

文章编号: 1007-4627(2009)02-0231-07

用推广的等效两体方法求解类氦离子三体问题*

林祁斛¹, 任中洲^{1, 2, #}

(1 南京大学物理系, 江苏 南京 210008;

2 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心, 甘肃 兰州 730000)

摘要: 介绍了求解三体问题的等效两体方法, 将等效两体方法推广到原子系统, 利用该方法求解类氦离子的基态, 与一般的单参数变分法相比得到了与实验值符合得更好的结果, 进而利用双参数变分法对所得结果进行了检验。结果表明, 等效两体方法同样适用于求解原子系统中的三体问题。

关键词: 三体问题; 等效两体方法; 变分法; 类氦离子

中图分类号: O571.21 **文献标识码:** A

1 引言

等效两体方法是由 Feshbach 和 Rubinow 提出的, 最初的目的在于解决原子核物理中的近似计算问题, 尤其是对核的三体问题。等效两体方法能够简单而有效地得到与实验值符合较好的结果^[1]。在此基础上, Abou-Hadid 和 Higgins 又对等效两体方法作了改进, 推广到一个两体质量相同的三体系统^[2]。任中洲教授用该方法研究 Efimov 效应, 发现存在弱束缚的 0^+ 激发态^[3]。既然等效两体方法在求解原子核系统时很有效, 那么, 能否用于求解除了原子核系统之外的其它量子力学三体系统呢?

本文中, 我们尝试将等效两体方法推广到原子系统, 用它来求解类氦离子问题。将看到, 相比于简单的单参数变分法, 等效两体方法得到的结果与实验值的符合程度要好得多, 而计算上并不复杂。最后用双参数变分法对结果进行检验, 相比而言, 等效两体方法通过简单的步骤就能够得到完全相同的结果, 从中更能体现出等效两体方法的优越性。

2 推广等效两体方法求解类氦离子

2.1 等效两体方法

对于三体问题, 3 个粒子分别标记为 1, 2 和 3,

选择三角形坐标系, r_1 , r_2 和 r_3 分别为粒子 1—2, 1—3 和 2—3 之间的距离。假设质心运动可以忽略, 并且只考虑球对称中心势, 且三体质量均为 m , 则由变分原理, 有如下的变分方程^[1]:

$$0 = \delta \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_3 r_1 r_2 r_3 \times \left\{ \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial r_3} \right)^2 + \frac{r_1^2 + r_2^2 - r_3^2}{2r_1 r_2} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} + \frac{r_1^2 + r_3^2 - r_2^2}{2r_1 r_3} \frac{\partial \psi}{\partial r_1} \frac{\partial \psi}{\partial r_3} + \frac{r_2^2 + r_3^2 - r_1^2}{2r_2 r_3} \frac{\partial \psi}{\partial r_2} \frac{\partial \psi}{\partial r_3} + \frac{m}{\hbar^2} [V_1(r_1) + V_2(r_2) + V_3(r_3)] \psi^2 - \frac{m}{\hbar^2} E \psi^2 \right\}.$$

等效两体方法对波函数及自变量作如下假定^[1]:

$$\Psi = \Phi(R),$$

$$R \equiv \frac{1}{2}(r_1 + r_2 + r_3),$$

$$R_2 \equiv r_2, R_3 \equiv r_3,$$

此时波函数只与变换后的自变量 R 有关。对自变量 R_2 和 R_3 积分, 再由 Euler-Lagrange 方程, 可以得到

* 收稿日期: 2009-01-09; 修改日期: 2009-02-25

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10535010, 10675090, 10775068, 10735010); 国家重点基础研究发展计划(973 计划)资助项目(2007CB815004)

作者简介: 林祁斛(1986-), 男(汉族), 广东潮安人, 硕士研究生, 从事理论核物理研究; E-mail: el8latspq@hotmail.com

通讯联系人: 任中洲, E-mail: zren@nju.edu.cn

$$\frac{1}{R^5} \frac{d}{dR} \left(R^5 \frac{d\Phi}{dR} \right) + \frac{14}{15} \frac{m}{\hbar^2} E \Phi - \frac{m}{\hbar^2} V_{\text{eff}} \Phi = 0, \quad (1)$$

其中

$$V_{\text{eff}} = \frac{8}{R^5} \int_0^R dR_3 \int_{R-R_3}^R dR_2 (2R - R_2 - R_3) \times R_2 R_3 [V_1(r_1) + V_2(r_2) + V_3(r_3)].$$

作为一种推广, 假设三体系统中, 粒子 2 和 3 为等质量全同粒子, 而与粒子 1 质量不等。为简单起见, 假定 3 个粒子均无自旋, 因此波函数不包含自旋部分。记 3 个粒子质量为 M_1, M_2 和 M_2 , 此时变分方程^[2, 3]为

$$0 = \delta \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_3 r_1 r_2 r_3 \times \left\{ \frac{\hbar^2 (M_1 + M_2)}{2M_1 M_2} \left[\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r_i} \right)^2 + t(1, 2, 3) + t(2, 3, 1) + t(3, 1, 2) \right] + \frac{\hbar^2 (M_1 - M_2)}{2M_1 M_2} \times \left[\left(\frac{\partial \Psi}{\partial r_3} \right)^2 - t(1, 2, 3) + t(2, 3, 1) + t(3, 1, 2) \right] + [U(r_1) + U(r_2) + V(r_3)] \Psi^2 - E \Psi^2 \right\},$$

其中

$$t(i, j, k) = \frac{r_i^2 + r_j^2 - r_k^2}{2r_i r_j} \frac{\partial \psi}{\partial r_i} \frac{\partial \psi}{\partial r_j}.$$

类似于前面的假定, 有^[2, 3]

$$\Psi = \Phi(R),$$

$$R(\eta) \equiv \frac{1}{2}(r_1 + r_2 + \eta r_3),$$

$$R_2 \equiv r_2, R_3(\eta) \equiv \frac{1}{2}(1 + \eta)r_3, \quad (2)$$

引入了一个参数 η 。当 $\eta = 1$ 时, 即回到前面的情况。在文献[2, 3]所解决的具体问题中, η 的取值范围为 $\eta \geq 0$ 。

经与前面相同的步骤, 可得到等效两体方程:

$$\frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^5 \frac{\partial \Phi}{\partial R} \right) - \frac{1}{D} \left[V_{\text{eff}} - \frac{8 + 5\eta + \eta^2}{15(1 + \eta)^3} E \right] \Phi = 0, \quad (3)$$

其中 D 的一般表达式为

$$D \equiv \frac{1}{60(1 + \eta)^3} \{ [2\mu + (\mu + \mu')\eta^2] \times (8 + 5\eta + \eta^2) + \eta(5 + \eta)(3\mu + \mu') \} \equiv \frac{D'}{60(1 + \eta)^3}, \quad (4)$$

$$\mu = \frac{\hbar^2 (M_1 + M_2)}{2M_1 M_2}, \mu' = \frac{\hbar^2 (M_1 - M_2)}{2M_1 M_2}.$$

而“等效势能” V_{eff} 的表达式为

$$V_{\text{eff}} = \frac{1}{R^5} \int_0^R dR_3 \int_{R-R_3}^{R-\beta R_3} dR_2 \times (2R - R_2 - \nu R_3) R_2 R_3 \times [U(r_1) + U(r_2) + V(r_3)], \quad (5)$$

其中

$$\beta = \frac{\eta - 1}{\eta + 1}, \nu = \frac{2\eta}{\eta + 1} = 1 + \beta.$$

2.2 η 取值范围的确定

然而, 我们也注意到, 在文献[2, 3]推导等效两体方法的过程中, 并没有指明一般情况下 η 的取值范围。下面我们证明在一般情况下取值范围为 $\eta > -1$ 。

考虑前面推导时所用到的积分变换:

$$\int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_3 \Rightarrow \int_0^\infty dR \int_0^R dR_3 \int_{R-R_3}^{R-\beta R_3} dR_2$$

为了使该变换成立, 分析坐标变换关系 $R(\eta) \equiv \frac{1}{2}(r_1 + r_2 + \eta r_3)$ 可知, 由于在 r_1 和 r_2 取定时, r_3 的取值范围是 $|r_1 - r_2|$ 到 $r_1 + r_2$, 为了保证变换之后 R 的取值范围为 $[0, \infty)$, 只需要 $\eta > -1$ 即可, 并不需要 $\eta \geq 0$ 。

在 $\eta > -1$ 的条件下, 由三角形各边长所满足的关系, 在 R 取定时, 有 $0 \leq r_3 \leq r_1 + r_2$, 由于 $R_3(\eta) \equiv \frac{1}{2}(1 + \eta)r_3, \eta + 1 > 0$, 故

$$\Rightarrow 0 \leq R_3, r_3 + \eta r_3 \leq r_1 + r_2 + \eta r_3 \Rightarrow 0 \leq R_3 \leq R,$$

同样, 在 R 和 R_3 取定时, 有

$$r_2 \leq r_1 + r_3 \Rightarrow 2r_2 \leq r_1 + r_2 + \eta r_3 + (1 - \eta)r_3 \Rightarrow R_2 \leq R - \beta R_3,$$

$$r_1 \leq r_2 + r_3 \Rightarrow r_1 + r_2 + \eta r_3 - (1 + \eta)r_3 \leq 2r_2 \Rightarrow R - R_3 \leq R_2,$$

因此, 在 $\eta > -1$ 的条件下, 变换

$$\int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_3 \Rightarrow \int_0^\infty dR \int_0^R dR_3 \int_{R-R_3}^{R-\beta R_3} dR_2$$

仍然成立, 其中 $\beta = (\eta - 1) / (\eta + 1)$, $\eta > -1$ 同时保证了 β 有意义。证毕。

2.3 类氢离子问题的求解

把等效两体方程(3)应用到类氢离子问题。令 $\Phi(R) = \frac{F(R)}{R^{5/2}}$, 代入(3)式得到

$$\frac{d^2 F}{dR^2} + \left[\frac{4(8 + 5\eta + \eta^2)}{D} E - \frac{V_{\text{eff}}}{D} - \frac{\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right)}{R^2} \right] F = 0, \quad (6)$$

对于类氢离子, 记

$$\epsilon = \frac{\mu}{\hbar^2/2m_e} = \frac{M + m_e}{M} = 1 + \frac{m_e}{M}, \quad \mu' \epsilon' = \frac{\mu'}{\hbar^2/2m_e} = \frac{M - m_e}{M} = 1 - \frac{m_e}{M},$$

M 为核的质量, 代入(4)式, 有

$$D = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{(\epsilon + \eta^2)(8 + 5\eta + \eta^2) + \eta(5 + \eta)(\epsilon + 1)}{30(1 + \eta)^3},$$

考虑原子核与核外电子间、两个电子间只有理想的库仑相互作用的情况, 即 $U(r_i) = -Ze^2/r_i (i = 1, 2)$, $V(r_3) = e^2/r_3$, 代入(5)式, 并根据(2)式, 经过简单计算可以得到

$$V_{\text{eff1}} = -(1 - \beta) \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{4} \left(\nu - \frac{1 + \beta}{2} \right) \right] Ze^2 \frac{1}{R},$$

$$V_{\text{eff3}} = (1 - \beta) \frac{1 + \eta}{2} \left[\frac{1}{2} - \frac{\nu}{3} + \frac{\nu(1 + \beta)}{8} - \frac{1 + \beta + \beta^2}{12} \right] e^2 \frac{1}{R},$$

$$V_{\text{eff}} = 2V_{\text{eff1}} + V_{\text{eff3}} = (1 - \beta) \frac{e^2}{R} \left[-Z \left(\frac{2}{3} - \frac{\nu}{4} \right) + \frac{1 + \eta}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{3} + \frac{\nu^2}{8} - \frac{1 + \beta + \beta^2}{12} \right) \right],$$

于是得到

$$\frac{d^2 F}{dR^2} + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E' + \frac{Z'e^2}{R} \right) - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] F = 0, \quad l = \frac{3}{2}, \quad (7)$$

$$E' = \frac{2(8 + 5\eta + \eta^2)}{(\epsilon + \eta^2)(8 + 5\eta + \eta^2) + \eta(5 + \eta)(\epsilon + 1)} E,$$

$$Z' = (1 - \beta) \frac{30(1 + \eta)^3}{(\epsilon + \eta^2)(8 + 5\eta + \eta^2) + \eta(5 + \eta)(\epsilon + 1)} \times \left[Z \left(\frac{2}{3} - \frac{\nu}{4} \right) - \frac{1 + \eta}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{3} + \frac{\nu^2}{8} - \frac{1 + \beta + \beta^2}{12} \right) \right].$$

方程(7)与核电荷数为 Z' 的类氢离子满足的方程形式上完全相同, 只是角动量子数 l 固定为 $3/2$ 。因此, 沿用类氢离子的结果, 可以解得

$$E' = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{Z'^2}{(n_r + 3/2 + 1)^2}, \quad (8)$$

$$E = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_r + 3/2 + 1)^2} f(\eta),$$

$$f(\eta) = \frac{\left\{ 30(1 - \beta)(1 + \eta)^3 \left[Z \left(\frac{2}{3} - \frac{\nu}{4} \right) - \frac{1 + \eta}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{3} + \frac{\nu^2}{8} - \frac{1 + \beta + \beta^2}{12} \right) \right] \right\}^2}{2(8 + 5\eta + \eta^2) [(\epsilon + \eta^2)(8 + 5\eta + \eta^2) + \eta(5 + \eta)(\epsilon + 1)]}.$$

作出 $f(\eta)$ 随 η 的变化曲线, 取氦原子 $Z=2, \epsilon=1+0.511/(4.002603 \times 931.5) = 1.000137$ 。结果见图 1。由于 E 和 $f(\eta)$ 符号相反, 因此, 在 $f(\eta)$ 取最大值时, 能量 E 取最小值。

同样地, 在各种类氦离子的条件下作相同的计算, 找到 $f(\eta)$ 的极值。对于基态 $n_r=0$, 把求得的能量极值作为基态能量, 与单参数变分法以及实验值作比较。结果见表 1。表 1 的实验数据来自文献 [4]。

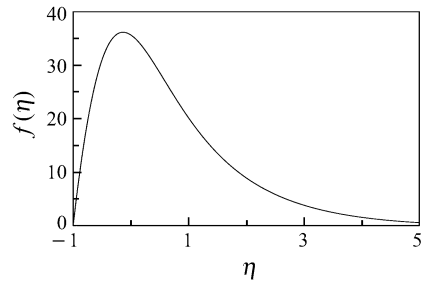


图 1 $f(\eta)$ 随 η 的变化曲线

表 1 等效两体方法基态能量与单参数变分法以及实验值对比

类氦离子	Z	核质量 M/u	实验值/eV	单参数变分法/eV	最佳 η 值	等效两体方法/eV
He	2	4.002603	-79.010	-77.474	-0.1371	-78.615
Li ⁺	3	7.016004	-198.087	-196.513	-0.0923	-197.714
Be ⁺⁺	4	9.012183	-371.574	-369.970	-0.0696	-371.200
B ⁺⁺⁺	5	11.009305	-599.495	-597.846	-0.0558	-599.094
C ⁴⁺	6	12.000000	-881.876	-880.139	-0.0466	-881.399
N ⁵⁺	7	14.003074	-1218.709	-1216.856	-0.0400	-1218.124
O ⁶⁺	8	15.994915	-1610.016	-1607.992	-0.0350	-1609.266

其中, 单参数变分法求得的基态能量 $E = -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2$, $\mu = \frac{Mm_e}{M+m_e}$ 为约化质量, M 为核的质量 [5]。

2.4 基态波函数的求解

以下仅对氦原子进行求解。其余类氦离子求解方法基本相同。对氦原子, 将 $Z=2, \epsilon=1.000137$ 以及最佳的 $\eta = -0.1371$ 代入方程(7), 可以得到

$$\frac{d^2 F}{dR^2} + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(2.389224E + 9.289051 \frac{e^2}{R} \right) - \frac{3/2(3/2+1)}{R^2} \right] F = 0,$$

该方程的解

$$\begin{aligned} F(R) &\propto r^{l+1} e^{-\beta r} F(-n_r, 2l+2, 2\beta r), \\ r &= R/a', \quad a' = a/Z' = \hbar^2/m_e Z' e^2, \quad Z' = 9.289051, \\ n_r &= 0, 1, 2, \dots, \quad \beta = \frac{1}{n_r + l + 1}, \end{aligned}$$

其中, a 为玻尔半径, r 是无量纲的变量, $F(\alpha, \gamma, \xi)$ 为合流超几何级数。

对于基态, $\alpha = -n_r = 0, F(\alpha, \gamma, \xi) = 1$, 且 $l=3/2$, 代入上式, 将 $|F(R)|^2$ 归一化, 得到

$$F(R) = K \frac{R^{5/2}}{a'^3} \exp \left[-\frac{R}{(n_r + l + 1)a'} \right],$$

其中, K 是一个无量纲的归一化系数。

由于 $\Phi(R) = \frac{F(R)}{R^{5/2}}$, 同时注意 $R(\eta) \equiv \frac{1}{2}(r_1 + r_2 + \eta r_3)$, $\eta = -0.1371$, 故基态波函数

$$\begin{aligned} \Phi(R) &= K \frac{Z'^3}{a^3} \exp \left(-\frac{2Z'R}{5a} \right) = K \frac{9.289051^3}{a^3} \exp \left(-\frac{2 \times 9.289051R}{5a} \right) \\ &= \frac{K'}{a^3} \exp \left(-\frac{2 \times 9.289051R}{5a} \right) = \frac{K'}{a^3} \exp \left[-\frac{1.8578102(r_1 + r_2 - 0.1371r_3)}{a} \right], \end{aligned}$$

最终结果是

$$\Phi(R) = \frac{K'}{a^3} \exp\left[-\frac{1.8578102(r_1 + r_2)}{a}\right] \exp\left(\frac{0.2547058r_3}{a}\right). \quad (9)$$

3 用变分法对结果进行检验

3.1 双参数变分法

考虑到等效两体方法的结果见公式(9), 取类氦离子基态的试探波函数为

$$\Phi(r_1, r_2, r_{12}, \lambda, k) = N \exp[-\lambda(r_1 + r_2) + kr_{12}] = N\Phi_1(r_1)\Phi_2(r_2)\Phi_3(r_{12}), \quad (10)$$

其中, λ 和 k 为引入的两个变分参数, N 为归一化系数, $r_{12} \equiv r_3$ 即两个电子之间的距离。

由变分原理, 计算体系的能量在该试探波函数下的平均值。为简单起见, 采用原子单位。考虑到

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{\lambda}{r_1}\right)\Phi &= \left[-\frac{1}{2}\nabla_1^2\Phi_1\right]\Phi_2\Phi_3 + \left(-\frac{1}{2}\right)(2\nabla_1\Phi_1 \cdot \nabla_1\Phi_3)\Phi_2 + \\ &\Phi_1\Phi_2\left[-\frac{1}{2}\nabla_1^2\Phi_3\right] - \frac{\lambda}{r_1}\Phi = -\frac{\lambda^2}{2}\Phi + \lambda k \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_1 r_{12}}\Phi - \frac{k^2}{2}\Phi - \frac{k}{r_{12}}\Phi, \\ \iint \Phi^* \left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{\lambda}{r_1}\right)\Phi d\tau_1 d\tau_2 &= \iint \Phi^* \left(-\frac{\lambda^2}{2} + \lambda k \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_1 r_{12}} - \frac{k^2}{2} - \frac{k}{r_{12}}\right)\Phi d\tau_1 d\tau_2 \\ &= -\frac{\lambda^2}{2} - \frac{k^2}{2} + \lambda k \iint \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_1 r_{12}} \Phi^2 d\tau_1 d\tau_2 - k \iint \frac{\Phi^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2, \end{aligned}$$

设

$$\begin{aligned} M_1 &= \iint \frac{\Phi^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2, \quad M_2 = \iint \frac{\Phi^2}{r_1} d\tau_1 d\tau_2 = \iint \frac{\Phi^2}{r_2} d\tau_1 d\tau_2, \\ M_3 &= \iint \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_1 r_{12}} \Phi^2 d\tau_1 d\tau_2 = \iint \frac{\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{r}_{21}}{r_2 r_{21}} \Phi^2 d\tau_1 d\tau_2, \end{aligned}$$

其中利用了 r_1 和 r_2 的对称性。

综合上面的结果, 计算系统的能量在试探波函数下的平均值, 有

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \iint \Phi^* \left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right)\Phi d\tau_1 d\tau_2 \\ &= \iint \Phi^* \left[\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{\lambda}{r_1}\right) + \left(-\frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{\lambda}{r_2}\right) - \frac{Z-\lambda}{r_1} - \frac{Z-\lambda}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right]\Phi d\tau_1 d\tau_2 \\ &= -\lambda^2 - k^2 + 2\lambda k M_3 - 2k M_1 - 2(Z-\lambda)M_2 + M_1. \end{aligned}$$

经过计算, 有

$$\begin{aligned} M_1 &= N^2 \iint \frac{\exp[-2\lambda(r_1 + r_2) + 2kr_{12}]}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 \\ &= N^2 \pi^2 \left[\frac{\lambda}{(\lambda - k)^4 (\lambda + k)^2} - \frac{1}{4\lambda(\lambda - k)^2 (\lambda + k)^2} - \frac{1}{8\lambda^3 (\lambda - k)(\lambda + k)} \right], \\ M_2 &= N^2 \iint \frac{\exp[-2\lambda(r_1 + r_2) + 2kr_{12}]}{r_1} d\tau_1 d\tau_2 \\ &= N^2 \pi^2 \left[\frac{\lambda + 2k}{(\lambda - k)^4 (\lambda + k)^2} - \frac{k}{4\lambda^2 (\lambda - k)^2 (\lambda + k)^2} \right], \\ M_3 &= N^2 \iint \exp[-2\lambda(r_1 + r_2) + 2kr_{12}] \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_{12}}{r_1 r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 \\ &= N^2 \pi^2 \left[\frac{\lambda(5k - \lambda)}{(\lambda - k)^5 (\lambda + k)^3} + \frac{1}{8\lambda^2 (\lambda - k)^2 (\lambda + k)^2} + \frac{3}{2(\lambda - k)^3 (\lambda + k)^3} \right], \end{aligned}$$

而由归一化条件 $\iint |\Phi|^2 d\tau_1 d\tau_2$, 可以得到

$$\frac{1}{N^2} = \pi^2 \left[\frac{\lambda(\lambda + 3k)}{(\lambda - k)^5 (\lambda + k)^3} - \frac{k}{2\lambda(\lambda - k)^3 (\lambda + k)^3} - \frac{k}{8\lambda^3 (\lambda - k)^2 (\lambda + k)^2} \right].$$

3.2 数值求解

将上面的各个积分代入能量平均值的表达式, 补上原子单位, 并且采用约化质量代替电子质量。经过数值计算, 求出令基态能量平均值取最小值的 λ 和 k , 结果见表 2(实验数据来自文献[4])。

表 2 双参数变分法基态能量与等效两体方法以及实验值对比

类氦离子	实验值/eV	等效两体方法/eV	最佳 λ 值	最佳 k 值	双参数变分法/eV
He	-79.010	-78.615	1.8581	0.2548	-78.616
Li ⁺	-198.087	-197.714	2.8600	0.2641	-197.715
Be ⁺⁺	-371.574	-371.200	3.8609	0.2687	-371.201
B ⁺⁺⁺	-599.495	-599.094	4.8615	0.2714	-599.095
C ⁴⁺	-881.876	-881.399	5.8619	0.2732	-881.400
N ⁵⁺	-1218.709	-1218.124	6.8621	0.2744	-1218.125
O ⁶⁺	-1610.016	-1609.266	7.8623	0.2754	-1609.267

将最佳的 λ 与 k 值代入(10)式, 补上原子单位, 得到氦原子基态波函数

$$\begin{aligned} \Phi(r_1, r_2, r_{12}) &= N \exp \left[\frac{-1.8580882(r_1 + r_2) + 0.2547460r_3}{a'} \right] \\ &= N \exp \left[\frac{-1.8580882(r_1, r_2)}{a} \right] = \exp \left(\frac{0.2547111r_3}{a} \right), \end{aligned}$$

与(9)式的结果符合得很好。

4 结论

本文介绍了求解三体问题的等效两体方法, 在已经成功应用于原子核系统的基础上, 将等效两体方法推广到原子系统, 证明了 η 的取值范围为 $\eta > -1$ 。在这个推广了的条件下, 将等效两体方法用于求解类氦离子的基态, 所得结果与一般的单参数变分法相比, 与实验值符合得更好。我们注意到, 在推广等效两体方法时, 为简单起见, 假设了一个 3 个粒子均无自旋的系统, 并且相互作用势中也不包含与自旋有关的部分, 而实际应用到原子系统时, 电子是有 1/2 自旋的。然而, 考虑到单参数变分法在忽略电子自旋的条件下就得到了很好的结果, 我们同样在采用等效两体方法进行计算时不计入电子自旋的影响, 计算结果也表明这种近似是合理的。

同时, 在等效两体方法求得的基态波函数的启发下, 本文尝试了双参数变分法来求解类氦离子, 用于检验等效两体方法的准确性。计算结果表明, 在考虑了约化质量所带来的修正之后, 忽略数值计算可能引入的误差, 可以得到和等效两体方法基本上完全相同的结果。从计算过程可以看出, 双参数变分法相比等效两体方法, 计算上要复杂一些。

另外还注意到, 等效两体方法不仅仅可以求解基态能量, 同样也可以求解激发态。这一点从上面求解类氦离子的结果可以明显地看出来。在 E 的表达式中, 取 $n_r = 0$, 得到基态; 取 $n_r = 1, 2, \dots$, 得到激发态。至于求得的激发态能量实际上对应于哪一个 0^+ 激发态, 则需要通过与实验数据的比较才能够确认。这些分析都表明, 等效两体方法对于求解原子系统中的三体问题是一个既简便、又有很好精度的近似方法。

参考文献 (References):

- [1] Feshbach H, Rubnow S I. *Phys Rev*, 1995, 98: 188.
- [2] Abou-Hadid L, Higgins K. *Proc Phys Soc*, 1962, 79: 34.
- [3] Ren Zhongzhou. *Phys Rev*, 1994, C49:1281; Bao Cheng-guang, Liu Yuxin. *Phys Rev Lett*, 1999, 82: 61; Ren Zhong-zhou, Xu Chang. *New Progress in Research on the Quantum Three-Body Problem*. In: Ke Shanzhe, Ju Guoxing, Wang Junyi, *et al.* *Liangzilixue Zhaohuaxishi*. Beijing: Science Press, 2007, 2: 135(In Chinese).
(任中洲, 许昌. 量子三体问题研究的新进展. 见: 柯善哲, 鞠国兴, 王均义等. 量子力学朝花夕拾(第二辑). 北京: 科学出版社, 2007, 135.)
- [4] Bethe H A, Salpeter E E. *Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Systems*. In: Flügge S, *Handbuch der Physik*, Bd. 35. Berlin: Springer-Verlag, 1957, 240.
- [5] Zeng Jinyan. *Quantum Mechanics*. Third Edition. Beijing: Science Press, 2000, 1:594(In Chinese); Wang Qi, Han Jian-long, Xiao Zhigang, *et al.* *HEP & NP*, 2006, 30(S2):136(In Chinese).
(曾谨言. 量子力学(卷 1. 第三版). 北京: 科学出版社, 2000, 594; 王琦, 韩建龙, 肖志刚等. 高能物理与核物理, 2006, 30(S2):136.)

Equivalent Two-body Method for Helium-like Ions^{*}LIN Qi-hu¹, REN Zhong-zhou^{1, 2, #}*(1 Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210008, China;**2 Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Research Facility in Lanzhou, Lanzhou 730000, China)*

Abstract: An extended equivalent two-body method for three-body systems is introduced in this article. The method is applied to an atomic three-body system. Energies and wave functions of a helium-like ion are calculated, which are consistent with the experimental data much better, in contrast to the results obtained by a one-parameter calculus of variations approach. Then we use a two-parameter calculus of variations approach to verify the precision of the ground state energy and wave function obtained by the extended equivalent two-body method. These results indicated that the extended equivalent two-body method is applicable to an atomic three-body problem.

Key words: three-body problem; equivalent two-body method; calculus of variations; helium-like ion

* Received date: 9 Jan. 2009; Revised date: 25 Sep. 2009

* Foundation item: National Natural Science Foundation of China(10535010, 10675090, 10775068, 10735010); 973 Major State Basic Research Development Program of China(2007CB815004)

Corresponding author: Ren Zhong-zhou, E-mail: zren@nju.edu.cn