

用蒙特卡罗哈密顿量方法研究非 S 态^{*}

黄纯青^{1,2} 黎永耀^{1,3} 罗向前^{1;1)} H. Kröger⁴

1 (中山大学物理系 广州 510275)

2 (佛山科学技术学院光电子与物理学系 佛山 528000)

3 (华南农业大学应用物理系 广州 510642)

4 (Département de Physique, Université Laval, Québec, PQ G1K 7P4, Canada)

摘要 以氢原子为例,验证了 Monte Carlo Hamiltonian(MCH)方法推广应用到量子力学系统中在原点发散的势的非 S 态的有效性,给出估计误差的新思路,得到和解析解相符的能谱和约化径向波函数.

关键词 量子理论 蒙特卡罗 等效哈密顿量 非 S 态

1 引言

量子理论有两种标准形式:即拉格朗日路径积分量子化形式和哈密顿正则量子化形式.这两种形式各有优缺点,前者易于使用计算机进行数值模拟,后者能够计算激发态波函数和能谱.由 JIRARI, KRÖGER,罗向前和 MORIARTY 提出的蒙特卡罗哈密顿(Monte Carlo Hamiltonian,下面简称为 MCH)方法^[1],结合了以上两种形式的优点,在拉格朗日形式下构造出等效哈密顿量,进行计算机模拟,进而得到波函数和能谱,计算系统的热力学函数.该方法已经被成功应用于量子力学^[2-4]以及量子场论中^[5].

最近,文献[6]以氢原子为例,报道了该方法在原点发散的势的 S 态(角量子数 $l=0$)的应用情况,但没有研究非 S 态($l \neq 0$).在原子分子物理、核物理、粒子物理中存在着大量的球对称模型势^[7, 8],这类问题也存在非 S 态.对于非 S 态,MCH 方法是否有效?这是令人感兴趣的问题.本文以氢原子为例,探讨使用 MCH 方法求解非 S 态的径向约化波函数和能谱的方法,并且给出估计误差的新方法,目的在于拓广 MCH 方法的应用范围,验证 MCH 方法的可靠性.

2 MCH 方法简介

MCH 方法的基本思想是构造等效哈密顿量,使用蒙特卡罗方法计算跃迁矩阵元.

首先在虚时坐标下,粒子从 0 时刻 x_i 位置的初态到 T 时刻 x_j 位置的末态的跃迁矩阵元为

$$M_{ij} = \langle x_i, 0 | x_j, T \rangle = \langle x_i | e^{-HT/\hbar} | x_j \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle x_i | E_n \rangle e^{-E_n T/\hbar} \langle E_n | x_j \rangle \approx \langle x_j | e^{-H_{\text{eff}} T/\hbar} | x_i \rangle = \sum_{n=1}^N \langle x_i | E_n^{\text{eff}} \rangle e^{-E_n^{\text{eff}} T/\hbar} \langle E_n^{\text{eff}} | x_j \rangle. \quad (1)$$

这里用等效哈密顿量 H_{eff} 近似代替原始哈密顿量 H ,比 H 的自由度少得多.

其次根据费曼路径积分量子化理论^[9],上述跃迁矩阵元可以写为

$$M_{ij} = \int [dx] \exp[-S[x]/\hbar] |_{x_i,0}^{x_j,T}, \quad (2)$$

其中:

$$S[x] = \int_0^T dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) \right). \quad (3)$$

2004-10-13 收稿

* 国家自然科学基金(10235040),教育部科学技术重点项目(105135),广东省自然科学基金(020127)和广东省教育厅资助

1)通讯作者 E-mail: stslxq@zsu.edu.cn

为了通过蒙特卡罗重点抽样法来计算跃迁矩阵元 $M_{ij}(T)$, 将(3)式的作用量分成两部分:

$$S = S_0 + S_V = \int_0^T dt \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \int_0^T dt V(x), \quad (4)$$

这样跃迁矩阵元 $M_{ij}(T)$ 可以写成

$$M_{ij}(T) = M_{ij}^0(T) \times \frac{\int [dx] \exp[-S_V[x]/\hbar] \exp[-S_0[x]/\hbar] |x_i, 0\rangle}{\int [dx] \exp[-S_0[x]/\hbar] |x_i, 0\rangle}. \quad (5)$$

而 M_{ij}^0 是对应自由粒子的传播子. 例如, 在 1 维量子力学中, 它有如下解析表达式

$$M_{ij}^0(T) = \int [dx] \exp[-S_0[x]/\hbar] |x_i, 0\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar T}} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar T} (x_i - x_j)^2\right]. \quad (6)$$

这样就可以用蒙特卡罗重点抽样法来计算 $M_{ij}(T)$ 了. 令

$$\Pi = \frac{\exp[-S_0/\hbar]}{\int [dx] \exp[-S_0[x]/\hbar] |x_i, 0\rangle}, \quad (7)$$

它对应着产生组态的几率分布函数, 而把 $\exp(-S_V/\hbar)$ 视为可观察量.

对于量子力学系统, 可选取 N 个均匀分布的径向空间坐标点 $x_i, i = 1, 2, \dots, N$, 分别计算 $(x_i, 0) \rightarrow (x_j, T), i, j = 1, 2, \dots, N$ 的跃迁矩阵元, 即得到 N 行 N 列实对称矩阵 $M(T) = (M_{ij}(T))_{N \times N}$. 使用线性代数方法将其对角化, 可求得 N 行 N 列实正交矩阵 U 和 N 行 N 列实对角矩阵 D , 使得

$$M(T) = U^+ D(T) U. \quad (8)$$

这样, 比较(1)式和(8)式可得

$$U_{ik}^+ = \langle x_i | E_k^{\text{eff}} \rangle, \quad D_k(T) = e^{-E_k^{\text{eff}} T/\hbar}. \quad (9)$$

由(9)式可得第 k 个能量本征值为

$$E_k^{\text{eff}} = -\frac{\hbar}{T} \ln D_k(T), \quad (10)$$

相应地第 k 个本征波函数可由 U^+ 矩阵的第 k 列得到.

3 误差的估算

文献[6]用非简并定态微扰论, 给出误差的估算. 需满足条件 $|H'_{mn}/(E_n^0 - E_m^0)| \ll 1$ (其中 $H' = -\hbar M^{-1} \Delta M/T$, 而 ΔM 是矩阵元的统计误差), 这就要求有较高的统计量. 本文研究的简并情形不能满足这个要求. 另外, 在本文的计算中, 得到的 M 矩阵的个别行的全部矩阵元趋近于零, 不容易计算其逆

矩阵, 因此必须改进估计误差的方法.

在蒙特卡罗模拟计算中得到误差矩阵 $\Delta M(T)$ 后, 可以使用下述方法计算能级误差和波函数误差.

首先假设波函数矩阵 U 不变, 由于 $\Delta M(T)$ 的引入, 存在矩阵 $D'(T)$, 使得 $D'(T) = U(M(T) + \Delta M(T))U^+$, 这样 $D'(T)$ 矩阵的 k 行 k 列元素为

$$[D'(T)]_{k,k} = e^{-(E_k^{\text{eff}} + \Delta E_k^{\text{eff}})T/\hbar}, \quad (11)$$

其中 ΔE_k^{eff} 为 $\Delta M(T)$ 引起的第 k 个能级的误差, 据此易得

$$\Delta E_k^{\text{eff}} = -\ln([D'(T)]_{k,k}) \times \hbar/T - E_k^{\text{eff}}. \quad (12)$$

其次假设能级 E_k^{eff} 不变, 存在矩阵 $U' = U + \Delta U$, 使得

$$M(T) + \Delta M(T) = U'^+ D(T) U' = (U + \Delta U)^+ D(T) (U + \Delta U). \quad (13)$$

略去和 ΔU 相关的高次项, 可得

$$(\Delta M)_{ij} = \sum_{k=1}^N e^{-E_k^{\text{eff}} T/\hbar} (U_{ik}(\Delta U)_{kj} + U_{kj}(\Delta U)_{ik}), \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (14)$$

这是一个线性方程组, 解此方程组, 可得矩阵 ΔU , 而第 k 个波函数的误差由矩阵 $(\Delta U)^+$ 的第 k 列给出.

4 用 MCH 方法求解氢原子的非 S 态

采用原子单位和自然单位, 则氢原子库仑势为

$$V(r) = -\frac{1}{r}. \quad (15)$$

约化径向波函数 $u(r)$ 所满足的方程为

$$u''(r) - \left[2(V(r) - E) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0.$$

可见对于非 S 态 ($l \neq 0$), 等效势场为

$$U(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2}. \quad (16)$$

将作用量写为

$$S = S_0 + S_V = \int_0^T dt \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + \int_0^T dt U(r),$$

就可以用前述的 MCH 方法进行计算.

值得说明的是, 在靠近原点处, 对 S 态, 当 $r \rightarrow 0$,

$V(r) = -\frac{1}{r} \rightarrow -\infty$, 无法直接进行蒙特卡罗抽样, 这时只能采用文献[6]介绍的外推法加以解决.

而对于非 S 态, 当 $r \rightarrow 0$ 时, $U(r) = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \rightarrow +\infty$, 粒子在原点附近出现的几率趋于零. 因此对非 S 态, 我们很幸运地采用常规 MCH 算法进行抽样

计算.

5 计算结果和讨论

根据(16)式给出的氢原子非 S 态的等效势,选取 $r_i = i \times dr, dr = 1.0, T = 1.0, N = 100$. 在对(5)式进行 Metropolis 抽样计算时,对于每一个矩阵元先预热了 500 个组态,并每隔 100 个组态进行一次抽样,共抽样 500 次,计算其平均值.这样计算了 100×100 个元素的 M 矩阵,采用雅可比对角化程序,得到相应的能谱和约化径向波函数的数值解,并用前述方法计算了能级以及波函数的误差.

表 1 给出了用 MCH 方法计算的不同角量子数 l 下的能级和解析解 $E_n = -\frac{1}{2n^2}, n = 2, 3, \dots, 7$ 的比较(文献[6]已研究了 $n = 1, l = 0$ 的情形). 可见,对于 $l \neq 0$ 的情况, MCH 方法也可以得到精确的能谱.

表 1 MCH 方法计算氢原子非 S 态能谱和理论值的比较

n	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$	解析解
2	-0.12450 ± 0.00354					-0.12500
3	-0.05539 ± 0.00121	-0.05552 ± 0.00040				-0.05556
4	-0.03118 ± 0.00053	-0.03123 ± 0.00022	-0.03124 ± 0.00009			-0.03125
5	-0.01996 ± 0.00028	-0.01999 ± 0.00012	-0.01999 ± 0.00007	-0.01999 ± 0.00003		-0.02000
6	-0.01385 ± 0.00016	-0.01387 ± 0.00008	-0.01388 ± 0.00004	-0.01388 ± 0.00004	-0.01388 ± 0.00001	-0.01388
7	-0.00969 ± 0.00014	-0.00990 ± 0.00012	-0.00992 ± 0.00004	-0.01004 ± 0.00003	-0.01013 ± 0.00001	-0.01020

图 1 和图 2 分别给出了 $n = 2, l = 1$ 和 $n = 3, l = 1$ 时的约化波函数的 MCH 结果和解析解的比较,从中可见两者符合得很好.对于其他量子态,结果也是理想的,为节约篇幅,本文仅给出两个波函数图.

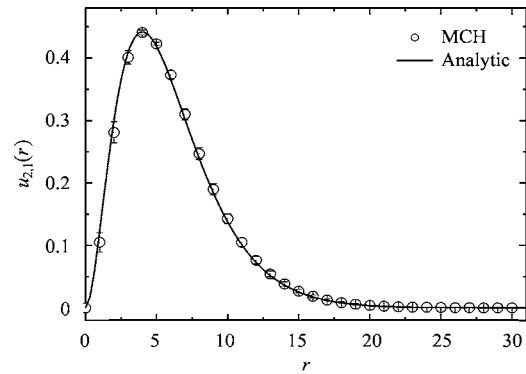


图 1 MCH 和解析计算得出 $n = 2, l = 1$ 的约化波函数

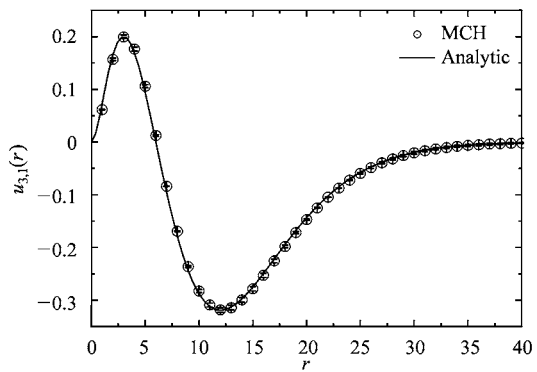


图 2 MCH 和解析计算得出 $n = 3, l = 1$ 的约化波函数

6 结论和前瞻

本文以氢原子为例,使用 MCH 方法研究了在零点发散的势的量子力学系统的非 S 态,得到了正确的能谱和径向波函数,并提出估算误差的新方法,验证了 MCH 方法的有效性,拓宽了 MCH 的应用范围.

在原子分子物理、核物理、粒子物理等领域中,人们构造了各种各样的球对称模型势^[7,8],我们完全有理由相信,可以使用 MCH 方法研究这些没有解析解的系统的能谱和波函数,进而计算系统的热力学函数.

发展 MCH 方法的最终目的,是希望将其应用于格点规范理论^[10],这一工作我们正在进行中.将 MCH 方法推广到格点规范理论中去,会有很多有趣的课题可以研究,例如 QCD 激发态和相变等^[11,12].

参考文献 (References)

- 1 Jirari H, Kroger H, LUO X Q et al. Phys. Lett., 1999, **A258**: 6—14
- 2 HUANG C Q, JIANG J Q, LUO X Q et al. High Energy Phys. & Nucl. Phys., 2000, **24**: 478—483 (in Chinese)
(黄纯青, 江俊勤, 罗向前等. 高能物理与核物理, 2000, **24**: 478—483)
- 3 LUO X Q, LIU J J, HUANG C Q et al. Commun. Theor. Phys., 2002, **38**: 561—565
- 4 JIANG J Q, HUANG C Q, LUO X Q et al. Commun. Theor. Phys., 2000, **34**: 723—728
- 5 HUANG C Q, Kroger H, LUO X Q et al. Phys. Lett., 2002, **A299**: 483—493
- 6 LUO X Q, CHENG X N, Kroger H. Commun. Theor. Phys., 2004, **41**: 509—512
- 7 CHEN C Y, LU H L, SUN D S et al. ACTA PHYSICA SINICA, 2004, **53**: 973—977 (in Chinese)
(陈昌远, 陆华林, 孙东升等. 物理学报, 2004, **53**: 973—977)
- 8 MEI H, CHEN H. High Energy Phys. & Nucl. Phys., 2004, **28**: 838—841 (in Chinese)
(梅花, 陈洪. 高能物理与核物理, 2004, **28**: 838—841)
- 9 Feynman R P, Hibbs A R. QUANTUM MECHANICS AND PATH INTEGRALS, McGraw-Hill Press, 1965
- 10 Wilson K G. Phys. Rev., 1974, **D10**: 2445
- 11 Gregory E, GUO S, Kroger H et al. Phys. Rev., 2000, **D62**: 054508
- 12 LUO X Q. Phys. Rev., 2004, **D70**: 091504

Investigation of Non S States Using Monte Carlo Hamiltonian*

HUANG Chun-Qing^{1,2} LI Yong-Yao^{1,3} LUO Xiang-Qian^{1,1)} H. Kröger⁴

1(Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275, China)

2(Department of Photoelectronics and Physics, Foshan University, Foshan 528000, China)

3(Department of Applied Physics, South China Agricultural University, Guangzhou 510642, China)

4(Département de Physique, Université Laval, Québec, PQ G1K 7P4, Canada)

Abstract Monte Carlo Hamiltonian (MCH) method is applied to the study of the non S states in the quantum mechanical system with inverse potential, and the hydrogen system is taken as an example. The validity and efficiency of MCH are verified. New suggestion for computing the statistical errors is provided. The spectrum and reduced wave functions are consistent with the analytic results.

Key words quantum theory, Monte Carlo, effective Hamiltonian, non S state

Received 13 October 2004

* Supported by NSFC (10235040), Ministry of Education Key Project(105135), Natural Science Foundation Project(020127) and Ministry of Education of Guangdong Province

1) Corresponding author. E-mail: stslxq@zsu.edu.cn