

He-He-Ba 三原子体系弱束缚态计算

勾庆东 李勇

Calculations of the binding energies of weakly bound He-He-Ba molecules

Gou Qing-Dong Li Yong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 193102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.193102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.193102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I19>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一氟化碳电子态的光谱性质和预解离机理的理论研究

Theoretical study on spectroscopic properties and predissociation mechanisms of the electronic states of carbon monofluoride

物理学报.2015, 64(15): 153101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.153101>

SiS 低激发态势能曲线和光谱性质的全电子组态相互作用方法研究

All-electron configuration interaction study on potential energy curves of low-lying excited states and spectroscopic properties of SiS

物理学报.2014, 63(11): 113102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.113102>

Mg-CO 体系的相互作用势和光谱预测

Potential energy surface and spectra prediction for the Mg-CO complex

物理学报.2013, 62(9): 093101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.093101>

He-He-Ba三原子体系弱束缚态计算*

勾庆东¹⁾²⁾ 李勇^{1)†}

1)(华中师范大学物理科学与技术学院, 武汉 430079)

2)(井冈山大学物理系, 吉安 343009)

(2015年4月7日收到; 2015年6月5日收到修改稿)

本文利用含有绝热近似的超球坐标方法计算了碱土金属原子 Ba 和氦原子组成的弱束缚三原子分子体系 He₂Ba 的基态性质. 系统地研究了该系统的道函数和超球势曲线特征, 进而得到体系的束缚能. 研究结果显示, ¹³⁸Ba 与 ⁴He, ³He 的各种组合 ⁴He-⁴He-¹³⁸Ba, ⁴He-³He-¹³⁸Ba 和 ³He-³He-¹³⁸Ba 都分别只有一个束缚态.

关键词: He-He-Ba 三体系统, 超球坐标, halo 态, Efimov 态

PACS: 31.15.xj, 36.90.+f

DOI: 10.7498/aps.64.193102

1 引言

在原子与分子物理、核物理、凝聚态物理和量子化学等研究领域, 简单原子分子的弱束缚态研究是一个重要的研究课题, 尤其是与 He 原子相关的弱束缚系统更是引起了广大理论和实验工作者的极大兴趣. 因为与 He 原子相关的弱束缚三体系统比两体系统具有更丰富的物理现象和可能呈现出更为特殊的量子特性. 对这些系统的研究有助于进一步探索 Efimov 效应和 halo 效应、进一步理解低能散射、玻色-爱因斯坦凝聚中的共振冷却以及揭示纳米液滴实验中原子间相互作用的性质.

量子世界中, 有两种很奇特的少体现象. 一是所谓的 halo 态或 Borromean 态^[1,2], 即当两体之间都没有束缚态的时候, 三体系统却存在束缚态. 具有 halo 态的系统的波函数占有很大的空间. 第二种情况是 Efimov 态^[3-6], 当两个组分之间只有一个束缚能为零的束缚态时, 三体系统有无穷多的束缚态. Efimov 态是组成物质的第三种方式^[7]. 这两种现象在核物理中得到了广泛的研究^[8-15].

在原子与分子物理中, He 两聚体和三聚体因

为具有非常弱的束缚能, 成为研究 Efimov 效应和 halo 效应的理想对象. 早在 1970 年代人们就注意到 He₃ 三原子分子^[16], 因为 He 原子之间的弱束缚作用使人们认识到 He₃ 可能存在 Efimov 态或 halo 态. Lim 等^[16], Cornelius 等^[17] 和 Esry 等^[18] 证明在 ⁴He 的三聚体中, 系统的弱束缚激发态对粒子间相互作用强度很敏感, 具有 Efimov 态性质, 但是这仍然有待实验证实. 直到 2006 年, Kraemer 等^[19] 在实验中对超冷 Cs₃ 气体的 Efimov 共振进行了研究, 证实了 Efimov 效应的主要理论预言. 2015 年, Kunitski 等^[20] 在 ⁴He₃ 中观察到了 Efimov 效应. He₃ 系统是全同粒子组成的对称系统, 由非全同粒子组成的非对称三体系统也可能存在弱束缚态^[5,18], 如 He-He-Li, He-He-Na, He-He-H, H-H-He 等^[21-24] 系统.

碱土金属元素与 He 原子间的相互作用强度比相应的碱金属元素与 He 原子间的相互作用强度要大^[25,26], 但是仍然比较弱, 与 He-He 相互作用强度相当. 因此, 碱土金属元素与 He 原子组成的三体系统可能具有与 He 三聚体相似的弱束缚性质. 对 He-He-Be^[27,28] 和 He-He-Mg^[29] 系统的研究表明, Be 和 Mg 原子都可以和 He 原子组成三体系统, 但

* 国家自然科学基金 (批准号: 11464020, 11164010) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yongli@phy.ccmu.edu.cn

是这些系统中不存在 Efimov 态或 halo 态.

最近, Guevara 等^[30]发现通过相互作用势 $1/r^2$ 作用的全同玻色子和费米子三体系统中存在一种新的态. 当三体系统中任何两个组分的相互作用弱到不能支持任何束缚态时, 三体系统有无穷多个束缚态. 这与 Efimov 态相似, 但当两体系统有束缚态时, 这个态仍然存在. 这个态本身并非 Efimov 态.

本文将研究 He-He-Ba 系统的弱束缚性质. He-He-Ba 被当作一个三体系统, 不考虑系统的内部结构. 通过引入原子间最佳唯象势, 在超球绝热近似下对该系统的薛定谔方程进行了求解, 得到系统的道函数和超球绝热曲线, 进而求得体系的束缚能. 碱土金属元素组成的三体系统的分子结构也是我们所关心的^[31], 因此还详细研究了道函数随着超径的变化情况.

2 理论方法

我们把 He-He-Ba 分子当作由两个 He 原子和一个 Ba 原子组成的系统, 忽略其内部结构. 三个相互作用原子的薛定谔方程用超球坐标展开, 然后在绝热近似下求解^[18,32]. 我们只考虑角动量 $J = 0$ 时的情况.

首先在质心系中建立薛定谔方程. 定义 Jacobi 坐标, ρ_1 是第一个原子到第二个原子的矢量, ρ_2 是由第一、第二原子的质心到第三个原子的矢量. 然后把 Jacobi 坐标转换成质量加权超球坐标^[32]:

$$\mu R^2 = \mu_1 \rho_1^2 + \mu_2 \rho_2^2, \quad (1)$$

$$\tan \phi = \sqrt{\frac{\mu_2}{\mu_1}} \frac{\rho_2}{\rho_1} \quad (2)$$

和

$$\cos \theta = \frac{\rho_1 \cdot \rho_2}{\rho_1 \rho_2}. \quad (3)$$

式中 μ 是任意标度系数, 我们选择第一个和第二个原子的约化质量. 与 Jacobi 坐标 ρ_1 和 ρ_2 相对应的约化质量 μ_1 和 μ_2 分别为

$$\mu_1 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (4)$$

和

$$\mu_2 = \frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 + m_2 + m_3}. \quad (5)$$

由于我们只考虑 $J = 0$ 的情形, 在以上坐标系中薛定谔方程只含有 $R, \phi,$ 和 φ (原子单位) 三个内部坐

标^[18,32]:

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\Lambda^2 - \frac{1}{4}}{2\mu R^2} + V(R, \phi, \theta) \right) \psi(R, \phi, \theta) = E_\psi(R, \phi, \theta), \quad (6)$$

其中 Λ^2 为总角动量算符^[32]. 为了消除动能算符中的一阶导数, 在原波函数前乘上系数 $R^{5/2} \sin \phi \cos \varphi$, 得到波函数 $\psi(R, \phi, \theta)$. 在绝热表示中, 我们首先固定超球半径 R , 然后解本征值方程

$$\left(\frac{\Lambda^2 - \frac{1}{4}}{2\mu R^2} + V(R, \phi, \theta) \right) \Phi_\nu(R, \phi, \theta) = U_\nu(R) \Phi_\nu(R, \phi, \theta). \quad (7)$$

边界条件为

$$\Phi_\nu(R, 0, \theta) = \Phi_\nu\left(R, \frac{\pi}{2}, \theta\right) = 0 \quad (8)$$

和

$$\frac{\partial \Phi_\nu(R, \phi, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=0} = \frac{\partial \Phi_\nu(R, \phi, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\pi} = 0. \quad (9)$$

则薛定谔方程总的解可表示为

$$\psi(R, \phi, \theta) = \sum_\nu F_\nu(R) \Phi_\nu(R, \phi, \theta). \quad (10)$$

忽略不同通道间的耦合项我们就能得到绝热近似下的超球方程:

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + U_\nu(R) + W_{\nu\nu}(R) \right) F_{\nu n}(R) = E_{\nu n} F_{\nu n}(R), \quad (11)$$

其中

$$W_{\nu\nu}(R) = -\frac{1}{2\mu} \left\langle \Phi_\nu(R) \left| \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right| \Phi_\nu(R) \right\rangle. \quad (12)$$

这是一维径向薛定谔方程. 等效超球势为 $U_\nu(R) + W_{\nu\nu}(R)$, 它决定了绝热近似中三体系统的能谱. 可以证明通过解方程(11)能得到系统真实基态能的上限, 如果忽略式中的 $W_{\nu\nu}(R)$ 项, 也就是通常的 Born-Oppenheimer 近似, 则得到真实基态能的下限^[33]. 由此我们就得到了系统基态能所在的区间.

3 原子间相互作用势

两原子间的相互作用决定着三体系统在超径 $R \rightarrow \infty$ 时的渐近行为. 对最低的势能曲线 $\nu = 0$ 来说, 如果碱土金属原子 Ba 与 He 原子之间的束缚

能大于He原子间的束缚能,系统在 $R \rightarrow \infty$ 时将成为He-Ba两原子分子和远远的一个He原子组成的体系,即HeBa+He;如果Ba原子与He原子之间的束缚能小于He原子间的束缚能,系统在 $R \rightarrow \infty$ 时将成为He-He两原子分子和远处的Ba原子组成的体系,即HeHe+Ba. 这些势能曲线的渐近行为($R \rightarrow \infty$)可表示为

$$U_0(R) + W_{00}(R) \rightarrow E_{00}^{\text{HeBa}} \quad (13)$$

或者

$$U_0(R) + W_{00}(R) \rightarrow E_{00}^{\text{HeHe}}, \quad (14)$$

其中 E_{00}^{HeBa} 和 E_{00}^{HeHe} 分别表示HeBa和HeHe的基态束缚能.

严格来说,三体系统的相互作用势应该由两部分组成,即两体之间的相互作用和三个粒子之间的相互作用. 本文中,只考虑粒子之间的两两相互作用,不考虑三体相互作用,因为三体力对系统束缚能的影响很小. 比如在He-He-He系统中三体相互作用对基态能的影响不到1% [34,35],在He-He-Be系统中的影响最多也只有0.7% [28]. 因此,我们不考虑三体力对系统的影响,即三体系统的总势能表示为

$$V_{\text{trimer}}(R, \theta, \phi) = V_{12}(r_{12}) + V_{23}(r_{23}) + V_{31}(r_{31}), \quad (15)$$

式中 r_{12} , r_{23} 和 r_{31} 是原子之间的距离.

对He-He双原子系统,相互作用势由Aziz和Slaman [36]给出, He-Ba相互作用势由Kleinekathöfer [25]给出. 图1中显示的是He-He和He-Ba双原子相互作用势.

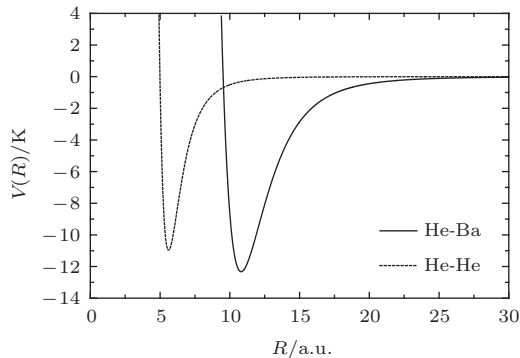


图1 He-He和He-Ba的相互作用势

Fig. 1. Interatomic potentials for He-He and He-Ba systems.

为得到He-He-Ba分子最低道的解离极限,我们求解了 $^4\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 和 $^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 的束缚态. 相关的两体径向薛定谔方程通过引入图1中的He-Ba

相互作用势用数值方法求解. 计算结果与氦双原子系统束缚能如表1所示.

表1 $^4\text{He-}^{138}\text{Ba}$, $^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 和 $^4\text{He-}^4\text{He}$, $^4\text{He-}^3\text{He}$, $^3\text{He-}^3\text{He}$ 基态束缚能

Table 1. The calculated ground state binding energies for the $^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ and $^4\text{He-}^{138}\text{Ba}$ dimers together with the results for the helium dimers. Missing entries indicate that no bound is found.

	^4He	^3He	^{138}Ba
^4He	-1.31 mK		-0.0377 K
			-5.1593 K
^3He			-4.3771 K

结果表明, $^4\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 有两个束缚能为-0.0377 K和-5.1593 K的束缚态, $^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 只有一个束缚能为-4.3771 K的束缚态. $^4\text{He-}^4\text{He}$ 之间有一个束缚能为-1.31 mK的束缚态,但是 $^4\text{He-}^3\text{He}$ 和 $^3\text{He-}^3\text{He}$ 之间没有束缚态. 因此,当超球半径 R 很大时,各个系统的能量将趋近于相应的解离极限. 对 $^3\text{He-}^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 系统,将趋近于 $^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 的束缚能-4.3771 K,对 $^4\text{He-}^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 系统和 $^4\text{He-}^4\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 系统,将趋近于 $^4\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 的最低束缚能-5.1593 K.

4 结果和讨论

绝热近似下的超球方法是最有效的研究稳定束缚态的理论方法之一. 该方法中,绝热超球势首先求得. 如果得到的势曲线是排斥的,就不会存在任何束缚态. 如果是吸引势,并且势阱足够深的话,就可能存在稳定的束缚态. 该方法已经成功的应用到He-He-He [18], He-He-Li, He-He-Na [22], He-He-K [37], He-He-H, H-H-He [23], He-He-e [38], H⁻ [39], Li-e⁺和Na-e⁺ [40]等系统中. 结果显示,系统的稳定性和束缚能级敏感的依赖于相互作用势和粒子的质量. 并且量子对称性在决定系统稳定性和束缚能级方面也起着重要作用 [41].

求解方程(11)后,我们得到了图2中 $^4\text{He-}^4\text{He-}^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He-}^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 和 $^3\text{He-}^3\text{He-}^{138}\text{Ba}$ 三个系统各自最低的绝热超球势. 图中当 R 比较大时,系统分别趋近于相应的解离极限.

由图2中各系统的绝热超球势能曲线,就能研究每一个势能曲线所能支持的束缚态. 通过解两体径向薛定谔方程,从而得到相应的三体系统的束缚能. 结果表明每条曲线都只能支持一个束缚态,各系统的计算结果如表2所示.

表2 三原子分子 $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 和 $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 的基态束缚能

Table 2. The calculated binding energies of the bound states for the $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ and $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ trimers.

	$^4\text{He}-^4\text{He}$		$^4\text{He}-^3\text{He}$		$^3\text{He}-^3\text{He}$	
	下限	上限	下限	上限	下限	上限
^{138}Ba	-5.7937 K	-3.8333 K	-4.9387 K	-3.3580 K	-4.8895 K	-3.6226 K

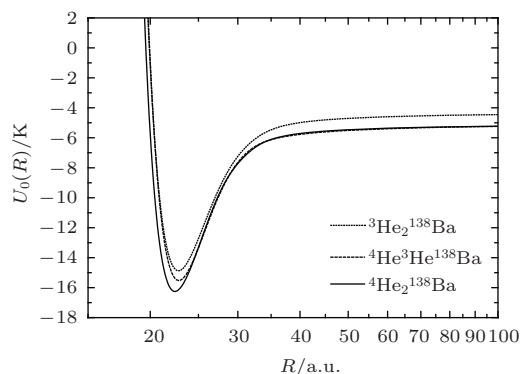


图2 三体系统 $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 和 $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 的超球绝热势能曲线

Fig. 2. The lowest hyperspherical potential curves for each of the triatomic systems, $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^3\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, and $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$ trimers.

从表中可以看出, $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 和 $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 三个系统各只有一个基态束缚能. 碱土金属原子与He组成的三体系统中, $^4\text{He}-^4\text{He}-^{24}\text{Mg}$ 有三个束缚态, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{24}\text{Mg}$ 有两个束缚态, $^3\text{He}-^3\text{He}-^{24}\text{Mg}$ 有一个束缚态 [29], 其他元素 (Be [27,28], Ca [42,43], Ba) 与He组成的三体系统分别都只有一个束缚态. 碱金属原子与He组成的三体系统中, 含有 Na [22], K [37] 和 Rb [44] 原子的也都只有一个束缚态, 含有 Li [22] 原子的 $^3\text{He}-^3\text{He}-^7\text{Li}$ 没有束缚态, $^4\text{He}-^4\text{He}-^7\text{Li}$ 和 $^4\text{He}-^3\text{He}-^7\text{Li}$ 也只有一个束缚态. 并且碱金属原子与He组成的系统的束缚能都较低 (mK), 而碱土金属与He组成的系统的束缚能相对较高 (K) [22,27-29,37,42-44]. 这是由于含有碱土金属的系统的超球绝热势能曲线的势井深度比含碱金属的系统势井深度大. 在与He原子的两体相互作用中, 碱土金属元素与He原子间的相互作用强度也比相应的碱金属元素与He原子间的相互作用强度要大 [25,26], 与He-He相互作用强度相当.

三体系统 $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 和 $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 的基态波函数如图3所示.

为进一步获得各个分子系统的几何构型特点, 我们详细研究了道函数随着超球势曲线的变

化情况. 系统的三体势 $V(R, \phi, \theta)$ 和在特定超径 R 处道函数 $\Phi_\nu(R, \phi, \theta)$ 的概率密度的二维等高图如图4所示.

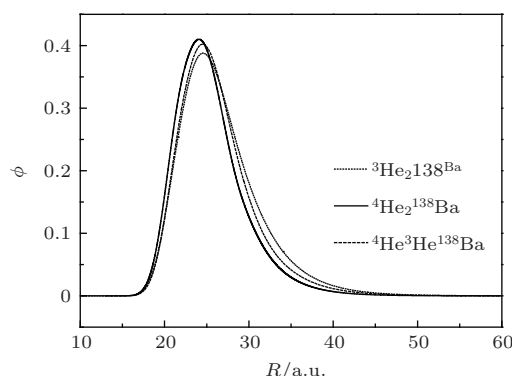


图3 三体系统 $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 和 $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 的基态波函数

Fig. 3. The wave functions for the bound states of the $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^3\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, and $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$ trimers.

图中第一、三、五行给出的是各个系统分别在超球势曲线的最低点、 $R = 30$ a.u. 和 $R = 100$ a.u. 时的三体势能分布. 第二、四、六行给出的是各系统分别在对应第一、三、五行的三体势时的道函数概率密度. 三体势能图像中的红点是各自图中势能的最低点, 概率密度图中的红点是对应系统在特定超径下的概率密度的最大值. 各个小图中坐标轴上的点是三个系统中Ba和He的结合点, 即Ba原子与 ^3He 原子或者Ba原子与 ^4He 原子之间的距离为0时 ϕ 和 θ 的取值位置. 对 $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 系统来说, 两个 $^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 结合点为 $(\phi = 0.247\pi, \theta = 0)$ 和 $(\phi = 0.247\pi, \theta = \pi)$; $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 系统中 $^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 的结合点为 $(\phi = 0.246\pi, \theta = 0)$ 和 $(\phi = 0.246\pi, \theta = \pi)$; $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 系统的两个结合点, $^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 为 $(\phi = 0.269\pi, \theta = 0)$, $^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$ 为 $(\phi = 0.224\pi, \theta = \pi)$. 对三体系统来说还有第三个结合点, 即两个He原子之间的距离为0时形成的结合点. 这个点在三体势能等高线图中表现为一面陡峭的在 $\phi = 0.5\pi$ 附近的“排斥墙”.

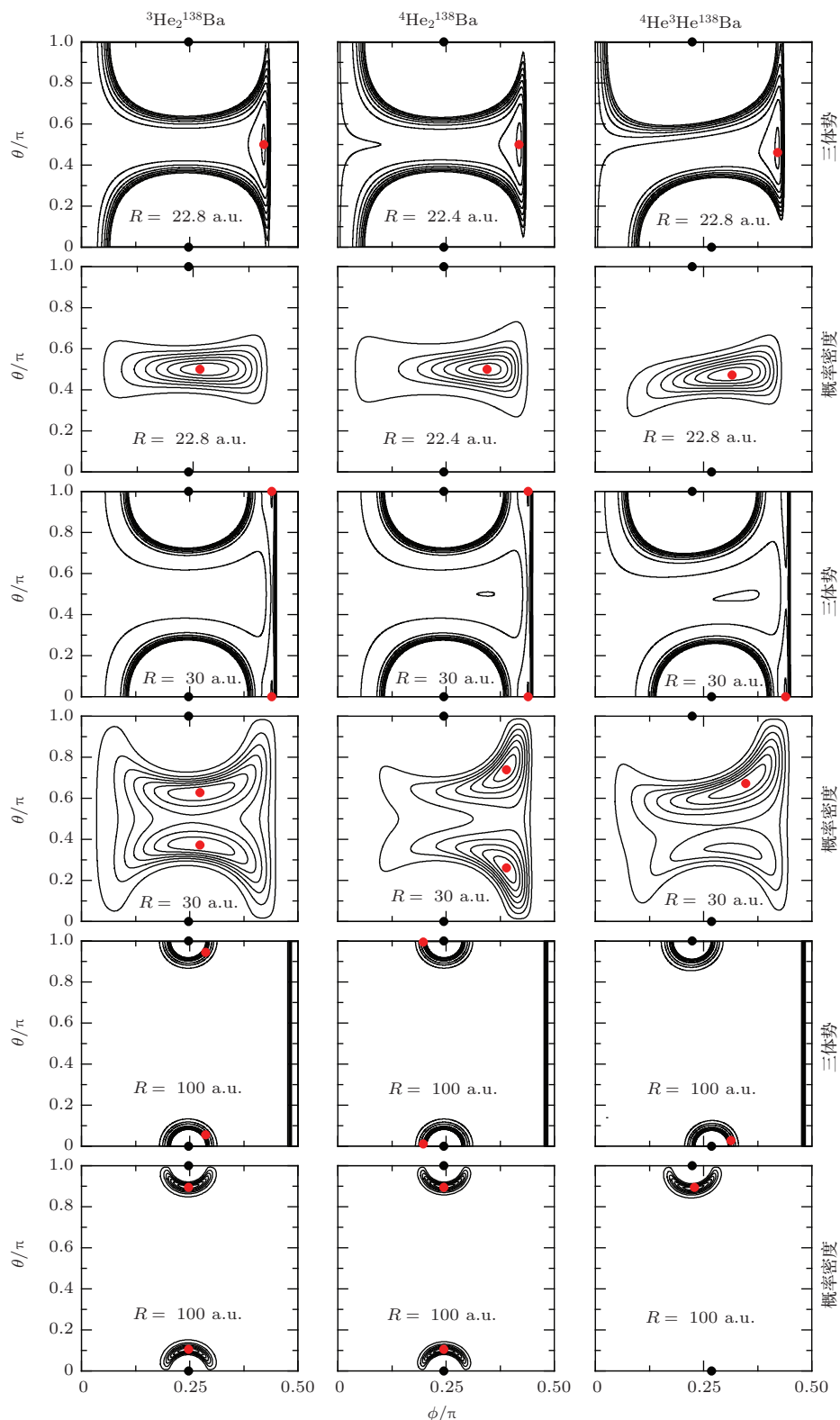


图4 (网刊彩色) 三体势能 $V(R, \phi, \theta)$ 和道函数 $\Phi_\nu(R, \phi, \theta)$ 的概率密度

Fig. 4. (color online) Two-dimensional contour plots of the potential surface $V(R, \phi, \theta)$ and the probability densities of the channel functions at fixed hyper-radius R as functions of the hyperangles ϕ and θ .

在图中可以看到, 概率密度的分布与相应超径下的三体势能曲线分布是对应的. 概率密度主要分布在三体势井区域, 其密度最大值也在势井最小值

附近. 这与 Suno 和 Esry 对 He-He-Li 和 He-He-Na 的研究是一致的 [45].

三个系统各自在超球势曲线的最低点、 $R =$

30 a.u. 和 $R = 100$ a.u. 时, 系统的道函数概率密度取得最大值时系统的几何结构如图 5 所示.

对 ${}^3\text{He}-{}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 系统, 当超径 $R = 22.8$ a.u. 时, 系统的超球绝热势取得最小值. 概率密度最大值在 $(\phi = 0.286\pi, \theta = 0.5\pi)$, 此时系统为等腰三角形结构, 如图 5 所示(图中的 1 和 2 代表 ${}^3\text{He}$, 3 代表 ${}^{138}\text{Ba}$). 三个原子间的距离分别为 $r_{12} = 14.193$ a.u., $r_{23} = 11.552$ a.u., $r_{31} = 11.552$ a.u.. 当 $R = 30$ a.u. 时, 因为系统是对称的, 概率密度的最大值点移动到 $(\phi = 0.275\pi, \theta = 0.373\pi)$ 和 $(\phi = 0.275\pi, \theta = 0.627\pi)$. 此时系统的三体势能最低点在 $(\phi = 0.440\pi, \theta = 0.000\pi)$ 和 $(\phi = 0.440\pi, \theta = \pi)$, 概率密度最大值点不在势能最低点附近, 而是分布在 ${}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 结合点附近的势阱中, 势能最低点分布在 ${}^3\text{He}-{}^3\text{He}$ 的结合点 $\phi = 0.5\pi$ 附近. 因

为 ${}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 存在束缚态, 两个 ${}^3\text{He}$ 原子不存在束缚态, 三体系统的道函数概率密度要趋于分布在使整个系统能量更低的位置. 在概率密度取最大值时三个原子组成斜三角形, ${}^{138}\text{Ba}$ 与其中一个 ${}^3\text{He}$ 原子距离比较近, 与另外一个 ${}^3\text{He}$ 原子距离较远, 两个 ${}^3\text{He}$ 原子的间距为 $r_{12} = 19.507$ a.u., ${}^{138}\text{Ba}$ 与较近 He 原子的距离为 11.924 a.u., 与另一 He 原子距离为 17.866 a.u.. 当 $R = 100$ a.u. 时, 概率密度的最大值点移动到 $(\phi = 0.247\pi, \theta = 0.104\pi)$ 和 $(\phi = 0.247\pi, \theta = 0.896\pi)$, 位于三体势能的最低点附近, 即 ${}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 结合点附近. 概率密度最大值时系统为更扁的斜三角形结构, 如图 5 所示. 对 ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 系统, 由于同样是对称系统, 与 ${}^3\text{He}-{}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 系统表现出相同的性质.

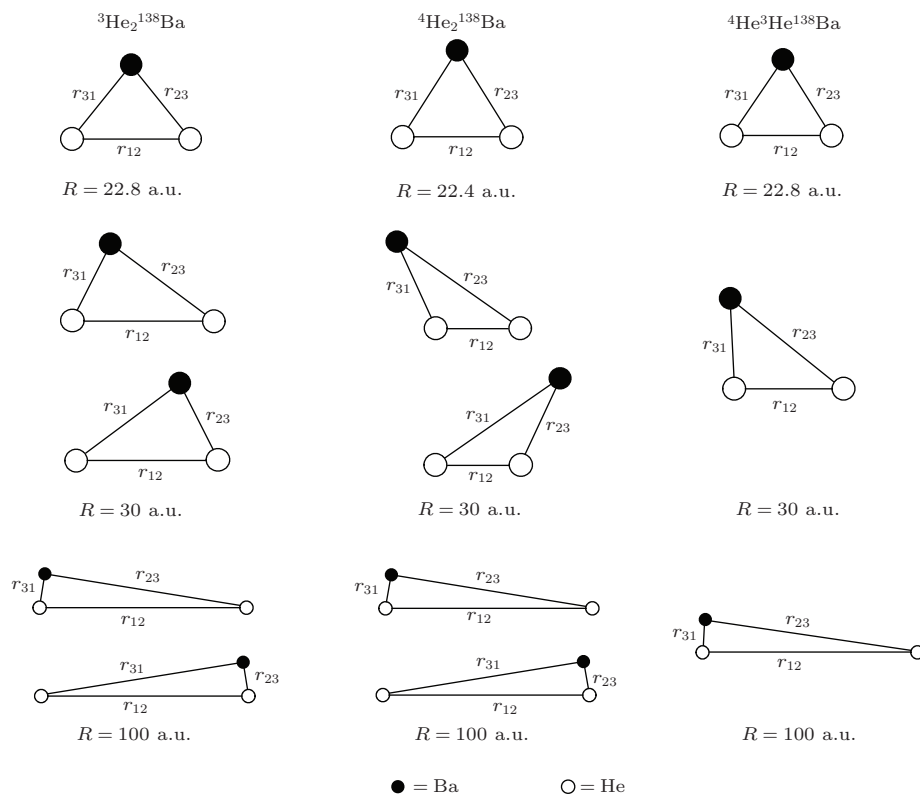


图 5 系统在不同超径处道函数概率密度取最大值时的几何结构

Fig. 5. The most probable geometries of ${}^3\text{He}-{}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$, ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$, and ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ trimers at R corresponding to the minimum of the hyperspherical potential curves, $R = 30$ a.u., and $R = 100$ a.u.

对不对称系统 ${}^4\text{He}-{}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 来说, 当超径 $R = 22.8$ a.u. 时, 概率密度的最大值点在 $(\phi = 0.315\pi, \theta = 0.475\pi)$, 也在三体势能的最低点附近, 如图 4 所示, 此时系统的几何结构为三条边长度接近的斜三角形, 如图 5 所示(图中的 1 代表 ${}^4\text{He}$, 2 代表 ${}^3\text{He}$, 3 代表 ${}^{138}\text{Ba}$). 三个原子间的距

离分别为 $r_{12} = 12.499$ a.u., $r_{23} = 11.556$ a.u., $r_{31} = 11.433$ a.u.. 当超径 $R = 30$ a.u. 时, 由于系统是不对称的, 概率密度的最大值只有一个点, 位于 $(\phi = 0.347\pi, \theta = 0.673\pi)$, 接近 ${}^4\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 的结合点. 三体势的最低点在 ${}^4\text{He}-{}^3\text{He}$ 的结合点 $\phi = 0.5\pi$ 附近, ${}^3\text{He}-{}^{138}\text{Ba}$ 的结合点附近的势阱

也比 ^4He - ^{138}Ba 结合点附近的势井深。但是 ^4He - ^{138}Ba 的束缚能是最低的,所以系统的道函数概率密度分布更趋向于能量最低的 ^4He - ^{138}Ba 结合点附近。当概率密度取得最大值时, ^{138}Ba 原子比较接近 ^4He 原子,如图5所示。当超径 $R = 100$ a.u.时,概率密度的最大值在($\phi = 0.230\pi$, $\theta = 0.889\pi$),此时系统为接近直线的三角形结构,如图5所示, ^{138}Ba 原子与 ^4He 原子距离很近, ^3He 原子在远处。

5 结 论

利用超球坐标方法计算了在绝热近似下He-He-Ba分子的弱束缚态能级,结果发现由三个原子 ^{138}Ba 与 ^4He , ^3He 组合的各种系统, ^4He - ^4He - ^{138}Ba , ^4He - ^3He - ^{138}Ba 和 ^3He - ^3He - ^{138}Ba 都可能存在,并且都只有一个束缚态。分析了特定超径处道函数概率密度的性质和相对应的几何构型。因为这些分子的束缚能都很小,只能存在于极冷的环境中,利用激光冷却等原子与分子的冷却技术,有可能直接在实验中研究这些分子。

参考文献

- [1] Richard J M, Fleck S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 1464
- [2] Federov D V, Jensen A S, Riisager K 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2817
- [3] Efimov V 1970 *Phys. Lett. B* **33** 563
- [4] Efimov V 1971 *Sov. J. Nucl. Phys.* **12** 589
- [5] Efimov V 1973 *Nucl. Phys. A* **210** 157
- [6] Macek J 1986 *Z. Phys. D* **3** 31
- [7] Macek J 2007 *Phys. Scr.* **76** c3
- [8] Tanihata I 1991 *Nucl. Phys. A* **522** 275c
- [9] Fedorov D V, Jensen A S, Riisager K 1994 *Phys. Rev. C* **49** 201
- [10] Cobis A, Fedorov D V, Jensen A S 1998 *Phys. Rev. C* **58** 1403
- [11] Liang Y J, Li Y S, Zhu M, Liu Z H, Zhou H Y 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5267
- [12] Liu Z H, Zhou H Y 2005 *Chin. Phys. B*, **14** 1544
- [13] Liang Y J, Li Y S, Liu Z H, Zhou H Y 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 032102
- [14] Wu Z D, Lin C J, Zhang H Q, Liu Z H, Yang F, An G P, Zhang C L, Zhang G L, Jia H M, Xu X X, Bai C L, Yu N, Jia F 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 022503
- [15] Han R, Li J X, Yao J M, Ji J X, Wang J S, Hu Q 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 092101
- [16] Lim T K, Duffy S K, Damer W C 1977 *Phys. Rev. Lett.* **38** 341
- [17] Cornelius T, Glöckle W 1986 *J. Chem. Phys.* **85** 3906
- [18] Esry B D, Lin C D, Greene C H 1996 *Phys. Rev. A* **54** 394
- [19] Kraemer T, Mark M, Waldburger P, Danzl J G, Chin C, Engeser B, Lange A D, Pilch K, Jaakkola A, Nägerl H C, Grimm R 2006 *Nature* **440** 315
- [20] Kunitski M, Zeller S, Voigtsberger J, Kalinin A, Schmidt L P H, Schoffler M, Czasch A, Schollkopf W, Grisenti R E, Jahnke T, Blume D, Dorner R 2015 *Science* **348** 551
- [21] Goy J, Richard J M, Fleck S 1995 *Phys. Rev. A* **52** 3511
- [22] Yuan J M, Lin C D 1998 *J. Phys. B* **31** L637
- [23] Li Y, Lin C D 1999 *J. Phys. B* **32** 4877
- [24] Baccarelli I, Delgado-Barrio G, Gianturco F A, González-Lezana T, Miret-Artes S, Villarreal P 2000 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2** 4067
- [25] Kleinekathöfer U 2000 *Chem. Phys. Lett.* **324** 403
- [26] Kleinekathöfer U, Lewerenz M, Mladenovic M 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 4717
- [27] Li Y, Song H W, Gou Q D, Han H L, Shi T Y 2009 *Phys. Rev. A* **79** 024501
- [28] Han H L, Li Y, Shi T Y 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 194307
- [29] Li Y, Huang D P, Gou Q D, Han H L, Shi T Y 2011 *Phys. Rev. A* **84** 014501
- [30] Guevara N L, Wang Y J, Esry B D 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 213202
- [31] Du Q, Wang L, Shen X H, Wang H Y, Gao T, Zhu Z H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 178 (in Chinese) [杜泉, 王玲, 谌晓洪, 王红艳, 高涛, 朱正和 2009 物理学报 **58** 178]
- [32] Lin C D 1995 *Physics Reports* **257** 1
- [33] Stratace A, Webster G L 1979 *Phys. Rev. A* **19** 1629
- [34] Parish C A, Dykstra C E 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 7618
- [35] Røeggen I, Almlöf J 1995 *J. Chem. Phys.* **102** 7095
- [36] Aziz R A, Slaman M J 1991 *J. Chem. Phys.* **94** 8047
- [37] Li Y, Gou Q D, Shi T Y 2006 *Phys. Rev. A* **74** 032502
- [38] Li Y, Lin C D 1999 *Phys. Rev. A* **60** 2009
- [39] Xie W F 2004 *Chin. Phys. B* **13** 1806
- [40] Yuan J M, Esry B D, Morishita T, Lin C D 1998 *Phys. Rev. A* **58** R4
- [41] Bao C G, Yang X Z, Lin C D 1997 *Phys. Rev. A* **55** 4168
- [42] Li Y, Gou Q D 2012 *Phys. Rev. A* **85** 012510
- [43] Li Y, Gou Q D 2012 *Phys. Rev. A* **86** 016502
- [44] Li Y, Zhang W J, Gou Q D, Song H W, Shi T Y 2010 *Phys. Rev. A* **82** 022515
- [45] Hiroya Suno, Esry B D 2010 *Phys. Rev. A* **82** 062521

Calculations of the binding energies of weakly bound He-He-Ba molecules*

Gou Qing-Dong¹⁾²⁾ Li Yong^{1)†}

1) (Department of Physics, Central China Normal University, Wuhan 430079, China)

2) (Department of Physics, Jinggangshan University, Ji'an 343009, China)

(Received 7 April 2015; revised manuscript received 5 June 2015)

Abstract

The three-body Schrödinger equation is approximately solved in the hyperspherical coordinates and the binding energies of the three-body weakly bound systems are calculated with the purpose to find if He-He-Ba trimers could exist. Using the special feature of the B-spline function like the flexible and highly localized properties, hyperspherical potentials are obtained by modifying the knots distribution of the B-spline basis of different weakly bound three-atom systems. Employing the best empirical interaction potentials between each pair of particles, we obtain that in the ground state binding energies of the weakly bound typical three-atom systems, the bindings of the molecules, $^4\text{He}-^4\text{He}-^{138}\text{Ba}$, $^4\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ and $^3\text{He}-^3\text{He}-^{138}\text{Ba}$ are possible. The binding energies of these systems are shown in the order of 1 Kelvin, each system could support only one bound state. These weakly bound molecules can exist only in a very cold environment. To get insight into the geometry of the molecules, the features of the channel functions associated with the hyperspherical potential curves of each system are investigated.

Keywords: He-He-Ba trimer, hyperspherical coordinate, halo state, Efimov state

PACS: 31.15.xj, 36.90.+f

DOI: 10.7498/aps.64.193102

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11464020, 11164010).

† Corresponding author. E-mail: yongli@phy.ccnu.edu.cn