

Yukawa 位基态波函数的 Green 函数叠代求解*

张昭¹ 赵维勤^{1,2}

1 (中国科学院高能物理研究所 北京 100039)

2 (中国高等科学技术中心 北京 100080)

摘要 应用最近发展的沿一条确定的轨迹求解 N 维基态量子波函数的方法, 首先由直接级数展开法得到 Hulthén 位的严格基态解和 Yukawa 位的近似基态解; 并进一步运用 Green 函数叠代法及变分-叠代法求 Yukawa 位的基态近似解.

关键词 格林函数 叠代解 变分法 Yukawa 位

1 引言

在应用薛定谔方程求解体系的能量本征值及本征波函数时, 往往不能求得严格解析解, 必须借助于各种近似计算的方法. 近来李政道等发展了一种沿着一条确定轨迹求解 N 维薛定谔方程的基态量子波函数的新方法^[1,2]. 该方法将基态波函数表示为 $\Phi(q) = e^{-S(q)}$, 并在位势中引入耦合系数 g^2 作为标度因子, 将 S 和能量 E 按 $1/g$ 展开代入薛定谔方程, 令方程两边 g^{-n} 系数相等, 使薛定谔方程由一个二阶偏微分方程化为一阶偏微分方程系列. 该系列的第一级方程恰为一经典的 Jacobi-Hamilton 方程, 求解该方程可得一条确定的经典轨迹 S_0 . 通过坐标变换 $q \rightarrow (S_0, \alpha)$, 可将该一阶偏微分方程系列化为一阶常微分方程系列. 此常微分方程系列的求解均可表示为沿确定的轨迹 S_0 的积分, 而能量则可以用位势极小处的系列微分表示. 此外, 基于这种级数展开的方法, 导出了一个全新的微扰展开系列. 沿这条确定的轨迹 S_0 定义相应的非微扰位的 Green 函数, 进而得到一种新的 Green 函数叠代求基态波函数的方法. 用以上两方法求解 N 维基态量子波函数, 所有步骤都最终转化为沿着一条确定轨迹的积分来完成. 与传统的微扰论相比较, 此方法无需求解非微扰位的激发态波函数, 即不必计算复杂的交叉矩阵元.

本文第二节应用直接级数展开的方法分别求 Hulthén 位及 Yukawa 位的基态解, 得到了 Hulthén 位的严格基态解和 Yukawa 位的基态近似解; 第三节则用 Green 函数叠代法分别以 Coulomb 位和 Hulthén 位的基态解为尝试波函数求 Yukawa 位的基态近似解, 得到的结果优于传统的微扰论; 另用以上两种位分别先作变分, 再叠代求解, 结果得到明显改进.

2 用级数展开法求解基态波函数

直接的级数展开方法有两个展开系列: 波函数 $\{S_n\}$ 和能量 $\{E_n\}$, S_0 由经典的 Jacobi-Hamilton 方程确定, 而各级 E_n 由相应 S_{n+1} 在位势极小处必须为解析的条件来决定; S_n 均化为沿 S_0 的积分. 一般结果为两无穷系列, 但对于有严格解析解的位势, 往往截断为有限项.

2.1 Hulthén 位基态波函数的严格解

Hulthén 位的 S 态有严格的解, 不过要求解二阶偏微分方程. 对于 Hulthén 位的基态波函数, 采用这种新的级数展开的办法, 可将其转化为一阶常微分方程系列. 通过逐级求解, 同样能得到严格的基态波函数及本征能量.

取 Hulthén 位为

2002-05-14 收稿

* 国家自然科学基金 (19947001) 资助

$$V_h = g^2 v(r), v(r) = -\frac{\alpha e^{-\alpha r}}{1 - e^{-\alpha r}}, \quad (1)$$

其中 α 是屏蔽因子, 耦合系数 g^2 作为级数展开的标度因子. 当 $r \rightarrow 0$ 时, Hulthén 位趋向于 Yukawa 位, 即

$$r \rightarrow 0, V_h \rightarrow -g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r}. \quad (2)$$

为方便起见, 取 $\hbar = 1$, 粒子质量 $m = 1$. 令 Hulthén 位的基态量子波函数为 Ψ_h , 则薛定谔方程为

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_h\right) \Psi_h = E \Psi_h. \quad (3)$$

将波函数表示为: $\Psi_h(r) = e^{-S(r)}$, (4)

引入归一化条件, 令 $\Psi_h(r)$ 满足: $\Psi_h(0) = 1$.

对 S 和基态能量 E 分别按 g^{-2} 幂次引入展开:

$$S = g^2 S_0 + g^0 S_1 + g^{-2} S_2 + g^{-4} S_3 + \dots, \quad (5)$$

$$E = g^4 E_0 + g^2 E_1 + g^0 E_2 + g^{-2} E_3 + \dots. \quad (6)$$

将上式代入薛定谔方程, 令方程两边 g^n 系数相等, 得如下系列方程:

$$g^4 \quad \frac{1}{2} (\nabla S_0)^2 = -E_0, \quad (7)$$

$$g^2 \quad \nabla S_0 \cdot \nabla S_1 = \frac{1}{2} \nabla^2 S_0 + v(r) - E_1, \quad (8)$$

$$g^0 \quad \nabla S_0 \cdot \nabla S_2 = \frac{1}{2} \nabla^2 S_1 - \frac{1}{2} (\nabla S_1)^2 - E_2, \quad (9)$$

$$g^{-2} \quad \nabla S_0 \cdot \nabla S_3 = \frac{1}{2} \nabla^2 S_2 - \nabla S_1 \cdot \nabla S_2 - E_3, \quad (10)$$

...

解方程(7)得: $S_0 = \sqrt{-2E_0} r$. (11)

将 S_0 及 $\nabla^2 = \frac{2}{r}$ 代入二级方程. 为使 S_1 在 $r=0$ 解析, 必须有: $\sqrt{-2E_0} = 1$,

即: $E_0 = -\frac{1}{2}, S_0 = r$. (12)

由此确定的轨迹正好是球坐标的径向分量 r . 沿 S_0 的积分即沿径向 r 的积分:

$$S_1 = \int_0^r \left[\left(\frac{1}{r'} + v(r') \right) - E_1 \right] dr'. \quad (13)$$

代入三级方程, 由 S_2 在 $r \rightarrow 0$ 时应解析, 得到

$$E_1 = \frac{\alpha}{2}, S_1 = -\frac{\alpha r}{2} + \ln \left(\frac{\alpha r}{1 - e^{-\alpha r}} \right). \quad (14)$$

由此可导得: $E_2 = -\frac{\alpha^2}{8}, S_2 = 0$. (15)

余此类推, 更高级项 $E_{n \geq 3}, S_{n \geq 3}$ 皆为零, 即 E 和 S 的展开截断为有限项:

$$S = g^2 S_0 + S_1, \quad (16)$$

$$E = -\frac{1}{2} g^4 + \frac{\alpha}{2} g^2 - \frac{\alpha^2}{8}. \quad (17)$$

至此, 利用这种新的级数展开的办法, 得到了 Hulthén 位的严格基态波函数:

$$\Psi_h = \frac{1 - e^{-\alpha r}}{\alpha r} e^{-\left(g^2 - \frac{\alpha}{2}\right)r}, \quad (18)$$

以下取 $\delta = \frac{\alpha}{g^2}$, 则由波函数可知 Hulthén 位的基态为束缚态的要求是:

$$\delta < 2. \quad (19)$$

2.2 级数展开法求解 Yukawa 位的基态能量本征值

$$\text{Yukawa 位: } V_y(r) = -g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r}. \quad (20)$$

其中 α 是屏蔽系数, g^2 为耦合系数.

类似于 Hulthén 位的求解过程, 可得各级能量修正为以下结果:

$$E_n = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{2} \nabla^2 S_{n-1} \quad (n > 2). \quad (21)$$

则 Yukawa 位的基态能量本征值为

$$E = g^4 \left[-\frac{1}{2} + \delta - \frac{3}{4} \delta^2 + \frac{1}{2} \delta^3 - \frac{11}{16} \delta^4 + \frac{21}{16} \delta^5 - \frac{145}{48} \delta^6 + \frac{757}{96} \delta^7 - \frac{69433}{3072} \delta^8 + \frac{321499}{4608} \delta^9 - \frac{2343967}{10240} \delta^{10} + \frac{24316577}{30720} \delta^{11} - \frac{2536041607}{884736} \delta^{12} + \frac{47860811537}{4423680} \delta^{13} - \frac{145923785051}{3440640} \delta^{14} + \frac{159957248809633}{928972800} \delta^{15} + O(\delta^{16}) \right]. \quad (22)$$

3 用 Green 函数叠代法求 Yukawa 位的基态近似解

Yukawa 位的能量本征态及本征值没有严格的解析解, 因此只能用各种近似计算的方法去求解. 这些近似的方法有传统的微扰论、变分法、数值计算等. 下面介绍用这种新的沿一条确定轨迹积分的 Green 函数叠代法来近似计算 Yukawa 位的基态解. 该方法只能用来求解基态和低激发态问题. 较之传统的微扰论, 它的优越性在于无需计算交叉矩阵元, 而将求解最终化为沿一条确定轨迹的积分.

3.1 Green 函数叠代法求中心势基态波函数的一般公式

中心势的基态波函数只是径向分量 r 的函数, 通过以上两例可以看出, 所谓的确定路径即径向分量 r . 设中心势 $V(r)$ 对应的哈密顿量为 H , 基态波函数 $\Psi(r)$ 及本征能量 E 待求; 非微扰势 $V_0(r)$ 对应哈密顿量为 H_0 , 相应的基态波函数 $\Psi_0(r)$ 及本征能量 E_0 已知; $\Delta V(r) = V(r) - V_0(r)$ 为微扰势, $\epsilon = E - E_0$ 为能量修正.

$$\text{引入归一化条件: } \Psi_0(0) = \Psi(0) = 1. \quad (23)$$

$$\text{定义 Green 函数 } G: (H_0 - E_0)G = 1, \quad (24)$$

则基态波函数 $\Psi(r)$ 满足下式:

$$\Psi = \Psi_0 - G(\Delta V - \epsilon)\Psi. \quad (25)$$

$$\text{令 } \Psi = \Psi_0 f, \text{ 有: } f = 1 - \overline{G}(\Delta V - \epsilon)f, \quad (26)$$

$$\text{其中: } \overline{G} = \Psi_0^{-1} G \Psi_0. \quad (27)$$

引进矩阵 Θ

$$(r | \Theta | r') = \begin{cases} 1 & \text{当 } r > r' \geq 0 \\ 0 & \text{当 } 0 \leq r < r' \end{cases}, \quad (28)$$

Green 函数 $\overline{G}^{(-1)}$ 为

$$\overline{G} \equiv -2\Theta\Psi_0^{-2} \frac{h_r}{h_w} \Theta \Psi_0^2 h_r h_w. \quad (29)$$

在球坐标系 (r, θ, φ) 中, h_r 及 h_w 定义如下

$$\begin{aligned} h_r^2 &= [(\nabla r)^2]^{-1} = 1, h_\theta^2 = [(\nabla \theta)^2]^{-1} = r^2, \\ h_\varphi^2 &= [(\nabla \varphi)^2]^{-1} = r^2 \sin^2 \theta, \\ h_w &= h_\theta h_\varphi = r^2 \sin \theta, \end{aligned} \quad (30)$$

将上式代入式(29)中, 得 $f(r)$ 的表达式

$$\begin{aligned} f(r) &= 1 - 2 \int_0^r \Psi_0^{-2}(r') \frac{1}{r'^2} dr' \int_r^\infty \Psi_0^2(r'') \cdot \\ &(\Delta V(r'') - \epsilon) f(r'') r''^2 dr'' \end{aligned} \quad (31)$$

而能量的修正 ϵ 由下式决定

$$\frac{\int_0^\infty \Psi_0^2(r) \Delta V(r) f(r) r^2 dr}{\int_0^\infty \Psi_0^2(r) f(r) r^2 dr}. \quad (32)$$

根据式(31)和式(32), 引入两个叠代系列 $\{f_n\}$ 和 $\{\epsilon_n\}$:

$$f = 1, f_1, f_2, \dots, f_n, \dots \quad (33)$$

$$\epsilon = 0, \epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n, \dots \quad (34)$$

要求满足下式:

$$\begin{aligned} f_n &= 1 - 2 \int_0^r \Psi_0^{-2}(r') \frac{1}{r'^2} dr' \cdot \\ &\int_r^\infty \Psi_0^2(r'') (\Delta V(r'') - \epsilon_n) f_{n-1}(r'') r''^2 dr'' \end{aligned} \quad (35)$$

$$\epsilon_n = \frac{\int_0^\infty \Psi_0^2 \Delta V(r) f_{n-1}(r) r^2 dr}{\int_0^\infty \Psi_0^2(r) f_{n-1}(r) r^2 dr}. \quad (36)$$

可以看出, ϵ_1 恰为传统微扰论能量的一级修正. 选择适当的尝试波函数 Ψ_0 , 这种交替叠代过程最终将得到收敛的 $f(r)$ 及能量修正 ϵ , 即

$$f(r) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(r), \epsilon = \lim_{n \rightarrow \infty} \epsilon_n,$$

Green 函数叠代法求解基态量子波函数的收敛性取决于尝试波函数的选择.

3.2 采用 Coulomb 位基态解为尝试波函数的叠代法求解

Yukawa 位又称类 Coulomb 位, 当 $r \rightarrow 0$ 时, Yukawa 位与 Coulomb 位趋于一致. Coulomb 位有严格解析解且形式简单, 故我们首先用 Coulomb 位的基态解作为尝试波函数, 用 Green 函数叠代法求解 Yukawa 位的基态近似解.

$$\text{Coulomb 位: } V_c = -g^2 \frac{1}{r}, \quad (37)$$

Coulomb 位基态波函数:

$$\Psi_c = e^{-g^2 r}, \quad (38)$$

$$\text{Yukawa 位: } V_y = -g^2 \frac{e^{-ar}}{r},$$

微扰势:

$$\Delta V_{y-c} = V_y - V_c = -g^2 \frac{e^{-ar}}{r} + g^2 \frac{1}{r}, \quad (40)$$

Yukawa 位的基态波函数 Ψ_y 及能量本征值 E , 满足:

$$\Psi_y = \Psi_c f, E = -\frac{1}{2} g^4 + \epsilon. \quad (41)$$

其中 f 及 ϵ 意义同上节. 引入叠代系列 $\{f_n\}$ 和 $\{\epsilon_n\}$, 根据上节所述方法, 得到一次叠代的能量修正为

$$\epsilon_1 = g^4 \times \frac{4\delta + \delta^2}{(2 + \delta)^2}. \quad (42)$$

它与微扰论的能量一级修正一致. 波函数的一次叠代修正为

$$\begin{aligned} f_1 &= 1 + \frac{2g^2}{2g^2 + \alpha} \int_0^r \frac{1}{r} (e^{-ar} - 1) dr + \\ &\frac{2g^2}{(2g^2 + \alpha)^2} \int_0^r \frac{1}{r^2} (e^{-ar} - 1 + ar) dr + \\ &g^2 \left[1 - \frac{4g^4}{(2g^2 + \alpha)^2} \right] r, \end{aligned}$$

由 $f_1(r)$ 叠代积分得二次叠代的能量修正为

$$\epsilon_2 = 4g^4 \times \left[\delta(16 + 56\delta + 72\delta^2 + 39\delta^3 + 10\delta^4 + \delta^5) - \right.$$

$$2(1 + \delta)(2 + \delta)^3 \ln\left(1 + \frac{\delta}{2}\right) + 8(2 + 3\delta + \delta^2) \ln\left(1 + \frac{\delta}{2 + \delta}\right) \Big/ \left\{ (1 + \delta)(2 + \delta)^2 \left[16 + 32\delta + 26\delta^2 + 5\delta^3 - 8(2 + \delta) \ln\left(1 + \frac{\delta}{2}\right) \right] \right\}, \quad (44)$$

上式收敛要求 $\delta < 2$.

继续叠代可得 f_2 及三次叠代能量修正 ϵ_3 . 由于不能得出 ϵ_3 的解析表达式, 需数值积分. 下面将一次叠代所得能量及二次叠代所得能量在收敛域内作泰勒展开:

$$E_c + \epsilon_1 = g^4 \left(-\frac{1}{2} + \delta - \frac{3}{4}\delta^2 + \frac{1}{2}\delta^3 - \frac{5}{16}\delta^4 + \frac{7}{64}\delta^6 + \frac{1}{16}\delta^7 - \frac{9}{256}\delta^8 + \dots \right), \quad (45)$$

$$E_c + \epsilon_2 = g^4 \left(-\frac{1}{2} + \delta - \frac{3}{4}\delta^2 + \frac{1}{2}\delta^3 - \frac{11}{16}\delta^4 + \frac{21}{16}\delta^5 - \frac{91}{48}\delta^6 + \frac{181}{96}\delta^7 - \frac{3643}{3072}\delta^8 + \dots \right). \quad (46)$$

可以看出一次叠代的结果与级数展开所得结果式 (22) 至 δ^3 一致, 而二次叠代的结果与用级数展开所得结果式 (22) 至 δ^5 一致, 预期三次以上结果会越来越逼近 Yukawa 位的严格基态解.

3.3 采用 Hulthén 位的基态解为尝试波函数的叠代求解

Hulthén 位介于 Coulomb 位和 Yukawa 位之间, 因此用 Hulthén 位的基态波函数作为尝试波函数, 用 Green 函数叠代法求解 Yukawa 位的基态解, 其收敛性应当更好些. 我们已在前面得到了 Hulthén 位的严格

基态波函数, 以下用叠代法求 Yukawa 位基态近似解.

与上节类似, Ψ_h 表示 Hulthén 位的基态波函数, ΔV_{y-h} 表示微扰势, f, ϵ, δ, f_n 及 ϵ_n 意义同前, 则有以下关系:

$$\Psi_h = \frac{1 - e^{-\alpha r}}{\alpha r} e^{-(g^2 - \frac{\alpha}{2})r}, \quad E_h = -\frac{1}{2}g^4 + \frac{\alpha}{2}g^2 - \frac{\alpha^2}{8}, \quad (47)$$

$$\Delta V_{y-h} = V_y - V_h = g^2 e^{-\alpha r} \left(\frac{\alpha}{1 - e^{-\alpha r}} - \frac{1}{r} \right), \quad (48)$$

$$\Psi_y = \Psi_h f, \quad E_y = E_h + \epsilon, \quad (49)$$

一次叠代的能量修正与微扰论一级修正一致, 为:

$$\epsilon_1 = \frac{\int_0^\infty \Psi_h^2 \Delta V_{y-h}(r) r^2 dr}{\int_0^\infty \Psi_h^2 r^2 dr} = g^4 \left\{ 1 - \frac{\delta}{2} - \frac{4 - \delta^2}{\delta^2} \left[2 \ln\left(1 + \frac{\delta}{2}\right) - \ln(1 + \delta) \right] \right\}, \quad (50)$$

上式的收敛域为 $\delta < 2$, 修正后的 Yukawa 位基态能量的泰勒展开式

$$E_h + \epsilon_1 = g^4 \left(-\frac{1}{2} + \delta - \frac{3}{4}\delta^2 + \frac{1}{2}\delta^3 - \frac{41}{96}\delta^4 + \frac{3}{8}\delta^5 - \frac{257}{768}\delta^6 + \frac{29}{96}\delta^7 - \frac{1409}{5120}\delta^8 + \dots \right). \quad (51)$$

由结果来看, Hulthén 位的一次叠代修正介于 Coulomb 位的一次叠代修正和二次叠代修正之间. 这说明, 叠代收敛的程度与尝试波函数的选取密切相关. 由于不能得到 ϵ_2 的解析式, 以 Hulthén 位为非微扰势的 Green 函数二次叠代所得能量修正的数值积分结果如表 1.

表 1 级数展开、Green 函数叠代与数值计算法求 Yukawa 基态能结果比较

Yukawa 位基态能量本征值的近似计算 能量单位 $-g^4$							
屏蔽参数 δ	Coulomb 位		Hulthén 位		级数	Hulthén 位	数值
	一级微扰	二级叠代	一级微扰	二级叠代	展开	单参变分	计算
0.001	0.49900	0.49900	0.49900	0.49900	0.49900	0.49900	0.499001
0.002	0.49800	0.49800	0.49800	0.49800	0.49800	0.49800	0.498000
0.005	0.49502	0.49502	0.49502	0.49502	0.49502	0.49502	0.495019
0.01	0.49007	0.49007	0.49007	0.49007	0.49007	0.49007	0.490074
0.02	0.48030	0.48030	0.48030	0.48030	0.48030	0.48030	0.480296
0.05	0.45182	0.45182	0.45182	0.45182	0.45182	0.45182	0.451816
0.06	0.44260	0.44260	0.44260	0.44260	0.44260	0.44260	0.442600
0.07	0.43351	0.43352	0.43351	0.43352	0.43352	0.43352	0.433518
0.08	0.42456	0.42457	0.42456	0.42457	0.42457	0.42457	0.424568
0.09	0.41574	0.41575	0.41574	0.41576	0.41576	0.41576	0.415749
0.10	0.40703	0.40706	0.40704	0.40706	0.40706	0.40706	0.407058

续表 1

Yukawa 位基态能量本征值的近似计算 能量单位 - g^4							
屏蔽 参数 δ	Coulomb 位		Hulthén 位		级数	Hulthén 位	数值
	一级微扰	二级叠代	一级微扰	二级叠代	展开	单参变分	计算
0.20	0.32645	0.32678	0.32658	0.32679	0.32681	0.32681	0.326808
0.30	0.25614	0.25742	0.25674	0.25754	0.25627	0.25763	0.257639
0.40	0.19444	0.19752	0.19610	0.19800	0.08339	0.19836	0.198376
0.50	0.14000	0.14580	0.14358	0.14712		0.14808	0.148117
0.60	0.09172	0.10101	0.09833	0.10403		0.10608	0.106136
0.70	0.04870	0.06235	0.05968	0.06796		0.07174	0.071834
0.80	0.01020	0.02872	0.02708	0.03828		0.04459	0.044704
0.90	-0.02438	-0.00060	0.00009	0.00014		0.02418	0.024314
1.00			-0.02165	-0.00404		0.01016	0.010286
1.05						0.00544	0.005552
1.10						0.00220	0.002287
1.15						0.00041	0.000456
1.20						0.00004	

3.4 Coulomb 位变分加叠代法的求解

采用变分法,用 Coulomb 位基态波函数为尝试波函数所得近似解明显好于一级微扰的结果. 因此以变分所得的近似解为尝试波函数,用 Green 函数叠代法求解 Yukawa 位的基态解,其结果应当有明显改进.

下面的变分 - 叠代过程以 Coulomb 位的耦合系数为变分参数来求解. 即

$$= -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{\lambda}{r}, H_\lambda \Phi_\lambda(r) = E_\lambda \Phi_\lambda(r), \quad (52)$$

$$\Delta V(r) = \frac{\lambda}{r} + V_y(r). \quad (53)$$

其中

$$\Phi_\lambda(r) = e^{-\lambda r}, E_\lambda = -\frac{1}{2} \lambda^2 \quad (54)$$

λ 为变分参数. 变分法求 H_λ 平均值:

$$\frac{\int_0^\infty r^2 \Psi_\lambda(r) (H_\lambda + \Delta V_\lambda) \Psi_\lambda(r) dr}{\int_0^\infty \Psi_\lambda^2(r) r^2 dr} =$$

$$E_\lambda + \epsilon_1(\lambda) = -\frac{1}{2} \lambda^2 + \lambda^2 - \frac{4g^2 \lambda^3}{(2\lambda + \alpha)^2}. \quad (55)$$

令: $\frac{dH}{d\lambda} = 0$, 取 $\mu = \frac{\lambda}{g}$, 得

$$4\mu(2\mu + 3\delta) = (2\mu + \delta)^3 \quad (56)$$

由 $\epsilon_1(\lambda)$ 得 f_1 为

$$= 1 + \frac{2g^2}{2\lambda + \alpha} \int_0^\infty \frac{1}{r} (e^{-\alpha r} - 1) dr +$$

$$\frac{2g^2}{(2\lambda + \alpha)^2} \int_0^\infty \frac{1}{r^2} (e^{-\alpha r} - 1 + \alpha r) dr + \left[\lambda - \frac{4g^2 \lambda^2}{(2\lambda + \alpha)^2} \right] r. \quad (57)$$

由 f_1 叠代积分得:

$$\begin{aligned} \epsilon_2 = 4g^4 \left\{ \mu^2 \left[-\delta^5 + \delta^6 + 2\delta^3 \mu - 11\delta^4 \mu + 11\delta^5 \mu + 8\delta^2 \mu^2 - 50\delta^3 \mu^2 + 50\delta^4 \mu^2 + 24\delta \mu^3 - 112\delta^2 \mu^3 + 120\delta^3 \mu^3 + 16\mu^4 - 120\delta \mu^4 + 160\delta^2 \mu^4 - 48\mu^5 + 112\delta \mu^5 + 32\mu^6 \right] \right. \\ \left. + 2\mu(\delta + \mu)(\delta + 2\mu)^3 \ln\left(1 + \frac{\delta}{2\mu}\right) + 8\mu^2(\delta^2 + 3\delta\mu + 2\mu^2) \cdot \ln\left(1 + \frac{\delta}{\delta + 2\mu}\right) \right\} / \left\{ (\mu + \delta)(2\mu + \delta)^2 \left[5\delta^3 + 8\mu^2(5\mu - 3) + 4\delta\mu(15\mu - 7) + \delta^2(30\mu - 4) - 8\mu(\delta + 2\mu) \ln\left(1 + \frac{\delta}{2\mu}\right) \right] \right\}. \quad (58) \end{aligned}$$

用 Coulomb 位波函数变分及变分 - 叠代所得 Yukawa 位基态本征能量近似值如表 2. 与数值计算结果相比较,正如预期,变分 - 叠代法对结果有明显改进.

3.5 Hulthén 位变分加叠代法的求解

与 Coulomb 位变分加叠代的过程完全类似,这里分别以 Hulthén 位的基态波函数作单参数和双参数的变分加叠代的方法求 Yukawa 位的基态解,可以得到较满意的结果.

a) 单参数变分:

$$H_\lambda = -\frac{1}{2} \nabla^2 - g^2 \frac{\lambda e^{-\lambda r}}{1 - e^{-\lambda r}}, \quad (59)$$

$$\Psi_\lambda = \frac{1 - e^{-\lambda r}}{\lambda r} e^{-(g^2 - \frac{\lambda}{2})r}, \quad (60)$$

$$E_\lambda = -\frac{1}{2} g^4 + \frac{\lambda}{2} g^2 - \frac{\lambda^2}{8}. \quad (61)$$

其中以屏蔽系数 λ 作变分参数.

b) 双参数变分:

$$H_{\lambda-\lambda'} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \lambda' \frac{\lambda e^{-\lambda r}}{1 - e^{-\lambda r}}, \quad (62)$$

$$\Psi_{\lambda-\lambda'} = \frac{1 - e^{-\lambda r}}{\lambda r} e^{-(\lambda' - \frac{\lambda}{2})r}, \quad (63)$$

$$E_{\lambda-\lambda'} = -\frac{1}{2} \lambda'^2 + \frac{\lambda}{2} \lambda' - \frac{\lambda^2}{8}. \quad (64)$$

其中变分参数 λ 为屏蔽系数, λ' 为耦合系数.

用 Hulthen 位波函数变分叠代所得 Yukawa 位的近似基态能量值见表 2, 各变分参数与 Yukawa 位屏蔽系数的对应关系见表 3. 可以看到双参数变分加叠代得到的能量本征值与所列数值计算结果基本一致.

表 2 各种变分及变分叠代法与数值计算求解 Yukawa 基态能结果的比较

Yukawa 位基态能量本征值的近似计算 (能量单位 - g^4)							
屏蔽参数 δ	Coulomb 位		Hulthén 位		Hulthén 位		数值计算
	单参变分	二级叠代	单参变分	二级叠代	双参变分	二级叠代	
0.1	0.407051	0.407058	0.407058	0.407058	0.407058	0.407058	0.407058
0.2	0.326729	0.326807	0.326808	0.326809	0.326808	0.326809	0.326808
0.3	0.257325	0.257626	0.257634	0.257639	0.257637	0.257639	0.257639
0.4	0.197576	0.198333	0.198362	0.198376	0.198372	0.198376	0.198376
0.5	0.146509	0.148012	0.148084	0.148117	0.148109	0.148117	0.148117
0.6	0.103354	0.105936	0.106077	0.106136	0.106122	0.106136	0.106136
0.7	0.067498	0.071532	0.071745	0.071834	0.071814	0.071834	0.071834
0.8	0.038471	0.044372	0.044587	0.044705	0.044679	0.044705	0.044704
0.9	0.015969	0.024247	0.024180	0.024314	0.024287	0.024314	0.024314
1.0	0	0.011575	0.010158	0.010284	0.010261	0.010286	0.010286
1.05		0.009722	0.005441	0.005549	0.005531	0.005552	0.005552
1.10			0.002204	0.002284	0.002271	0.002287	0.002287
1.15			0.000413	0.000454	0.000448	0.000456	0.000456
1.18			0.000197	0.00003082	0.000029	0.00003096	0.00003094
1.19					0.000000	0.000000	0.000000
1.20							

表 3 变分参数与 Yukawa 位屏蔽系数对应关系

Yukawa 位基态能量本征值的近似计算				
Yukawa 位	Coulomb 位变分	Hulthén 位变分	Hulthén 位双参变分	
屏蔽参数 δ	耦合参数 $\frac{\lambda}{g^2}$	屏蔽参数 $\frac{\lambda}{g^2}$	屏蔽参数 $\frac{\lambda}{g^2}$	耦合参数 $\frac{\lambda'}{g^2}$
0.1	0.99333	0.2296	0.2248	0.99965
0.2	0.97568	0.4358	0.4210	0.99793
0.3	0.94922	0.6263	0.5986	0.99457
0.4	0.91502	0.8052	0.7631	0.98963
0.5	0.87349	0.9750	0.9176	0.98330
0.6	0.82441	1.1377	1.0642	0.97542
0.7	0.76697	1.2944	1.2044	0.96712
0.8	0.69903	1.4461	1.3393	0.95756
0.9	0.61564	1.5936	1.4696	0.94720
1.0	0.50000	1.7374	1.5959	0.93614
1.05	0.39181	1.8081	1.6577	0.93038
1.10	0.32645	1.8780	1.7188	0.92448
1.15		1.9473	1.7790	0.91844
1.18		1.9885	1.8149	0.91476
1.19		2.0022	1.8267	0.91352
1.20		2.0158	1.8386	0.91229

4 结果分析及讨论

沿一条确定轨迹积分求解 N 维基态量子波函数的方法的优点在于无需知道各激发态的情况, 即不必计算交叉矩阵元. 级数展开法可以得到某些位势基态的严格解析波函数. 对于大多数的位势, 其结果为无穷序列, 因此实际计算只能得到有限级数解. 由表 1 可以看出, 级数展开所得结果只在 δ 很小范围内有很好的近似. 相对而言, 叠代法所得结果的有效范围则大得多. 由于能量的一级叠代近似等同于微扰论的一级近似, 而叠代法高级叠代的近似计算要比微扰论相应的高级近似计算简单得多, 因此对于基态量子波函数的求解, 叠代法明显优于微扰论.

另由表 1 可以看出以 Hulthén 位基态解为尝试波函数的结果好于以 Coulomb 位基态解作尝试波函数的结果, 即 Green 函数叠代法收敛性取决于尝试波函数的选择. 在以上求解中, 高级叠代计算过程中的积分变得很困难. 因此, 找到一个理想的尝试波函数是改善叠代法收敛性的关键. 变分法往往能够得到较好的近似波函数. 表 2 的结果显示, 用变分加叠代的方法的确可以改进变分近似计算的结果.

由表 3 可见, Coulomb 位变分参数 $\frac{\lambda}{g}$ 在 $\delta > 1.10$ 后出现虚部, 因此不能得到正确的临界屏蔽参数. 而 Hulthén 位变分结果要好得多. 由 Hulthén 位单参变分得到 $\delta = 1.19$ 时, 基态近似解已不是束缚态; 而双参变分结果当 $\delta = 1.19$ 时, 基态近似解仍为束缚态. 因此双参变分所得近似解好于单参变分. 以上

方法可以确定 Yukawa 位基态解对应的临界屏蔽参数 $\delta_c > 1.19$.

由变分-叠代计算过程得知, 一次叠代等同于单纯变分. 因此更高次的叠代将会改进变分的计算结果. 由表 3 可以看出, 与数值计算结果相比, 变分加二次叠代的结果较单纯变分结果确有改善, 特别在临界屏蔽参数附近的改进尤为显著. Hulthén 位双参变分-叠代至能量二次修正, 保留小数点后六位有效数, 与数值计算结果完全一致. 这一结果可用于互相验证两种算法的可靠性.

J/ψ 产额压低是 QGP 可能存在的一种信号. Yukawa 位被用来描述 $c\bar{c}$ 系统在 QGP 中的德拜屏蔽. 达到临界屏蔽参数时, 系统没有束缚态. 因此临界屏蔽参数可以用于确定 J/ψ 在 QGP 中被离解的临界温度. 根据单圈微扰 QCD 计算结果^[3], 德拜屏蔽参数 α 和 QGP 温度 T 的关系为

$$\alpha = \sqrt{3\pi g^2 \left(\frac{N_c}{3} + \frac{N_f}{6} \right)} T. \quad (65)$$

对 $N_f = 3$ 的 QGP 系统, 上式为

$$\alpha = 3\sqrt{\frac{g^2 \pi}{2}} T. \quad (66)$$

取 $m_c = 1.84 \text{ GeV}$ ^[3], $\delta_c = 1.19$, 得

$$T_c = 0.2913 \sqrt{g^2} \text{ GeV}. \quad (67)$$

如果取 $g^2 = 0.52$ ^[3], 则 $T_c = 210 \text{ MeV}$. 然而, 如果考虑到 QCD 耦合常数随温度递减, 取 $g^2 = 0.2$ ^[3], $c\bar{c}$ 系统离解的临界温度为 $T_c = 130 \text{ MeV}$ ^[1]. 因此, 在高于临界温度 T_c 的 QGP 中, $c\bar{c}$ 系统由于德拜屏蔽而不存在束缚态, 即由核核碰撞产生的 J/ψ 粒子在高温的 QGP 中产额会明显压低. 这已经作为高温时 QGP 存在的可能信号被广泛研究.

参考文献 (References)

1 Friedberg R, Lee T D, ZHAO W Q. Ann. Phys., 2001, 288:52

2 Friedberg R, Lee T D, ZHAO W Q et al. Ann. Phys., 2001, 293:1

3 Wong C Y. Introduction to High-Energy Heavy-Ion Collisions, World Scientific Pub., 344—356

1) 文献[3]第 356 页用测不准关系估算得 $\delta_c = 0.84$. 但因该页式(15.17)有误, 所得的 T_c 并不是按书中的方法应得的结果.

Green Function Iterative Solution of Ground State Wave Function for Yukawa Potential *

ZHANG Zhao¹ ZHAO Wei-Qin^{2,1}

¹ (Institute of High Energy Physics, CAS, Beijing 100039, China)

² (China Center of Advanced Science and Technology, Beijing 100080, China)

Abstract The newly developed single trajectory quadrature method is applied to solve central potentials. First, based on the series expansion method an exact analytic solution of the ground state for Hulthen potential and an approximate solution for Yukawa potential are obtained respectively. Second, the newly developed iterative method based on Green function defined by quadratures along the single trajectory is applied to solve Yukawa potential using the Coulomb solution and Hulthen solution as the trial functions respectively. The results show that a more proper choice of the trial function will give a better convergence. To further improve the convergence the iterative method is combined with the variational method to solve the ground state wave function for Yukawa potential, using variational solutions of the Coulomb and Hulthen potentials as the trial functions. The results give much better convergence. Finally, the obtained critical screen coefficient is applied to discuss the dissociate temperature of J/ψ in high temperature QGP.

Key words Green function, iterative solution, variational method, Yukawa potential