一变换成fm^{-1}

通过$\hbar c = 197.3269718\ MeV \cdot fm$

比如中子的质量为939.5983MeV，那么换算后为4.7616 fm^{-1}

程序说明

```
LIB = -L ../lapack-3.9.0 -llapack  -lrefblas
```

makefile正确链接lapack库

```
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC请写出傅里叶变换的程序并得到CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC动量表象下的势并画出对角线部分CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC即pp(ip),vpp(ip,ip)CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

在pot.f中求势的傅里叶变化

```
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC请计算A矩阵CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC并画出对角线部分CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
```

在bound.f中计算A矩阵

```
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      subroutine eigenvalue(E,lambda,wf)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

在bound.f中了解求本征值的方法

程序说明

```
!!!!secant method to find E1, iteration method to solve lambda
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccc完善secant method寻找正确的束缚态能量ccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

完善程序寻找到正确的束缚态

已知potential，求该potential所支持的束缚态

思考：如果加深势阱深度使得该势不止支持一个束缚态，那么该如何求解