

学校代码: 10246
学 期: 2024 春

復旦大學

荣誉课课程论文

量子少体问题与埃菲莫夫效应

Quantum Few-Body Problem and the Efimov Effect

院 系: 物理学系

课 程 名 称: 数学物理方法 (H)

组 别: 第三组 第四组

指 导 教 师: 丁鲲

完 成 日 期: 2024 年 6 月 23 日

小 组 成 员

童煜智 22307110067

陈 璇 22307110307

莫双铭 22307110373

霍晋元 22300200022

谈凯霖 22300190022

杨远青 22300190015

目 录

摘要	iii
第 1 章 引言	1
1.1 量子单体问题及可约化至单体的问题	1
1.2 量子两体问题	3
1.3 量子三体问题与 Efimov 效应	4
第 2 章 单电子问题与散射基本概念	8
2.1 单电子问题：氢原子模型	8
2.1.1 波函数解法	8
2.1.2 对称性分析与简并性	10
2.2 散射基本概念	11
2.2.1 分波法与散射长度	11
2.2.2 调节散射长度——Feshbach 共振	13
2.2.3 两个极限与重整化群流极限环	14
第 3 章 两体问题的近似与求解	17
3.1 引入：氦原子问题的求解	17
3.2 变分波函数	19
3.3 Hartree-Fock 近似方法	20
3.4 蒙特卡罗模拟：从梯度下降到费米网络 (Ferminet)	23
3.4.1 变分量子蒙特卡罗 (Quantum Monte Carlo, VQMC)：梯度下降与神经网络	23
3.4.2 优化算法：费米网络	25
第 4 章 Efimov 效应	29
4.1 在超球坐标系下推导 Efimov 效应	29
4.1.1 引入：Efimov 效应的条件	29
4.1.2 从雅可比坐标系到超球坐标系	29
4.1.3 从薛定谔方程到低能 Faddeev 方程	30

4.1.4	绝热近似与径向方程的导出	31
4.1.5	本征值 λ 的数值求解	32
4.1.6	短程截断与初见离散标度不变性	34
4.2	重整化群	34
4.3	重整化群方法在 Efimov 问题中的应用	36
4.4	格林函数蒙特卡洛	37
4.5	Efimov 态能谱: Efimov scenario	39
第 5 章 总结与展望		43
参考文献		46
致谢		51

摘要

量子少体问题是现代物理学中的重要研究领域, 主要研究由少数量子粒子组成的系统。量子少体问题的研究不仅为理解和描述少数粒子在量子力学框架下的行为提供了基础, 还为多体系统的研究积累了经验和方法。其中的量子单体问题, 如氢原子和散射问题的求解, 展现量子力学解决物理问题的范式; 而量子两体问题, 例如氦原子的近似求解, 则进一步扩展了对复杂体系的理解。更为有趣的是 Efimov 效应, 作为量子三体及更多体问题中的一个独特现象, 展示了量子少体物理中的普适性与标度不变性, 也在重整化群与有效场论的观点下显现出更深刻的物理内涵, 具有重要的理论和实验研究价值。

本文首先从量子单体问题及其可约化至单体的问题入手, 介绍了氢原子及散射问题的求解, 及其对量子力学发展的贡献, 随后探讨了量子两体问题, 尤其是氦原子问题的近似与求解方法, 包括变分波函数、Hartree-Fock 近似方法与蒙特卡罗模拟等。接着, 本文详细探讨了 Efimov 问题, 给出了 Efimov 效应在超球坐标系下的导出, 介绍了重整化群方法及其在 Efimov 问题中的应用, 并对 Efimov 态各条件下的能谱进行推导与描绘。最后, 本文通过总结与展望, 讨论了量子少体问题研究的未来发展方向及其在实际应用中的潜力。

关键词: 量子力学; 量子少体物理; Efimov 效应

中图分类号: O413.1

第 1 章 引言

量子少体问题主要研究由少数(通常是两个到几个)量子粒子组成的系统。这些粒子可以是原子、分子、核子、夸克或其他基本粒子。与量子多体物理相对,关于量子少体物理的研究,旨在理解和描述少数粒子在量子力学框架下的行为,两者均为人类理解量子系统数理特性与物理本质的重要研究方向。量子少体问题研究的流程及重点通常包括:确定粒子间的相互作用势函数,这是研究的基础;通过解析计算、近似方法或数值方法,求解少体系统薛定谔方程;计算能谱和波函数,找到系统的本征能量与本征态;利用散射理论,研究粒子相互散射时的行为,计算散射幅和散射截面等。

量子少体物理,在现代物理学研究中具有重要地位。其为研究多体系统的一种基础、视角,通过研究少体问题,可以积累经验和方法,进而推广到更复杂的多体问题中。少体系统通常能提供一个可以严格测试量子力学理论和模型的平台,通过与实验结果对比,可以检验和改进理论模型;而其研究过程,也推动了许多数值方法和计算技术的发展,比如密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)、量子蒙特卡罗(Quantum Monte Carlo, QMC)等。就实际应用而言,在化学、材料科学、生物物理学中,许多重要现象和过程可以简化为少体问题,例如,分子中的化学键、核反应中的核子相互作用等。总而言之,量子少体问题不仅是基础量子理论研究的重要组成部分,对其理解也可为更复杂的物理系统和现象提供理论支撑和技术支持^[1-4]。

我们将从薛定谔方程的求解开始,逐渐增加研究体系粒子数目,来引入量子少体问题及 Efimov 效应。

1.1 量子单体问题及可约化至单体的问题

求解薛定谔方程是量子力学的基本目标之一,其包含求解系统本征态与本征能量,以及确定给定初态在薛定谔方程下的演化行为等。从单体问题出发,考虑系统可由量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 描述。我们通常关心单体及少体系统在实空间的行为,因此将其投影至实空间(坐标表象)来研究,即量子态表示为 $\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle$ 。在哈密顿量 \hat{H} 作用下,态的演化满足含时薛定谔方程:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.1)$$

该式已经给出量子态含时演化的形式解, 即 $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$, 其中 $\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathcal{T}} \exp\left(-i \int_{t_0}^t \hat{H} d\tau/\hbar\right)$, $\hat{\mathcal{T}}$ 为编时算符。为更清晰地表征系统的性质, 也可对待解量子态进行分离变量: $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\phi(t)$, 得到不含时(定态)薛定谔方程:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.2)$$

求解定态薛定谔方程, 将得到系统一系列本征态 $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$, 系统在任意时刻的量子态即可写为本征态的线性组合^[5]。

对氢原子的求解, 是量子力学研究实际粒子体系的初步。早在量子力学创立之初, 由于氢原子光谱亟待可靠的理论解释, 氢原子能级求解便一直备受关注。在质心参考系中, 运用玻恩-奥本海默近似, 若只计及质子与电子的库仑相互作用, 氢原子问题可约化为库仑势下的标准单体问题, 通过解析求解可以得出其能级与主量子数 n 呈平方反比关系。进一步, 考虑电子与核的自旋-轨道耦合效应, 以及电子运动的相对论效应, 利用微扰论进行能量修正, 可给出氢原子能级的精细结构。接下来, 再考察原子核的自旋与电子角动量的耦合, 我们能够得到氢原子能级超精细结构。更严格地, 直接采用狄拉克方程进行研究, 也能解析地解出氢原子旋量本征波函数及能级^[5-6]。氢原子体系作为可解析求解与微扰计算的一个案例, 是量子单体问题求解的典范; 得益于光谱学技术的发展, 其与实验的对比验证也容易进行。

然而, 大多数相互作用势形式下的薛定谔方程难以解析计算。除直接数值求解方程以外, 一些近似技巧(变分波函数等)与分析方法(对称性分析等)也被广泛应用。例如, 在氢原子问题中, 通过找到龙格-楞次矢量守恒, 并计算(归一化的)龙格-楞次矢量算符与角动量算符的对易关系, 我们可以发现, 二者六个分量算符构成一组封闭的李代数($so(4)$ 代数), 而氢原子最大对称李群即为 $SO(4)$ ^[7]。利用这一动力学对称性, 可以绕过对波函数的刻画, 而直接解出氢原子的能级。通过类似的对称性分析, 可对不同体系的性质得到一个清晰的认识; 而得到体系对称性后, 取具有相对对称性的试探波函数, 也能对数值变分计算提供极大帮助。

以上的研究视角中, 我们考察的多为体系的束缚态性质。另一方面, 量子系统的散射行为也同样值得关注。由于大量的物理学实验, 本质上是散射实验, 研究系统在散射过程中的响应特性变得尤为重要。仍考虑单体问题, 将入射粒子建模为一列平面波 $\psi(z) \sim e^{ikz}$, 其与散射势相遇后, 产生一系列球面波。当粒子被散射足够远后, 其波函数可表示为如下形式:

$$\psi(r, \theta, \phi) \sim e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.3)$$

从而, 问题可归结为确定散射振幅 $f(\theta, \phi)$, 其给出 θ, ϕ 方向的散射概率。值得一提的是, 散射振幅导出的微分散射截面 $\sigma_c(\theta, \phi) = |f(\theta, \phi)|^2$ 在实验中容易测

量。为得到散射振幅,一个制式的方法为分波展开:对薛定谔方程的解分离变量 $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$, 即将散射波函数展开至角动量的本征态,每个角动量对应的分波通过求解径向方程来得到。将所有分波项求和、与式(1.3)比较,最终得到散射振幅的形式。另一种常用方法为玻恩近似,其为用于求解散射问题的摄动理论方法:假设势场对粒子的影响较小,散射波函数可以近似为入射波函数加上一个小的校正项。通过逐阶迭代求解,可以得到散射幅的近似表达式^[5-6]。量子散射问题的研究不仅在基础物理学中具有深远的意义,而且在应用科学、技术发展以及跨学科领域中也发挥着重要作用。通过实验和理论的结合,量子散射研究不断推动我们对微观世界和自然规律的理解。

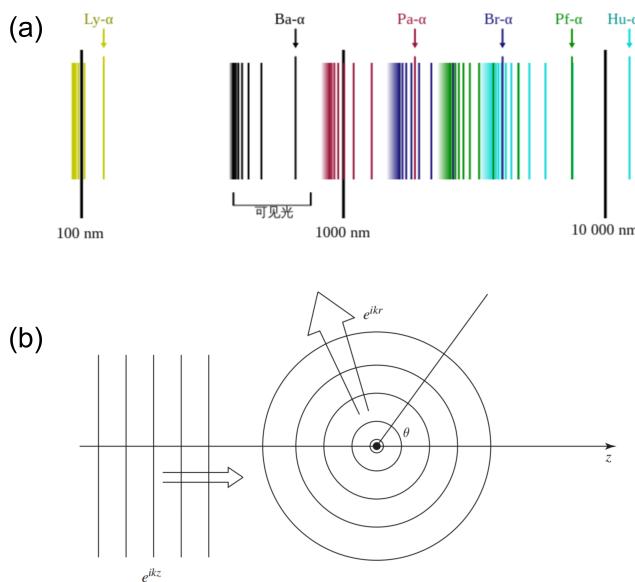


图 1-1 (a) 氢原子能级示意图。图片取自 [Wikipedia: Hydrogen spectral series](#)。(b) 量子散射示意图。图片取自文献^[5]

1.2 量子两体问题

以上介绍的量子单体问题,由于求解自由度少、近似路径直接,其研究相对简单,理论已趋成熟。接下来,我们不妨增加系统粒子数,进入量子两体问题的研究范畴。

作为氢原子束缚态问题的一个直接推进,氦原子能级是一个值得关注的问题。在此之前,让我们先建立对多电子原子问题的整体认识。在质心系中,即便只考虑库仑相互作用,多电子原子中的相互作用形式已足够复杂。具体而言,对于含有 Z 个电子的原子,其本征方程可以写为

$$\left[\sum_{i=1}^Z \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i \neq j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{ij}} \right] |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (1.4)$$

这是一个耦合的 Z 元偏微分方程, 相互作用的存在导致直接求解极为困难; 同时, 电子外态波矢 $|\psi\rangle$ 解的对称性依赖于其自旋内态, 即空间波函数与自旋波函数的乘积需要交换反对称。以自旋内态交换对称的情形为例, 此时外态空间波函数需交换反对称, 一种表示方式是, 将其写成 Slater 行列式的形式:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \begin{vmatrix} |\psi_1(\mathbf{r}_1)\rangle & |\psi_2(\mathbf{r}_1)\rangle & \cdots & |\psi_Z(\mathbf{r}_1)\rangle \\ |\psi_1(\mathbf{r}_2)\rangle & |\psi_2(\mathbf{r}_2)\rangle & \cdots & |\psi_Z(\mathbf{r}_2)\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\psi_1(\mathbf{r}_Z)\rangle & |\psi_2(\mathbf{r}_Z)\rangle & \cdots & |\psi_Z(\mathbf{r}_Z)\rangle \end{vmatrix}. \quad (1.5)$$

这意味着, 分离变量的求解方式未必可行。事实上, 多电子原子能级的解析解并不存在^[6,8]。

回到对氦原子问题的求解, 为计算其能级, 有必要采用一些数值方法。一些常用的数值方法包括, 使用变分波函数, 通过最小化系统的能量期望值来得到基态能量的近似值^[8]; 引入 Hartree-Fock 近似, 将多电子波函数近似为单电子波函数的乘积, 考虑电子之间的平均场相互作用, 通过自洽场迭代方法求解 Hartree-Fock 方程, 得到每个电子的轨道^[9]; 采用密度泛函理论 (DFT), 引入电子密度函数来描述系统的能量, 而不是直接处理多电子波函数, 使用近似交换-关联泛函来处理电子间的相互作用^[10]; 以及直接对哈密顿量进行数值对角化^[11]等。随着机器学习的研究与发展, Google DeepMind 已经训练出了采取第一性原理求解多电子薛定谔方程的神经网络, 即费米子神经网络 (FermiNet), 其适用于求解氦原子在内的多电子原子基态波函数及能量^[12]。求解氦原子能级的快速、高效且与实验数值相吻合的计算方法, 相对成熟且正不断发展, 为量子少体问题的研究提供了可靠的经验与开阔的思路。

1.3 量子三体问题与 Efimov 效应

我们进一步增加所研究体系粒子数, 开始对量子三体问题的讨论。然而, 即便是经典的三体问题, 如牛顿引力框架下的三体动力学模型, 其微分方程都往往是混沌的; 量子三体问题的数学结构必然更加复杂。幸运的是, 量子三体研究中存在一类特殊的、具有普适性的问题: Efimov 问题。

Efimov 问题由 Vitaly Efimov 于 1970 年首次提出并研究, 其发现一类三粒子量子系统的奇异特性^[13-14]。首先, 系统中的两个粒子, 在短程相互作用 (此处为衰减快于 $1/r^3$ 的相互作用, r 为粒子间距) 下, 可能达到近共振的状态, 即几乎或刚好能够支持一个弱两体束缚态的状态。其产生机制的物理图像为: 由于粒子动能存在量子涨落, 若粒子间吸引相互作用相比之下较弱, 则无法将两个粒子束缚在一起; 当相互作用强度刚好足以抵消动能涨落带来的等效排斥时, 粒子将在相

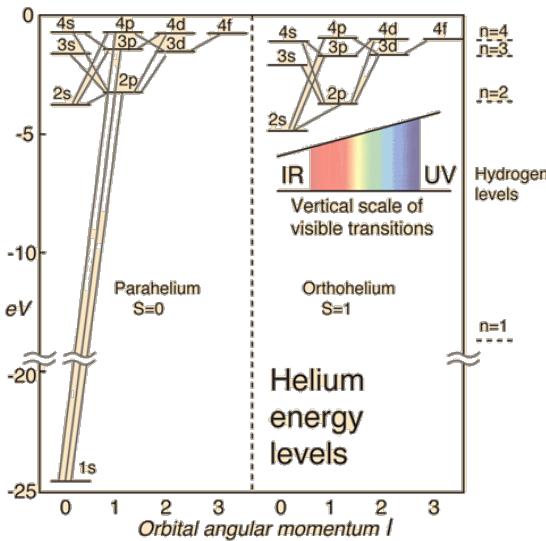


图 1-2 氦原子能级示意图。图片取自 [Hyperphysics: Helium Energy Levels](#)

互作用下的低能散射过程中接近结合, 达成“共振”的状态, 共存很长时间后才分开。定量地, 共振状态的形成, 可由散射理论中 s 波(对应角动量 $l = 0$) 散射长度远大于相互作用范围来表征。在此种条件下, 对于三体系统, Efimov 随即发现了一种有效的长程三体吸引力, 其可支持无限数量的三体束缚态, 被称为 Efimov 态; 等效吸引相互作用形式为 $V_{\text{eff}}(R) \sim -1/R^2$, 而决定系统态 $f(R)$ 等效的“径向方程”(实际需由超球坐标换元得到, R 仍为正比于系统尺度的长度量, 即超球径)可以写作:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{s_0^2 + 1/4}{R^2} \right] f(R) = E f(R), \quad (1.6)$$

其中 $s_0 \approx 1.00624$. 从该式可以看出, 作标度变换 $R \rightarrow \lambda R$, 能量变换为 $E \rightarrow E/\lambda^2$, 方程仍然保持成立, 即系统具有标度不变性。然而, 诱导出的等效吸引相互作用仅在长程(低能)下成立, 而我们已经忽略了短程(高能)的散射细节, 因此需对系统进行短程截断, 截断后的系统呈现出离散标度不变性。Efimov 发现, 三体系统能谱形成一个几何级数, 在零能阈值处积累, 对应于无限微弱的束缚态。量子三体问题中, 共振点附近呈现的诱导长程相互作用, 以及离散的标度不变性, 被称为 Efimov 效应。由 Efimov 效应引发的一系列现象被统称为 Efimov 物理^[15]。

离散的 Efimov 态能谱通常被比喻为一组俄罗斯套娃。这个形象最初用来描述重整化群极限环^[16], 其最初由 Kenneth G. Wilson 提出^[17]。Efimov 效应具有的离散标度不变性, 自然可从重整化群极限环视角进行研究^[18-19]。此外, 超越三体的更多体 Efimov 效应也被广泛研究; 理论上, 少体有效场论也被建立、应用, 以研究这类普适的量子少体问题^[20]。

Efimov 效应不仅因其独特性质而引人注目, 而且也揭示了低能物理的普适

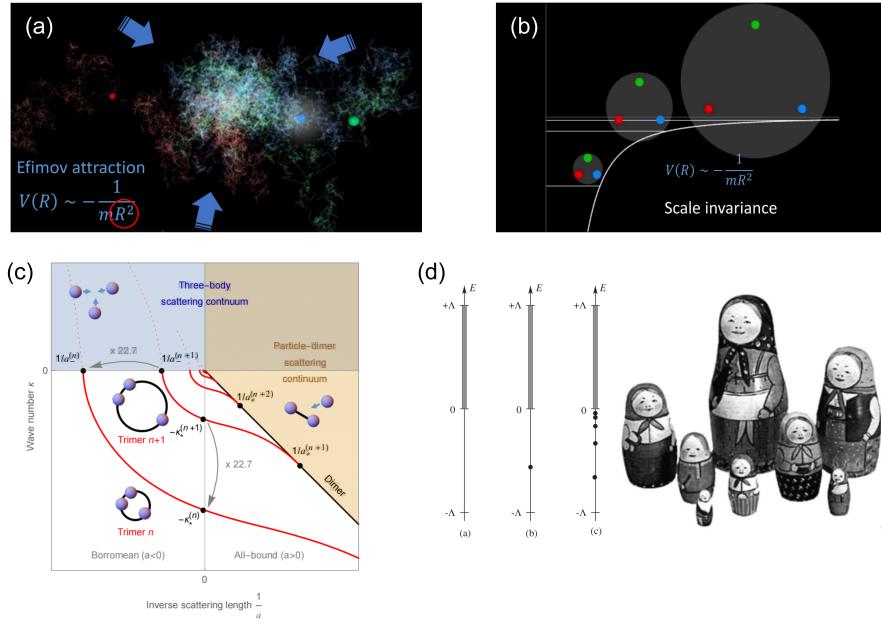


图 1-3 (a) 三体 Efimov 相互作用示意图。图中绘出三个粒子在平方反比的有效作用势下, 位置期待值的示意轨迹。图片取自文献^[15]附带视频。(b) 三体 Efimov 有效势及束缚态示意图。Efimov 态展示出标度不变的特征。图片取自文献^[15]附带视频。(c) “Efimov plot” 或 “Efimov scenario”, 图中左下方区域给出束缚态波数 κ 随散射长度的倒数 $1/a$ 变化的关系, 可见其谱成几何级数。相邻曲线横坐标截止值之比实际为 22.7, 此处仅作示意, 未按真实比例画出。图片取自文献^[15]。(d) 俄罗斯套娃与 Efimov 态能量的类比。图片取自文献^[20]

性。当具有短程相互作用的物理系统具有足够低的能量时, 其波函数会如此弥散, 以至于许多微观相互作用的细节变得无关紧要, 使得大部分性质可以通过少量参数有效描述。这种物理是普适的, 因为它可以应用于许多不同的系统, 而不考虑它们的微观细节。Efimov 物理就是这种情况的一个例子, 因为它涉及的状态中, 粒子的平均间隔大于它们相互作用的范围^[15]。由于这种普适性, Efimov 物理几乎适用于量子物理的任何领域, 如原子分子物理^[21], 核物理^[22–24], 凝聚态物理^[25], 以及高能物理^[26–27]等。有趣的是, 由于量子理论和统计物理之间的形式联系, 它也可能适用于经典系统的热平衡, 如三链 DNA (Triple-stranded DNA)^[28]。

验证 Efimov 效应及 Efimov 态存在性的实验持续进行。Efimov 理论提出七年后, T. K. Lim 指出了 He-4 原子的特殊性, 其原子间相互作用足够接近共振, 可以容纳两个三体束缚态, 也使得实验观察的可能性更高^[29]。Jan Peter Toennies 团队在哥廷根进行了长达十年的实验, 通过分析氦-4 团簇的衍射束, 寻找到了这两个 He-4 三聚体态^[30–31]。然而, 被视为真正的 Efimov 三聚体和 Efimov 效应证据的激发态三聚体却未被观察到。Efimov 物理学实验的真正突破来自超冷原子领域。1990 年代, 随着激光冷却、Feshbach 共振等冷原子调控技术的成熟^[32–34], 足以揭示三体 Efimov 性质 (三体存在于已知为非束缚的两体子系统区域以外的区域) 的

Cs-133 原子三体态于 2006 年被 Hanns-Christoph Nägerl 和 Rudolf Grimm 团队观测并分析、发表^[35]。此后, 四体 Cs 原子 Efimov 束缚态^[36], 三体 Cs 原子的第二个 Efimov 态^[37], 两个 Cs 原子和一个 Li 原子构成的三体系统的三个 Efimov 态^[38-39]被相继观测到。值得一提的是, 2015 年发表的文献^[40]中, Reinhard Dörner 课题组通过库仑爆炸成像技术, 观察到了人们长期寻找的 He-4 第二个三聚体。这不仅进一步实验证实了 Efimov 效应, 还提供了 Efimov 态的第一次空间成像。Efimov 效应的探索历史, 及其中标志性的成果, 总结在图 1-4 中。

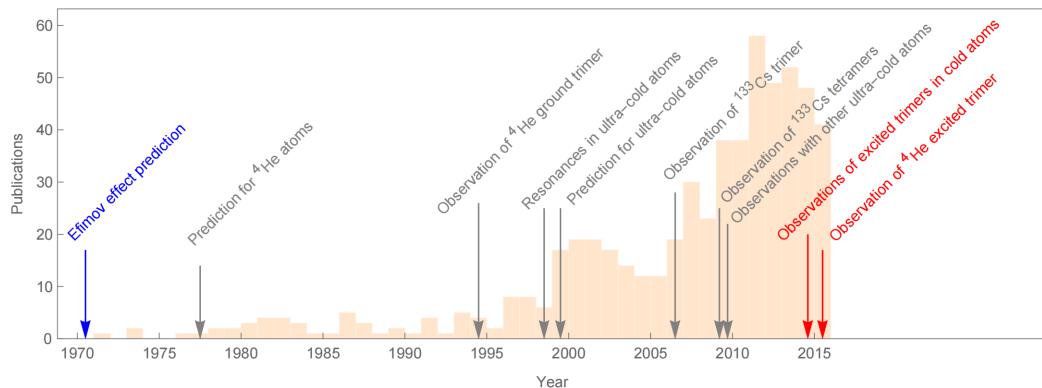


图 1-4 Efimov 效应理论及实验探索历史、成果总结。该图给出了自 Efimov 理论预测以来, 到 He-4 第二个三聚体被成功观测到期间, 每年的 Efimov 效应相关文献发表数量; 标出了标志性的成果。图片取自文献^[15]

本文的正文部分组织如下: 第 2 章从量子单体系统出发, 介绍了单电子问题与散射基本概念, 包括氢原子的波函数解法、对称性分析以及散射理论的基本方法。第 3 章讨论了量子两体问题的近似与求解, 详细解释了氦原子的求解过程、变分波函数方法和 Hartree-Fock 近似方法, 以及蒙特卡罗模拟的应用。第 4 章重点分析了 Efimov 效应, 在超球坐标系下推导出 Efimov 效应的条件和径向方程, 介绍了重整化群方法及其在 Efimov 问题中的应用, 推导及描绘了 Efimov 态能谱并讨论其特性。最后, 第 5 章对全文进行总结, 并展望了量子少体问题未来的研究方向和实际应用。

第2章 单电子问题与散射基本概念

紧扣量子少体这一主题，我们在课余时间学习了较多的量子力学知识。结合提供的参考文献列表，我们沿袭由少到多的思路，从可精确求解的氢原子模型入手，学习了基本的形式理论，同时也重点学习了低能散射的基本概念，为之后的 Efimov 问题研究打下基础。本章将从这以上两大主题入手，回顾我们相关的理论学习成果。

2.1 单电子问题：氢原子模型

只考虑库仑势的非相对论性单电子 toy model，作为氢原子的初阶波函数解法，是我们数理方法课程所学内容应用的范本。在本学期的数理方法和原子物理课程后回顾它有助于我们加深理解。其核心是从含时薛定谔方程

2.1.1 波函数解法

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.1)$$

中分离时间变量 $\psi(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ （势场不显含时间），得到定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 u(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) = Eu(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

并依据库仑势的球对称性，在球坐标下进一步分离变量 $u(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ ，分别求解径向方程和角向方程。

其中角向方程实为角动量平方算符

$$L_{\theta, \varphi}^2 \equiv -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (2.3)$$

在自然边界条件（单值有限）下的本征值问题，其解将是我们熟知的球谐函数，即 θ 方向连带勒让德函数 $P_l^m(\cos \theta)$ 与 φ 方向周期解 $e^{im\varphi}$ 的乘积，归一化后为：

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \equiv (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (2.4)$$

$$(l = 0, 1, 2, \dots; m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \quad (2.5)$$

借助变量代换 $R(r) = \frac{u(r)}{r}$, 可解析求解如下的径向方程

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = 0 \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.6)$$

其无量纲化后可进一步化为 Laguerre 方程（实为 Kummer 方程）。故最终我们可用三个量子数 n, l, m （主量子数、角量子数与磁量子数）来标记氢原子的定态波函数 $u_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$, 并借助特殊函数表达其解析解：

$$\phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2.7)$$

其中 a_0 为玻尔半径, $\rho = \frac{2r}{na_0}$, $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ 为广义 Laguerre 多项式, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ 为球谐函数。这一抽象的波函数表达式, 可以借助2-1可视化理解:

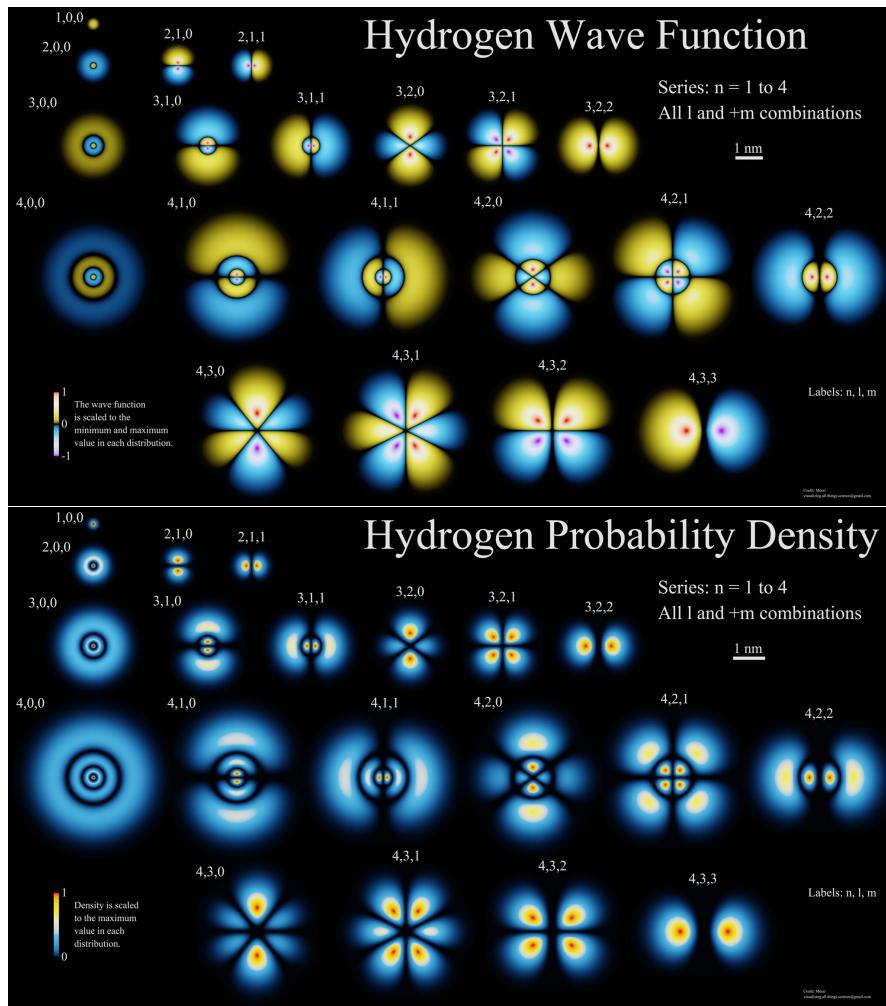


图 2-1 单电子波函数与概率密度分布的可视化, 图片取自 [Flickr:Hydrogen Electron Orbitals](#)

值得注意的是, 上述最简氢原子模型中, 能级的 $n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$ 重简并 (对于特定的支壳层, 电子磁量子数 m 有 $(2l+1)$ 种取值), 并不能很直观从上述薛定谔方程波函数解法看出。

2.1.2 对称性分析与简并性

借助对称性的分析，我们可以避免直接求解薛定谔方程，从更高的视角得到氢原子能级的简并性，并借此讨论相对论修正与自旋轨道耦合带来的能级分裂。先从非相对论氢原子的哈密顿量入手：

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{k}{r} \quad (2.8)$$

其中势能部分的球对称性明示我们，该系统至少以三维转动群 $SO(3)$ 作为其对称群， $SO(3)$ 的三个生成元 $\vec{L} = i\partial_{\vec{\theta}} R(\vec{\theta})|_{\vec{\theta}=0}$ 恰对应最明显的三个守恒量——角动量的三个分量 $L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$ ，且满足对易关系 $[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k, i, j, k = 1, 2, 3$ 。但对于 $SO(3)$ 群的不可约表示，表示空间的基函数是我们在波函数解法中引入的球谐函数 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ，其维数仅为 $(2l+1) < n^2$ 。这迫使我们寻找新的守恒量，以构建更大的对称群来描述氢原子系统的动力学对称性。

回想起上学期经典力学课程中，我们学习到的天体运动中额外的“离心率守恒矢量”，Laplace-Runge-Lenz 矢量 $\vec{R} = \vec{p} \times \vec{L} - mk\vec{r}/r$ ，自然联想到其是否能够算符化推广到氢原子系统中。但当我们计算对易子 $[\vec{R}, H]$ 后，将失望地发现，这一算符并不与哈密顿量对易。幸运的是，将其改写为 Hermitian 形式后

$$\vec{R} = \frac{1}{2mk}(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) - \frac{\vec{r}}{r}, \quad (2.9)$$

我们将得到守恒的 Runge-Lenz 矢量。归一化 $\vec{A} = [\frac{-2H}{mk^2}]^{-\frac{1}{2}} \vec{R}$ 后，进一步得到该系统六个守恒量之间简洁的对易关系

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k, [L_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} A_k, [A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} L_k \quad (2.10)$$

上述的对易关系在 Sakurai 等教材中常被认为是“氢原子系统动力学对称性由 $SO(4)$ 群描述”的依据，因为它们恰可对应 $SO(4)$ 的六个生成元。但这样的说法稍有瑕疵，因为 $SO(4) \cong SU(2) \times SU(2)$ ，每个 $SU(2)$ 的不可约表示维数为 $(2j+1)$ （整数或半整数的 j ，以示与 $SO(3)$ 的整数表示 l 的区分）， $SO(4)$ 的不可约表示维数为 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ ，并不直接对应氢原子的 n^2 重简并。

不过我们注意到两个守恒矢量间还有特殊的正交关系 $\vec{L} \cdot \vec{R} = 0$ （类比天体运动中轨道平面内的 Runge-Lenz 矢量与角动量正交），这促使我们考虑另外两组独立的角动量

$$\vec{I} = (\vec{L} + \vec{A})/2, \quad \vec{K} = (\vec{L} - \vec{A})/2 \quad (2.11)$$

它们不仅有同等简洁的对易关系

$$[I_i, I_j] = i\epsilon_{ijk} I_k, [K_i, K_j] = i\epsilon_{ijk} K_k, [I_i, K_j] = 0 \quad (2.12)$$

其二次型 *Casimir* 算符 \vec{I}^2, \vec{K}^2 还满足

$$\vec{I}^2 - \vec{K}^2 = \vec{L} \cdot \vec{A} = 0 \quad (2.13)$$

亦即它们的本征值被限定为 $i = k$ 。这直接导致其哈密顿量的本征值满足的方程退化为

$$\vec{I}^2 + \vec{K}^2 = \frac{1}{2}(\vec{L}^2 + \vec{A}^2) = \frac{1}{2}(1 - \frac{mk^2}{2H}) = 2j(j+1) \quad (2.14)$$

其中 I^2 与 K^2 的本征值此时均为 $j(j+1)$, j 取半整数或整数。最终我们求解得到 n^2 重简并的氢原子能级：

$$H = -\frac{mk^2}{2n^2}, \quad n = 2j+1 = 1, 2, 3, \dots \quad (2.15)$$

回顾推导过程，我们不难发现，是额外的守恒量 \vec{R} 的引入，及其与角动量的正交性，使得氢原子束缚态可由 SO(4) 群中满足 $\vec{I}^2 = \vec{K}^2$ 的非独立表示描述，最终解释了其能级的 n^2 重简并性。

与此不同，相对论性氢原子遵循的 Dirac 方程（自然单位制， α, β 为 Dirac 矩阵），并不遵循这一对称性^[41]。其哈密顿量形式为：

$$H = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m - \frac{k}{r}. \quad (2.16)$$

其中 $\vec{\alpha}$ 与 $\vec{\beta}$ 分别为 Dirac 矩阵的 α 和 β 分量， \vec{p} 为动量， m 为质量， \vec{r} 为位置。这与自旋轨道耦合 $H \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$ 一起，造成氢原子能级的退简并，分裂出精细结构。例如与总角动量量子数相关联的 Sommerfeld 公式，

$$E_{jn} \approx -\frac{\mu c^2 \alpha^2}{2\pi^2} [1 + \frac{\alpha^2}{n^2} (\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4})] \quad (2.17)$$

以及自旋轨道耦合带来的 Lamb 位移等，都是氢原子精细结构的重要特征。更进一步，考虑原子核的自旋还将带来氢原子的超精细结构。本部分都不再赘述。依照惯例，我们引用可视化的氢原子 *Grotian* 图，以展示氢原子能级的跃迁规律。

氢原子能谱的解析解似乎与我们后续的研究内容有些脱钩，但其作为我们初入量子力学大门学习的最简单几个模型之一，仍然有许多值得我们深入思考的地方。且对于其各种外场下的能谱计算，实质上引入了微扰的思想，熟悉这些知识，有助于我们从底层理解微扰理论等相关的量子力学知识。

2.2 散射基本概念

2.2.1 分波法与散射长度

散射长度作为低能有效散射理论中，表征相互作用强度的重要参数，是我们研究 Efimov 问题的基础。在散射理论中，我们通常采用分波法来描述散射过

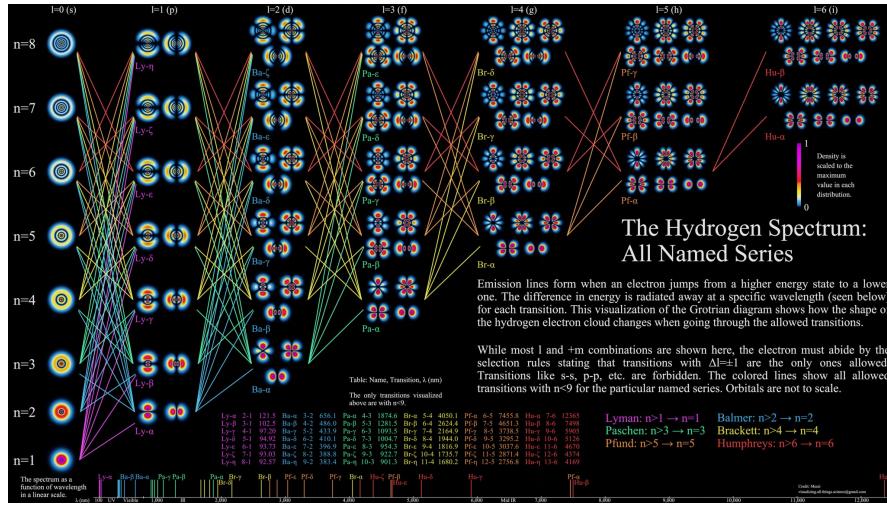


图 2-2 氢原子能级跃迁图，图片取自 Flickr:The Hydrogen Spectrum: All Names Series

程。考虑质量为 m 的原子，通过短程势相互作用。两个具有相反动量 $\pm \hbar k$ 和总动能 $E = \hbar^2 k^2/m$ 的原子的弹性散射可以通过一个依赖于两个原子分离矢量 \mathbf{r} 的波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 来描述。对于中心势场散射问题，类比期末考试压轴题，我们讨论入射平面波。当 $r \rightarrow \infty$ 时，其渐近行为是平面波和出射球面波的和：

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.18)$$

在我们的讨论中，相互作用 $V(r)$ 仅在 $r < b$ 时显著，在远离这一区域后迅速衰减（快于 $\frac{1}{r^3}$ ）于是出射球面波可以使用广义傅里叶级数展开

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{f_l(r)}{r} P_l(\cos \theta) \quad (2.19)$$

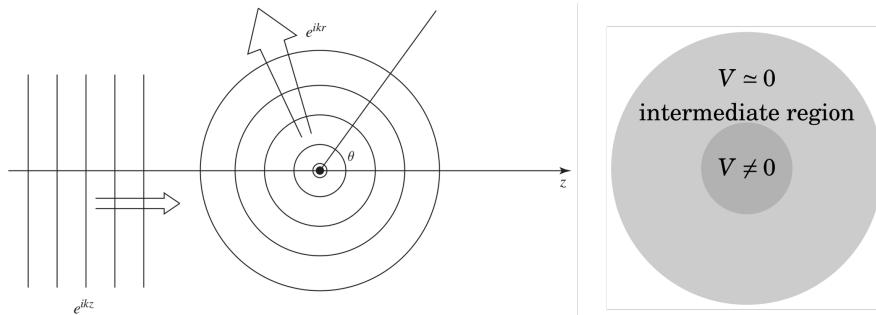


图 2-3 分波法示意图，取自文献 [15,20]， z 方向为入射平面波， θ 方向为出射球面波，右图表示远离相互作用范围的渐进自由区域

在 $r \gg b$ 的无相互作用区域，每个分波的振幅 $f_l(r)$ 可渐进展开为：

$$f_l(r) \propto \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (2.20)$$

其中 $l \neq 0$ 的分波，相移 $\delta_l \approx 0$ 。在低能散射下，只有 $l = 0$ 的 s 波相移显著（仅限于我们讨论的玻色子相互作用，对于费米子为 p 波）。对于不同的势能 $V(r)$ ，均可以将相移展开为：

$$k \cot \delta_0(k) = -1/a + \frac{1}{2}r_s k^2 - \frac{1}{4}P_s k^4 + \dots \quad (2.21)$$

其中 a 定义为 s 波散射长度， r_s 定义为 s 波有效范围， P_s 为形状参数。 a 的物理意义还可以用图2-4 来解释：散射长度 a 即为出射波 $\chi(r)$ 第一个零点位置，调节

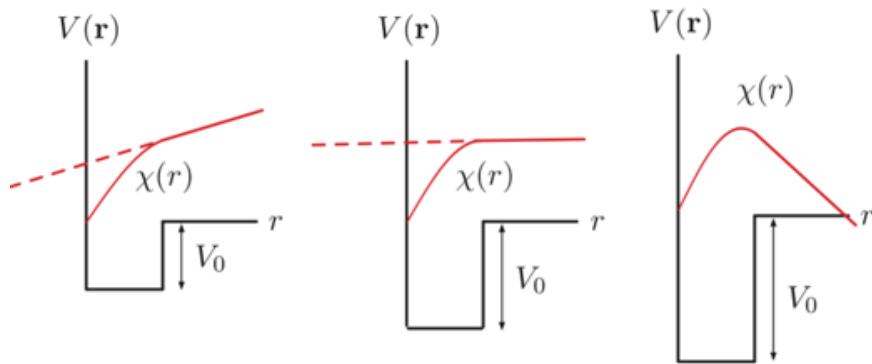


图 2-4 散射长度示意图，取自文献^[42]，根据出射波第一个零点的位置，可以直观判断散射长度的大小与正负 (a) 散射长度为负 (b) 散射长度发散，共振 (c) 散射长度为正

不同的势阱深度，可以使 $a < 0$ 或者 $a > 0$ ，甚至是 $a \rightarrow \infty$ 。

2.2.2 调节散射长度——Feshbach 共振

Efimov 问题的研究一度停滞，原因在于其需要达到的近共振相互作用条件过于苛刻。所幸在冷原子系统的实验技术取得进展后，Feshbach 共振为我们提供了一种调节散射长度的方法。

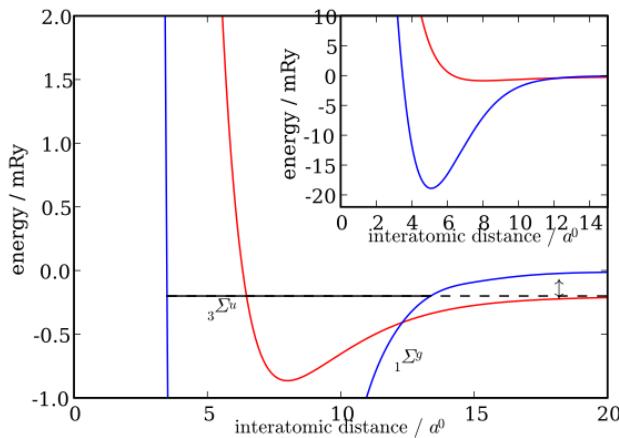


图 2-5 Feshbach 共振示意图，图片取自 [Wikipedia:Feshbach resonance](#)

图2-5展示了两个原子通道耦合的过程，通过外加磁场调节两个通道的能量差，可以在交叠区形成中间过渡的虚态进而调节散射长度。这一技术的发展，为我们研究 Efimov 问题提供了新的可能性。具体而言，散射长度依赖于外加磁场的形式将为：

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0}\right) \quad (2.22)$$

其中 a_{bg} 是背景散射长度， B_0 是发生共振的磁场强度， Δ 是共振宽度。当我们把磁场调至共振点附近，散射长度 a 将从 $-\infty$ 跃变至 $+\infty$ ，这将使系统产生接近零能的极浅束缚态

$$E_c = -\hbar^2/2ma_s^2 \simeq 0 \quad (2.23)$$

使得原子能在散射态与束缚态之间跃迁，也即达到散射共振，这也是 Efimov scenario 图中二聚体散射态与三聚体等分界处的物理图景。

2.2.3 两个极限与重整化群流极限环

在讨论 Efimov 问题时，我们强调两体相互作用的自然作用范围是有限的，但要求等效的作用范围散射长度 a 较大，这实际上是在调节两者的比值 $\frac{a}{r_0}$ 发散。这一目标可以通过两种等效途径实现，即分别调节散射长度 a 和两体相互作用范围 r_0 。接下来，我们将探讨这两种调节方式的不同点。

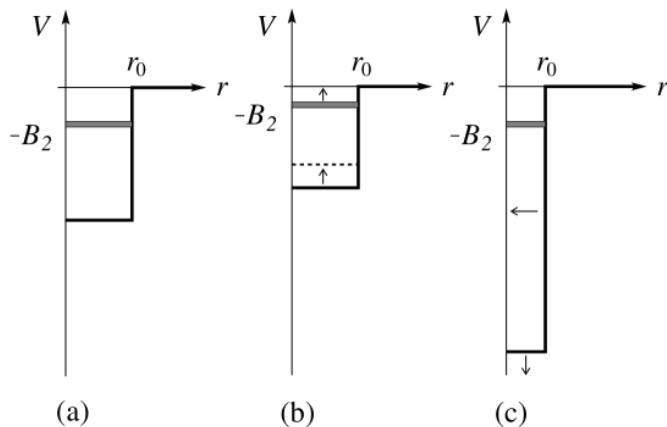


图 2-6 共振极限与标度极限调节示意图。图片取自文献^[43]。(a) 调节前的势阱，(b) 通过调节势阱深度达到的共振极限，(c) 通过同时调节势阱宽度与深度达到的标度极限。

共振极限：当散射长度 $a \rightarrow \pm\infty$ ，相互作用的自然范围 r_0 保持固定，这对应于系统在高能（共振点附近）的细节。

标度极限：当散射长度 a 固定，相互作用的自然范围 $r_0 \rightarrow 0$ ，这对应于系统的长程物理图像。

在具体调节中，以有限深方势阱为例，共振极限只需要调节势阱深度（实验上通过 Feshbach 共振完成）。而标度极限不仅需要调节势阱宽度 $r_0 \rightarrow 0$ ，还要保

证散射长度不因此改变，因此需要同时改变势阱深度。相比于共振极限，标度极限的调节自由度更高。

在第4章中，我们将详细讨论 Efimov 问题中重整化群的应用，此处简要说明两个极限对应的重整化群流的极限环行为。在“粗粒化”调整系统耦合常数 $\Lambda \frac{dg}{d\Lambda} = \beta(g)$ 的过程中，如图 2-7 所示，重整化群流可能会遇到不动点、极限环，甚至是分岔出更复杂的行为。

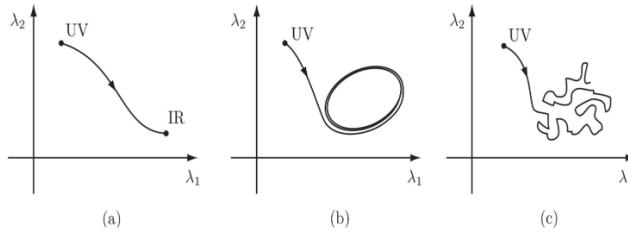


图 2-7 重整化群流不同情况示意图，取自文献^[44]，(a) 不动点 (b) 极限环 (c) 分岔等情形。

Glazek 和 Wilson 最初使用的是一个离散的 toy model

$$\langle m | H_N | n \rangle = b^{(m+n)/2} \epsilon (I_{mn} - g_N S_{mn} - i h_N A_{mn}), \quad m, n = 0, 1, \dots, N \quad (2.24)$$

来讨论极限环行为。其中 g 与 h 分别为相互作用中的对称和反对称部分。其耦合常数变换的方程

$$g_{N-1} = \frac{g_N + h_N^2}{1 - g_N}, \quad h_{N-1} = h_N \quad (2.25)$$

将给出 p 次迭代后的耦合常数

$$\arctan \left(\frac{g_{N-p}}{h} \right) = \arctan \left(\frac{g_N}{h} \right) + p \arctan(h) \quad (2.26)$$

于是这个 toy model 由于边界条件限制破缺成了离散标度不变性 $\lambda_0 = b^{\pi/\arctan(h)}$ 。但根据 h 的不同取值，这一离散标度不变性可能也无法在有限能标范围内展现。最经典的例子就是氦核中的第二个浅束缚态难以寻找^[13]。

前述的高能细节下的共振极限，对应的是紫外截断 $\Lambda \rightarrow \infty$ ；而更关注长程物理图像的标度极限，对应的是紫外截断 $\Lambda \rightarrow 0$ 。在重整化群流中，它们分别对应紫外极限与红外极限附近的极限环行为，但导致的离散标度不变性却是相反互补的。

其中，紫外极限附近的共振极限，随着散射长度趋于发散，将导致系统存在一系列无限深的束缚态

$$E_T^{(n)} \sim (e^{-2\pi/s_0})^{(n-n_*)} \frac{\hbar^2 \kappa_*^2}{m}, \quad n \rightarrow -\infty \quad (2.27)$$

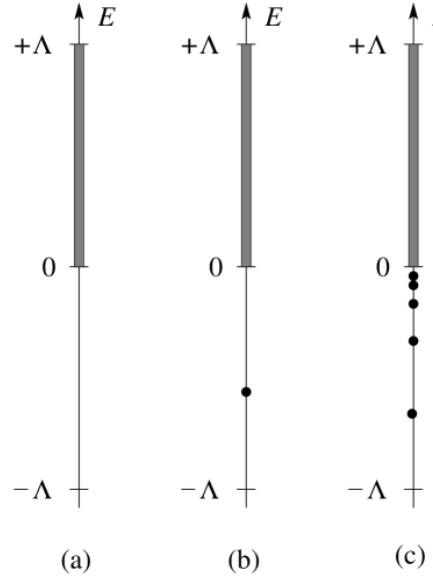


图 2-8 Glazek-Wilson 模型离散标度不变性示意图。阴影部分表示散射态连续谱，圆点表示束缚态离散谱。图片取自文献^[20]。(a) 无相互作用， $g = h = 0$ ，系统只有连续谱；(b) $h = 0$ 的相互作用模型，缩放因子趋于 ∞ 等效于只有一个浅束缚态；(c) 一般情况下的离散标度不变性，一系列无限深、浅的束缚态。

而红外极限附近的共振极限，将导致系统存在一系列无限浅的束缚态

$$E_T^{(n)} \sim (e^{-2\pi/s_0})^{(n-n_*)} \frac{\hbar^2 \kappa_*^2}{m}, \quad n \rightarrow +\infty \quad (2.28)$$

两者的行为共同构成了 Efimov 离散标度不变性中的双方向无限多束缚态

$$E_T^{(n)} \sim (e^{-2\pi/s_0})^{(n-n_*)} \frac{\hbar^2 \kappa_*^2}{m}, \quad n \rightarrow \pm\infty \quad (2.29)$$

第3章 两体问题的近似与求解

3.1 引入：氢原子问题的求解

氢原子的研究在历史上是极富意义的。首先，它是最简单的真实的问题，在这个问题里面全同性问题起着一种重要的作用。其次，尽管它是一个简单的系统，但这个两粒子的薛定谔方程却无法解析地求解。因此，这是一个说明微扰论以及变分法用处的很好的地方。

基本的哈密顿量由

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{2e^2}{r_1} + \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (3.1)$$

给出，其中

$$r_1 = |x_1|, r_2 = |x_2|, r_{12} = |x_1 - x_2| \quad (3.2)$$

假定 e^2/r_{12} 项不存在。于是，在全同性问题被忽略的前提下，波函数将会只是会将 $Z = 1$ 变成 $Z = 2$ 的两个氢原子波函数的乘积。总自旋是一个运动常数，所以自旋态是单态或自旋态或是三重态。在其中的一个电子处于基态而另一个处于用 (nlm) 描述的激发态的重要情况中，波函数的空间部分是

$$\phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(x_1)\psi_{nlm}(x_2) + \psi_{100}(x_1)\psi_{nlm}(x_2)] \quad (3.3)$$

其中上面(下面)的符号是对自旋单态(三重态)的，以后将回到这个激发态的一般形式。

对于基态，需要有一个特殊的处理。这里，组态由 $(1s)^2$ 描述，即这两个电子都处在 $n = 1, l = 0$ 的态。那么，空间函数必定是对称的，且只有自旋单态函数是允许的，所以有

$$\psi_{100}(x_1)\psi_{100}(x_2)\chi_{\text{单态}} = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^2}\right) e^{-Z(x_1+x_2)/a_0} \chi_{\text{单态}} \quad (3.4)$$

其中 $Z = 2$ 。不足为奇的是，这个“无微扰”的波函数给出基态能量

$$E = 2 \times 4 \left[-\frac{e^2}{2a_0} \right] = -108.8eV. \quad (3.5)$$

它约比实验值大 30%。这正是研究的起点。因为在求得上3.4式的形式时完全忽略了3.1式中描写两个电子相互作用的最后一项。一种将更好能量问题的方法是：把3.4式作为无微扰波函数视为作用微扰。应用一级微扰论。得到

$$\Delta_{(1s)^2} = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = \left(\frac{Ze^2}{\pi a_0^3} \right) \int \int \frac{e^{-2Z(x_1+x_2)/a_0}}{r_{12}} dx_1 dx_2 \quad (3.6)$$

为了计算该次积分，首先注意

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{r_1, r_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\gamma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} P_l(\cos\gamma) \quad (3.7)$$

其中 $r_>, r_<$ 是 r_1 和 r_2 的较大（较小）的值， γ 是 x_1 和 x_2 之间的夹角。使用球谐函数的加法定理，用 $Y_l^m(\theta_1, \phi_1)$ 和 $Y_l^m(\theta_2, \phi_2)$ 表示出来，则角度积分可以很容易地进行。（例如参见 Arfken 和 Weber (1995) 的 12.8 节）有

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{l=0}^{\infty} Y_l^{m*}(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2) \quad (3.8)$$

此时角积分是平凡的，

$$\int Y_l^m(\theta_i, \phi_i) d\Omega_i = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} [(4\pi)\delta_{l0}\delta_{m0}] \quad (3.9)$$

在计算过程中，径向积分是基本的，但包括繁琐的代数，它导致

$$I = \int_0^{\infty} \left[\int_0^{r_1} \frac{r_1}{\exp\left(\frac{-2Z}{a_0} \cdot (r_1 + r_2)\right)} r_2^2 + \int_{r_1}^{r_2} \frac{r_2}{\exp\left(\frac{-2Z}{a_0} \cdot (r_1 + r_2)\right)} r_1^2 \right] r_1^2 dr_1 = \left(\frac{5a_0^5}{128Z^5} \right) \quad (3.10)$$

把所有的这些结果放在一起。对于 $Z = 2$ ，我们得到

$$\Delta W_1 = \left(\frac{Ze^2}{\pi a_0^3} \right) (4\pi)^2 \left(\frac{5}{128} \right) \left(\frac{a_0^5}{Z^5} \right) = \frac{5}{128} \frac{e^2}{a_0} \quad (3.11)$$

把这个能量移动到3.5式，有

$$E_{\text{计算}} = \left(-8 + \frac{5}{2} \right) \left(\frac{e^2}{2a_0} \right) = -74.8 eV \quad (3.12)$$

这个结果将与实验结果

$$E_{\text{实验}}^* = -78.8 eV \quad (3.13)$$

相比较，已经有了一定的准确度。但是如果我们希望将准确性再次提升。在接下来的处理中，我们可以应用变分的方法。^[6]

3.2 变分波函数

变分法的基础在于以下两个条件：

1. 基态是所有态中能量最低的。
2. 本征函数构成一个正交完备归一基，记为

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \varphi_n \quad (3.14)$$

通过求泛函极值的方式求出一个系统的基态能量或更高能级的能量，这种方法就是运用的变分的思想。设取任意一个波函数 ψ ，计算其期望能量 $E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ ，根据变分原理，得到的能量一定大于等于基态能量。

在实际应用中，通过逐渐优化波函数，可以使计算得到的能量逐渐逼近基态能量。这一优化波函数的过程即为变分法。对于一个复杂的系统，它的势能或者说哈密顿量已知，但波函数却难以求解，此时借助变分法，就能在没有严谨得到波函数的情况下，得到近似的基态能量。具体来说，我们可以对波函数进行合理地猜测，我们将猜测的波函数称为试探波函数。假设试探波函数为

$$\psi = \left(\frac{Z^3}{\pi a^3} \right) e^{-\frac{Z(r_1+r_2)}{a}} \quad (3.15)$$

其中 Z 为可变参数， a 为常数，且 $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ 。

我们需要计算

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \quad (3.16)$$

使用 Mathematica 逐项计算得：

$$\langle \psi | -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) | \psi \rangle = \frac{Z^2}{a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \quad (3.17)$$

$$\langle \psi | -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} \right) | \psi \rangle = \frac{-4Z}{a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \quad (3.18)$$

$$\langle \psi | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|r_1 - r_2|} \right) | \psi \rangle = \frac{5Z}{8a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \quad (3.19)$$

所以总能量

$$E = \left(Z^2 - \frac{27}{8}Z \right) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \right) \quad (3.20)$$

当 $Z = 1.6875$ 时能量最小， $E = -77.5$ eV。对比实验值 -78.975 eV，这个结果已经达到了较为精确的程度。在历史上，这个结果被认为是证实薛定谔波动力学的正确性的最早信号之一。如果我们将需求进一步升高，求解多电子系统下的本征态，则需要考虑在变分思想的基础上作合理的近似手段。

3.3 Hartree-Fock 近似方法

正如我们所熟知的，薛定谔方程解释了原子和亚原子粒子的运动。但薛定谔方程只适用于少数基本的单电子类氢系统。因此，我们需要更复杂系统的近似方法。在量子化学中，有两种基本理论可以近似多电子系统的电子结构：价键理论和分子轨道理论，这两种理论均相当于 Hartree-Fock 理论。Hartree-Fock 方法更易于计算机编码，因此是求解与时间无关的薛定谔方程的主要近似方法。

在 Born-Oppenheimer 近似条件下，由于原子核比电子重得多，移动速度慢得多，我们可以考虑电子在固定原子核的场中移动。因此，我们可以将上式中的第二项等同于零，并将最后一项视为常数。这样导致的误差可以忽略不计，因为向算符添加任何常数不会影响算符的特征函数，只会添加到算符的特征值。剩下的项被称为电子哈密顿量，它们表示 N 个电子在 M 个固定核的场中的运动

其能量的表达式为：

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H_{\text{ele}} | \Psi_0 \rangle \quad (3.21)$$

式中 E_0 表示体系基态电子能量； H_{ele} 表示体系的电子哈密顿算符，

$$H_{\text{ele}} = \sum_i^N -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^M \frac{Z_a}{R_{ia}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (3.22)$$

根据作用方式，可以将 H_{ele} 分解为两部分

$$H_{\text{ele}} = O_1 + O_2 \quad (3.23)$$

其中 O_1 为单电子算符

$$O_1 = \sum_i^N -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^M \frac{Z_a}{R_{ia}} = \sum_i^N -\left(\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \sum_{a=1}^M \frac{Z_a}{R_{ia}} \right) = \sum_i^N h_i \quad (3.24)$$

描述单个电子的动能和原子核吸引势能；而 O_2 为二电子算符

$$O_2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (3.25)$$

描述电子间相互作用。这个方程中的第一项是单电子动能的总和。第二个是每个电子和所有原子核之间的吸引力之和。因此，前两项是可分离的——注意，分离是基于电子的。但是，最后一项是所有电子对之间的排斥力之和，不可分割为单个电子项。Hartree 建议我们可以平均地近似电子-电子排斥。这意味着，我们可以计算每个电子与所有其他电子的平均场之间的排斥力，而不是计算所有电

子对的排斥力。通过这样做，我们可以将第三项分离为一组单电子项，并将哈密顿量写成单电子算符的和：

$$H_{\text{elec}} = \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (3.26)$$

$$f(x_i) = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + v^{HF}(x_i) \quad (3.27)$$

v^{HF} 是第 i 个电子由于其他电子而经历的平均电势， $f(x)$ 是一个单电子算符，称为 Fock 算符。使用 Fock 算符，我们可以将电子薛定谔方程分解为一组单电子方程。

$$f_i \chi_{x_i} = \sum_b \epsilon_{ba} \chi_{x_i} \quad (3.28)$$

Hartree 乘积作为电子波函数具有严重的流动性。也就是说，它与电子的不可区分性不一致。注意，如果我们在 Hartree 乘积中交换两个电子，结果项是不同的。

$$\chi(x_1, x_2, \dots, x_N) \neq \chi(x_2, x_1, \dots, x_N) \quad (3.29)$$

此外，根据泡利不相容原理，电子波函数必须是反对称的，这意味着随着任意两个电子的空间和自旋坐标的互换，波函数的符号会发生变化。

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = -\Psi(x_2, x_1, \dots, x_N) \quad (3.30)$$

为了满足这些要求，我们可以使用 Hartree 乘积的某些线性组合——注意，如果波函数是可接受的，那么它的线性组合也是可接受的。考虑一个双电子波函数，如果电子一和电子二分别占据 χ_i 和 χ_j 自旋轨道，我们有：

$$\Psi_{HP}(x_1, x_2) = \chi_i(x_1) \chi_j(x_2) \quad (3.31)$$

此外，我们可以通过将电子 1 放在 χ_j 中，将电子 2 放在 χ_i 中，得到另一个 Hartree 乘积。

$$\Psi_{HP}(x_2, x_1) = \chi_i(x_2) \chi_j(x_1) \quad (3.32)$$

这些 Hartree 乘积都不是反对称的，它们的电子也不可区分，但我们可以线性组合它们来形成反对称波函数。

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_i(x_1) \chi_j(x_2) - \chi_i(x_2) \chi_j(x_1)] \quad (3.33)$$

其中 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ 是一个归一化因子，减号确保波函数是反对称的。为了整齐起见，我们可以把这个方程写成 2×2 的行列式。

$$\Psi(x_1, x_2) = 2^{-1/2} \begin{vmatrix} \chi_i(x_1) & \chi_j(x_1) \\ \chi_i(x_2) & \chi_j(x_2) \end{vmatrix} \quad (3.34)$$

同样，每个 N 电子波函数都可以写成一个 $N \times N$ 的行列式，称为 Slater 行列式。

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = (N!)^{-1/2} \begin{vmatrix} \chi_i(x_1) & \chi_j(x_1) & \cdots & \chi_k(x_1) \\ \chi_i(x_2) & \chi_j(x_2) & \cdots & \chi_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_i(x_N) & \chi_j(x_N) & \cdots & \chi_k(x_N) \end{vmatrix} \quad (3.35)$$

每一行都属于 Slater 行列式中的一个电子，每一列都代表一个自旋轨道。这些行列式的线性组合是一个更准确的波函数，它更准确地考虑了电子之间的相关性。配置交互 (CI) 是一种更复杂且计算繁琐的方法，它利用这些行列式的线性组合来描述电子系统。使用单个 Slater 行列式可以说等于以平均方式处理电子-电子排斥，这是 Hartree-Fock 近似的本质。对比我们熟知的 Hartree 方法：

1. Hartree 方法

- 基于自治场的概念，即每个电子都在由其他电子产生的平均电场中运动。Hartree 方法忽略了电子间的交换相互作用，即电子具有不可区分性所带来的效应。
- 关键的是，Hartree 方法使用玻色子波函数进行计算，这在处理电子结构时是一个重要的限制，因为电子实际上是费米子。

2. Hartree-Fock 方法

- Hartree-Fock 方法是 Hartree 方法的一个改进版本，它考虑了电子之间的交换相互作用。这种方法基于 Slater 行列式，通过引入交换项来考虑电子的不可区分性和泡利不相容原理，这意味着它使用费米子波函数。
- Hartree-Fock 方法因此能更准确地描述电子间的相互作用，尤其是对于闭壳层系统。
- 但它仍然忽略了电子相关效应（即电子之间的动态相互作用），这在一些系统中可能非常重要。

在以上的行列式中，Hartree 乘积是一个完全不相关的波函数，但反对称的 Slater 行列式引入了电子之间的一些相关性。也就是说，具有平行自旋的电子不

可能在相同的空间轨道上，因为在这种情况下，两行斯莱特行列式相等——记住，如果一个行列式的两行相同，那么行列式为零。因此，Hartree-Fock 方法考虑了一种类型的相关性，称为交换相互作用。Slater 行列式的数学形式实际上对应于费米子的统计特征，这也是我们在后续计算中引入费米网络的原因，详细的模拟过程将在后面的3.4.2中详细介绍。

3.4 蒙特卡罗模拟：从梯度下降到费米网络 (Ferminet)

3.4.1 变分量子蒙特卡罗 (Quantum Monte Carlo, VQMC)：梯度下降与神经网络

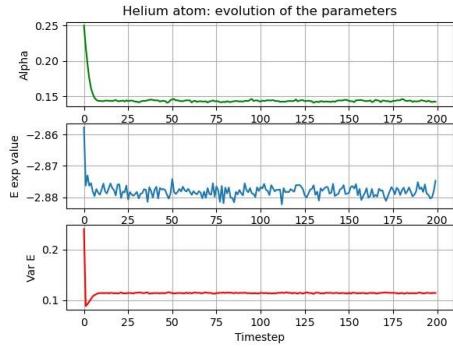
基于我们前面所介绍的内容，使用 Hartree-Fock 近似进行电子结构计算时，首先需要写出系统的哈密顿量。通过 Hartree-Fock 近似方法，我们可以假设包含待定变分参数的波函数。该波函数可以表示为 $\Psi(\alpha)$ ，其中 α 为待定的变分参数。接下来，我们需要计算局域能量 (Local Energy)，其表达式为：

$$E_L = \frac{\hat{H}\Psi(\alpha)}{\Psi(\alpha)} \quad (3.36)$$

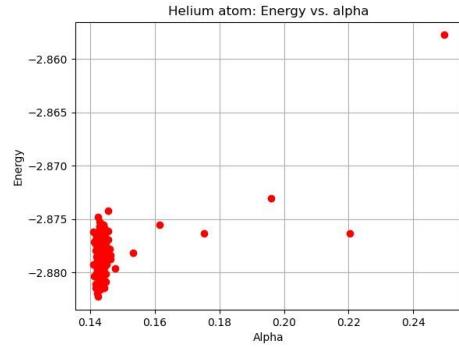
最后，通过调整波函数中的参数 α ，使得局域能量 E_L 达到极小值。这一过程使得我们能够找到系统的基态能量和相应的波函数，从而更准确地描述电子间的相互作用和系统的整体行为。

我们首先考虑采用 Metropolis 算法进行优化，生成随机的变量 r ，并给予 r 随机微扰。若概率密度 $\rho = \psi^\dagger \psi$ 变大，则接受 r 的更新；若概率密度 $\rho = \psi^\dagger \psi$ 变小，则生成随机数，概率密度大于随机数则更新 r ，反之则拒绝更新。重复以上循环，计算平均基态能量并不断更新变分参数，不断逼近准确结果，可见平均能量趋近基态能量。

采用梯度下降的方式进行计算，首先如前所述我们分别写出氦原子的哈密顿量： $\hat{H} = -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right)$ 。选用的波函数： $\psi = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1 + r_2)/a}$ 进行约两百次迭代后结果如图 3-1。



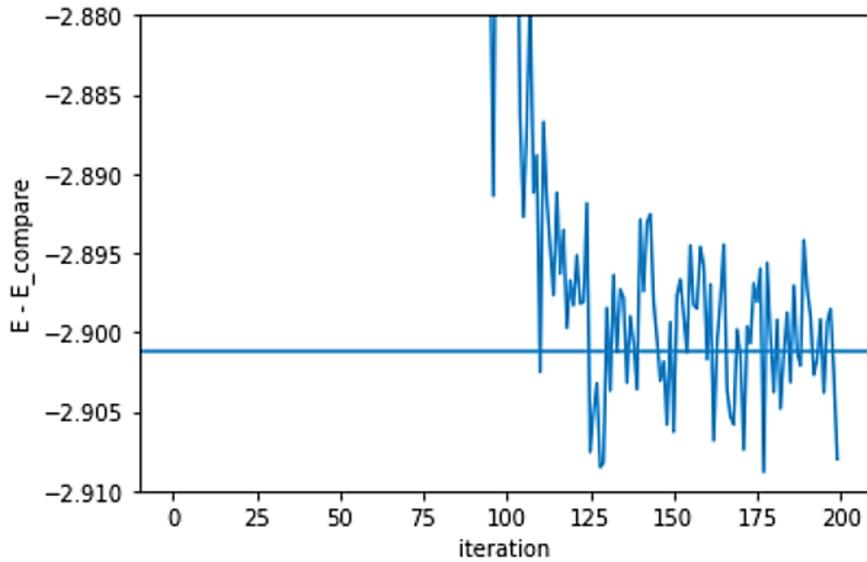
(a) 计算氦原子的参数迭代过程



(b) 计算所得的氦原子基态能量。

图 3-1 $\psi = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a}$ 梯度下降的模拟结果

模拟结果3-1a, 3-1b显示，计算得到的氦原子基态能量在-2.878Hartree附近震荡（参考标准值-2.90Hartree）。如果我们通过添加更多的变分参数这一手段提升计算准确性，我们写出哈密顿量： $\hat{H} = -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|r_1-r_2|}\right)$ 。选用的波函数： $\psi = e^{-2s}(1 + \frac{u}{2}e^{au})(1 + bu + cu^2 + du^2)$ ，迭代200次后如图3-2。能量在-2.901Hartree附近震荡（参考标准值-2.9037Hartree）。

图 3-2 $\psi = e^{-2s}(1 + \frac{u}{2}e^{au})(1 + bu + cu^2 + du^2)$ 梯度下降模拟结果

从计算时间来看，第一次迭代用时约为5小时，而第二次用时约为10分钟，在提升准确性的前提下计算的效率也有了量变，佐证了变分在计算机模拟中的可操作性。

至此，我们可以使用Metropolis-Hastings提取样本，使用重要性采样评估能量和梯度，更新波函数参数并重复。现在，我们继续使用神经网络来处理波函数。继续讨论氦原子。由于氦是双电子系统，空间波函数必须是对称的（反对称

性来自波函数的自旋部分)。因此，我们只需使用多层感知机 (MLP) 学习氦基态波函数。编写一个使用简单包络函数乘以 MLP 输出的网络，包络确保波函数服从开放边界条件，尝试使用电子位置和距离作为特征，使用 ADAM 优化网络并监控能量收敛。

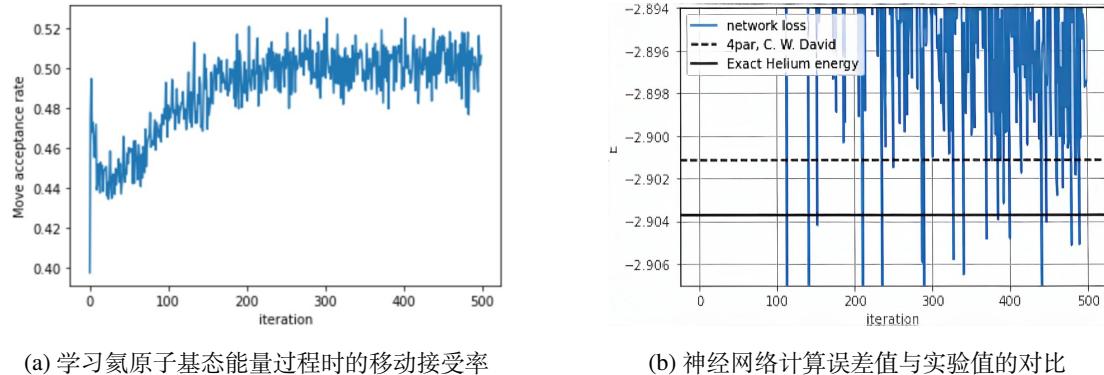


图 3-3 MLP 学习氦基态波函数的模拟结果

迭代 500 次后的结果显示，200 次后接受率已经趋于稳定，而且其能量误差与 David 等人的实验结果相比，准确性已经相当可观。

我们在前文采用的梯度下降的优化算法普遍存在计算速度较慢的弊端，产生这种问题的主要原因是因为我们代码中对同一个点进行了多次随机计算，以避免落入局部最优解而非全局最优解。但总体而言，计算效率不如费米网络框架下理想，接下来我们将介绍费米网络下的优化过程。

3.4.2 优化算法：费米网络

深度学习在人工智能领域的成功引发了大量关于神经网络在量子物理和化学中应用的研究。这些方法中，许多通过对从现有计算方法中编制的数据集进行监督学习，训练深度神经网络来预测新系统的性质。我们可以从有限集的一电子轨道 ϕ_1, \dots, ϕ_N 出发，将多电子波函数近似为这些函数的反对称化张量积 (Slater 行列式) 的线性组合：

$$\sum_{\mathcal{P}} \text{sign}(\mathcal{P}) \prod_{i=1}^N \phi_i^k(\mathbf{x}_{\mathcal{P}(i)}) = \begin{vmatrix} \phi_1^k(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_1^k(\mathbf{x}_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1^k(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_1^k(\mathbf{x}_1) \end{vmatrix} = \det[\phi_i^k(\mathbf{x}_j)] = \det[\boldsymbol{\Phi}^k], \quad (3.37)$$

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \sum_k \omega_k \det[\boldsymbol{\Phi}^k], \quad (3.38)$$

其中， $\{\phi_1^k, \dots, \phi_n^k\}$ 是 N 个轨道中 n 个轨道组成的子集，式(3.37)中的求和是对电子索引的所有排列 P 进行的。计算中的困难在于，Slater 行列式的数量随着系统规模呈指数增长。因此一般采用对拟设进行优化的方法计算。

大多数量子蒙特卡罗方法中波函数拟设的选择是 Slater-Jastrow Ansatz，即采用一个截断的 Slater 行列式线性组合并添加一个 Jastrow 因子，以描述近距关联。

通过将费米神经网络 (Fermionic Neural Network，或 FermiNet) 作为更灵活的波函数拟设，可以极大提高变分量子蒙特卡罗方法的速度与准确性。^[45] FermiNet 避免了使用有限基组集，这是其他波函数拟设中误差的重要来源，并且可以更好地对高阶电子-电子相互作用进行建模。

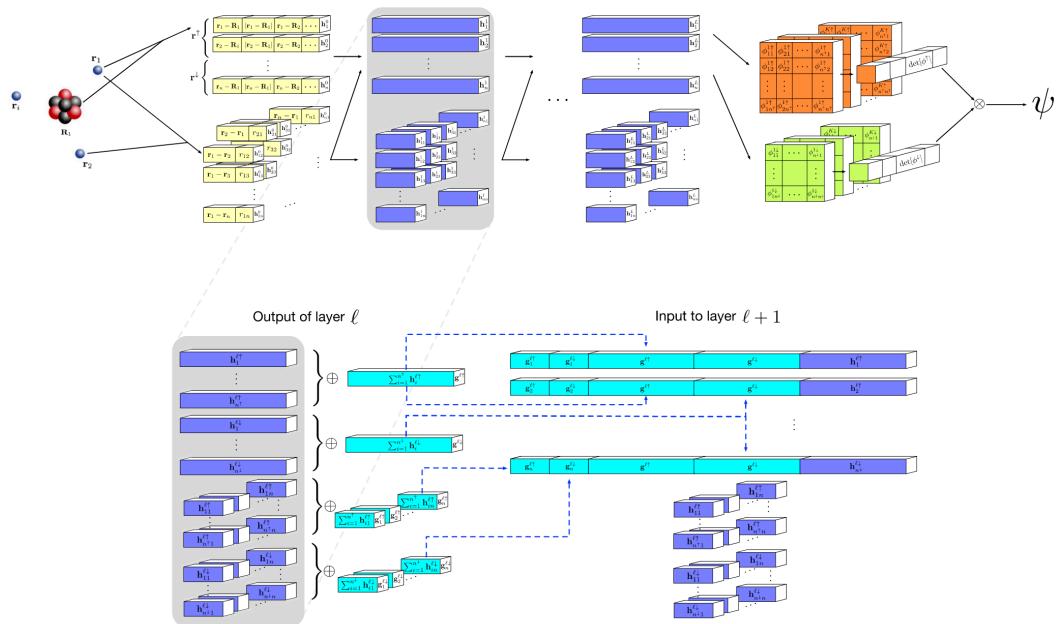


图 3-4 FermiNet 结构示意图。图片取自文献^[45]

FermiNet 中，需要单电子和电子对的特征作为输入。对于网络的单电子流输入，包括每个电子和原子核之间的位置差异 $\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I$ 和距离 $|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|$ 。类似地，对于双电子流的输入包括电子之间的位置差异 $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ 和距离 $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 。直接将粒子之间的绝对距离作为输入消除了在行列式之后需要单独加入 Jastrow 因子的必要性。由于距离在零点是一个非平滑函数，神经网络能够表达当两个粒子重合时波函数的奇异行为。

为了满足费米子波函数的整体反对称约束，FermiNet 的中间层以一种置换等价的方式混合信息。在中间层中，取网络不同流激活的平均值，将这些平均激活连接并添加到网络的单电子流中。对于各个单层来说，这只是一个线性操作，但层后结合非线性激活函数时，它可以成为构建置换等价函数的结构。来自其他单电子流和双电子流的信息都被输入到单电子流中。为了减少计算开销，双

电子流之间并没有信息传递。这个连接的向量随后输入到一个线性层，后接一个 \tanh 非线性函数。对于同一形状的层之间，还为单电子流和双电子流添加了残差连接。

在网络的最后一个中间层之后，对激活进行一个自旋依赖的线性变换，并将输出乘以一个指数衰减包络的加权和，确保波函数在远离原子核时趋于零的边界条件。新的波函数仅在相同自旋电子交换下是反对称的，但仍然能产生自旋无关可观测量的正确期望值。如果需要，可以由此重新构建全反对称波函数。

如同变分蒙特卡罗波函数的优化，我们希望最小化波函数拟设的能量期望：

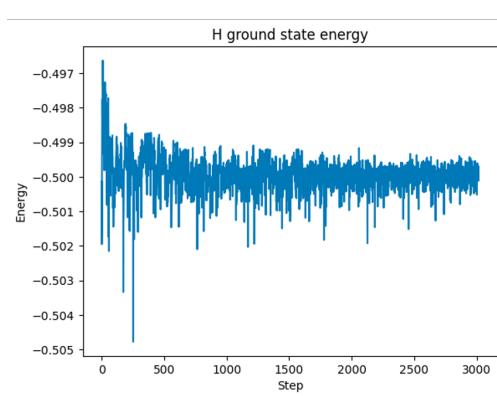
$$\mathcal{L}(\theta) = \frac{\langle \psi_\theta | \hat{H} | \psi_\theta \rangle}{\langle \psi_\theta | \psi_\theta \rangle} = \frac{\int d\mathbf{X} \psi_\theta^*(\mathbf{X}) \hat{H} \psi_\theta(\mathbf{X})}{\int d\mathbf{X} \psi_\theta^*(\mathbf{X}) \psi_\theta(\mathbf{X})} \quad (3.39)$$

其中 θ 为拟设参数， \mathbf{X} 表示完整的电子态。

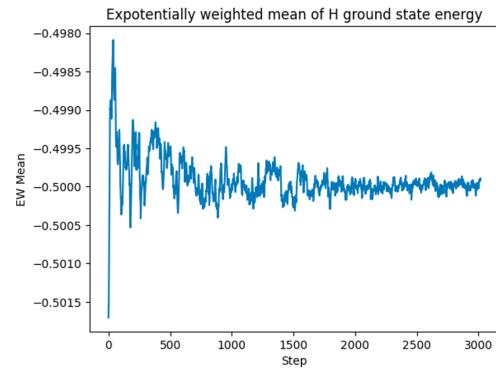
为优化波函数，使用 KFAC (Kronecker-factored Approximate Curvature) 算法的修改版本，一种适用于神经网络的自然梯度下降近似方法。

使用 FermiNet 可以方便快捷地计算复杂原子分子体系的相关参数^[46]。我们计算了氢原子与氦原子的基态能量，并将结果与变分量子蒙特卡罗方法进行了比较。

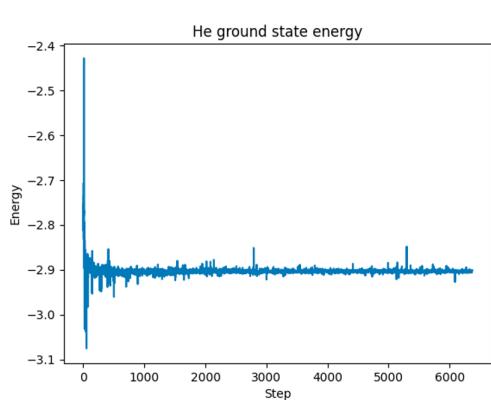
对 FermiNet 进行配置，氢原子为单电子，氦原子为双电子，预训练次数 100 次。分别迭代 3000 和 6000 次，可以获得以下结果：



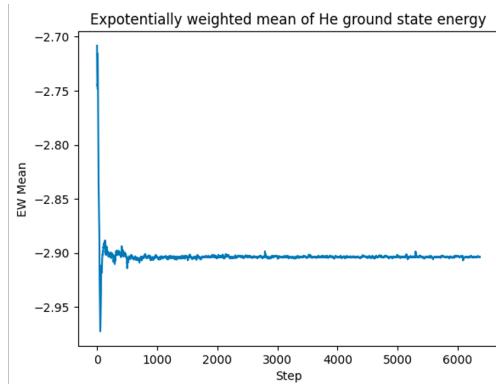
(a) H ground state energy



(b) Exponentially weighted mean of H ground state energy



(c) He ground state energy



(d) Exponentially weighted mean of He ground state energy

H 原子基态能量收敛到 -0.4999 Hartree, He 原子基态能量收敛到 -2.903 Hartree, 与现有理论相符, 且迭代速度相较于传统的量子蒙特卡洛方法有极大提高, 前者迭代数千次只需不到 10 分钟, 后者达到收敛则需要 7 小时.

第 4 章 Efimov 效应

4.1 在超球坐标系下推导 Efimov 效应

4.1.1 引入：Efimov 效应的条件

两体问题的求解已经有了相当的复杂性，不难想象，三体问题的研究应更是艰难。但幸运的是，在 Efimov 效应中，我们关心的是：只存在两体相互作用的，在标度极限 ($l \rightarrow 0$, l 为二体作用势的自然长度标度)，共振极限 ($a_s \rightarrow \infty$) 下的三个全同玻色子的浅束缚态 ($E \approx 0$)。这些条件，及三体问题的对称性，都会被充分利用，将大大简化我们的推导，并最终给出此时三体问题中的等效平方反比势，这也正是三体 Efimov 效应的根源^{[20] [47]}。我们将做的近似看似大胆，但每一步都有其物理根源，它们在极限条件下甚至是准确的。

4.1.2 从雅可比坐标系到超球坐标系

雅可比坐标系 (Jacobi coordinates) 是研究少体问题的范式，其在量子化学等的模拟中有着相当广泛的运用。对 n 个质点的系统 (质点 m_1, \dots, m_n 位于 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$)，定义 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \mathbf{r}_2 = \mathbf{x}_3 - \frac{m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2}{m_1 + m_2}$ ，以此类推，每个坐标 \mathbf{r}_i 都由前 i 个质点的质心指向第 $i + 1$ 个质点。首先，这样的坐标只依赖于各质点的相对位置，利用了问题的平移不变性；更重要地，动能算符和角动量算符在这一坐标系下有着简单的形式。

在此之前，我们将视角切换回三体问题。对三个全同玻色子，我们先定义雅可比坐标：

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \quad (4.1)$$

$$\mathbf{r}_{k,ij} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{2}(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j) \quad (4.2)$$

其中， i, j, k 是 $1, 2, 3$ 的轮换，我们可以定义三套这样的雅可比坐标。为了讨论三体系统的角动量 (我们很快会看到这样做的用意——便于我们将问题限制在 S 波散射下) 并便于利用三体波函数方程的性质 (即之后将做的超球展开)，我们考虑取类似求解氢原子时所取的球坐标系，从而可以先利用球谐函数作展开，处理角动量。当然，由于这里的雅可比坐标是 6 维的，我们需要的是超球坐标系 (Hyper-spherical coordinates)。

我们引入超球径 R (Hyper-radius) 及超角变量 α_k (Hyper-angle):

$$R^2 = \frac{1}{3} (r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2) \quad (4.3)$$

$$\alpha_k = \arctan\left(\frac{\sqrt{3}r_{ij}}{2r_{k,ij}}\right) \quad (4.4)$$

它们可给出 $r_{ij} = \sqrt{2}R \sin \alpha_k$, $r_{k,ij} = \sqrt{\frac{3}{2}}R \cos \alpha_k$ 。于是, 在超球坐标系下, 一种位形便记为 $(R, \alpha_k, \Omega_{ij}, \Omega_{k,ij})$, 其中 $\Omega_{ij}, \Omega_{k,ij}$ 为 $\hat{r}_{ij}, \hat{r}_{k,ij}$ 的方位角。

4.1.3 从薛定谔方程到低能 Faddeev 方程

如前所述, 在超球坐标系下, 系统的哈密顿量有着还算漂亮的形式:

$$H = T_R + T_{\alpha_k} + \frac{\Lambda_{k,ij}^2}{2mR^2} + V(R, \Omega) \quad (4.5)$$

其中, T_R, T_{α_k} 为分别对应着超球径和超角坐标的动能项, 而 $\Lambda_{k,ij}^2$ 称为广义角动量, 其对应有一角向动能。我们直接给出它们的形式:

$$T_R = \frac{\hbar^2}{2m} R^{-5/2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{15}{4R^2} \right] R^{5/2} \quad (4.6)$$

$$T_\alpha = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{1}{\sin(2\alpha)} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 4 \right] \sin(2\alpha) \quad (4.7)$$

$$\Lambda_{k,ij}^2 = \frac{\mathbf{L}_{ij}^2}{\sin^2 \alpha_k} + \frac{\mathbf{L}_{k,ij}^2}{\cos^2 \alpha_k} \quad (4.8)$$

其中, $\mathbf{L}_{ij}, \mathbf{L}_{k,ij}$ 分别为对应着角变量 $\Omega_{ij}, \Omega_{k,ij}$ 的常规角动量算符。

因为我们考虑的是三个玻色子, 所以可以把波函数写成对称的形式:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \psi^{(1)}(\mathbf{r}_{23}, \mathbf{r}_{1,23}) + \psi^{(2)}(\mathbf{r}_{31}, \mathbf{r}_{2,31}) + \psi^{(3)}(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{3,12}) \quad (4.9)$$

因为我们考虑的是散射问题, 所以自然可以假设势能中仅包含两体相互作用, 即 $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = V(r_{12}) + V(r_{23}) + V(r_{31})$ 。于是, 可以构造出满足对称形式 Faddeev 方程的 $\psi^{(i,j,k)}$:

$$\left(T_R + T_{\alpha_i} + \frac{\Lambda_{i,jk}^2}{2mR^2} \right) \psi^{(i)} + V(r_{jk}) (\psi^{(i)} + \psi^{(j)} + \psi^{(k)}) = E \psi^{(i)} \quad (4.10)$$

满足上式的 $\psi^{(i,j,k)}$ 被称为 Faddeev 波函数。它们的上标 i, j, k 是 1, 2, 3 的轮换, 于是共有三个这样的方程, 容易验证, 将它们相加便能恢复出薛定谔方程。在进

一步讨论前，我们先尝试简化 $\psi^{(k)}$ ，其变量中除了 R 和 α_k 之外，还有 $\Omega_{i,j}, \Omega_{k,ij}$ 对应的两组角变量。于是，我们需用两个球谐函数对其进行展开：

$$\psi^{(k)}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{k,ij}) = \sum_{l_x, m_x} \sum_{l_y, m_y} f_{l_x m_x, l_y m_y}^{(k)}(R, \alpha_k) Y_{l_x m_x}(\Omega_{ij}) Y_{l_y m_y}(\Omega_{k,ij}) \quad (4.11)$$

幸运的是，对玻色子而言，由分波法，在能量 $k \rightarrow 0$ 时，其散射波角动量为 L 的分量的相移满足 $\delta_L(k) \sim k^{2L+1}$ 。于是， $L=0$ 的 S 波占主导。这意味着，我们可以只保留 $l_x = l_y = 0$ 的分量。于是，Faddeev 波函数就只是超球径和超角的函数了，即 $\psi^{(k)} = \psi^{(k)}(R, \alpha_k)$ 。现在，Faddeev 方程便可改写作：

$$(T_R + T_{\alpha_1} - E) \psi(R, \alpha_1) + V(\sqrt{2}R \sin \alpha_1) [\psi(R, \alpha_1) + \psi(R, \alpha_2) + \psi(R, \alpha_3)] = 0 \quad (4.12)$$

但每个 Faddeev 方程中，都包含了三个超角坐标，显然不利于求解。我们可以利用 Faddeev 波函数的对称性，以及三组超球坐标间的对称性，将两边同时对 $d\Omega_{ij} d\Omega_{k,ij}$ 积分，并且利用：

$$\iint d\Omega_{ij} d\Omega_{k,ij} = \frac{32\pi^2}{\sqrt{3}} \int_{|\frac{1}{3}\pi - \alpha_k|}^{\frac{1}{2}\pi - |\frac{1}{6}\pi - \alpha_k|} \frac{\sin(2\alpha_i)}{\sin(2\alpha_k)} d\alpha_i \quad (4.13)$$

原方程于是可化作只与一个超角坐标有关的微分-积分方程：

$$\begin{aligned} (T_R + T_\alpha - E) \psi(R, \alpha) &= -V(\sqrt{2}R \sin \alpha) \\ &\times \left[\psi(R, \alpha) + \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{|\frac{1}{3}\pi - \alpha|}^{\frac{1}{2}\pi - |\frac{1}{6}\pi - \alpha|} \frac{\sin(2\alpha')}{\sin(2\alpha)} \psi(R, \alpha') d\alpha' \right] \end{aligned} \quad (4.14)$$

这便是在低能极限下的三体 Faddeev 方程。

4.1.4 绝热近似与径向方程的导出

在超球坐标系下求解波函数时，进行超球展开是常用的范式。超球展开的形式为：

$$\psi(R, \alpha) = \frac{1}{R^{5/2} \sin(2\alpha)} \sum_n f_n(R) \phi_n(R, \alpha) \quad (4.15)$$

其中， $f_n(R)$ 为超球径函数， $\phi_n(R, \alpha)$ 为超角函数，其满足本征方程：

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \lambda_n(R) \right] \phi_n(R, \alpha) &= \\ -\frac{2mR^2}{\hbar^2} V(\sqrt{2}R \sin \alpha) \times &\left[\phi_n(R, \alpha) + \frac{4}{\sqrt{3}} \int_{|(1/3)\pi - \alpha|}^{(1/2)\pi - |(1/6)\pi - \alpha|} \phi_n(R, \alpha') d\alpha' \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

该方程将 R 作为一个参数，其本征值为 $\lambda_n(R)$ ，超角函数作为其本征解 $\phi_n(R, \alpha)$ 构成一组本征基。 $\lambda_n(R)$ 还定义了一个存在平方反比形式的有效势能：

$$V_n(R) = [\lambda_n(R) - 4] \frac{\hbar^2}{2mR^2} \quad (4.17)$$

其会出现在超径函数的方程中。

然而, 由于 $\phi_n(R, \alpha)$ 满足的本征方程中的算符并不厄米, 它们之间并不满足正交关系, 但我们可以定义矩阵:

$$G_{nm}(R) = \int_0^{(1/2)\pi} d\alpha \phi_n^*(R, \alpha) \phi_m(R, \alpha) \quad (4.18)$$

我们将超球展开的表达式代入 Faddeev 方程, 并对两边取与 $\phi_n(R, \alpha)$ 的内积, 将得到耦合的径向函数微分方程组; 两边作用 $G(R)$ 的逆矩阵, 便可得到:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{15}{4R^2} \right) + V_n(R) \right] f_n(R) + \sum_m \left[2P_{nm}(R) \frac{\partial}{\partial R} + Q_{nm}(R) \right] f_m(R) = E f_n(R) \quad (4.19)$$

其中,

$$P_{nm}(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k G_{nk}^{-1}(R) \int_0^{(1/2)\pi} d\alpha \phi_k^*(R, \alpha) \frac{\partial}{\partial R} \phi_m(R, \alpha) \quad (4.20)$$

$$Q_{nm}(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k G_{nk}^{-1}(R) \int_0^{(1/2)\pi} d\alpha \phi_k^*(R, \alpha) \frac{\partial^2}{\partial R^2} \phi_m(R, \alpha) \quad (4.21)$$

这是通常的求解流程, 但幸运的是, 我们关注的 Efimov 问题处在共振极限下, 也即 $a_s \rightarrow \infty$, 可以料想, 在 $R \ll a_s$ 的尺寸下, 本征值 $\lambda_n(R)$ 对 R 的变化也应并不敏感(其合理性在最后会自行体现出来)。又由于 $R \ll l$, 故可以认为, 超角函数的本征方程中对 R 几乎无依赖, 故我们大可以做绝热近似, 也即认为 $\frac{\partial}{\partial R} \phi_n = 0$, $\frac{\partial^2}{\partial R^2} \phi_n = 0$, 进而 $P_{nm} = Q_{nm} = 0$ 。我们的径向方程最后便简化为了:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{15}{4R^2} \right) + V_n(R) \right] f_n(R) \approx E f_n(R) \quad (4.22)$$

4.1.5 本征值 λ 的数值求解

我们现在只剩下了最后一步——得到径向方程中的 $V_n(R)$ 的行为。为此, 我们需考察超角函数的本征方程, 得到其本征值 $\lambda_n(R)$ 的行为。我们考虑 $\alpha \gg 1$ 和 $\alpha \ll 1$ 两种极限下的行为, 并利用 $R \gg l$ 的标度极限条件, 联立两者, 得到描述 $\lambda_n(R)$ 的方程。

在 $\alpha \gg 1$ 的条件下, 有 $R \sin \alpha \gg l$, 进而 $V(\sqrt{2}R \sin \alpha) \approx 0$, 于是超角本征方程简化为:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \lambda_n(R) \right] \phi_n^{(hi)}(R, \alpha) \approx 0 \quad (4.23)$$

其解易得:

$$\phi_n^{(hi)}(R, \alpha) \approx \sin \left[\lambda_n^{1/2}(R) \left(\frac{\pi}{2} - \alpha \right) \right] \quad (4.24)$$

其中的 $\frac{\pi}{2}$ 是由于超球展开中分母上的 $\sin(2\alpha)$, 需要保证 $\alpha = \frac{\pi}{2}$ 时解的收敛。在 $\alpha \ll 1$ 时, 注意到此时超角本征方程中积分项的上下限之差为一小量, 且被积函数中的 ϕ_n 可取为 $\alpha \gg 1$ 时的解 $\phi_n^{(\text{hi})}$, 则方程可化为:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{2mR^2}{\hbar^2} V(\sqrt{2}R\alpha) \right] \phi_n^{(\text{lo})}(R, \alpha) \approx -\frac{2mR^2}{\hbar^2} V(\sqrt{2}R\alpha) \frac{8\alpha}{\sqrt{3}} \phi_n^{(\text{hi})}\left(R, \frac{\pi}{3}\right) \quad (4.25)$$

该非齐次方程的特解可写为:

$$\phi_n^{(\text{lo})}(R, \alpha) \approx A(R) \psi_0(\sqrt{2}R\alpha) - \frac{8\alpha}{\sqrt{3}} \phi_n^{(\text{hi})}\left(R, \frac{\pi}{3}\right) \quad (4.26)$$

其中, $\psi_0(\sqrt{2}R\alpha)$ 满足:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + V(\sqrt{2}R\alpha) \right] \psi_0(\sqrt{2}R\alpha) = 0 \quad (4.27)$$

仍是由于 $R \gg l$, 即便 $\alpha \ll 1$, 仍可认为有 $R \sin \alpha \gg l$, 故此时方程中的势能项可忽略, 解具有形式 $\psi_0(r) = r - a$, 由于 $r = a$ 是波函数第一次为零时的距离, 可知 a 的物理意义即为散射长度。同时可见, 此前在 $\alpha \gg 1$ 区域得到的解 $\phi_n^{(\text{hi})}$, 在 $\alpha \ll 1$ 区域也成立。于是, 让 $\phi_n^{(\text{hi})}$ 与 $\phi_n^{(\text{lo})}$ 两解在 $\alpha \approx 0$ 处函数值与导数值匹配, 可以得到:

$$A(R) = -\sin\left[\lambda^{1/2}(R)\frac{\pi}{2}\right] \frac{1}{a} \quad (4.28)$$

$$\cos\left(\lambda^{1/2}\frac{\pi}{2}\right) - \frac{8}{\sqrt{3}}\lambda^{-1/2} \sin\left(\lambda^{1/2}\frac{\pi}{6}\right) = \sqrt{2}\lambda^{-1/2} \sin\left(\lambda^{1/2}\frac{\pi}{2}\right) \frac{R}{a} \quad (4.29)$$

上述的超越方程便给出了我们所要的本征值 $\lambda_n(R)$ 。在最低的能级上, λ_0 在共振极限附近的行为为:

$$\lambda_0(R) \longrightarrow -s_0^2 \left(1 + 1.897 \frac{R}{a}\right), \quad R \rightarrow 0 \quad (4.30)$$

其中, $s_0 \approx 1.00624$ 。其给出我们关心的奇异的平方反比吸引势:

$$V_0(R) \approx -(4 + s_0^2) \frac{\hbar^2}{2mR^2}, \quad R \ll |a| \quad (4.31)$$

至此, 我们终于得出了 Efimov 效应中, 等效的径向方程:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{s_0^2 + 1/4}{R^2} \right] f_0(R) = E f_0(R) \quad (4.32)$$

同时不难发现, 在共振极限下, 总有 λ, ϕ 对 R 弱依赖, 这说明了我们所作的绝热近似的合理性。

4.1.6 短程截断与初见离散标度不变性

上述的等效径向方程有零能解:

$$f_0(R) \approx AR^{1/2} \sin [s_0 \ln(\kappa R) + \alpha] \quad (4.33)$$

其中, $\kappa = (m|E|/\hbar^2)^{1/2}$ 。容易注意到, 该解在 $R = 0$ 时行为奇异, 这是由于我们此前的讨论都基于长程物理, 故只在长程才成立, 而在短程则会受势能的细节影响。因此, 我们模仿讨论二体散射问题时的做法, 做一个短程的截断, 匹配短程和远程的对数导数作为边界条件:

$$R_0 \frac{f'_0(R_0)}{f_0(R_0)} = \frac{1}{2} + s_0 \cot [s_0 \ln (\kappa R_0) + \alpha] \quad (4.34)$$

不难注意到, 取 $\frac{\kappa'}{\kappa} = e^{-\pi/s_0}$ 时, 边界条件依旧成立。这意味着, 我们可以对其作离散的重标度:

$$R \rightarrow \lambda R, \quad E \rightarrow E/\lambda^2, \quad \lambda = e^{n\pi/s_0} \quad (4.35)$$

进而可以找到无穷多的, 无限浅的束缚态。这也就是共振极限下 Efimov 效应。短程截断和离散标度不变性 (Discrete Scale Invariance), 无不暗示着对 Efimov 效应存在着更高的观点, 那就是我们接下来将介绍的重整化群。

4.2 重整化群

重整化群 (Renormalization Group) 是一个非常重要的概念, 它在物理学的各个领域都有着广泛的应用。在这里, 我们将简要介绍重整化群的基本思想, 以及它在 Efimov 问题中的应用。

重整化群的基本思想是, 我们可以通过不断地缩放系统的自由度, 来研究系统在不同尺度下的行为。考虑哈密顿量上的重整化群变换, 它消除了系统中的短程自由度, 同时保持了长程可观测量不变。如果长度尺度小于 $1/\Lambda$ 的所有自由度都被积掉, 我们称 Λ 为紫外截断。在合适的算符 O_n 下展开哈密顿量^[20]:

$$H = \sum_n g_n O_n \quad (4.36)$$

这使得哈密顿量可以用耦合常数空间中的一个点 $\mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots)$ 来描述。重整化群变换即研究这个点在不同尺度下的演化。如果紫外截断 Λ 可以做一个连续变量, 那么 RG 变换就定义了耦合常数空间的一个流, 这个流可以写出如下的微分方程:

$$\frac{d\mathbf{g}}{d \ln \Lambda} = \beta(\mathbf{g}) \quad (4.37)$$

其中 $\beta(\mathbf{g})$ 是耦合常数空间的一个复杂的非线性函数。在一些特殊的情况下，我们可以通过一些近似的方法来求解这个方程，从而得到系统在不同尺度下的行为。如果我们从一个具有耦合常数 \mathbf{g}_0 的系统出发，系统将沿着 RG 流演化，可能落入红外极限 $\Lambda \rightarrow 0$ ，也可能落入紫外极限 $\Lambda \rightarrow \infty$ 。在红外极限下，系统的自由度已经被积掉，只剩下长程的自由度。

Wilson 指出^[48]，除了 0 和 ∞ 这两个固定点外，还有一些特殊的固定点，称为不动点 (Fixed Point)。在不动点处，哈密顿量不随着 Λ 的变化而变化，其耦合常数满足：

$$\mathbf{g}(\Lambda) = \mathbf{g}^* \quad (4.38)$$

其中， \mathbf{g}^* 是 $\beta(\mathbf{g}^*) = 0$ 的解。宏观变量调节到一个临界点在微观层面上对应于耦合常数调节到临界轨迹。临界现象的普适性可以通过以下事实来解释：临界轨迹可以从哈密顿量空间的广泛分离的区域流向相同的不动点。因此，在微观层面完全不同的系统可以具有相同的长程行为。

可以在不动点 \mathbf{g}^* 附近线性展开 β ，得到：

$$\frac{d\mathbf{g}}{d \ln \Lambda} = \mathbf{B}(\mathbf{g} - \mathbf{g}^*) \quad (4.39)$$

其中 \mathbf{B} 是 β 的雅可比矩阵。这个方程的解是：

$$\mathbf{g}(\Lambda) = \mathbf{g}^* + \mathbf{C} \cdot \Lambda^{\mathbf{B}} \quad (4.40)$$

其中 \mathbf{C} 是一个常数。这个方程表明，耦合常数的演化是指数的，这是重整化群的一个重要特征。算子 \mathbf{B} 的特征值称为与 \mathbf{B} 对应的特征向量相关的算子的临界指数。具有正、零和负临界指数的算子分别称为相关、边缘和无关算子。随着紫外截止 Λ 的增加，相关算子的耦合常数会增加，系统会远离固定点。因此，为了使系统在紫外极限下流向固定点，相关算子的耦合常数必须被调整到它们的临界值。这确保了系统能够克服相关算子的影响，保持或趋向于固定点，从而展示出预期的临界行为。

方程 (4.37) 定义的重整化群流通常具有非常复杂的拓扑结构。固定点只是最简单的拓扑特征。更复杂的可能性是极限环 (limit cycle)，在这种情况下，RG 轨迹会永远围绕一个闭合回路流动。极限环是一族哈密顿量 $\mathbf{H}_*(\theta)$ 它在 RG 流下是闭合的，并且可以用从 0 到 2π 的角度 θ 参数化。每当紫外截止 Λ 变化一个乘法因子 λ_0 时，哈密顿量在极限环上完成一个完整的循环。可以选择参数 θ 使得极限环上的 RG 流 $\mathbf{g}^*(\theta)$ 只是 θ 随 $\ln \Lambda$ 的线性增加。因此，如果在某个初始截止 Λ_0 时的耦合常数是 $\mathbf{g}(\Lambda_0) = \mathbf{g}^*(\theta)$ ，则对于一般的截止值，其值为：

$$\mathbf{g}(\Lambda) = \mathbf{g}^*(\theta + 2\pi \frac{\ln(\Lambda/\Lambda_0)}{\ln \lambda_0}) \quad (4.41)$$

值得注意的是，耦合常数在做离散标度变换 $\Lambda \rightarrow \Lambda \cdot e^{\ln \lambda_0}$ 后不变。

4.3 重整化群方法在Efimov问题中的应用

Efimov问题是一个三体问题，其中三个粒子之间的相互作用是吸引的。Efimov问题的一个重要特征是，当两个粒子的散射长度 a 远大于系统的范围 r_0 时，系统会出现无穷多个无限深的Efimov三体束缚态。这些束缚态的能级之间的比例是固定的，这个比例是一个无量纲的常数 $\kappa \approx 22.7$ 。Efimov问题的重整化群分析是由Bedaque和Braaten在1999年首次提出的。他们发现，当两个粒子的散射长度 a 远大于系统的范围 r_0 时，系统的低能行为可以用一个有效场论来描述：

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi - \frac{g_2}{4} (\psi^\dagger \psi)^2 - \frac{g_3}{36} (\psi^\dagger \psi)^3 \quad (4.42)$$

在这个有效场论中，只有一个参数 κ 决定了系统的低能行为。这个结果是通过重整化群的方法得到的。在这个方法中，我们首先将系统的自由度划分为长程自由度和短程自由度。然后，我们积掉短程自由度，得到一个只包含长程自由度的有效场论。通过重整化群的分析，我们可以得到这个有效场论的参数 κ 。这个参数 κ 是一个无量纲的常数，它决定了系统的低能行为。这个结果表明，当两个粒子的散射长度 a 远大于系统的范围 r_0 时，系统的低能行为是普遍的，只依赖于一个无量纲的常数 κ 。

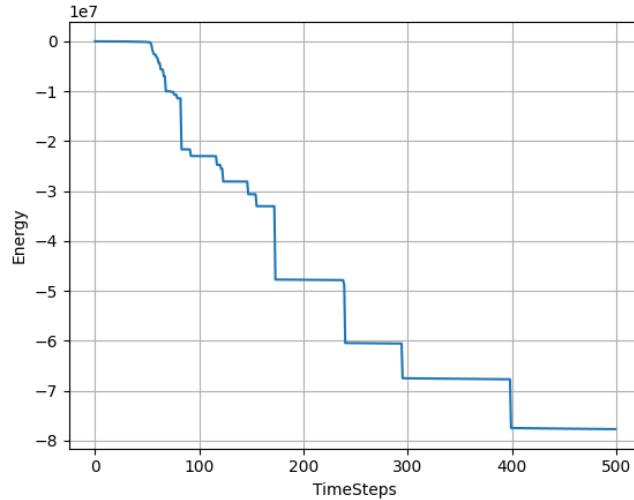


图 4-1 能量与模拟步数的关系图。使用变分量子蒙卡方法对 $1/r^2$ 势进行模拟，模拟结果体现了两点：1) 离散；2) 无基态，衰减到负无穷。

实际上，不借助场论的语言，只靠量子力学版本的低能散射有效理论同样可以得到相同的结论。在这个理论中，我们通过划分不同长度尺度，分别建立有效势能并求解薛定谔方程，将求解结果进行重整化群分析，得到相同的结论。考虑：

$$V(r) = \begin{cases} \alpha/r^2, & r > r_0 \\ -g/r_0^2, & r < r_0 \end{cases} \quad (4.43)$$

其中 r_0^{-1} 正是系统的截断 Λ 。在 $r > r_0$ 时，我们可以求解薛定谔方程，得到散射相移与散射长度。考虑低能极限 $r_0 < r \ll 1/\sqrt{E}$ ，解零能薛定谔方程：

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} - \frac{2m\alpha}{\hbar^2 r^2}\psi = 0 \quad (4.44)$$

将参数 m 和 \hbar 全部设为 1，得到的解为：

$$\psi(r) = c_- r^{\nu_-} + c_+ r^{\nu_+} \quad (4.45)$$

$$\nu_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\alpha - \alpha_*}, \quad \alpha_* = -\frac{1}{4} \quad (4.46)$$

基于量纲分析，可以将 c_+/c_- 写作^[49]：

$$\frac{c_+}{c_-} = -r_0^{\nu_- - \nu_+} \frac{\gamma + \nu_-}{\gamma + \nu_+}, \quad \gamma = \left[\frac{\sqrt{g} J_{1/2}(\sqrt{g})}{J_{-1/2}(\sqrt{g})} \right] \quad (4.47)$$

其中 J 是贝塞尔函数。我们希望 c_+/c_- 不随着截断 r_0 的变化而变化，即找到体系的不动点。写出体系的 RG 方程：

$$\beta = \frac{d\gamma}{d \ln \Lambda} = -\frac{d\gamma}{d \ln r_0} = -(\gamma + \nu_+)(\gamma + \nu_-) = (\alpha - \alpha_*) - (\gamma - \gamma_*)^2 \quad (4.48)$$

其中 $\gamma_* = -1/2$ 。考虑满足 $\beta = 0$ 的解，当 $\alpha > \alpha_*$ 时，两个解为实数 $\gamma_{\pm} = \gamma_* \pm \sqrt{\alpha - \alpha_*}$ ， γ_- 和 γ_+ 分别对应于紫外极限 ($c_- = 0$) 和红外极限 ($c_+ = 0$)。

当 $\alpha < \alpha_*$ 时，两个解为复数 $\gamma_{\pm} = \gamma_* \pm i\sqrt{\alpha_* - \alpha}$ 。此时体系对于 γ 不敏感，当 $\gamma \rightarrow \infty$ 时， $g \rightarrow -\infty, V(r) \rightarrow \infty (r < r_0)$ ，此即硬核极限，或者说钢球模型。基态波函数可以用贝塞尔函数写出： $\psi(r) = \sqrt{r} K_{i\eta}(kr), \eta = \sqrt{\alpha_* - \alpha}$ 。物理量依赖于我们选取的截断，根据 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ ，我们可以得到结合能与截断 Λ 的关系：

$$E \propto \Lambda^2 = \left[\frac{1}{r_0} \exp \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\gamma / \beta \right) \right]^2 = \frac{1}{r_0^2} e^{-2\pi/\sqrt{\alpha_* - \alpha}} \quad (4.49)$$

得到的 $e^{-2\pi/\sqrt{\alpha_* - \alpha}}$ 即 Efimov 效应著名的离散标度因子。这个结果与场论的结果是一致的。

4.4 格林函数蒙特卡洛

接下来，我们介绍一种朴实但有趣的少体系统基态计算方法，其在核物理中常被应用^[50]。有 N 体薛定谔方程：

$$\begin{aligned} - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) + V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \\ = E \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \end{aligned} \quad (4.50)$$

作简单的变量代换：

$$E = -B$$

$$\mathbf{r}_i = (2M_i B/\hbar^2)^{1/2} \mathbf{x}_i$$

$$V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = -\lambda BW(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = -\lambda BW(\mathbf{R})$$

其中， W 为窗函数，描述势能函数的“形状”， λ 则描述势能与基态能量的相对大小。于是有：

$$(-\nabla_{\mathbf{R}}^2 + 1) \psi(\mathbf{R}) = \lambda W(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{R}) \quad (4.51)$$

注意我们假设其基态能量 E 是已知的，于是将问题转化为了求解 λ 。可以对左侧的微分算符定义格林函数：

$$(-\nabla_{\mathbf{R}}^2 + 1) G(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}) = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \quad (4.52)$$

其可以被解析求得：

$$G(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}) = [1/(2\pi)^{3N/2}] \left[K_{3N/2-1}(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|) / |\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|^{3N/2-1} \right] \quad (4.53)$$

其中， K 为第二类虚宗量贝塞尔函数。进而，原微分方程可改写为：

$$\psi(\mathbf{R}) = \lambda \int d\mathbf{R}' G(\mathbf{R}', \mathbf{R}) W(\mathbf{R}') \psi(\mathbf{R}') \quad (4.54)$$

我们将其记作 $\psi(\mathbf{R}) = \lambda S \psi(\mathbf{R})$ 。

接下来，我们任取一初始波函数，其一定可写为本征函数的线性叠加： $\psi_0 = \sum C_k \psi^{(k)}$ ，其中 $\psi^{(k)} = \lambda^{(k)} S \psi^{(k)}$ 。在每次迭代中，我们在作用一次 S 的同时，再乘上一个因子 λ_0 ：

$$\psi_{n+1}(\mathbf{R}) = \lambda_0 S \psi_n(\mathbf{R}) \quad (4.55)$$

迭代 n 次后，便有：

$$\psi_n = \sum C_k \psi^{(k)} (\lambda_0 / \lambda^{(k)})^n \quad (4.56)$$

可见，在迭代足够次数后，一切本征值 $\lambda^{(k)} < \lambda_0$ 的分量都被抑制；只要在迭代过程中适时减小 λ_0 ，最终在达到稳定时，就一定能得到本征值最小的分量：

$$\lambda_0 = \lambda \equiv \lambda^{(k)} \quad (4.57)$$

由这个比值意义为：基态能量为 E 时，所需的某一形式的势能的最小大小；即也可以反推出给定某一势能时的基态能量。为了计算积分，我们可以将被积式中的 $G(\mathbf{R}', \mathbf{R})$ 看作一个分布，即：

$$p(\mathbf{R}) d\mathbf{R} = [1/(2\pi)^{3N/2}] [K_{3N/2-1}(R) R^{3N/2}] d\Omega dR \quad (4.58)$$

从数学上可以证明, 径向的分布可以由随机数 $\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{3N}$ 给出:

$$\begin{aligned} u &= -\ln(\xi_1 \xi_2 \cdots \xi_{3N}), \quad 0 \leq u < \infty \\ v &= \left(1 - \xi_0^{2/(3N-1)}\right)^{1/2}, \quad 0 \leq v \leq 1 \\ R &= uv \end{aligned} \quad (4.59)$$

于是便可用蒙特卡洛^[51]完成该积分。我们以最简单的方势阱作为两体作用势, 求出三体和四体系统基态能量与散射长度的关系:

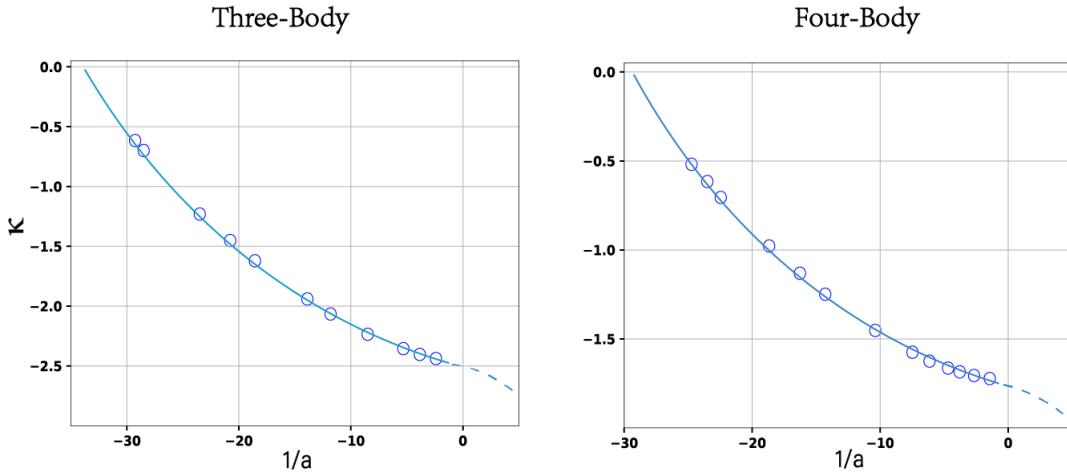


图 4-2 实际绘制了 $\kappa = (m|E|/\hbar^2)^{1/2} \sim 1/a_s$ 的关系, 取 $\hbar = 1, m = 1, V_0 = 1$, 改变势阱宽度以调控 a_s

然而, 我们所得到的基态并不是 Efimov 态中最深的束缚态, 少体系统的基态当然应该取决于吸引势的短程细节, 而我们在 Efimov 效应中始终关注的只有长程物理, 换言之, 束缚最深的 Efimov 态本身也是激发态。

4.5 Efimov 态能谱: Efimov scenario

接下来, 我们对 Efimov 效应最著名的結果之一——“Efimov scenario”(Efimov 效应的能譜) 进行理论推导与数值计算。从超球坐标下导出的径向方程开始, 在有限的散射长度下, s 波满足:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{s_0^2 + 1/4}{R^2} \right] f(R) = E f(R), \quad (4.60)$$

其中 $s_0 \simeq 1.00624$, 以及普适标度因子 $\lambda_0 = e^{\pi/s_0} \simeq 22.7$ 。对于设置截断的束缚态, 定义三体束缚能 $B_3 = -E$, 以及束缚态波数 $\kappa = E \sqrt{m/(\hbar^2 B_3)}$ 。将散射长度倒数 a^{-1} 与波数 κ 变换至极坐标下, 即:

$$\begin{aligned} a^{-1} &= h \cos \xi, \\ \kappa &= h \sin \xi, \end{aligned} \quad (4.61)$$

则 Efimov 态能谱的求解, 即波数 κ 关于散射长度倒数 $1/a$ 变化关系的确定, 转换为极坐标方程 $h = h(\xi)$ 的求解。值得一提的是, 对于极坐标下确定角度 ξ 的直线, 其 h 值以标度因子 $\lambda_0 \simeq 22.7$ 离散取值, 为离散标度不变性的结果。由此可得, 所有分立的三体束缚态谱将在 (a^{-1}, κ) 平面上形成形状完全相同、仅有尺度缩放的一系列相似曲线。为进一步确定 Efimov 能谱, 方程 (4.60) 的通解具有形式:

$$f(R) = \sqrt{hR} [Ae^{is_0 \ln(hR)} + Be^{-is_0 \ln(hR)}], \quad (4.62)$$

即为入射与出射“超球面波”的叠加, 叠加系数可与 ξ 相关。物理的考虑要求, 无穷远处波函数应衰减至 0, 则入射、出射超球面波应相干抵消, 因此其叠加系数需满足形式 $A = Be^{i\Delta(\xi)}$, 并可导出 $\Delta(\xi) = 2s_0 \ln h(\xi)$ 。将式 (4.62) 代入式 (4.60), 我们得到 Efimov 方程^[13]:

$$B_3 + \frac{\hbar^2}{ma^2} = \frac{\hbar^2 \kappa_*^2}{m} e^{-2\pi n/s_0} e^{\Delta(\xi)/s_0}, \quad (4.63)$$

其中 n 为态数的指标, κ_* 为 $n = 0$ 对应最深束缚态下的束缚波数 ($1/a \rightarrow 0$ 时的波数)。 κ_* 的值由三体边界条件决定, 亦即三体参数之一。一旦确定了 $\Delta(\xi) \sim \xi$ 的关系, Efimov 态的三体束缚能 B_3 也就可被导出; 然而, $\Delta(\xi)$ 并无解析表达式。

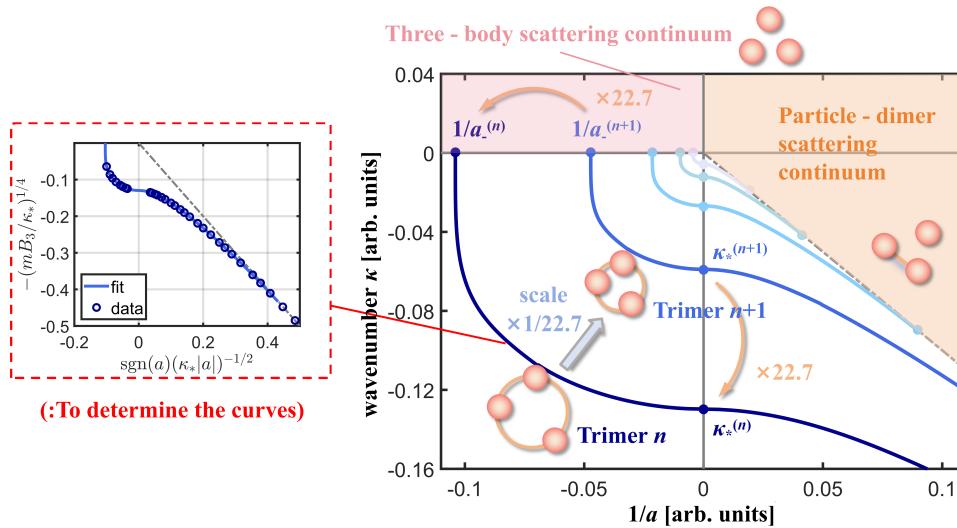


图 4-3 复现的三体 Efimov scenario 示意图, 图中给出各分立的束缚态下, 波数 κ 随散射长度倒数 $1/a$ 变化的曲线。左方子图展示利用文献^[52] 给出的数据点, 分段拟合确定了 $\Delta(\xi)$ 表达式。右方主图作出各分立的束缚态下 $\kappa \sim 1/a$ 曲线簇, 以及第一、四象限浅橙色阴影区的单粒子 + 二聚体连续散射态 (Particle - dimer scattering continuum), 第二象限浅红色阴影区的三体单粒子连续散射态 (Three - body scattering continuum)。作为示意图, 出于可视化需要, 未按真实比例画出, 绘图时取标度因子 $\lambda_0 = 2.2$

一种数值确定 $\Delta(\xi) \sim \xi$ 的方法由文献^[52] 给出。在 $n = 0$ 时、不同散射长度 a 下, 数值求解方程 (4.60), 解得一系列对应的三体束缚能 B_3 , 计算得到一

系列 $(\xi, \Delta(\xi))$ 数据, 其已由文献^[52]列出。我们采用文中的数据, 并沿用其处理方法: 按各区间取点数目均匀性的要求, 将 ξ 分为三个区间: $\xi \in [-\pi, -5\pi/8]$, $\xi \in [-5\pi/8, -3\pi/8]$, $\xi \in [-3\pi/8, -\pi/4]$, 并分别令 $x = (-\pi/4 - \xi)^{1/2}$, $y = \pi/2 + \xi$, $z = (\pi + \xi)^2 \exp[-1/(\pi + \xi)^2]$, 在三个区间上分别对 z, y, x 作多项式拟合。拟合得到的结果为:

$$\Delta(\xi) = \begin{cases} 0.2511z^2 + 0.2779z - 9.1106, & \xi \in [-\pi, -\frac{5\pi}{8}], \\ 1.1697y^3 + 1.9721y^2 + 2.1187y - 8.2232, & \xi \in [-\frac{5\pi}{8}, -\frac{3\pi}{8}], \\ 3.1005x^2 - 9.6289x - 2.1825, & \xi \in [-\frac{3\pi}{8}, -\frac{\pi}{4}]. \end{cases} \quad (4.64)$$

利用此 $\Delta(\xi)$ 关系, 可以确定 $n = 0$ 时的 $\kappa \sim 1/a$ 关系; 再利用标度关系, 可绘制 (a^{-1}, κ) 平面的等比曲线簇。完整的 Efimov scenario 复现结果见图 4-3, 其中除束缚态离散谱之外, 还包含第一、四象限浅橙色阴影区的单粒子 + 二聚体连续散射态 (Particle - dimer scattering continuum), 以及第二象限浅红色阴影区的三体单粒子连续散射态 (Three - body scattering continuum)。

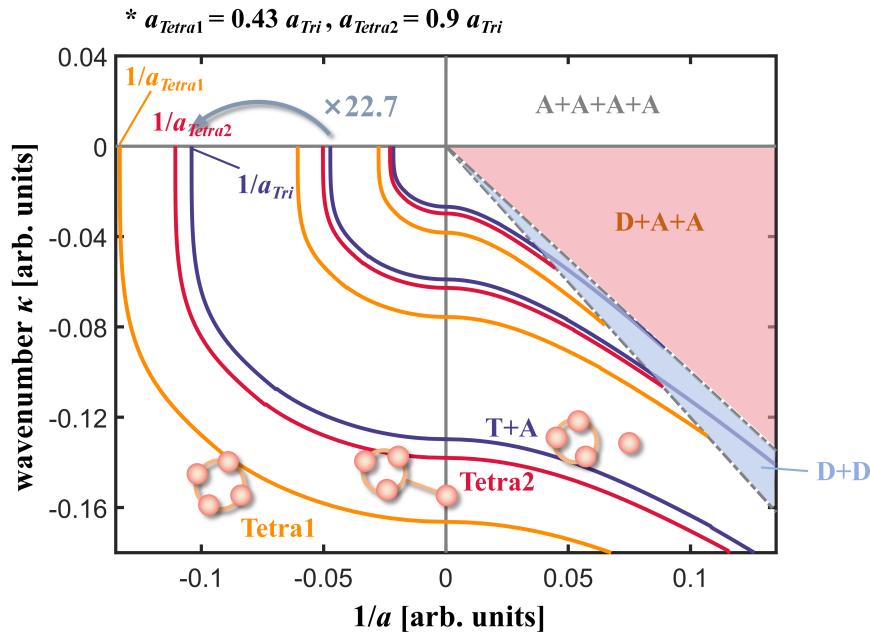


图 4-4 复现的四体 Efimov scenario 示意图, 图中给出各分立的束缚态下, 波数 κ 随散射长度倒数 $1/a$ 变化的曲线。图中分立的曲线簇分别为 Tetra1, Tetra2 及 T+A 的能谱; 第二象限浅蓝色、浅红色阴影区域分别对应 D+D, D+A+A 散射态出现区域; 第一、二象限对应 A+A+A+A 散射态出现区域。作为示意图, 出于可视化需要, 未按真实比例画出, 绘图时取标度因子 $\lambda_0 = 2.2$

对于四体 Efimov 问题, 其与三体的情况类似, 仍然存在一系列标度不变的分立本征态。有趣的是, 由于粒子数增多, 四体问题中的四个粒子存在若干种聚合方式, 其中分立束缚态包括: 两种不同构型的四聚体 (Tetra1, Tetra2), 以及一个三

聚体 + 一个自由粒子 ($T+A$); 散射态聚合方式包括两个二聚体 ($D+D$), 一个二聚体 + 两个自由粒子 ($D+A+A$), 以及四个自由粒子 ($A+A+A+A$)^[36]。特别地, 对于三种不同聚合方式的束缚态, 在同一个指标 n 下, 其截止散射长度满足普适性关系 $a_{Tetra1} = 0.43a_{Tri}$, $a_{Tetra2} = 0.9a_{Tri}$, 其中 $a_{Tetra1}, a_{Tetra2}, a_{Tri}$ 分别对应 Tetra1, Tetra2 和 $T+A$ 三种聚合方式^[53]。由之前得到的三体 Efimov $\Delta(\xi)$ 表达式, 结合以上普适性关系, 绘出四体 Efimov scenario 如图 4-4 所示。

更多体的 Efimov 束缚态也已由理论分析、数值求解得到^[54-58]。对于粒子数 $N = 5$ 的情形, 五个全同玻色子的聚合方式包含: 形成五聚体 (pentamer), 以及一个三聚体 + 一个二聚体 (trimer + dimer) 等; 而对粒子数 $N = 6$ 的情形, 六个粒子聚合方式含六聚体 (hexamer) 和三个二聚体 (3 dimers) 等。粒子数 $N = 3 \sim 6$ 的束缚态能谱定性总结于图 4-5。

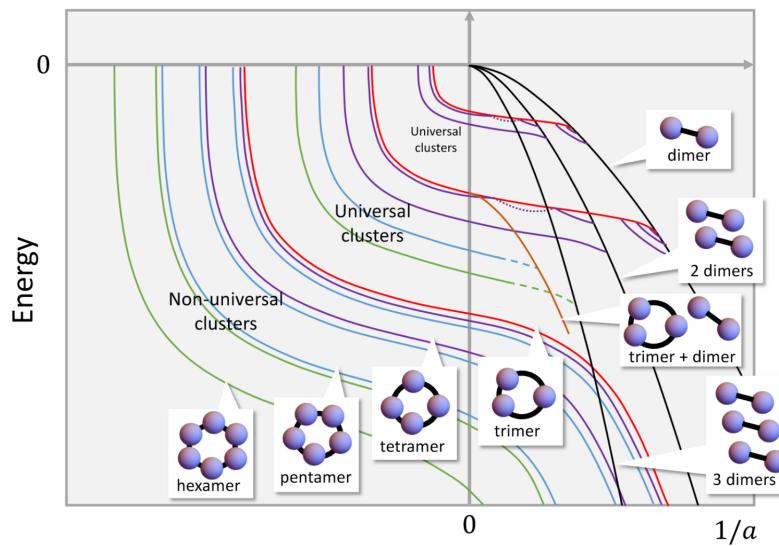


图 4-5 粒子数 $N = 3 \sim 6$ 的 Efimov 能谱示意图, 图中给出各分立的束缚态下, 能量随散射长度倒数 $1/a$ 变化的曲线。各粒子数情形下的粒子聚合方式已在图中标出。图片取自文献^[15]

第 5 章 总结与展望

作为本论文的尾声，我们对已有工作进行总结并展望未来的研究方向。第一章提纲挈领地介绍了我们所研究的量子少体问题的背景与意义，相较于量子多体物理，这一领域更关注描述少数粒子在量子力学框架下的行为。一方面，这有助于我们更好理解轻元素核子相互作用等物理现象；另一方面，这为我们研究多体物理中微观粒子集体行为的起源提供了别样的视角。还原与演生的和谐统一，在我们研究的问题中得到了体现，为理解更复杂的物理体系提供了新的视角。引言部分从薛定谔方程的求解开始，由一到多，回顾我们的量子少体问题之旅，从单体问题到两体问题，再入手三体问题的讨论并自然引出我们研究的重点——Efimov 效应。同时还简要介绍了各部分的研究思路并回顾了 Efimov 问题研究的历程。

第二章介绍了单电子问题与一些基础的散射概念。其中单电子问题是学期初我们迈入量子力学大门的引路人。以氢原子模型为例，我们首先讨论了只考虑库仑势的非相对论氢原子。结合本学期所学的数学物理方法知识，我们得以更系统地理解这一过程，对本征值与量子数的关联理解更为透彻。接下来是有些偏离我们讨论主线的部分：使用对称性分析氢原子能级的 n^2 简并性，借助群论语言，我们得以从守恒量出发，解构氢原子系统哈密顿量的动力学对称性，并与其势能部分的 $SO(3)$ 对称性对读。这样的分析似乎局限于非相对论的库仑势等系统，但为我们后续讨论三体问题的对称性等概念，点亮了一盏小灯。随后我们回顾了分波法与散射长度等重要概念，它们是后续分析低能散射物理的基础，尤其是作为长程物理现象中，最重要的相互作用参数——散射长度 a 。其可调控得益于最新的超冷原子实验进展——Feshbach 共振。2022 年科大潘建伟院士团队的超冷三原子分子系综制备，正是基于此项技术^[59]。我们还简要介绍了两体相互作用调节中，两种极限与重整化群流中极限环的对比分析。

第三章正式进入两体问题的近似与求解。我们由衷敬佩第四组同学们在这一板块的知识储备与先进技术运用的能力。相比之下，笔者简陋的氦原子基态能量 Hartree-Fock 变分（双 ζ 基底）尝试，就未登大雅之堂，仅收纳在我们的代码存储地中。不同于尚有解析解可得的氢原子，氦原子的全同性使得其基态与激发态能量的计算都异常复杂，便成为我们使用微扰论与变分法的炼金石。本章中我们先是介绍了微扰法与变分法在氦原子基态能量求解中的应用，概括了两者的

核心思想：逐阶计算的微扰论与基态能量最低的变分原理。更进一步，我们还介绍了基于自治场理念的 Hartree 方法和改进版本的 Hartree-Fock 方法，带我们走上计算化学的星光大道。随后我们使用尚方宝剑——Monte Carlo 模拟，分别使用梯度下降算法与 Google DeepMind 团队最新研发的 Ferminet 方法，对氦原子基态能量进行了计算。期间我们还使用了多层感知机 (MLP) 学习氦基态波函数，还使用 ADAM 优化网络并监控能量收敛。Ferminet 不同于常见的 Slater-Jastrow 拟设，采用更灵活的 Ansatz 波函数形式，通过神经网络学习波函数的特征，从而有效拟合费米子系统的波函数。在氦原子的基态能量计算上，Ferminet 体现了显著优势，迭代至收敛的时间大幅降低。且这一方法在更多粒子数的推广与激发态能量的计算中具有重大潜力。

第四章中我们跋山涉水，终于抵达 Efimov 效应的殿堂。自 1970 年由 Efimov 首次提出并研究，迄今为止，已成为少体研究的重要领域。当两体相互作用达到共振状态时，三体系统将出现等效的长程吸引力，且存在无穷多呈几何级数的离散束缚态。这一奇异性质注定其有丰富的物理现象与应用，且随着冷原子技术的迅速发展，散射长度等参数的可控调节，使我们“DIY”少体系统的邓丽大幅增强。本章中我们循序渐进，追寻前人步伐，先在超球坐标系下推导 Efimov 效应。超球坐标系充分考虑三体相互作用问题的对称性，这与前文讨论单电子模型的思路有相通之处。从 Jacobi 坐标到超球坐标，从薛定谔方程到低能极限下的三体 Faddeev 方程，我们成功复现了径向方程的推导，并数值求解了超角函数的本征方程，最终推导得出 Efimov 效应的核心——等效的径向方程，揭示了长程三体相互作用的产生原理。在此基础上我们进行短程截断，就能初探离散标度不变性。但进一步的理解，还需要借助重整化群的语言进行高屋建瓴的分析，结合低能散射有效理论，我们也可以得到与场论一致的结果。随后我们对 Efimov 问题进行了两方面的数值模拟，首先是采用格林函数蒙特卡洛方法 (GFMC)，模拟了方势阱下，三体和四体系统基态能量与散射长度的函数关系。另一方面，我们对 Efimov 效应最著名的结论——Efimov 能谱进行了复现，通过理论推导与数值计算，我们将散射长度倒数 a^{-1} 与波数 κ 变换至极坐标下进行求解。所有分立的三体束缚态能谱将在 (a^{-1}, κ) 平面上形成形状完全相同，仅有尺度缩放（离散标度不变）的一系列相似曲线。借助分段多项式拟合，我们成功复现了径向方程的推导三体与四体 Efimov 能谱的绘制。

最后，在本章中，笔者对我们已有的工作进行了简略的总结。当然本论文还有许多亮点或不足未深入讨论，比如说第二章散射概念的相关介绍不够深入，主要是笔者自己也未知全貌。但一学期下来，我们的文献阅读能力、口头报告以及分工合作等能力均有显著提升（本文便是借助 Overleaf 的高效率系统工程奇迹），对量子少体系统与多体理论的初步探索对我们今后的学习大有裨益，期间掌握

的多种多样的数值模拟技术^①，是我们数理方法课程的有机结合。展望 Efimov 问题，近些年依旧有许多令人兴奋的工作。在实验上，我们期待在更多的物理系统中观测到这一普适的物理现象，而不局限于当前的超冷原子气体、核子系统等；在理论研究与计算上，我们期待有更精确的理论模型，考虑更多的相互作用细节与非理想条件，或是利用高性能计算方法（ED、QMC、DFT、DMRG?）进行更精确的模拟。尤其是近年来，超冷原子领域已经可以实现多种异核费米混合气（K-Li、Dy-K、Cr-Li 等），这些不等质量（我们先前主要讨论等质量的三玻色子系统）的两组分费米混合气体中，一个足够轻的原子能很容易绑定 N 个重费米子形成 $(N + 1)$ 束缚态，有望成为四聚体超流（偶数个费米子的超流类比玻色凝聚）简单易操控的物理体系。崔晓玲团队就曾揭示三体 Efimov 关联的可观测效应以及极化-分子相变本质，他们最近关于 1:3 轻重费米子数配比系统的研究就与我们的课题有相联系之处^[60]。（这期 PRL 丁老师应该眼熟？）

^① 我们数值计算相关的源代码将上传至[Gitee](#)。

参考文献

- [1] ZINGL H, HAFTEL M, ZANKEL H. Few body systems and nuclear forces ii: 8. international conference held in graz, august 24–30, 1978: Vol. 87[M]. Springer, 2005.
- [2] ZINNER N T. Few-body physics in a many-body world[J]. Few-Body Systems, 2014, 55(8): 599-604.
- [3] D' INCAO J P. Few-body physics in resonantly interacting ultracold quantum gases[J]. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2018, 51 (4): 043001.
- [4] GREENE C H, GIANNAKEAS P, PÉREZ-RÍOS J. Universal few-body physics and cluster formation[J]. Reviews of Modern Physics, 2017, 89(3): 035006.
- [5] GRIFFITHS D J, SCHROETER D F. Introduction to quantum mechanics[M]. Cambridge university press, 2018.
- [6] SAKURAI J J, NAPOLITANO J. Modern quantum mechanics[M]. Cambridge University Press, 2020.
- [7] GREINER W, MÜLLER B. Quantum mechanics: symmetries[M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [8] BETHE H A, SALPETER E E. Quantum mechanics of one-and two-electron atoms[M]. Springer Science & Business Media, 2013.
- [9] MARTINEZ J P. The hartree-fock method: from self-consistency to correct symmetry[J]. Annalen der Physik, 2017, 529(1-2): 1600328.
- [10] BASEDEN K A, TYE J W. Introduction to density functional theory: Calculations by hand on the helium atom[J]. Journal of chemical education, 2014, 91(12): 2116-2123.
- [11] ANTSYGINA T, CHISHKO K. Helium atom in an external electric field: Exact diagonalization[J]. Low Temperature Physics, 2014, 40(9): 807-815.

- [12] PFAU D, SPENCER J S, MATTHEWS A G, et al. Ab initio solution of the many-electron schrödinger equation with deep neural networks[J]. Physical Review Research, 2020, 2(3): 033429.
- [13] EFIMOV V N. Weakly bound states of three resonantly interacting particles.[R]. Ioffe Inst. of Physics and Tech., Leningrad, 1970.
- [14] EFIMOV V. Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system[J]. Physics Letters B, 1970, 33(8): 563-564.
- [15] NAIDON P, ENDO S. Efimov physics: a review[J]. Reports on Progress in Physics, 2017, 80(5): 056001.
- [16] LECLAIR A, ROMAN J M, SIERRA G. Russian doll renormalization group and superconductivity[J]. Physical Review B, 2004, 69(2): 020505.
- [17] WILSON K G. Renormalization group and strong interactions[J]. Physical Review D, 1971, 3(8): 1818.
- [18] BEDAQUE P F, HAMMER H W, VAN KOLCK U. Renormalization of the three-body system with short-range interactions[J]. Physical Review Letters, 1999, 82 (3): 463.
- [19] HAMMER H W, PLATTER L. Efimov physics from a renormalization group perspective[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2011, 369(1946): 2679-2700.
- [20] BRAATEN E, HAMMER H W. Universality in few-body systems with large scattering length[J]. Physics Reports, 2006, 428(5-6): 259-390.
- [21] BRAATEN E, HAMMER H W. Efimov physics in cold atoms[J]. Annals of Physics, 2007, 322(1): 120-163.
- [22] JENSEN A, RIISAGER K, FEDOROV D V, et al. Structure and reactions of quantum halos[J]. Reviews of modern physics, 2004, 76(1): 215.
- [23] KIEVSKY A, GATTOBIGO M, GIRLANDA L, et al. Efimov physics and connections to nuclear physics[J]. Annual Review of Nuclear and Particle Science, 2021, 71: 465-490.
- [24] ENDO S, EPELBAUM E, NAIDON P, et al. Three-body forces and efimov physics in nuclei and atoms[A]. 2024.

- [25] NISHIDA Y, KATO Y, BATISTA C D. Efimov effect in quantum magnets[J]. Nature Physics, 2013, 9(2): 93-97.
- [26] HAMMER H W. Universality in qcd and halo nuclei[A]. 2009.
- [27] HAMMER H W, PLATTER L. Efimov states in nuclear and particle physics[J]. Annual Review of Nuclear and Particle Science, 2010, 60: 207-236.
- [28] MAJI J, BHATTACHARJEE S M, SENO F, et al. When a dna triple helix melts: an analogue of the efimov state[J]. New Journal of Physics, 2010, 12(8): 083057.
- [29] LIM T, DUFFY S K, DAMER W C. Efimov state in the he 4 trimer[J]. Physical Review Letters, 1977, 38(7): 341.
- [30] SCHÖLLKOPF W, TOENNIES J P. Nondestructive mass selection of small van der waals clusters[J]. science, 1994, 266(5189): 1345-1348.
- [31] BRÜHL R, KALININ A, KORNILOV O, et al. Matter wave diffraction from an inclined transmission grating: Searching for the elusive he-4 trimer efimov state [A]. 2004.
- [32] TIESINGA E, VERHAAR B, STOOF H. Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions[J]. Physical Review A, 1993, 47(5): 4114.
- [33] INOUYE S, ANDREWS M, STENGER J, et al. Observation of feshbach resonances in a bose-einstein condensate[J]. Nature, 1998, 392(6672): 151-154.
- [34] COURTEILLE P, FREELAND R, HEINZEN D J, et al. Observation of a feshbach resonance in cold atom scattering[J]. Physical review letters, 1998, 81(1): 69.
- [35] KRAEMER T, MARK M, WALDBURGER P, et al. Evidence for efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms[J]. Nature, 2006, 440(7082): 315-318.
- [36] FERLAINO F, KNOOP S, BERNINGER M, et al. Evidence for universal four-body states tied to an efimov trimer[J]. Physical review letters, 2009, 102(14): 140401.
- [37] HUANG B, SIDORENKO L A, GRIMM R, et al. Observation of the second triatomic resonance in efimov' s scenario[J]. Physical review letters, 2014, 112(19): 190401.

- [38] TUNG S K, JIMENEZ-GARCIA K, JOHANSEN J, et al. Geometric scaling of efimov states in a li 6- cs 133 mixture[J]. Physical review letters, 2014, 113(24): 240402.
- [39] PIRES R, ULMANIS J, HÄFNER S, et al. Observation of efimov resonances in a mixture with extreme mass imbalance[J]. Physical review letters, 2014, 112(25): 250404.
- [40] KUNITSKI M, ZELLER S, VOIGTSBERGER J, et al. Observation of the efimov state of the helium trimer[J]. Science, 2015, 348(6234): 551-555.
- [41] BETHE H A, SALPETER E E. The hydrogen atom without external fields[M/OL]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1957: 4-118. DOI: [10.1007/978-3-662-12869-5_2](https://doi.org/10.1007/978-3-662-12869-5_2).
- [42] ZHAI H. Two-body interaction[M]. Cambridge University Press, 2021: 31–70.
- [43] BRAATEN E, KUSUNOKI M, ZHANG D. Scattering models for ultracold atoms [J]. Annals of Physics, 2008, 323(7): 1770-1815.
- [44] BULYCHEVA K M, GORSKY A S. Limit cycles in renormalization group dynamics[J/OL]. Physics-Uspekhi, 2014, 57(2): 171. DOI: [10.3367/UFNe.0184.201402g.0182](https://doi.org/10.3367/UFNe.0184.201402g.0182).
- [45] PFAU D, SPENCER J, DE G. MATTHEWS A, et al. Ab-initio solution of the many-electron schrödinger equation with deep neural networks[J/OL]. Phys. Rev. Research, 2020, 2: 033429. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.033429>.
- [46] JAMES S, SPENCER D P, CONTRIBUTORS F. FermiNet[CP/OL]. 2020. [http://github.com/deepmind/ferminet](https://github.com/deepmind/ferminet).
- [47] NIELSEN E, FEDOROV D, JENSEN A, et al. The three-body problem with short-range interactions[J]. Physics Reports, 2001, 347(5): 373-459.
- [48] WILSON K G. The renormalization group and critical phenomena[J]. Reviews of Modern Physics, 1983, 55(3): 583.
- [49] KAPLAN D B, LEE J W, SON D T, et al. Conformality lost[J]. Physical Review D, 2009, 80(12): 125005.

- [50] KALOS M H. Monte carlo calculations of the ground state of three- and four-body nuclei[J/OL]. Phys. Rev., 1962, 128: 1791-1795. DOI: [10.1103/PhysRev.128.1791](https://doi.org/10.1103/PhysRev.128.1791).
- [51] PEDRO C.PEREZ A G. Monte-Carlo method for the nuclear few-body problem [CP/OL]. 2020. <http://github.com/pedro-95/few-body>.
- [52] BRAATEN E, HAMMER H W, KUSUNOKI M. Universal equation for efimov states[J]. Physical Review A, 2003, 67(2): 022505.
- [53] VON STECHER J, D'INCAO J P, GREENE C H. Four-body legacy of the efimov effect[A]. 2008.
- [54] VON STECHER J. Weakly bound cluster states of efimov character[J]. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2010, 43(10): 101002.
- [55] VON STECHER J. Five-and six-body resonances tied to an efimov trimer[J]. Physical Review Letters, 2011, 107(20): 200402.
- [56] GATTOBIGIO M, KIEVSKY A. Universality and scaling in the n-body sector of efimov physics[J]. Physical Review A, 2014, 90(1): 012502.
- [57] YAN Y, BLUME D. Energy and structural properties of n-boson clusters attached to three-body efimov states: Two-body zero-range interactions and the role of the three-body regulator[J]. Physical Review A, 2015, 92(3): 033626.
- [58] YAN Y, BLUME D. Temperature dependence of small harmonically trapped atom systems with bose, fermi, and boltzmann statistics[J]. Physical Review A, 2014, 90(1): 013620.
- [59] YANG H, CAO J, SU Z, et al. Creation of an ultracold gas of triatomic molecules from an atom–diatomic molecule mixture[J/OL]. Science, 2022, 378(6623): 1009-1013. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.adc6307>.
- [60] CHEN Y, CUI X. Ultrastable super-tonks-girardeau gases under weak dipolar interactions[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2023, 131: 203002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.131.203002>.

致 谢

我们将真挚的谢意致以丁鲲老师和张鹏飞老师。感谢丁老师在课题进行过程中的宝贵建议与意见，以及张鹏飞老师对课题研究方向的指导。

以下是我们课题分工：

- **第三组：**

- 谈凯霖：开题汇报；三体、四体 Efimov 能谱学习与推导，Efimov scenario 复现
- 霍晋元：中期汇报；超球坐标下 Efimov 效应推导，极限环行为的简单引入；GFMC 计算少体基态
- 杨远青：期末汇报；氦原子基态 HF 变分，Efimov 态两个极限与极限环的对照

- **第四组：**

- 童煜智：使用梯度下降法的变分量子蒙卡、低能散射的有效理论及重整化群
- 陈琦：中期汇报；变分法与 Hartree-Fock 近似理论推导，梯度下降 VQMC、MLP 神经网络两种方法的氦原子两体问题问题的模拟求解，部分 Efimov 态中的标度律
- 莫双铭：FermiNet、Efimov 态中的重整化群

以下是我们论文分工：

- 童煜智：Efimov 理论与重整化群
- 陈琦：两体问题；变分波函数；Hartree-Fock 近似；梯度下降和 MLP 神经网络
- 莫双铭：FermiNet
- 谈凯霖：摘要；引言；Efimov scenario 相关推导与复现
- 杨远青：单电子问题与散射基本概念；总结与展望
- 霍晋元：超球坐标下推导 Efimov 效应；GFMC 方法介绍