

# 电子偶素负离子的结构\*

## Geometric Structure of the Positronium Negative Ion

覃团发 吕国雄  
Qin Tuanfa Lu Guoxiong

(广西大学物理系 南宁市西乡塘路 10号 530004)

(Dept. of Physics, Guangxi University, 10 Xixiangtanglu, Nanning, Guangxi, 530004)

**摘要** 在超球坐标中,用类氢波函数基展开来计算电子偶素负离子 ( $PS^-$ ) 系统的基态能量,然后用基态波函数计算体系的形状密度,从而确定基态的几何结构.

**关键词** 电子偶素负离子 几何结构

**Abstract** Using hydrogenlike wave function as basis function, the ground state energy of  $PS^-$  ( $e^+ e^- e^-$ ) was calculated in hyperspheried coordinated. Using ground state wave function of the system to calculate shape density, the geometric structure of ground state of  $PS^-$  was given.

**Key words** positronium negative ion, geometric structure

中图法分类号 O565

电子偶素负离子 ( $PS^-$ ) 是两个电子和一个正电子组成的库仑三体系统。它的存在首先由 J. A. Wheeler<sup>[1]</sup>所预言,且理论计算出当  $PS^-$  分解为  $PS$  ( $e^+ e^-$ ) 和一个自由电子时,所需要的能量<sup>[2,3]</sup>,后来 Allen P. Mills, Jr用非常精美的实验证明  $PS^-$  的存在<sup>[4]</sup>,接着对  $PS^-$  的衰变率做了测量<sup>[5]</sup>,这就重新促使人们对  $PS^-$  系统感兴趣,从此不断有人对  $PS^-$  系统进行了计算<sup>[6,7]</sup>,并给出结合能的理论值,但没有明确提到  $PS^-$  系统的几何结构,且计算使用的波函数含有较多的参数,带有很大的为人因素。我们使用直接的三体方法,在超球坐标中,用人们熟悉的类氢基展开来求解系统的能量和波函数,然后用系统的形状密度描述系统的基态结构

一个三体系统, Jacobi坐标有三种取法。

$PS^-$  系统的库仑势能为:

$$V = \frac{e^2}{r^T} - \frac{e^2}{r^U} - \frac{e^2}{r^V} \quad (1)$$

因  $r$  写成球矢径  $a$  和超角  $h$  有如下关系:

$$r^T = \frac{a}{\cos^T h} \quad (2.1)$$

$$r^U = \frac{a}{\cos^U h} \quad (2.2)$$

$$r^V = \frac{a}{\cos^V h} \quad (2.3)$$

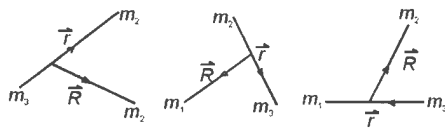


图 1 三体系统 Jacobi坐标的 3种取法

Fig. 1 Three types of Jacobi coordinate of a three-body system

体系的势可写为:

$$V = -\frac{e^2}{a} \left[ \frac{1}{\cos^T h} - \frac{1}{\cos^U h} - \frac{1}{\cos^V h} \right] = \frac{Z_{eff} e^2}{a} \quad (3)$$

它就是类氢势,其中  $Z_{eff}$  称为有效电荷数,在计算中作为一个可调参数,把它代入 Schrodinger 方程:

$$\left[ \left( \frac{\partial}{\partial a^2} + \frac{5}{a} \frac{\partial}{\partial a} - \frac{\Lambda^2 (\frac{\Omega}{a})}{a^2} \right) + \frac{2}{h^2} (V - E) \right] \psi = 0 \quad (4)$$

求得本征值和本征函数:

$$E_n = \frac{E_0 Z_{eff}^2}{b_n^2 m_e} \quad (5.1)$$

$$\lambda = 2m + l_1 + l_2 + \frac{3}{2} \quad (5.2)$$

$$b_n = n + \lambda + 1 \quad (5.3)$$

$$k_n = \frac{e^2 Z_{eff}}{h^2 b_n} \quad (5.4)$$

$$h_{[k]} = N_{nl} a^{2m+l_1+l_2} \exp(-k_n a) L_{b_n}^{2m+l_1} (2k_n a) Y_{[k]}(\Omega) \quad (5.5)$$

此本征函数就是类氢波函数,  $L_{b_n}^{2m+l_1}$  是拉盖尔多

项多。  $PS^-$  体系基态波函数  $j$  满足方程

$$Hj = Ej \quad (6)$$

$j$  可用类氢波函数展开

$$j = \sum_{[k]} C_{[k]} j_{[k]} \quad (7)$$

若体系总势为  $V$ , 则体系哈密顿为:

$$H = T + V = T + V' + (V - V') = H' + (V - V') \quad (8)$$

式中  $V'$  为类氢势,  $H'$  为类氢哈密顿, 把它代入

(8) 并积分得:

$$\sum_{[k]} H_{kk'} C_{[k]} = EC_{[k]} \quad (9)$$

求短阵元  $H_{kk'} = \langle j_{[k]} | H | j_{[k']} \rangle$  的关键是求其中的

的。

$$H_{kk'} = \langle j_{[k]} | H | j_{[k']} \rangle$$

仅计算基态时,  $L = 0$ , 且  $l_1, l_2$  满足

$$|l_1 - l_2| \leq L \leq l_1 + l_2 \quad (10)$$

又由  $PS^-$  系统为费米子系统, 且有两个全粒子,

故

$$l_1 = l_2 = 0, 2, 4, \dots$$

为了方便我们把体系的势化为  $T$  系坐标表示, 然

后直接展开而求得,  $V_{kk'} = \langle j_{[k]} | V | j_{[k']} \rangle$ , 展开项数取

到 140 项时, 计算结果基本收敛, 得到近似基态能量

为 6.46 eV 与文献 [6][7] 的计算结果基本符合。

本文主要目的是研究  $PS^-$  体系的结构, 为此, 引入

形状密度<sup>[8]</sup>,

$$d(s) = 8e^2 |j|^2 r^2 R^2 \overline{r^2 + R^2} \sin\theta \quad (11)$$

$PS^-$  体系基态形状密度等位图如图一所示, 它

只有一个极大, 就是体系基态的最可几结构, 对应的  $r, R, Q$  值为 3.63A, 1.79A, 90°。

我们计算的基态能量在精度上虽没有已有文献的那么好, 但我们所使用方法具有的优点还是很明显的:

- (1) 物理图象清晰, 类氢波函数为人们所熟悉;
- (2) 仅使用一个参数;
- (3) 使用形状密度来研究基态结构比较方便。

$PS^-$  体系作为一种最简单而真实存在的库仑三体系统, 将会越来越引起人们的兴趣, 不论理论还是实验都还有大量工作有待去完成, 我们的方法对研究其内部运动状态将是很有前途的。

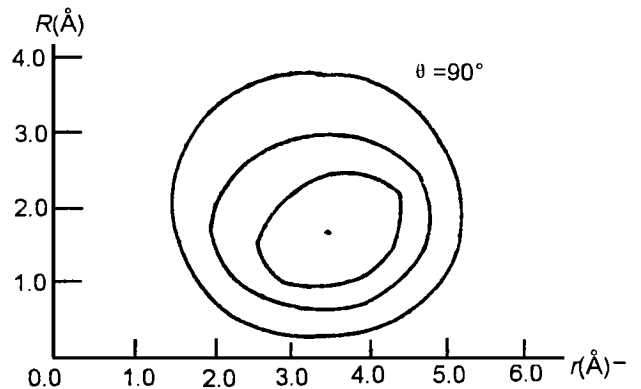


图 2  $PS^-$  基态形状密度

Fig. 2 The shape density of  $PS^-$  ground state

### 参考文献

- 1 Wheeler J A. Ann. N Y Acad. Sci, 1946, 48 219.
- 2 Kolos W, Roothaan CCJ, R A. Sack Rev Mod Phys, 1960, 32 178.
- 3 Bhatia A K, Richard J Drochman Physical Review A, 1983, 28 2525.
- 4 Allen P. Mills Jr. Physical Review Letters, 1981, 46 717.
- 5 Allen P. Mills Jr. Physical Review Letters, 1983, 50 671.
- 6 V B. Mandelzweig Physical Review A, 1989, 39 2813.
- 7 Lin CD, Liu Xianhui. Physical Rev A General Physics, 1988, 37 2749.
- 8 Bao Cheng-guang Few - Bod Methods Principles and Application, 1986, 581.

(责任编辑: 莫鼎新 邓大玉)