arXiv:2304.00878v1 [physics.atom-ph] 3 Apr 2023

Feshbach共振调控范德华相互作用下埃菲莫夫物理的多通道超球模型

Kajsa–My Tempest 和 Svante Jonsell斯德哥尔摩大学物理系，*SE-10691*，瑞典斯德哥尔摩

（日期：2023年4月4日）

本文提出一种四通道模型，将磁可调费什巴赫共振纳入三个通过两两范德华相互作用的原子所组成的系统。我们的方法旨在模拟近期实验：这些实验利用可调节的散射长度研究三体埃菲莫夫态；当二体散射长度趋于发散时，这类态便会出现。利用该模型，我们计算三体绝热势曲线和有效势曲线，并研究 Feshbach共振的强度（或宽度）如何影响与 Efimov效应相关的三体势。我们发现，随着系统趋近窄共振极限，用于解释宽共振中所谓范德瓦耳斯普适性的排斥势垒位置略有偏移；这一偏移与绝热能量景观中两个避免交叉的出现相关。更重要的是，吸引势阱明显向高能方向移动，在最窄的共振下极浅。我们认为，这种行为与弱（窄）共振中范德瓦耳斯普适性的失效有关。

I. 引言

共振二体力会在量子三体谱中产生一系列能级，这一点早已为人熟知。恰处于共振时，会出现无限多个这类能级，并遵循离散几何标度律。这些能级称为埃菲莫夫态 [1]，它们具有许多有趣的普适性质。Efimov物理 [2] 这一术语指的是少体系统中因这一效应而产生的一系列普适现象。

尽管进行了许多努力，对埃菲莫夫结论的实验验证仍然困难重重。原因在于，理想的埃菲莫夫情形要求表征共振二体相互作用的参数—— s波散射长度 a——其绝对值远大于两两相互作用范围。

在实验条件下，这一条件很少能得到完全满足。一个例外是超冷原子云，其中可以借助磁可调费什巴赫共振 [3]来控制散射长度。发生 Feshbach共振时，两个碰撞中的原子会与一个准束缚分子态发生微弱耦合（若无此耦合，该态将严格束缚）。例如，自旋构型不同的一对原子可能通过超精细相互作用发生耦合。如果两个分子态的磁矩不同，外加磁场会通过塞曼效应改变它们的相对能量。因此，可以通过调节磁场强度来控制闭通道束缚态的位置。

在超冷区，碰撞发生在零能极限。当磁场取某个值 B_0 时，闭通道分子的准束缚能级将与开放通道的阈值能量重合。这会在零能散射极限下产生共振耦合，因此 s波散射长度$a(B)$发散。在该磁场附近，散射长度对磁场的依赖关系为 [4]

$$a(B) = a_{\mathrm{bg}} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0}\right), \tag{1}$$

其中， a_{bg} 是非共振背景散射长度， ΔB 是共振宽度。关于Feshbach共振的理论及其分类，将在第二节进一步讨论。此处只需指出，根据共振宽度和二体相互作用势的参数，它们可分为强共振（入口通道主导）和弱共振（闭通道主导）。

利用这一技术，人们通过在特定磁场强度 [5] 下三体复合率的增强，探测到了超冷铯原子云中接近阈值的埃菲莫夫态。此后，人们利用费什巴赫调谐来调节散射长度，并在多种碱金属体系中搜寻埃菲莫夫态。这类态已在由三个全同玻色子组成的体系中得到报道： ^{7}Li [6, 7], ^{39}K [8–10],^{85}Rb [11], ；也在混合玻色子体系或玻色子-费米子体系中得到报道： ^{41}K–^{87}Rb [12, 13],^{40}K–^{87}Rb [14] ^{7}Li–^{87}Rb [15],^{6}Li–^{133}Cs [16, 17], ；甚至在纯费米子体系中也有报道： ^{6}Li [18–21]（使用不同超精细态的混合物）。

值得注意的是，在氦三聚体中也发现了埃菲莫夫效应；该体系不存在上述类型的费什巴赫共振 [22]。

尽管 Efimov理论预言，连续埃菲莫夫态的参数之间存在普适标度关系，但这些态的绝对尺度仍不具普适性，即由原子间相互作用的细节决定，通常因原子种类不同而异。然而，随着埃菲莫夫态的实验观测不断累积，人们发现了另一种出乎意料的普适性。对于强共振，埃菲莫夫态会出现在磁场处，其中 $a \approx -9r_{\mathrm{vdW}}$， r_{vdW} 为范德华长度 [23]。这种现象称为范德瓦耳斯普适性，其起源可由短距离处成对关联受到抑制来解释；这一抑制在三体有效势中表现为特定位置上的排斥势垒 [24]。

文献 [24], 中的理论分析与许多关于Efimov物理的理论研究一样，采用基于模型势的单通道模型。该研究使用了经过调谐、满足 $a \to \pm\infty$ 的范德华势。因此，Feshbach共振的物理效应仅通过在 $B = B_0$处取值的单一参数 a（B）纳入模型。由此，该模型按定义无法考察取决于共振强度或宽度 ΔB 的效应；共振强度或宽度取决于初始开放通道与分子闭合通道之间的耦合大小。该模型也无法考察与共振碰撞物理的多通道特性有关的其他效应。

明确考虑Feshbach共振多通道特性的理论研究为数不多：一些定性方面的研究采用基于零程相互作用坐标空间Faddeev方程的方法 [25–28], ，或采用基于产生与湮灭算符的方法 [29–31]。相比之下，通过在绝热超球近似下求解薛定谔方程，并采用实验确定参数的Lennard–Jones势，已经获得了与使用 ^{133}Cs [32] 和^{39}K [10] 进行的实验定量一致的结果。近期研究探讨了与本文相近的物理问题，但采用了相当不同的方法，即基于动量空间Faddeev方程并使用可分离相互作用 [33, 34]。

借助能够描述闭通道主导共振的模型，可以考察共振宽度如何影响三体谱及其普适性质。更具体地说，该模型使我们能够数值研究范德瓦耳斯普适性的极限 [24, 35]。在实验中，范德瓦耳斯普适性出现在宽共振和中等宽度共振区间 [24, 35], 而对于窄共振，则有迹象表明这种普适性会失效。

推广到三个原子时，二体相互作用的双通道模型需要四个通道，因为闭合通道中的原子配对方式有三种。本文提出一种方法，利用包含磁可调费什巴赫共振的四通道模型，求解三个全同玻色子通过两两范德华相互作用的体系。该模型的优势在于能够研究超越单通道近似的埃菲莫夫物理的各个方面，并探究闭合通道主导的窄共振区间。

大多数实验研究的埃菲莫夫态都利用了中等至强耦合的Feshbach共振，这无疑是因为弱耦合共振通常需要极其精确的磁场控制，带来实验上的挑战，尤其是在 B_0 较大时。数值计算中，我们采用了 ^{23}钠的窄共振参数。据我们所知，尚无人尝试在这些共振条件下搜寻埃菲莫夫态。选择这些共振，是因为它们是从理论上理解得很透彻的弱至极弱共振的典型实例 [38]。我们预计，这里发现的定性特征也适用于其他系统中的类似共振。

在本研究中，我们考察了使用四通道模型得到的数值三体超径向势能曲线，并将其与单通道计算结果进行比较。我们发现了若干随共振强度而变化的特征。最主要的发现是，随着共振宽度减小，绝热势能景观中会出现额外的避免交叉。我们讨论了这些避免交叉如何影响非绝热Efimov势，并分析了它们对范德瓦耳斯普适性相关特征产生的后续影响。

II. Feshbach共振下的二体散射

在存在 Feshbach共振的情况下描述三体散射过程，只需一组少量参数，这些参数可通过相应的二体散射计算获得。对于我们的三体模型，我们考虑了三个玻色钠原子的散射，并使用 [38] 中描述的双体模型提取所需参数。下面我们简要介绍二体散射图景，并主要遵循 [38–41]中提出的理论。

A. 耦合通道散射

当原子具有非零核自旋 i，且该自旋与非零电子角动量 $\vec{j}$耦合形成总（原子）角动量 $\vec{f}=\vec{i}+\vec{j}$时，可能出现磁场可调共振。元素周期表 I族中的元素就是例子，其基态项为 $^2S_{1/2}$。这些原子的轨道角动量均为零，因此 $\vec{j}=\vec{s}$。由此，$^2S_{1/2}$ 能级分裂为两个超精细能级，其对应的量子数分别为 $f=i-1/2$ 和$f=i+1/2$。这两个能级的能量差即为超精细分裂 $E_{\rm hf}$。在外加磁场存在时，塞曼相互作用使电子自旋和原子核自旋与磁场耦合，从而使超精细能级分裂为个塞曼能级；这些能级由 f沿磁场轴的投影 $m_f\hbar$ 确定。

我们考虑两个核自旋为 $i=3/2$ 的 $^2S_{1/2}$ Na 原子的散射，其可能的超精细能级为 $f=1$和 $f=2$，对应的塞曼能级（按能量升序排列）为 $m_{f=1}=1$，0，-1 和 $m_{f=2}$ =−2，-1，0，1，2。这些态标记为 $|a\rangle$，$|b\rangle$，...，$|h\rangle$。对于四个最低的塞曼能级，自旋投影 m_s 在磁场方向上的分量等于 $-1/2$；对于四个最高的能级，则等于 $1/2$ （见 [38] 中的图 1）。

在超冷碰撞中，超精细能量和塞曼能量远大于原子的动能；而在足够强的磁场中，塞曼相互作用占主导地位。此时，散射道按照每个原子的渐近塞曼能级分类，即 $\alpha\beta=\{f_1m_{f1}f_2m_{f2}\}$，其中花括号表示玻色对称性。当所有通道均为闭合通道时，系统的总能量 E 对应于一个严格束缚的分子态。然而，如果该态与至少一个开放通道耦合，E 则对应于散射连续谱中的闭合通道离散态，换言之，即一个共振。

此外，超冷碰撞的限制意味着我们只需考虑 s 波散射，也就是说，在良好近似下，可以忽略两个碰撞原子之间的相对角动量。因此，磁量子数是两个原子各自贡献之和，即 $M_F=m_{f1}+m_{f2}$。由于系统在绕磁场轴（取为沿 z 轴）的旋转下保持不变，M_F 在碰撞过程中守恒。当原子彼此靠近时，它们会到达一个位置，在那里电子与原子核解耦，并彼此重新耦合，形成分子电子自旋 $S=\vec{s}_1+\vec{s}_2$，从而形成分子

$f_1m_{f_1}$	m_{s_1}	$f_2m_{f_2}$	m_{s_2}	$\alpha\beta$	M_S
1 1	$-\frac{1}{2}$	1 1	$-\frac{1}{2}$	aa	-1
1 1	$-\frac{1}{2}$	2 1	$+\frac{1}{2}$	ag	0
1 0	$-\frac{1}{2}$	2 2	$+\frac{1}{2}$	bh	0
2 0	$+\frac{1}{2}$	2 2	$+\frac{1}{2}$	fh	1
2 1	$+\frac{1}{2}$	2 1	$+\frac{1}{2}$	gg	1

表 I. 该表展示了具有 $M_F=2$的不同 s波散射通道的量子数，以及相应的标记约定。各通道按内能 $E_{\alpha\beta}$递增的顺序列出。

单重态（$S=M_S=0$）或三重态（$S=1$，$M_S=0$，±1）。超精细相互作用会弱耦合电子自旋不同但总自旋相同的态 M_F。

虽然 M_S 并非严格守恒，但分子通道的磁矩近似为 $\mu\simeq\mu_BM_S$。因此，可以将 B 作为调节量，通过初始渐近态与闭合通道态磁矩之差 $\delta\mu$，控制二者之间的能量间隔。在重新耦合点，内禀耦合会混合各通道，使原子对能够从初始通道跃迁到闭合通道，在那里原子会暂时束缚在一起。

我们假设原子被囚禁在其最低塞曼态中，这意味着 aa是入口通道。该态具有 $M_F=2$，并且可以与另外四种原子态组合耦合，从而形成具有相同 M_F值的分子态（$|\{\alpha\beta\}\rangle$），见表 I。只要动能低于塞曼分裂，渐近区域中就只有 aa 通道是开放的；在较短的r处，它与四个渐近闭合通道耦合。随后可用耦合通道方法 [42–44], 描述碰撞问题，将总散射态展开为各个通道态之和

$$\Psi=\sum_{\alpha\beta}\psi_{\alpha\beta}(\vec{r})\,|\{\alpha\beta\}\rangle\,, \tag{2}$$

其中 $|\{\alpha\beta\}\rangle=|\alpha\rangle\otimes|\beta\rangle$ 渐近地（即，当 $r\to\infty$时）。将展开式（2）代入薛定谔方程，其中系统的动力学由有效哈密顿量描述，该哈密顿量由 H_0 及其本征态 $|\alpha\beta\rangle$ 和使通道发生耦合的相互作用部分 V 组成。由此得到一组五个耦合微分方程。利用 $S=0$ 和 $S=1$ 态的 Born–Oppenheimer 势，可以数值求解这些耦合方程，并根据计算得到的波函数预测所出现 Feshbach共振的位置和宽度[38]。

表 II. 双通道模型的 LJ(6,10) 模型参数，单位为 $E_{\rm vdW} \approx 1.18152 \times 10^{-8}$ 哈特里。

$a_{\rm bg}(a_0)$	C_8(原子单位)	C_{10}(原子单位)	$r_{\rm vdW}(a_0)$	$E_{-1}/E_{\rm vdw}$
63	1556	1.62005×10^9	45	2.6

如 [38], 所示，包含在磁场强度上彼此充分分离的 Feshbach共振的多通道问题，可以化简为一个有效双通道问题。

B. 双通道模型

双通道模型由一个开放通道和一个包含分子态的单一闭合通道组成，二者耦合后产生共振。在质心参考系中，耦合的双通道哈密顿量为

$$\hat{H}_{\rm 2b} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\rm 2b}}\frac{d^2}{dr^2} + v_{\rm bg}(r) & W(r) \\ W(r) & -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\rm 2b}}\frac{d^2}{dr^2} + v_{\rm c}(r;B) \end{pmatrix}, \tag{3}$$

其中， $\mu_{\rm 2b}$ 是两个 ^{23}钠原子的约化质量。开放通道势 $v_{\rm bg}$ 充当参考势或背景势，其选择旨在近似散射原子在 aa 通道中的相互作用。该通道主要具有三重态特征，且 $M_S = -1$。该势在短距离处应具有排斥势垒，在大距离处则应呈现典型的范德华尾部。开放通道模型势的重要性质在于，其散射长度 $a_{\rm bg}$ 以及最后一个束缚振动态的位置应与精确势的相应数值一致。我们采用 Lennard–Jones 6-10 势，其参数取自三重态 ^{23}钠二聚体 [45, 46]

$$v_{\rm bg}(r) = \frac{C_{10}}{r^{10}} - \frac{C_6}{r^6}, \tag{4}$$

通过调节 C_{10} ，使其支持一个 s波束缚态，并具有 s波散射长度 $63a_0$，其中 a_0 是玻尔半径。真实的钠二聚体当然支持更多的束缚态，但这一简化势捕捉了近阈值 s波散射性质的基本特征 [45]。参数设置和势的性质列于表 II中。

范德华长度和能量用于表征势的作用范围和尺度，其定义为 C_6

$$r_{\rm vdW} = \frac{1}{2}(2\mu_{\rm 2b}C_6/\hbar^2)^{1/4}, \tag{5}$$

$$E_{\rm vdW} = \frac{\hbar^2}{2\mu_{\rm 2b}r_{\rm vdW}^2}, \tag{6}$$

平均散射长度 [47], 设定了散射长度的典型尺度，其表达式为

$$\bar{a} = \sqrt{2}(2\mu_{\rm 2b}C_6/\hbar^2)^{1/4}\frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} \approx 0.956 r_{\rm vdW}. \tag{7}$$

用范德华单位表示时，势 (4) 变为

$$v_{\rm bg}(r) = -\frac{16}{r^6}\left(1 - \frac{C}{r^4}\right), \tag{8}$$

其中，唯一的非普适常数 $C = C_{10}/C_6 r_{\rm vdW}^4$决定 $a_{\rm bg}$。

未耦合开放通道波函数 ϕ_E 定义为薛定谔方程的能量归一化正则解

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_{\rm 2b}}\frac{d^2}{dr^2} + v_{\rm bg}(r)\right)\phi_E(r) = E\phi_E(r), \tag{9}$$

其中， E 是原子的散射能。 ϕ_E 的渐近形式为

$$\phi_E(r) \xrightarrow{r\to\infty} \sqrt{\frac{2\mu_{\rm 2b}}{\pi\hbar^2 k}}\sin(kr + \delta_{\rm bg}), \tag{10}$$

其中， $k = \sqrt{2\mu_{\rm 2b}E}/\hbar$ 和 $\delta_{\rm bg}$ 是背景散射相移。背景散射长度为

$$a_{\rm bg} = \lim_{k\to 0} -\frac{\tan\delta_{\rm bg}}{k}. \tag{11}$$

对于所有磁场强度 B，零能量定义为开放通道的渐近能量。

对于闭合通道， [38] 指出，共振主要由与通道fh 和 gg的耦合引起。这两个通道与 aa一样，都具有三重态特征，但重要的区别在于 $M_S = 1$ （见表 I）。因此，闭合通道势与 $v_{\rm bg}$的区别仅在于一个依赖磁场的能量位移

$$v_{\rm c}(r;B) = v_{\rm bg}(r) + E_{\rm c}(B), \tag{12}$$

其中，我们将两个通道的能量间隔定义为

$$E_{\rm c}(B) = E_{-1} + \delta\mu(B - B_{\rm c}). \tag{13}$$

这里， E_{-1} 是背景势唯一束缚态的束缚能， $\delta\mu$ 是分离原子与闭合通道态之间的磁矩差。如果分子态具有纯粹的$M_S = \pm 1$ 特征，则应有 $\delta\mu = g_s\Delta M_s\mu_B = 4\mu_B$；但由于不同态之间存在混合，这一关系

并非完全成立。我们采用 [38] 在共振附近的值 $\delta\mu = 3.8\mu_B$ 。

裸共振态 ϕ_c 定义为满足下式的单位归一化解

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_{2b}}\frac{d^2}{dr^2}+v_c(r;B)+E_{-1}\right)\phi_c(r) = E_c(B)\phi_c(r). \quad (14)$$

如果通道间没有耦合，当磁场调谐至B_c时，在零碰撞能量极限下，该态将与开放通道发生共振。

原子彼此靠近时，通道间会发生耦合，因此耦合项 $W(r)$应为短程函数；除此之外，其具体形式并不重要。我们采用

$$W(r) = W_0 e^{-0.2r}. \quad (15)$$

这种耦合会使闭合通道 ϕ_c 中的态与开放通道 ϕ_E中的态混合，即它们成为缀饰态。因此，缀饰态是薛定谔方程的本征态

$$(\hat{H}_{2b} - E\hat{I})\begin{pmatrix}\phi_E(r)\\ \phi_c(r)\end{pmatrix} = 0, \quad (16)$$

ˆ其中 I 是单位矩阵。耦合会产生Feshbach共振（即缀饰共振态），其能量相关的衰变宽度 [38, 39]为

$$\Gamma(E) = 2\pi|\langle\phi_c|W|\phi_E\rangle|^2. \quad (17)$$

由于耦合，共振发生时的磁场 B_0 （即共振态的零能交叉）相较于裸共振态 B_c的共振位置会有所偏移。因此，Feshbach共振的两个物理参数是共振位置 B_0及其测量宽度 ΔB；它们与依赖于磁场强度的散射长度式（1）相关。

共振着装后位置的偏移量可使用多通道量子亏损理论估算 [48, 49]

$$B_0 - B_c = \Delta B\frac{r_{bg}(1-r_{bg})}{1+(1-r_{bg})^2}, \quad (18)$$

其中 $r_{bg} = a_{bg}/\bar{a}$。

共振宽度 ΔB 是共振处的磁场 B_0 与满足 $a = 0$时的磁场之差。它通过 [38, 39]与衰变宽度公式（17）相关联

$$\Delta B = \lim_{k\to 0}\frac{\Gamma(E)}{2ka_{bg}\delta\mu}. \quad (19)$$

作为起点，我们使用 ^{23}Na 中两个 Feshbach共振的物理参数 B_0和 ΔB （见表 V），从公式（19）中提取模型参数 W_0 ，并从公式（18）中提取 B_c 。

假设 B_c 的取值来自式 (18)，随后我们通过显式计算着装开放通道中的相移 $\delta(E)$，对共振位置进行微调；具体做法是使用 [39] 中概述的 R矩阵方法求解式 (16)，且在 R矩阵边界 r_a 处不施加任何边界条件。图 1 展示了两个共振中较宽者对应的、随 B 变化的散射长度绝对值。这里，共振位置相较于输入参数值略有偏移 $B_0 = 90.7$ 毫特斯拉至 $B_0^* = 90.71084$ 毫特斯拉，但宽度几乎相同。表 V 列出了经微调后产生零能共振的磁场 B_0^* 。

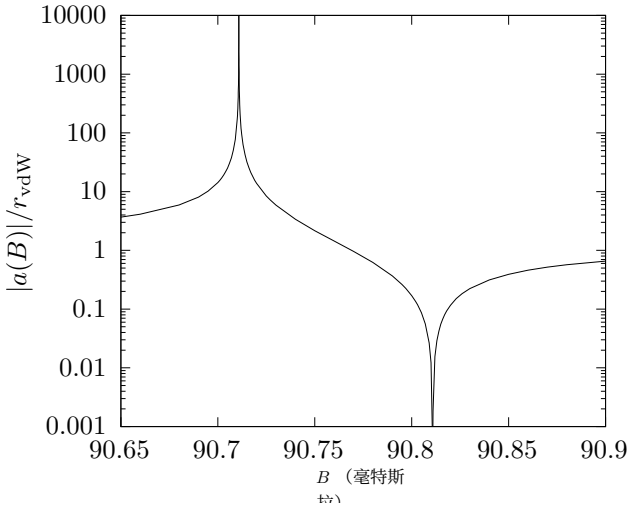

图 1. 在.09 共振附近，散射长度 $|a(B)|/r_{vdW}$ 随 B (毫特斯拉)的变化关系。共振位置相较于输入参数 $B_0 = 90.7$ 毫特斯拉略有偏移至 $B_0^* = 90.71084$ 毫特斯拉。

C. 共振强度

通过引入无量纲强度参数 s_{res} [41]，可将Feshbach共振分为两种主要类型。共振强度定义为

$$s_{res} = r_{bg}\delta\mu\Delta B/\bar{E}, \quad (20)$$

其中 $\bar{E} = \hbar^2/2\mu_{2b}\bar{a}^2$。利用 s_{res} ，可将该共振的内禀长度 r^*[41, 50] 定义为

$$r^* = \bar{a}/s_{res}. \quad (21)$$

强共振是指具有 $s_{res} > 1$ 的共振。这些共振的内禀长度远小于

背景势的相互作用长度；对于范德华相互作用，该长度由 $r_{\rm vdW}$ 给出。强共振也称为开放通道主导的共振，因为原子更有可能处于入口通道中。这意味着，在 ΔB [41] 的很大一部分范围内，缀饰束缚态（即 Feshbach 分子）的自旋更多地呈现开放入口通道的特征。强共振通常也较宽，也就是说，共振宽度 ΔB 很大。

弱共振是指具有 $s_{\rm res} \ll 1$的共振。此处 r^*相较于背景相互作用长度较大。这些共振由闭通道主导，且通常相对于 ΔB而言较窄。

III. FESHBACH共振下的三体散射

这里概述带有 Feshbach 共振背景的三体散射问题四通道模型理论。在以下所有讨论中，我们假设三粒子系统的总轨道角动量为 $J = 0$，这适用于埃菲莫夫态。

A. 超球绝热表象

首先考虑不存在 Feshbach 共振时三个粒子的单通道问题。此时薛定谔方程可写为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{i=1}^{3} m_i^{-1}\Delta_{\vec{x}_i} + \sum_{i<j}^{3} v(r_{ij})\right)\Psi(\vec{x}_1,\vec{x}_2,\vec{x}_3) = E\Psi(\vec{x}_1,\vec{x}_2,\vec{x}_3), \tag{22}$$

其中 m_i 为粒子质量，$v(r_{ij})$为二体相互作用势，$r_{ij} = |\vec{x}_j - \vec{x}_i|$ 为粒子 i 和 j之间的距离。

我们通过引入质量缩放雅可比坐标，将粒子的质心运动与内部运动分离，然后将这些内部坐标系转换为超球坐标。设 M 为总质量，三体约化质量 μ和归一化常数 d_k 定义为[1]

$$\mu^2 = \frac{m_i m_j m_k}{M}, \qquad d_k^2 = \frac{m_k(m_i+m_j)}{\mu M}, \tag{23}$$

[1] For identical particles of mass m, $\mu = m/\sqrt{3}$ and $d_k = \sqrt{2}/3^{1/4}$.

质量缩放雅可比坐标和质心坐标定义为

$$\vec{r}_k = d_k^{-1}(\vec{x}_j - \vec{x}_i), \qquad \vec{R}_k = d_k(\vec{x}_k - (\vec{x}_j+\vec{x}_i)/2), \qquad \vec{X}_{\rm c.m.} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{3} m_i\vec{x}_i. \tag{24}$$

这里，指标 i, j, k 是 (1,2,3) 的循环置换。

由于二体相互作用 $v(r_{ij})$ 与 $\vec{}$和 $X_{\rm c.m.}$ 无关，这一变换使相对运动与质心运动解耦，因此 $\Psi(\vec{r}_k, \vec{R}_k, \vec{X}_{\rm c.m.}) = \widetilde{\psi}(\vec{r}_k, \vec{R}_k)\varphi(\vec{X}_{\rm c.m.})$。由此可以分离出质心。接下来我们求解粒子的内部运动。

两个 Jacobi矢量合并为一个位置矢量，其分量在 $\mathbb{R}^6$ 中定义一个点。超球坐标是该点的极坐标，包括一个超半径 ρ 和五个超角 Ω。其中三个角是外部坐标，我们选择欧拉角 α, β, γ。它们描述由三个粒子定义的平面的取向，而其余两个超角 θ和 φ_k 描述系统的三角形形状以及顶点处的粒子置换 [51]。最后，超半径描述系统的大小，其定义为 $\rho = \sqrt{r_k^2 + R_k^2} = 3^{-1/4}\sqrt{r_{ij}^2 + r_{jk}^2 + r_{ki}^2}$。

重标度 $\widetilde{\psi}_n(\rho, \Omega) = \rho^{5/2}\psi_n(\rho, \Omega)$ 消除了超径向动能算符中关于 ρ 的一阶导数。因此，内部运动的薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(\Lambda^2 + \frac{15}{4}\right) + \sum_{i<j}^{3} V(r_{ij})\right]\psi_n(\rho,\Omega) = E_n\psi_n(\rho,\Omega), \tag{25}$$

其中，E_n 是能量本征值，Λ 是总角动量。超角的依赖关系包含在 Λ 中，其形式取决于超角的定义。

对于内部超角，我们采用 Johnson [52] 所述的映射过程，定义一组经过修正的坐标。这些坐标最初由 Smith and Whitten [53]引入。两个 Jacobi矢量位于$\hat{}x\hat{}y$平面内，较小的转动惯量沿$\hat{}x$轴，较大的转动惯量沿$\hat{}y$轴。垂直于该平面的$\hat{}z$轴，其正方向为 $\vec{A} = (\vec{r}_k \times \vec{R}_k)/2$ 的方向，并且

$\hat{z} = \vec{A}/A$。位置矢量的笛卡尔分量定义为

$$\begin{aligned}
(\vec{r}_k)_x &= \rho\cos(\pi/4-\theta/2)\cos(\varphi_k/2),\\
(\vec{r}_k)_y &= \rho\sin(\pi/4-\theta/2)\sin(\varphi_k/2),\\
(\vec{r}_k)_z &= 0,\\
(\vec{R}_k)_x &= -\rho\cos(\pi/4-\theta/2)\sin(\varphi_k/2),\\
(\vec{R}_k)_y &= \rho\sin(\pi/4-\theta/2)\cos(\varphi_k/2),\\
(\vec{R}_k)_z &= 0,
\end{aligned} \tag{26}$$

其中 $\theta \in [0,\pi/2]$ 和 $\varphi_k \in [0,4\pi)$。要求波函数为单值，并对全同粒子施加玻色对称性后， φ_k 的取值范围缩小为 $[0,\pi/3]$。对于全同粒子，坐标组 (k、 i、 j) 内的运动学转动对应于$\varphi_j = \varphi_i + 4\pi/3$。下文选取 $k=3$，并省略式（26）中超角坐标 φ_k 的指标。因此， $\{\vec{r}_1,\vec{R}_1\}$ 由 $\varphi \to \varphi + 4\pi/3$ 得到，而 $\{\vec{r}_2,\vec{R}_2\}$由 $\varphi \to \varphi + 8\pi/3$得到。粒子间的距离于是为

$$\begin{aligned}
r_{12} &= \frac{d_k\rho}{\sqrt{2}}[1+\sin\theta\cos\varphi]^{1/2},\\
r_{23} &= \frac{d_k\rho}{\sqrt{2}}[1+\sin\theta\cos(\varphi-2\pi/3)]^{1/2},\\
r_{31} &= \frac{d_k\rho}{\sqrt{2}}[1+\sin\theta\cos(\varphi+2\pi/3)]^{1/2}.
\end{aligned} \tag{27}$$

现在，我们通过将解 $\psi_n(\rho、\Omega)$ 展开为一组完备的正交归一通道函数 $\Phi_\nu(\rho;\Omega)$，引入绝热表示，其中径向波函数 $F_{\nu n}(\rho)$ 为展开系数。通道函数是绝热方程的解

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(\Lambda^2+\frac{15}{4}\right)+\sum_{i<j}^{3}V(r_{ij})\right]\Phi_\nu(\rho;\Omega) = U_\nu(\rho)\Phi_\nu(\rho;\Omega), \tag{28}$$

其中，本征值 $U_\nu(\rho)$ 在此称为绝热势曲线，它们是通过在多个不同的超半径处求解方程（28）得到的。代入解

$$\psi_n(\rho,\Omega) = \sum_{\nu=0}^{\infty}F_{\nu n}(\rho)\Phi_\nu(\rho;\Omega) \tag{29}$$

代入式 (25)，投影掉 $\Phi_\mu(\rho;\Omega)$，并对角度积分后，可得到一组无限个耦合常微分方程

$$\begin{aligned}
&\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+U_\mu(\rho)-\frac{\hbar^2}{2\mu}Q_{\mu\mu}(\rho)\right)F_{n\mu}(\rho)\\
&-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\sum_{\nu\neq\mu}2P_{\mu\nu}(\rho)\frac{\partial}{\partial\rho}+Q_{\mu\nu}(\rho)\right)F_{n\nu}(\rho) = E_nF_{n\mu}(\rho),
\end{aligned}$$

其中 $P_{\mu\nu}(\rho)$ 和 $Q_{\mu\nu}(\rho)$ 是定义如下的耦合矩阵元

$$\begin{aligned}
P_{\mu\nu}(\rho) &= \int d\Omega\Phi^*_\mu(\rho;\Omega)\frac{\partial}{\partial\rho}\Phi_\nu(\rho;\Omega),\\
Q_{\mu\nu}(\rho) &= \int d\Omega\Phi^*_\mu(\rho;\Omega)\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\Phi_\nu(\rho;\Omega),\\
P^2_{\mu\nu}(\rho) &= -\int d\Omega\frac{\partial}{\partial\rho}\Phi^*_\mu(\rho;\Omega)\frac{\partial}{\partial\rho}\Phi_\nu(\rho;\Omega).
\end{aligned} \tag{30}$$

耦合矩阵 P 是反对称的，因此$P_{\nu\nu}=0$。方程（30）中的耦合矩阵之间的关系为

$$\bar{Q} = \frac{d\bar{P}}{d\rho}+\bar{P}^2, \tag{31}$$

其中，对角元素为 $Q_{\nu\nu} = P^2_{\nu\nu}$。

非绝热耦合项可以通过数值微分确定。然而，这种方法相当繁琐。利用 Hellmann–Feynman 定理 [54, 55], 可以更高效地计算 $P_{\mu\nu}$。通过 Wang [56],提出的巧妙论证，这种方法还可以扩展到计算 $P^2_{\mu\nu}$。

绝热势 U_ν 包含了大部分三体物理，并且可以视为二体问题中 Born–Oppenheimer 势的三体对应物。二体复合通道与渐近趋近于二体束缚态能量的 U_ν 相关，而对于三体连续通道

$$U_\nu(\rho) \xrightarrow{\rho\to\infty} \hbar^2\frac{n(n+4)+15/4}{2\mu\rho^2}, \tag{32}$$

其中 $n=0$、4、6、.....是渐近非相互作用问题的本征值，其解可以用 Gegenbauer 多项式表示。 [57]

我们遵循惯例，将三体有效势曲线定义为

$$W_\nu(\rho) = U_\nu(\rho)-\frac{\hbar^2}{2\mu}Q_{\nu\nu}(\rho). \tag{33}$$

在渐近区域 $\rho \gg |a|$，非绝热耦合 $Q_{\nu\nu}$ 消失，且 $W_\nu \to U_\nu$。

在共振 $a \to \pm\infty$处，其中一条三体有效势变为吸引势，其形式为

$$W_\nu(\rho) = -\hbar^2\frac{|s_0|^2+1/4}{2\mu\rho^2}, \tag{34}$$

其中 $s_0 \approx \pm 1.00625i$。正是这一吸引性的三体势导致了Efimov效应。

玻色对称性通过边界条件施加。由公式 (27) 可知，操作 $\varphi \to -\varphi$ 对应于 $\{r_{12} \to r_{12}, r_{23} \leftrightarrow r_{31}\}$，而 $\varphi - \pi/3 \to -(\varphi - \pi/3)$ 对应于 $\{r_{31} \to r_{31}, r_{12} \leftrightarrow r_{23}\}$。（这些对称性将在下文中进一步详细讨论。）玻色全同粒子对称性确保波函数在这些操作下保持不变。因此，反射点处的导数必须为零。也就是说，我们使用以下边界条件求解公式 (28)

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi_\nu(\rho;\theta,0) = \frac{\partial}{\partial\varphi}\Phi_\nu(\rho;\theta,\pi/3) = 0. \tag{35}$$

θ 中的边界条件源于以下要求：解应与势趋于零时的解（即超角谐函数）平滑衔接。在此极限下，即绝热态的 $\rho \to \infty$极限，超角方程（28）可分离变量，

$$-\left(\frac{4}{\sin 2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin 2\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{4}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Phi_\nu(\theta,\varphi) = \lambda_\nu\Phi_\nu(\theta,\varphi). \tag{36}$$

其中 $\lambda_\nu(\rho) \xrightarrow{\rho\to\infty} n(n+4)$。满足上述 φ边界条件的方程（36）的解具有如下形式$\Phi_\nu(\theta, \varphi) = g_{l,\,m}(\theta)\cos m\varphi$ (其中 $m = 0,\ 3,\ 6,$ .....且$n = 2(l+m)$)，并且

$$\left(-\frac{1}{\sin 2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin 2\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)g_{l,m}(\theta) = \frac{\lambda_{l,m}}{4}g_{l,m}(\theta). \tag{37}$$

该方程的正则解在 θ^m 处按 $\theta \to 0$变化，并在 $\theta \to \pi/2$ 时趋近于一个常数值。因此， θ 中的边界条件可写为

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\Phi_\nu(\rho;0,\varphi) = \frac{\partial}{\partial\theta}\Phi_\nu(\rho;\pi/2,\varphi) = 0. \tag{38}$$

B. 四态模型中的三体物理

接下来，我们考虑三个全同玻色子在 Feshbach共振存在时通过成对相互作用进行相互作用的问题中的绝热部分。为描述 Feshbach共振，我们采用 II B节中介绍的双通道模型。三个原子中的每一个都可以处于两种自旋态之一：开放通道 $|o\rangle$ 或闭合分子通道 $|c\rangle$。因此，三个原子原则上有八种可能的态。然而，原子总是成对地从开放态转移到闭合态，这意味着处于闭合态的原子数必须是偶数。因此，对于三体态，要么所有粒子都处于开放通道，要么两个粒子处于闭合通道，一个粒子处于开放通道。后一种情况有三种不同的排列方式，因此这四种三体态分别为： $|ooo\rangle$、 $|coc\rangle$、 $|occ\rangle$ 和 $|cco\rangle$。由于我们纳入了自旋态，现在必须考虑波函数的对称性要求，以确定其边界条件。因此，有必要稍作停顿，简要介绍粒子置换理论。

1. 粒子置换

对于全同玻色子系统，总态必须在任意粒子置换下保持不变。一个含有 N 个粒子的系统有 $N!$ 种置换。与该系统相关的 $N!$ 个置换算符构成对称群 S_N。

任意置换都可以表示为对换的乘积[2] ，而所有对换都是厄米且幺正的。对换算符（ij）交换位于位置 i 和 j 的两个粒子。由于任意对换都是幺正的，且任意置换都是对换的乘积，因此所有置换也都是幺正的。并非所有置换都是厄米的，因为算符乘积的厄米共轭会改变算符的顺序，而对换不一定彼此对易。然而，置换的厄米共轭总是其自身的逆元，这正是幺正性所要求的。此外，将置换分解为对换乘积的方式并不总是唯一的。不过，表示一个特定置换所需的对换数总是偶数或奇数。因此，若一个置换由偶数个对换构成，则称其为偶置换；若由奇数个对换构成，则称其为奇置换。在 S_N 中，偶置换的数量等于奇置换的数量。

可以找到一些态，它们是置换群中所有元素的本征态。然而，由于这些算符一般并不对易，这组态不可能是完备的，也就是说，一般的态无法在此基底上展开。能够展开的态是满足玻色对称性或费米对称性的态。 N 粒子置换算符写作$P_\alpha = P_{\alpha(1),\ \alpha(2)\ldots}$，其中 α 是数字 $[1, 2, \ldots, N]$的一种置换。置换算符对 N粒子态的作用为

$$\hat{P}_\alpha |a\rangle_{(1)} \otimes |b\rangle_{(2)} \otimes |c\rangle_{(3)} \cdots \\ |a\rangle_{(\alpha(1))} \otimes |b\rangle_{(\alpha(2))} \otimes |c\rangle_{(\alpha(3))} \cdots, \tag{39}$$

[2] 对换是一种交换两个粒子的置换。

也就是说， P_α 取粒子 1 的属性并赋予粒子 α(1)，依此类推。完全对称态 $|\Psi_{\mathrm{S}}\rangle$ 在置换群中所有元素的作用下保持不变

$$\hat{P}_\alpha |\Psi_{\mathrm{S}}\rangle = |\Psi_{\mathrm{S}}\rangle \quad \forall\, \alpha. \tag{40}$$

因此，这些态是群中所有算符的本征态，且本征值均为 1。因此，在 N 个粒子的总希尔伯特空间中，我们可以识别出一个对称态子空间。可以构造投影到这一对称子空间的投影算符。利用置换算符，我们可以借助对称化算符构造完全对称态

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \hat{P}_\alpha, \tag{41}$$

其中 $\hat{S} = \hat{S}^\dagger$ 和 $\hat{S}^2 = \hat{S}$。玻色对称性意味着我们的态满足

$$\hat{S} |\Psi\rangle = |\Psi\rangle . \tag{42}$$

2. 三体态的置换

现在我们考虑三粒子态的置换。对称群 S_3 有六个元素：恒等变换、两个循环置换和三个对换。三粒子态表示为

$$|a\rangle_{(1)} \otimes |b\rangle_{(2)} \otimes |c\rangle_{(3)} \equiv |abc\rangle , \tag{43}$$

其中右矢中的位置对应粒子编号，即粒子 1 具有性质 a，粒子 2 具有性质 b，依此类推。对这一态中的粒子进行置换，需使用置换算符 P_{ijk}；该算符将粒子 1 所具有的性质赋给粒子 i、 $2 \to j$ 和 $3 \to k$。例如

$$\hat{P}_{312} |abc\rangle = |bca\rangle . \tag{44}$$

置换算符、它们分解为对换乘积的形式，以及它们对右矢和波函数的作用列于表 III。下文将使用表 III 中定义的算符 C_n ($n = 0 - 5$)表示不同的置换。由于这些算符构成一个群，因此它们都有逆元。恒等算符和对换都是自身的逆元，即对于 $i = 0, \ldots, 3$， $\hat{C}_i^{-1} = \hat{C}_i$。循环置换的逆元则分别为 $\hat{C}_4^{-1} = \hat{C}_5$ 和 $\hat{C}_5^{-1} = \hat{C}_4$。厄米共轭遵循相同的规律，从而保证幺正性。

厄米共轭从右侧作用于左矢。因此，对于波函数 $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) = \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \vec{x}_3 | abc \rangle$，其中 $\vec{x}_i$ 是粒子 i的位置矢量，循环置换 C_4 的作用为

$$\begin{aligned} \hat{C}_4 \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3) &= \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \vec{x}_3 | \hat{C}_4 | abc \rangle \\ &= \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \vec{x}_3 | \hat{C}_5^\dagger | abc \rangle \\ &= \psi(\vec{x}_3, \vec{x}_1, \vec{x}_2). \end{aligned} \tag{45}$$

因此，重要的是要认识到，虽然算符 $\hat{C}_i$ 作用于态，而算符 $\hat{C}_i^\dagger$ 作用于坐标，但对于 $i = 4,5$，它们并不相同。

表 III。该表总结了 S_3 的元素及其分别作用于右矢和波函数时的结果。注意，$\hat{C}_4$ 和 $\hat{C}_5$ 互为厄米共轭，即 $\hat{C}_4^\dagger = \hat{C}_5$ 和 $\hat{C}_5^\dagger = \hat{C}_4$。

		作用于	
算子	分解	$\lvert abc\rangle$	$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$
$\hat{C}_0 \equiv \hat{P}_{123}$	$\mathbb{1}$	$\lvert abc\rangle$	$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3)$
$\hat{C}_1 \equiv \hat{P}_{213}$	(12)	$\lvert bac\rangle$	$\psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1, \vec{x}_3)$
$\hat{C}_2 \equiv \hat{P}_{132}$	(23)	$\lvert acb\rangle$	$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_3, \vec{x}_2)$
$\hat{C}_3 \equiv \hat{P}_{321}$	(13)	$\lvert cba\rangle$	$\psi(\vec{x}_3, \vec{x}_2, \vec{x}_1)$
$\hat{C}_4 \equiv \hat{P}_{312}$	(23)(12)[a]	$\lvert bca\rangle$	$\psi(\vec{x}_3, \vec{x}_1, \vec{x}_2)$
$\hat{C}_5 \equiv \hat{P}_{231}$	(12)(23)[b]	$\lvert cab\rangle$	$\psi(\vec{x}_2, \vec{x}_3, \vec{x}_1)$

[a] 这种分解并不唯一。其他可能的两个乘积分解为 (13)(23) 和 (12)(13)。[b] (23)(13) 和 (13)(12) 是等价的描述。

3. Smith–Whitten 坐标的对称变换

在对三粒子系统进行建模时，使用式 (26) 中给出的 Smith–Whitten 坐标很有优势，因为对称操作只会影响超角 φ。下面将讨论如何利用这些坐标进行反演和置换。

我们已在第 IIIA 节中提及如何在不同组的雅可比坐标之间进行变换。这里我们选取坐标系 $k = 3$ ，并考察粒子置换的影响。

反演对称性，即 $\hat{i}\{\vec{r}_i, \vec{R}_i\} \to \{-\vec{r}_i, -\vec{R}_i\}$，可以通过两种方式获得：对超角 $\varphi \to \varphi + 2\pi$ 进行变换，或绕体固定 z轴旋转坐标系，旋转角度为 π ；该轴垂直于由三个粒子定义的平面。请注意，反演算符作用于坐标，因此不会改变右矢。

旋转通过改变欧拉角（α，β，γ）实现，并产生新的体固定坐标系 ˆ [58]。这里关注的旋转为 D_x（π）、ˆ ˆD_y（π）和 D_z（π）。这些旋转会使非旋转轴的另外两条轴反向，例如 ˆD_x（π）$\{\hat{x},\ \hat{y},\ \hat{z}\} = \{\hat{x},\ -\hat{y},\ -\hat{z}\}$。

两个全同粒子的对换等价于连接这两个粒子的雅可比坐标反演，即 $\{\vec{r}_i, \vec{R}_i\} \to \{-\vec{r}_i, \vec{R}_i\}$。$S_3$ 中的所有置换都可以通过 φ 的变换与整个系统的旋转组合得到。然而，后者对我们的计算没有实际影响，因为波函数只依赖于玻色子之间的距离。

对于 S_3中的每个置换，与之对应的 φ变换和旋转的组合并不唯一；不过，只有一种选择会得到 $\varphi \in [0, 4\pi]$。这些置换的厄米共轭对坐标的作用列于表 IV。以 ˆ$C_4^\dagger$ 为例，其作用可表示为

$$\left\langle \begin{smallmatrix}3\\1\to2\end{smallmatrix}\right| \hat{C}_4^\dagger = \left\langle \begin{smallmatrix}3\\1\to2\end{smallmatrix}\right| \Big((23)(12)\Big)^\dagger$$
$$= \left\langle \begin{smallmatrix}3\\1\to2\end{smallmatrix}\right| (12)^\dagger(23)^\dagger = \left\langle \begin{smallmatrix}3\\2\to1\end{smallmatrix}\right| (23)^\dagger = \left\langle \begin{smallmatrix}1\\2\to3\end{smallmatrix}\right|. \tag{46}$$

请注意，对换（ij）会交换位置 (ij)上的粒子。因此，ˆ $C_4^\dagger$ 按照$\{\vec{r}_3, \vec{r}_1, \vec{r}_2\} \to \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3\}$变换每一对粒子之间的雅可比坐标，并且

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\,\hat{C}_4^\dagger &= \langle\varphi|\,(12)^\dagger(23)^\dagger \\ &= \langle 4\pi-\varphi|\,\hat{D}_y(\pi)^\dagger(23)^\dagger \\ &= \langle 4\pi-(10\pi/3-\varphi)|\,\hat{D}_y(\pi)^\dagger\hat{D}_x(\pi)^\dagger \\ &= \langle 2\pi/3+\varphi|\,\hat{D}_z(\pi)^\dagger.\end{aligned}$$

仅变换 $\varphi \to \varphi + 2\pi/3$ 就能正确变换距离，见式（27）。然而，要正确变换 Jacobi矢量，见式（26），此处的变换 φ 还需与坐标系的旋转 ˆ $\varphi \to \varphi + 2\pi/3$ (π) 结合。

4. 三体态的对称化

使用对称化态，我们可以限制 φ 的定义域。这在数值计算中极具优势。

	φ	$\hat{D}$	$\vec{r}_3$	$\vec{r}_1$	$\vec{r}_2$
$\hat{C}_0^\dagger$	φ		$\vec{r}_3$	$\vec{r}_1$	$\vec{r}_2$
$\hat{\imath}$	$2\pi+\varphi$		$-\vec{r}_3$	$-\vec{r}_1$	$-\vec{r}_2$
$\hat{C}_1^\dagger$	$4\pi-\varphi$	$\hat{D}_y(\pi)^\dagger$	$-\vec{r}_3$	$-\vec{r}_2$	$-\vec{r}_1$
($\hat{\imath}$ ˆC_1)†	$2\pi-\varphi$	$\hat{D}_y(\pi)^\dagger$	$\vec{r}_3$	$\vec{r}_2$	$\vec{r}_1$
$\hat{C}_2^\dagger$	$\frac{10\pi}{3}-\varphi$	$\hat{D}_x(\pi)^\dagger$	$-\vec{r}_2$	$-\vec{r}_1$	$-\vec{r}_3$
($\hat{\imath}$ ˆC_2)†	$\frac{4\pi}{3}-\varphi$	$\hat{D}_x(\pi)^\dagger$	$\vec{r}_2$	$\vec{r}_1$	$\vec{r}_3$
$\hat{C}_3^\dagger$	$\frac{8\pi}{3}-\varphi$	$\hat{D}_y(\pi)^\dagger$	$-\vec{r}_1$	$-\vec{r}_3$	$-\vec{r}_2$
($\hat{\imath}$ ˆC_3)†	$\frac{2\pi}{3}-\varphi$	$\hat{D}_y(\pi)^\dagger$	$\vec{r}_1$	$\vec{r}_3$	$\vec{r}_2$
$\hat{C}_4^\dagger$	$\varphi+\frac{2\pi}{3}$	$\hat{D}_z(\pi)^\dagger$	$\vec{r}_1$	$\vec{r}_2$	$\vec{r}_3$
($\hat{\imath}$ ˆC_4)†	$\varphi+\frac{8\pi}{3}$	$\hat{D}_z(\pi)^\dagger$	$-\vec{r}_1$	$-\vec{r}_2$	$-\vec{r}_3$
$\hat{C}_5^\dagger$	$\varphi+\frac{4\pi}{3}$		$\vec{r}_2$	$\vec{r}_3$	$\vec{r}_1$
($\hat{\imath}$ ˆC_5)†	$\varphi+\frac{10\pi}{3}$		$-\vec{r}_2$	$-\vec{r}_3$	$-\vec{r}_1$

表 IV. 置换算符 ˆ$C_n^\dagger$ 与其对应的粒子间坐标。

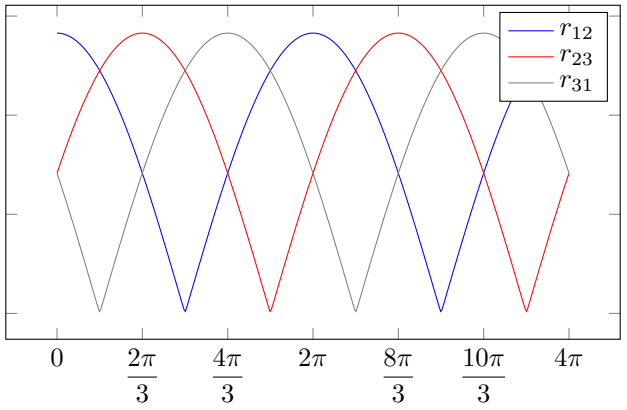

图2. 式（27）中定义的原子间距离在此绘制为 φ 关于 $\theta = \pi/2$的函数。

采用式 (27) 中给出的原子标记，并将 φ 的范围限制为 $[0, \pi/3]$，我们实际上选取了满足 $r_{31} \le r_{23} \le r_{12}$ [3] 的构型，见图2。显然，这个态并不对称。对该态应用对称化算子 ˆ$S^\dagger$ 不会在 φ 中形成连续覆盖，这一点从表 IV 中的变换可以明显看出，

[3] 限制范围 $\varphi \in [2\pi, 7\pi/3]$ 会选出相同的原子对，但所有坐标都反转了。

然而，对定义在 $[0,\pi/3]$ 上的 $|\varphi\rangle$ 应用组合 $\hat{S}(1+\hat{\imath})$，将得到定义在定义域 $\tilde{\varphi}\in[0,4\pi]$上的对称化态，如图3所示。因此，所得态不仅关于粒子置换对称，也关于宇称对称。

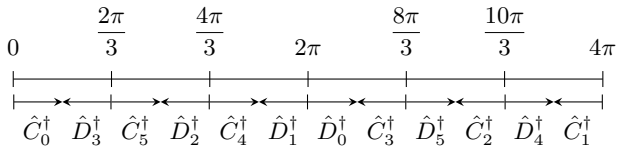

图3. 应用 $\hat{S}^\dagger(1+\hat{\imath})$ 后所覆盖的 $\tilde{\varphi}$定义域示意图：$\varphi\in[0,\pi/3]$。算子 $\hat{D}_n^\dagger=(\hat{\imath}\hat{C}_n)^\dagger$。

在 $\varphi\in[0,\pi/3]$ 上求解薛定谔方程将得到一个态

$$|\psi\rangle=|\phi\rangle\otimes|\xi\rangle\,, \tag{47}$$

它由空间部分 $|\phi\rangle$ 和自旋部分 $|\xi\rangle$ 组成。$\hat{}$ 对称化算子随后写作 $S=\hat{}\,\hat{S}_\phi\otimes S_\xi$。由于反演算符仅作用于空间部分，因此 $S(1+\hat{\imath})$ 对方程（47）的作用为

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\,\hat{S}(1+\hat{\imath})\,|\psi\rangle=\langle\varphi|\,\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})\,|\phi\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|\xi\rangle=\\ \frac{1}{N!}\sum_{i=0}^{5}\Big[\,\langle\varphi|\,\hat{C}_n(1+\hat{\imath})\,|\phi\rangle\otimes\hat{C}_n\,|\xi\rangle\,\Big].\end{aligned} \tag{48}$$

我们将闭合通道空间部分定义为 $\langle\varphi|31\rangle=\phi_{31}(\varphi)$ 等，并将未对称化态 $|\psi\rangle$ 写作

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle=\phi_o(\varphi)\,|ooo\rangle+\phi_{31}(\varphi)\,|coc\rangle\\ +\phi_{23}(\varphi)\,|occ\rangle+\phi_{12}(\varphi)\,|cco\rangle\,.\end{aligned} \tag{49}$$

这里，ϕ_o 完全对称，但 $\phi_{31}\neq\phi_{23}$ 和$\phi_{23}\neq\phi_{12}$则不然，因为我们选取了这样一种构型：粒子对 $\{3,1\}$ 最有可能形成分子。

根据 $\varphi\in[0,\pi/3]$上的这个解，我们可以利用$\hat{S}(1+\hat{\imath})$作用后得到的各部分，构造出 $\tilde{\varphi}\in[0,4\pi]$ 上的一般解。因此，对称波函数可表示为

$$\begin{aligned}\langle\tilde{\varphi}|\psi_S\rangle=\langle\varphi|\,\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})\,|\phi\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|\xi\rangle=\\ \langle\varphi|\hat{S}(1+\hat{\imath})|\phi_o\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|ooo\rangle+\\ \langle\varphi|\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})|31\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|coc\rangle+\\ \langle\varphi|\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})|23\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|occ\rangle+\\ \langle\varphi|\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})|12\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|cco\rangle\,.\end{aligned} \tag{50}$$

在该方程的自旋部分中，使用未取共轭的算符。然而，处理空间部分时，我们将变换作用于 φ，因此此处使用相应的共轭算符。

我们首先让算子作用于每个自旋右矢。对于三个不同的闭合通道部分，我们得到

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})|31\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|coc\rangle=\\ \frac{1}{N!}\Big[\,\langle\varphi|(\hat{C}_0+\hat{C}_3)(1+\hat{\imath})|31\rangle\otimes|coc\rangle+\\ \langle\varphi|(\hat{C}_1+\hat{C}_4)(1+\hat{\imath})|31\rangle\otimes|occ\rangle+\\ \langle\varphi|(\hat{C}_2+\hat{C}_5)(1+\hat{\imath})|31\rangle\otimes|cco\rangle\,\Big],\end{aligned} \tag{51}$$

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})[|23\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|occ\rangle]=\\ \frac{1}{N!}\Big[\,\langle\varphi|(\hat{C}_0+\hat{C}_2)(1+\hat{\imath})|23\rangle\otimes|occ\rangle+\\ \langle\varphi|(\hat{C}_3+\hat{C}_4)(1+\hat{\imath})|23\rangle\otimes|cco\rangle+\\ \langle\varphi|(\hat{C}_1+\hat{C}_5)(1+\hat{\imath})|23\rangle\otimes|coc\rangle\,\Big]\end{aligned} \tag{52}$$

and

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\hat{S}_\phi(1+\hat{\imath})[|12\rangle\otimes\hat{S}_\xi\,|cco\rangle]=\\ \frac{1}{N!}\Big[\,\langle\varphi|(\hat{C}_0+\hat{C}_1)(1+\hat{\imath})|12\rangle\otimes|cco\rangle+\\ \langle\varphi|(\hat{C}_3+\hat{C}_5)(1+\hat{\imath})|12\rangle\otimes|occ\rangle+\\ \langle\varphi|(\hat{C}_2+\hat{C}_4)(1+\hat{\imath})|12\rangle\otimes|coc\rangle\,\Big].\end{aligned} \tag{53}$$

将不同的闭合通道合并，并用其共轭量改写，得到

$$
\begin{aligned}
\langle\tilde{\varphi}|\psi_S\rangle = \frac{1}{N!}\Big\{ & \langle\varphi|\phi_o\rangle\otimes|ooo\rangle + \\
& \Big[\langle\varphi|(\hat{C}_2^\dagger+\hat{C}_5^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|12\rangle + \langle\varphi|(\hat{C}_1^\dagger+\hat{C}_4^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|23\rangle + \langle\varphi|(\hat{C}_0^\dagger+\hat{C}_3^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|31\rangle\Big]\otimes|coc\rangle + \\
& \Big[\langle\varphi|(\hat{C}_3^\dagger+\hat{C}_4^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|12\rangle + \langle\varphi|(\hat{C}_0^\dagger+\hat{C}_2^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|23\rangle + \langle\varphi|(\hat{C}_1^\dagger+\hat{C}_5^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|31\rangle\Big]\otimes|occ\rangle + \\
& \Big[\langle\varphi|(\hat{C}_0^\dagger+\hat{C}_1^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|12\rangle + \langle\varphi|(\hat{C}_3^\dagger+\hat{C}_5^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|23\rangle + \langle\varphi|(\hat{C}_2^\dagger+\hat{C}_4^\dagger)(1+\hat{\imath}^\dagger)|31\rangle\Big]\otimes|cco\rangle\Big\},
\end{aligned}
\tag{54}
$$

由此得到

$$
\begin{aligned}
\langle\tilde{\varphi}|\psi_S\rangle = \frac{1}{N!}\Big\{ & \langle\varphi|\phi_o\rangle\otimes|ooo\rangle + \\
& \Big[\Big(\langle\frac{10\pi}{3}-\varphi| + \langle\frac{4\pi}{3}-\varphi| + \langle\varphi+\frac{4\pi}{3}| + \langle\varphi+\frac{10\pi}{3}|\Big)|12\rangle + \Big(\langle 4\pi-\varphi| + \langle 2\pi-\varphi| + \langle\varphi+\frac{2\pi}{3}| + \langle\varphi+\frac{8\pi}{3}|\Big)|23\rangle + \\
& \Big(\langle\varphi| + \langle\varphi+2\pi| + \langle\frac{8\pi}{3}-\varphi| + \langle\frac{2\pi}{3}-\varphi|\Big)|31\rangle\Big]\otimes|coc\rangle + \\
& \Big[\Big(\langle\frac{8\pi}{3}-\varphi| + \langle\frac{2\pi}{3}-\varphi| + \langle\varphi+\frac{2\pi}{3}| + \langle\varphi+\frac{8\pi}{3}|\Big)|12\rangle + \Big(\langle\varphi| + \langle\varphi+2\pi| + \langle\frac{10\pi}{3}-\varphi| + \langle\frac{4\pi}{3}-\varphi|\Big)|23\rangle + \\
& \Big(\langle 4\pi-\varphi| + \langle 2\pi-\varphi| + \langle\varphi+\frac{4\pi}{3}| + \langle\varphi+\frac{10\pi}{3}|\Big)|31\rangle\Big]\otimes|occ\rangle + \\
& \Big[\Big(\langle\varphi| + \langle\varphi+2\pi| + \langle 4\pi-\varphi| + \langle 2\pi-\varphi|\Big)|12\rangle + \Big(\langle\frac{8\pi}{3}-\varphi| + \langle\frac{2\pi}{3}-\varphi| + \langle\varphi+\frac{10\pi}{3}| + \langle\varphi+\frac{4\pi}{3}|\Big)|23\rangle + \\
& \Big(\langle\frac{10\pi}{3}-\varphi| + \langle\frac{4\pi}{3}-\varphi| + \langle\varphi+\frac{2\pi}{3}| + \langle\varphi+\frac{8\pi}{3}|\Big)|31\rangle\Big]\otimes|cco\rangle\Big\}.
\end{aligned}
\tag{55}
$$

公式（55）中闭合通道部分的图示见图4。如前所述，振幅大小的顺序为 $\phi_{31}\geq\phi_{23}\geq\phi_{12}$。这里，蓝色方框圈出了 $\varphi=\tilde{\varphi}\in[0,\frac{\pi}{3}]$ 的区域，因此波函数的闭合通道部分为 $\phi_{31}|coc\rangle+\phi_{23}|occ\rangle+\phi_{12}|cco\rangle$。图4(a)中的红色方框展示了这些函数如何随着 $\tilde{\varphi}$ 从 $\pi/3\to4\pi/3$ 增大而从 $\phi_{31}\to\phi_{23}\to\phi_{12}$ 演变。这种行为也可以在图2中追踪到，其中最短的原子间距对应振幅最大的自旋通道，即 ϕ_{31}。通过考察图2中 $[\frac{\pi}{3},\frac{4\pi}{3}]$ 范围内的距离，我们可以推断，通道 $|coc\rangle$ 的振幅将为 ϕ_{31}（当 $\tilde{\varphi}\in[\frac{\pi}{3},\frac{2\pi}{3}]$ 时），而 $|cco\rangle$ 的振幅将为 ϕ_{31}（当 $\tilde{\varphi}\in[\frac{2\pi}{3},\frac{4\pi}{3}]$ 时）。我们使用图4(a)中 $|coc\rangle$ 通道的图形，并将空间部分写成分段定义函数

$$
\Phi_C(\tilde{\varphi})\equiv\begin{cases}\phi_{31}(\tilde{\varphi}), & \text{if } \tilde{\varphi}\in[0,\frac{\pi}{3}],\\ \phi_{31}(\frac{2\pi}{3}-\tilde{\varphi}), & \text{if } \tilde{\varphi}\in[\frac{\pi}{3},\frac{2\pi}{3}],\\ \phi_{23}(\tilde{\varphi}-\frac{2\pi}{3}), & \text{if } \tilde{\varphi}\in[\frac{2\pi}{3},\pi],\\ \phi_{12}(\frac{4\pi}{3}-\tilde{\varphi}), & \text{if } \tilde{\varphi}\in[\pi,\frac{4\pi}{3}],\\ \phi_{12}(\tilde{\varphi}-\frac{4\pi}{3}), & \text{if } \tilde{\varphi}\in[\frac{4\pi}{3},\frac{5\pi}{3}],\\ \phi_{23}(2\pi-\tilde{\varphi}), & \text{if } \tilde{\varphi}\in[\frac{5\pi}{3},2\pi].\end{cases}
\tag{56}
$$

这样，空间部分便可用我们最初定义在 $\varphi\in[0,\frac{\pi}{3}]$ 上的通道函数 $\phi_{12}(\varphi)$、$\phi_{23}(\varphi)$ 和 $\phi_{31}(\varphi)$ 表示。

利用 Φ_C，闭合通道项可以通过图 4(a) 的平移版本更紧凑地表示：

$$
\Phi_C(\tilde{\varphi})\,|coc\rangle+\Phi_C(\tilde{\varphi}+4\pi/3)\,|occ\rangle+\Phi_C(\tilde{\varphi}+2\pi/3)\,|cco\rangle\,.
\tag{57}
$$

最后，为了确定适当的边界条件，我们可以考察范围 $\tilde{\varphi}\in[\frac{\pi}{3},\frac{4\pi}{3}]$ 内的 $|coc\rangle$ 通道，因为这是第一个包含所有子函数 ϕ_{31}、ϕ_{23} 和 ϕ_{12} 的、长度为 π 的区间。

对于 ϕ_o，边界条件与单通道问题中的相同，见式（35）。然而，对于闭合通道子函数，情况有所不同。在 $\tilde{\varphi}\in[\frac{\pi}{3},\frac{4\pi}{3}]$ 的端点处，我们应有 $\Phi_C'(\tilde{\varphi})=0$，且 Φ_C 应在 $\tilde{\varphi}=\frac{2\pi}{3}$ 和 $\tilde{\varphi}=\pi$ 处光滑。这对应于以下边界条件

$$
\text{at } \varphi=0:\begin{cases}\phi_o'(0)=0,\\ \phi_{12}'(0)=0,\\ \phi_{31}(0)=\phi_{23}(0),\\ \phi_{31}'(0)=\phi_{23}'(0),\end{cases}
\tag{58}
$$

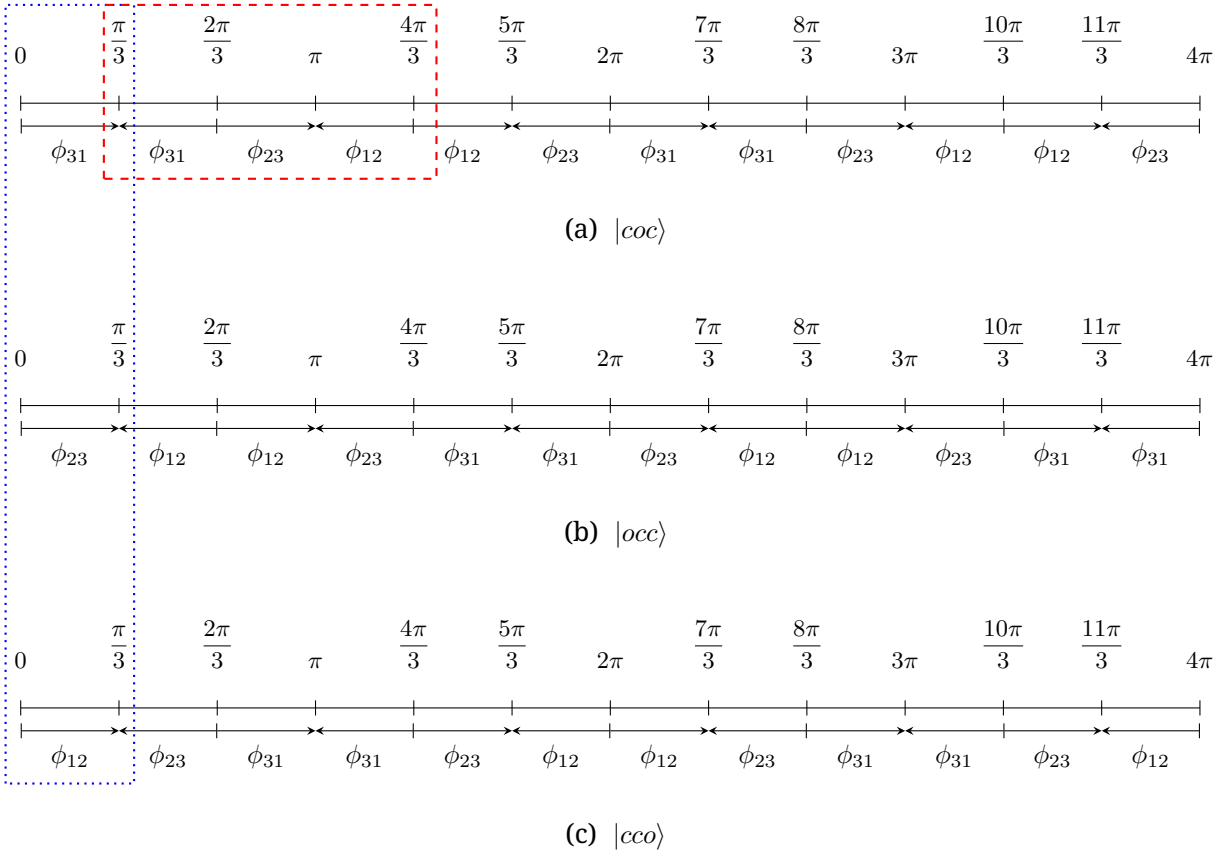

图4. 公式（55）中闭合通道部分的示意图。蓝色方框圈出了 $\varphi = \tilde{\varphi} \in [0, \frac{\pi}{3}]$ 的区域，此时波函数的闭合通道部分为 $-\phi_{31}|coc\rangle + \phi_{23}|occ\rangle + \phi_{12}|cco\rangle$。(a) 中的红色方框示意了当 $\tilde{\varphi}$ 从 $\pi/3 \to 4\pi/3$ 变化时，这些函数如何演化。

$$\text{at } \varphi = \frac{\pi}{3} : \begin{cases} \phi_o'(\frac{\pi}{3}) = 0 \\ \phi_{31}'(\frac{\pi}{3}) = 0 \\ \phi_{23}(\frac{\pi}{3}) = \phi_{12}(\frac{\pi}{3}), \\ \phi_{23}'(\frac{\pi}{3}) = \phi_{12}'(\frac{\pi}{3}). \end{cases} \tag{59}$$

C. 四态哈密顿量与数值实现

当我们将闭合通道中包含原子的三个通道纳入考虑时，哈密顿量矩阵的维数会增至原来的四倍。因此，四态哈密顿量可表示为

$$\hat{\mathrm{H}} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathrm{bg}} & W_{31} & W_{23} & W_{12} \\ W_{31} & \hat{H}_{\mathrm{c}_{31}} & 0 & 0 \\ W_{23} & 0 & \hat{H}_{\mathrm{c}_{23}} & 0 \\ W_{12} & 0 & 0 & \hat{H}_{\mathrm{c}_{12}} \end{pmatrix}. \tag{60}$$

这里，开放通道哈密顿量为

$$\hat{H}_{\mathrm{bg}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \hbar^2\frac{\Lambda^2 + 15/4}{2\mu\rho^2} + V_{\mathrm{bg}}, \tag{61}$$

其中 $V_{\mathrm{bg}} = v_{\mathrm{bg}}(r_{12}) + v_{\mathrm{bg}}(r_{23}) + v_{\mathrm{bg}}(r_{31})$ 是背景势，闭合通道哈密顿量为

$$\hat{H}_{\mathrm{c}_{ij}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \hbar^2\frac{\Lambda^2 + 15/4}{2\mu\rho^2} + v_c(r_{ij}), \tag{62}$$

其中，$v_c(r_{ij}; B)$ 是原子对 ij 的闭合通道势。函数 W_{ij} 将闭合的 ij 通道与开放通道耦合起来。请注意，我们只考虑原子之间的两两相互作用；通常认为这足以捕捉埃菲莫夫物理的基本特征。要真实地表示三原子系统，不仅需要比模型公式（4）复杂得多的势，还需要纳入非加性短程三体力 [59]。由于我们的模型势本身并不具有真实的短程形式，因此没有必要增加这种复杂性。闭合通道中束缚的一对原子与开放通道中的第三个原子之间的相互作用也是如此。对这种原子-分子相互作用作任何真实表示，都不会等同于两个公式（4）形式的势之和。

在式（60）中，行和列分别对应于

通道 $|ooo\rangle$、$|coc\rangle$、$|occ\rangle$ 和 $|cco\rangle$，同样，其本征函数的形式为

$$\begin{pmatrix} \phi_o(\theta,\varphi)\,|ooo\rangle \\ \phi_{31}(\theta,\varphi)\,|coc\rangle \\ \phi_{23}(\theta,\varphi)\,|occ\rangle \\ \phi_{12}(\theta,\varphi)\,|cco\rangle \end{pmatrix}. \tag{63}$$

在我们的数值实现中，我们将所有通道函数 ϕ_α 展开到同一组基函数中。使用 B 样条基底 $B_{i,\ k}$可以特别简单地实现边界条件。因此，通道函数 ϕ_α 展开为

$$\phi_\alpha(\theta,\varphi) = \sum_{i=1}^{N_\varphi}\sum_{j=1}^{N_\theta} c_{ij}^{\alpha} B_{i,k}(\varphi) B_{j,k}(\theta), \tag{64}$$

其中 $\alpha = o$，31，23 或 12。B 样条具有以下有用性质

$$\begin{aligned} &B_{1,k}(0) = 1, && B_{i>1,k}(0) = 0, \\ &B_{N_\varphi,k}(\pi/3) = 1, && B_{i<N_\varphi,k}(\pi/3) = 0, \\ &B'_{1,k}(0) = -B'_{2,k}(0), \\ &B'_{N_\varphi,k}(\pi/3) = -B'_{N_\varphi-1,k}(\pi/3). \end{aligned}$$

随后可以通过设置以下条件来满足式 (58) 和 (59) 中的边界条件（对所有 j）

$$\begin{aligned} &c^{o}_{1,j} = c^{o}_{2,j}, && c^{12}_{1,j} = c^{12}_{2,j}, \\ &c^{31}_{1,j} = c^{23}_{1,j}, && c^{31}_{2,j} = c^{23}_{2,j}, \\ &c^{12}_{N_\varphi,j} = c^{23}_{N_\varphi,j}, && c^{12}_{N_\varphi-1,j} = c^{23}_{N_\varphi-1,j}, \\ &c^{o}_{N_\varphi,j} = c^{o}_{N_\varphi-1,j}, && c^{31}_{N_\varphi,j} = c^{31}_{N_\varphi-1,j}. \end{aligned}$$

因此，边界条件将 φ 中基函数的求和项数从 N_φ 项减少到 $N_\varphi - 2$ 项，同时将边界条件纳入基函数中。代价是，当式 (60) 中的哈密顿量用这一缩减后的基底表示时，它将不再具有简单的分块对角形式。例如，系数为 $c^{31}_{1,\ j}$ 的基函数，不仅会与乘以系数 $c^{31}_{i>1,\ j}$ 的函数重叠，还会与具有 $c^{23}_{i,\ j}$类型系数的函数重叠。

IV. 结果与讨论

本节主要讨论三体绝热势中发现的特征，这些特征会影响有效势中排斥壁的位置，而该有效势是产生Efimov效应的原因。在采用多种不同二体相互作用的单通道模型中，排斥壁出现在一个看似普适的位置 $\rho \approx 2r_{\mathrm{vdW}}$ [24]，这一现象被用来解释实验观察到的第一条Efimov共振从三体连续态中出现的位置所具有的普适性。起初，人们认为Efimov共振与三体连续态耦合时的散射长度（a_-）仅在具有 $s_{\mathrm{res}} > 1$ 的开放通道主导共振中才具有普适性。然而，实验表明，这种普适性在中等共振区间仍然存在，此时 $s_{\mathrm{res}} \simeq 0.1$ [36]。更弱的共振—— ^{7}Li $-^{133}$ Cs中的异核共振，具有 $s_{\mathrm{res}} = 0.05$ ——则明显偏离了这种普适性；其零能Efimov态的散射长度大于范德瓦耳斯普适性所预测的数值，这表明随着 s_{res} [37] 减小，a_- 呈增大趋势。虽然计算 a_- 不在本文的讨论范围内，但考察Efimov势的形式仍然很有意思，因为排斥壁的起始位置和势阱深度与这一参数相关。

为将我们的工作置于先前理论发现的背景中，我们首先简要回顾这种普适性如何在单通道模型中体现，并讨论其物理基础。随后，我们介绍多通道模型中的发现，并说明将 Feshbach 共振调至闭通道主导区间如何影响绝热势之间的耦合，进而改变导致 Efimov 效应的有效势。我们表明，这些发现与实验观察到的趋势以及近期基于另一类双通道Feshbach模型的数值结果所作的理论预测一致 [34]。

A. 前言

Wang 等人发现，使用基于具有吸引性范德瓦耳斯尾部的二体相互作用的单通道模型，得到了超径向三体势中普适位置的排斥势垒 [24]。他们认为，实验观测到的 a_- 普适性，即三体参数出乎意料的普适性，是由三体有效势中的这种普适排斥所致。该排斥位于中间超径向区域的 $\rho \approx 2r_{\mathrm{vdW}}$ 处，阻止三体态探入短程区域，即 $\rho < r_{\mathrm{vdW}}$，在那里原本会发生物种特异性相互作用。这使得任何三体可观测量实际上都不受二体相互作用细节的影响。排斥出现在特定距离这一事实表明，对于由范德华力主导的原子碰撞，三体参数的普适性可能有其成因。

普适三体排斥可由二体层面出现的一种效应解释：当任意一对原子之间的距离短于范德瓦耳斯吸引的特征长度时，找到这对原子的概率会受到抑制；也就是说，间距短于 r_{vdW}时便会受到抑制。原子间距接近 r_{vdW} 时出现的集体对抑制，会在 ρ 减小到某个临界值以下时，迫使该态呈现等边三角形形状。 [60] 研究了这种由二体抑制驱动的形变如何导致动能突然非绝热增加。在形变开始时，方程（33）中的非绝热对角项会变大。这会在有效三体势中形成排斥势垒；如果相对于 r_{vdW} 而言，对抑制足够强且具有普适性，那么按 r_{vdW} 缩放时，该势垒将在大致固定的超半径处出现。

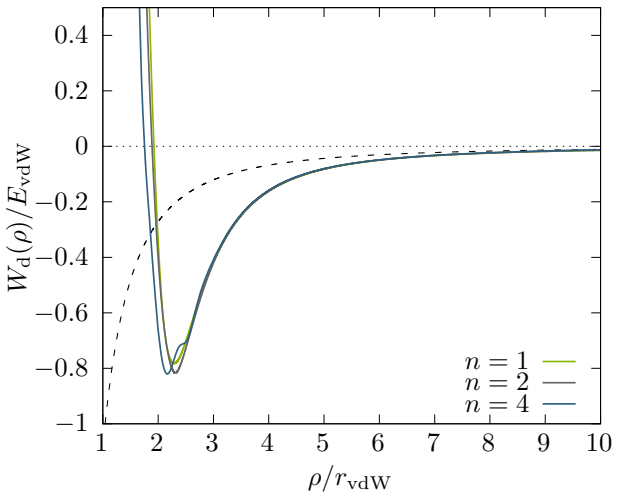

图 5. 使用单通道计算得到的埃菲莫夫型有效势，该计算采用双体 Lennard–Jones 6-10 模型，包含 $n = 1$，2 个及 4 s-波态，并且 $a = \pm\infty$。

图 5 展示了三体有效势 W_{d} ，这些势由单通道模型获得，采用方程 (4) 中给出的 Lennard–Jones势，并将 C_{10} 调谐至包含 $n = 1$、2 个或 4 s 波束缚态，以及 $a = \pm\infty$。这些势按照 [24]中的方法，通过避免交叉进行了绝热态转换。值得注意的是，这里使用仅含少数 s 波束缚态的模型得到的势，与 [24, 60], 中的势非常相似，在零能交叉的位置（即排斥壁或势垒）、势阱最低点的能量以及长程吸引尾部方面均如此。对相关二体势阱内的对振幅抑制进行分析后发现，$n = 1$ 与 $n = 8$ s 波束缚态的结果实际上相同；对于仅含一个束缚态的势 $r < r_{\mathrm{vdW}}$ ，分析也证实存在显著的二体抑制。因此，我们得出结论：在二体层面，具有一个 s 波束缚态时的对抑制，足以（至少近似地）重现具有范德瓦耳斯普适性的单通道普适埃菲莫夫势。

有效势 W_ν 相较于绝热势 U_ν 是一种改进的近似。对于许多绝热态，两者的差异相对较小；但在接近阈值时，这两种近似呈现出定性上不同的特征。事实上，范德瓦耳斯普适性只出现在 W_0 中。不过需要强调的是，在这两种近似中，超角波函数 $\Phi_\nu(\rho;\Omega)$ 都相同，即式（28）中的超角哈密顿量的本征函数。区别在于， U_ν 是相应的本征值，而有效势 W_ν 是完整哈密顿量（包括超径向动能）的期望值。因此，与超角构型相关的性质，以及与四个 Feshbach 通道相关的性质，均保持不变。如下文所示，加入修正项会使能量景观变得非常复杂。因此，我们认为，先讨论与绝热态相关的特征，再探讨这对有效势的影响，是很有帮助的。

B. 四态模型结果

这里展示的结果涉及三体绝热势 U_ν 以及通过在不同超球半径下，采用 B 样条基组（ θ 和φ中通常各有 90 个）对绝热四态哈密顿量进行对角化而得到的有效势 W_ν ，由此构成一个 26896×26896 维哈密顿量。我们采用一种记号约定，其中 ν 的符号表示三个原子的渐近构型。负号对应于一个原子-

二聚体通道、一个正号、一个三体连续谱通道，而 $\nu = 0$ 是收敛于式（34）所示普适 Efimov 吸引的通道。

Feshbach 模型的构建旨在模拟在 ^{23}Na 中发现的两个共振，它们分别出现在约 90.7 毫特斯拉和 85.3 毫特斯拉处。这两个共振的物理性质以及双体模型所用的参数已在 [38], 中得到充分表征，并列于表 V 的前两行。较宽的共振属于中等强度共振，其 $s_{\mathrm{res}} = 0.09$；而较窄的共振较弱，其 $s_{\mathrm{res}} = 0.0002$。我们将它们分别称为中等强度共振和窄共振。

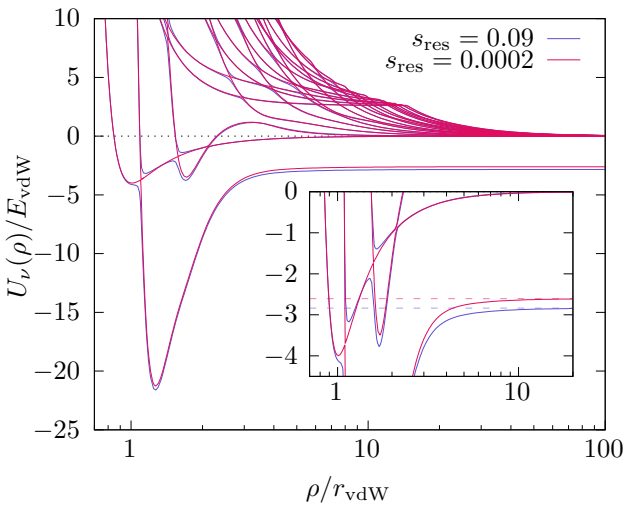

图 6. 中间共振（$s_{\rm res} = 0.09$）和窄共振（$s_{\rm res}$ =0.0002）下最低的 20 条三体绝热势曲线U_ν 。插图中的虚线表示对应的缀饰态二体能量。

1. 三体绝热势

图 6 展示了中等强度共振（蓝色）和窄共振（红色）的最低 20 条三体绝热势曲线 U_ν 。对于这两种势，磁场均设为 B_0^*，即 $a \to \pm\infty$。乍看之下，这些曲线十分相似。可以看到，最低的势曲线 U_{-1} 收敛于相应缀饰二聚体的能量：中等强度共振对应 $-2.8E_{\rm vdW}$ ，窄共振对应 $-2.6E_{\rm vdW}$ （图中放大插图里的水平虚线标出了这些能量）。这两种共振的最低绝热势在区域 $\rho \sim r_{\rm vdW}$ 内差异更为显著。在该区域，窄共振背景下得到的势有三个非常尖锐的避免交叉；而对于中等强度共振，除约在 $2r_{\rm rvdW}$ 处的一个之外，其余避免交叉都平缓得多。

为了考察这些势的埃菲莫夫长程特征，更实用的做法是将这些势改写为

$$\lambda_\nu(\rho) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\rho^2 U_\nu(\rho) + \frac{1}{4}. \tag{65}$$

对于共振二体相互作用（$a = \pm\infty$），随后可以将导致埃菲莫夫效应的通道识别为在所谓的无标度区域 $\rho \gg r_{\rm c}$ 中收敛至 $-s_0^2 \approx -1.0125$ 的通道（对于有限的 a，该区域满足 $|a| \gg \rho \gg r_{\rm c}$）。这里， $r_{\rm c}$ 是二体相互作用的特征长度；对于内禀长度为 $r^* < r_{\rm vdW}$ （见式（21））的开放通道主导共振，该长度为 $r_{\rm vdW}$ ；而对于闭合通道主导的共振，

对于 $r^* \gg r_{\rm vdW}$ ，相关共振的表达式为 r^*。

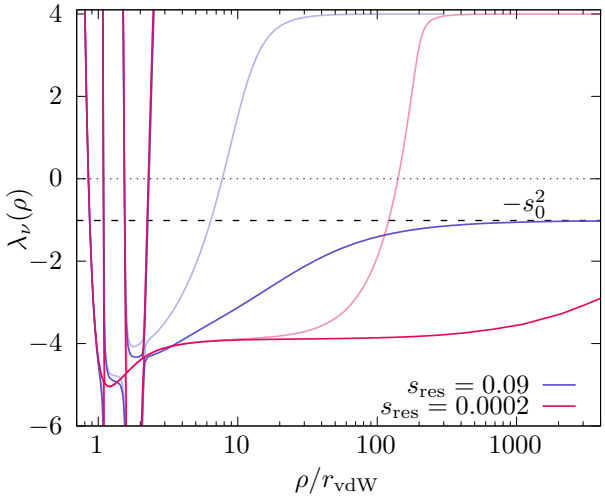

图 7. 宽共振和窄共振下，三体势 λ_ν （$\nu = -1$ 至 1）随 $\rho/r_{\rm vdW}$ 的变化，其中 $a = \pm\infty$为实色曲线， $a = 0$ 为浅色曲线。

图 7 展示了中等强度共振和窄共振存在共振相互作用时的势 λ_ν （$\nu = -1$ 至 1），以及相应的有效非相互作用原子曲线（$a = 0$）（浅色曲线）。我们的计算范围延伸至 $\rho = 4000r_{\rm vdW}$；超出这一范围后，我们无法获得收敛结果。对于共振二体相互作用，中等强度共振的势 λ_0 显然正收敛至普适的埃菲莫夫势 $-s_0^2$ ，当 $\rho > 300r_{\rm vdW}$时尤为如此。该共振的内禀长度为 $r^* \approx 10r_{\rm vdW}$，因此，这一势的埃菲莫夫特征出现在约为 r^*一个数量级的超径处。由于窄共振的 $r^* \approx 4000r_{\rm vdW}$ ，尚未达到无标度区域，因此这些势不应呈现埃菲莫夫长程形式。由此，我们的发现与 Petrov 在 [50]中提出的预测一致。

当 $a = 0$ 处于较大 ρ 时， λ_0 的行为在分离距离足够大时等同于三个非相互作用原子的行为。三体连续态通道的渐近形式为 $\lambda_\nu \to n(n+4) + 4$ （见公式 (32) 和 (65)）。由于 λ_0 在长程区域趋近于 4，该通道对应于本征值为 $n = 0$ 的最低三体连续态通道。值得注意的是，对于散射长度趋于零的窄共振，原子之间的相互作用一直延伸到 $\rho \approx 100r_{\rm vdW}$。

为了清楚说明，在窄共振极限下，共振区间中的普适长程行为由 r^* 支配，我们在图 8 中绘出了

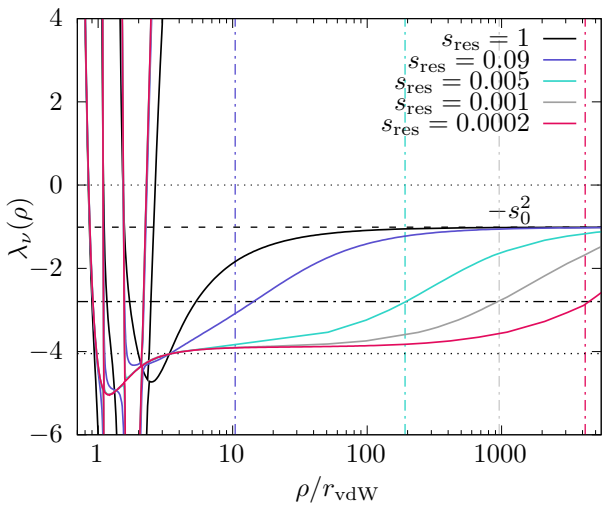

图 8. 共振对应的三体势 λ_ν （$\nu = -1$ 从 1 到 0.0002）。可以看到，对于每个共振， λ_0 在无标度区域内都趋于 $-s_0^2 \approx -1.0125$ （黑色虚线）。竖直点划线标示了同色共振对应的 r^* 值。水平线标示了 $\lambda_0 = -2.8$，这是所有窄共振中 λ_0 （r^*）的近似值。

五种不同共振对应的势 λ_ν，其中 $s_{\rm res}$ 从 1 到 0.0002 不等，且 $a = \pm\infty$。通过简单改变耦合强度，便可从相同的势得到额外的共振（见表 V）。竖线标示了中等强度共振和窄共振的 r^*，其颜色与相应的势曲线相匹配。对于宽共振和中等强度共振，即 $s_{\rm res} = 1 - 0.09$，可以看到，随着各势逐渐接近无标度区域， λ_0 收敛至普适常数 $-s_0^2$。对于三个极窄共振（$s_{\rm res} = 0.005 - 0.0002$）， λ_0 的尾部相对于 r^* 也呈现出类似的收敛趋势：可以看到，在r^*处它们已达到大致相同的高度，此时三条曲线的 ≈ -2.8 （黑色点划线水平线）。对于 $s_{\rm res} = 1$ （$r^* \approx r_{\rm vdW}$），尾部区域的形状显然不同，而中等强度共振的曲线看起来更像窄共振区间中的曲线。

2. 避免交叉与共振强度

鉴于避免交叉的尖锐程度存在差异，我们现在更详细地考察共振强度如何影响不交叉曲线 U_ν之间的能隙。图 9 展示了 $s_{\rm res}$取值从 1 到 0.0002 时得到的三条最低绝热势曲线（(b)–(h)）。作为比较，我们还在 (a) 中给出了具有一个 s波束缚态的单通道三体绝热势曲线（$\nu = -2$ 至 1）。在讨论共振背景效应对绝热势曲线的影响之前，我们先指出所有势能景观共有的两个特征。第一个特征是类似于离心势垒峰的峰结构（这是与一个高能通道形成的宽阔避免交叉），第二个特征是与Efimov效应相关的通道 $\nu = 0$ 和最低三体散射通道 $\nu = 1$之间的尖锐避免交叉（标记为 P_1）。避免交叉 P_1 在单通道能量景观中出现在 $\rho = 1.9 r_{\rm vdW}$ 附近，而在 $s_{\rm res} = 1$ 的双通道能量景观中则位于 $\rho = 2.4 r_{\rm vdW}$ 附近（(b)）。可以看出，P_1 的位置略微依赖于共振强度：随着 $s_{\rm res}$ 减小，它向更小的 ρ 移动（当 $s_{\rm res} = 0.0002$ 时为$\rho = 2.1 r_{\rm vdW}$，见 (h)）。然而，P_1 的能隙并不随共振强度变化。

随着 Feshbach 共振被调至窄共振区间，势能景观随之改变。随着 $s_{\rm res}$ 减小，离心势垒的峰值能量升高，谱中逐渐出现两个新的避免交叉（在 (e) 中标记为 P_{2a} 和 P_{2b} ）。显然，我们的谱中有两类避免交叉：第一类是静态的 P_1，， 不受通道耦合影响；第二类是依赖耦合的 P_2。我们的解释是，避免交叉 P_1 源于第 IV A 节所讨论的三体态的几何形变，而避免交叉 P_{2a} 和 P_{2b} 则发生在属于不同超精细通道的态之间，因此只能通过自旋翻转跃迁相互连接。

非绝热跃迁（即跨越能隙，或沿透热路径运动）发生在避免交叉中心附近[4]。轨迹若穿过避免交叉处尖点顶端[5]，跃迁概率几乎为 1；而当轨迹穿越势能曲线时若经过其中心附近，波函数便会分裂。其中一个波随后沿绝热路径继续运动，另一个波则以一定概率隧穿通过避免交叉，跃迁至另一条绝热势能曲线；该概率可用 Landau–Zener 公式 [61, 62]计算。若避免交叉区域足够小，非绝热跃迁概

[4] 两条势能曲线的透热渐近线相交之处。[5]此时，两条发生避免交叉的势能曲线具有尖锐的尖点，且彼此之间的能隙很小。图 9(h) 中的三个避免交叉均属于这种情况。

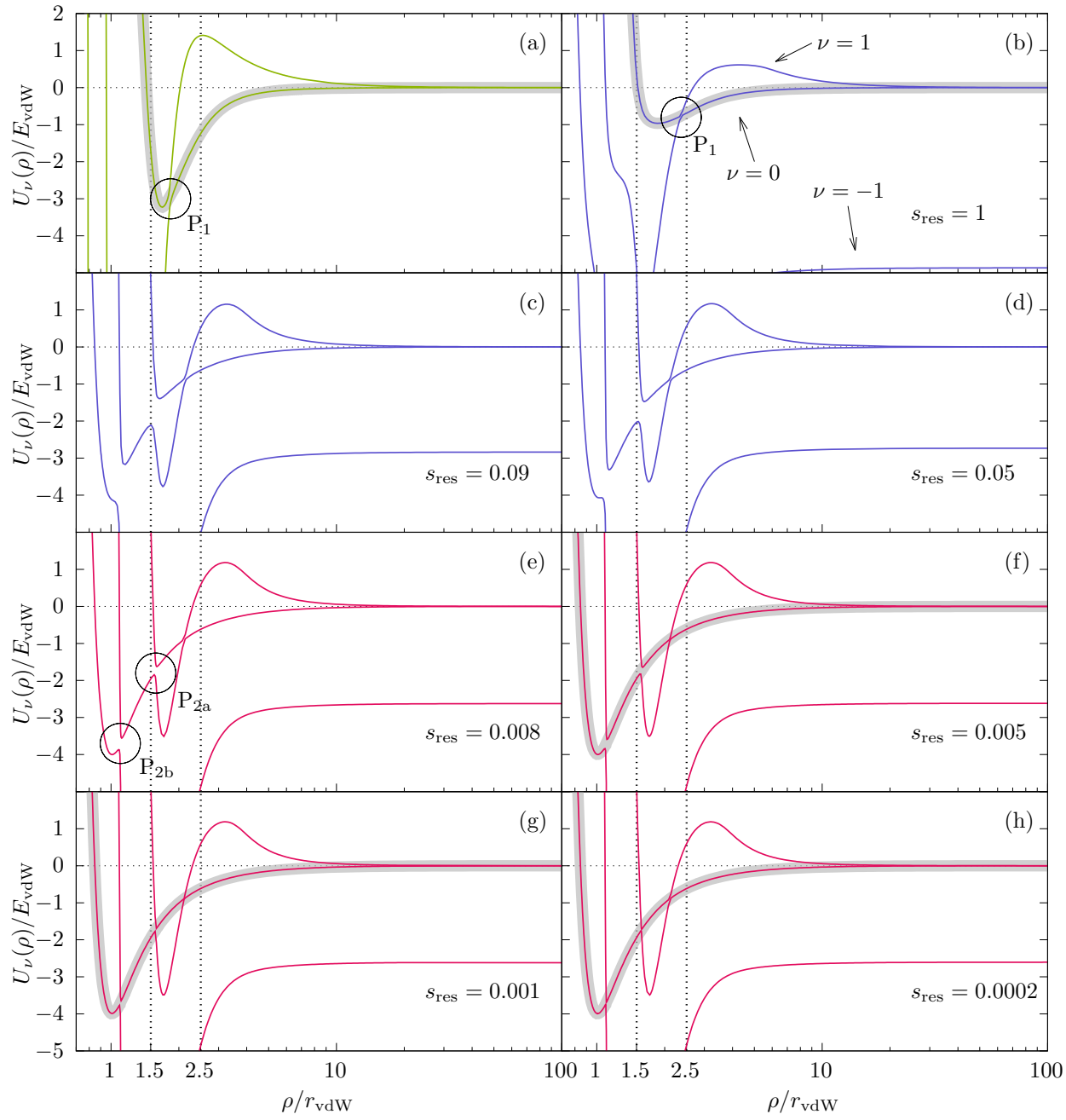

图 9。使用包含一个 $J = 0$ 二体层面（$\nu = -2$ 至 1，以绿色表示）的单通道模型，以及使用具有不同共振强度 $s_{\rm res}$ （$\nu = -1$ 至 1，以蓝色和红色表示）的双通道模型计算得到的 U_ν 三体绝热势曲线 $a \to \pm\infty$ 。

率可表示为

$$P_{\rm LZ} = \exp \frac{-\pi^2}{h} \frac{g^2}{v \delta s}, \tag{66}$$

其中， g 是能隙， v 是局部速度， δs 是穿过中心 [63] 的两条相交透热渐近线的斜率之差。

可能渐近连接到埃菲莫夫势的绝热曲线在图 9 中以灰色标示。在

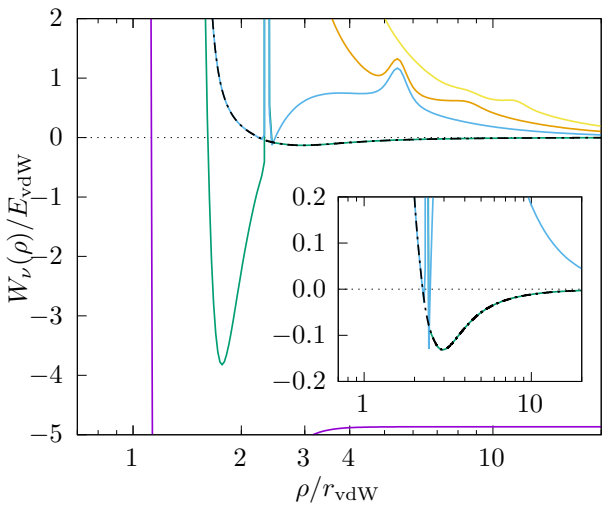

图 10. 对于$s_{\rm res} = 1$的有效势曲线 W_ν ($\nu = -1$ 至 3)，以及绝热化有效势（黑色点划线）。这里的埃菲莫夫绝热势经过一个尖锐的峰值。请注意，纵轴上的能量标度与图 9 相同，而普适的埃菲莫夫吸引势以黑色虚线表示。

3. 三体有效势

为说明在绝热势中加入对角修正的影响，我们在图 10 和图 11 中展示了在宽共振区间极限下以及窄共振情况下得到的三体有效势 W_ν（$\nu = -1$ 至 3），即分别对应 $s_{\rm res} = 1$ 和 $s_{\rm res} = 0.0002$。对于 $s_{\rm res} = 1$，图 10 中可观察到一个尖锐的峰，位于相应绝热曲线的避免交叉 P_1 处。对于 $s_{\rm res} = 0.0002$，图 11 中可见三个尖锐的峰，其最大值分别位于三个避免交叉 P_1, 、P_{2a} 和 P_{2b} 处。这些尖峰是绝热表象造成的伪影。虽然绝热态在避免交叉处的性质不会发生显著变化，但在避免交叉两侧，它们分别与不同的绝热势相关。由于交叉区很窄，绝热态会在短暂的 ρ 区间内从一种绝热态转变为另一种。这反映为 $|Q_{\nu\nu}|$ (33) 的突然增大。图 9 中提出的绝热 Efimov 势以黑色点划线表示。与绝热势相比，有效的绝热势总是向上发生能量位移。加入非绝热修正对与 Efimov 效应相关的势影响最为显著：与单通道模型相比，其吸引势阱变得非常浅。

极窄共振的极限下，通过与耦合趋近于零的极端情形 (h) 比较，可以轻易确定这一点。在相反的极限下，则可通过与熟悉的单通道模型比较，推断出恰当的绝热化。也就是说，对于单通道情形 (a) 和宽共振 (b)，绝热势跨越间隙 P1；如下文所述，这会产生熟悉的范德瓦耳斯普适性。对于极窄共振，似乎也存在普适行为，不过其定性特征有所不同：最自然的绝热化除了跨越 P1 外，还会跨越间隙 P2。中间共振没有容易辨认的绝热化。拓扑上最合理、概率也最高的路径会穿过 P_1，以及 P_{2a} 和 P_{2b}。

此外，(h) 中的 Efimov 势与闭合通道相关，而两条红色曲线与背景势完全相同，即在不存在任何共振耦合时，$V_{\rm bg}$（具有 $a_{\rm bg} = 63a_0$）的超径向势。随着 ρ 变得非常大，Efimov 势逐渐呈现出更多开放通道的特征，这一点可由其尾部趋近于式 (34) 的普适 Efimov 吸引体现出来。

在图12中，我们放大零能阈值附近的区域，展示宽共振区、中间共振区和窄共振区内三种共振对应的绝热交叉埃菲莫夫有效势曲线，并与具有一个 s 波束缚态的单通道势进行比较。对于图中所示的超径向范围，只有最宽共振（$s_{\rm res} = 1$, $r_{\rm c} = r_{\rm vdW}$）对应的势，其尾部位于无标度区域内。可以看到，该势确实在 $\rho \approx 10 r_{\rm vdw}$ 附近趋近于普适 Efimov 吸引（黑色虚线）。还要注意，对于 $s_{\rm res} = 1$，其趋近于普适吸引的范围比单通道势在更小的 ρ 处就已出现。宽共振和中间共振对应的势表现出与 [34]中观察到的类似的、依赖于 $s_{\rm res}$的行为。随着 $s_{\rm res}$ 减小，排斥壁的位置从 $s_{\rm res} = 1$时的 $\rho \approx 2.2 r_{vdW}$ 移向略大的 ρ，而势阱深度则减小。$s_{\rm res} = 0.0002$对应的势与另外两种不同，它有两个极小值和两个排斥区。从较大的 ρ 处向内追踪，可以看到一个浅势阱；随后，势在$\rho \approx 3.2 r_{\rm vdw}$ 处穿过零点，并出现一个类离心势垒峰；之后，势再次变为吸引性，并出现第二个更深的势阱。最后，势再次变为排斥性

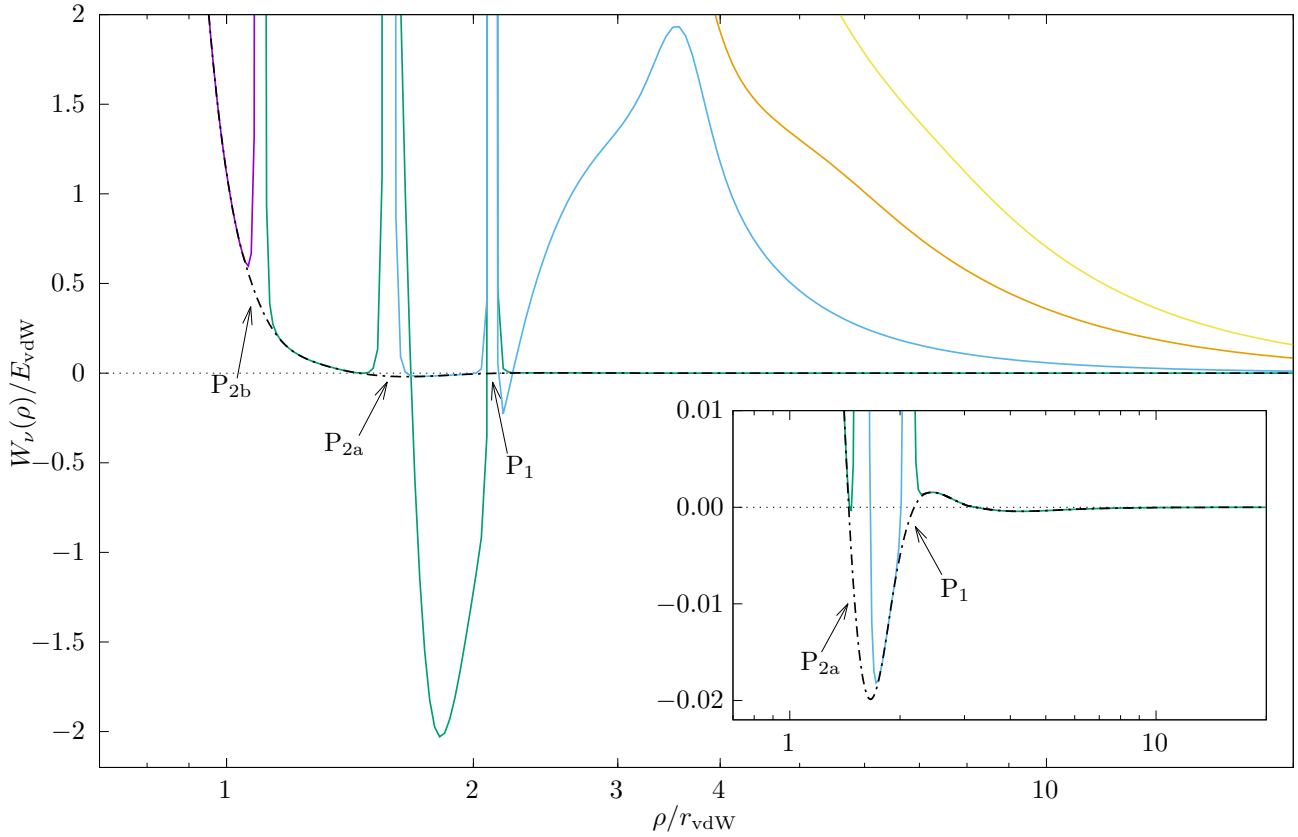

图 11. $s_{\rm res} = 0.0002$ 的有效势曲线 W_ν （$\nu = -1$ 至 3）。此处的埃菲莫夫绝热势呈现三个尖锐峰值。

在 $\rho \approx 1.5 r_{\rm vdw}$处再次变为排斥性。内势阱是通过避免交叉 P_1 和 P_{2a}的连接组合所产生的拓扑结果。由于第一个势阱可能包含埃菲莫夫态，因此将该势的第一段排斥部分与此前讨论的势进行比较是合理的。由此可见，随着 $s_{\rm res}$减小，零点位置的超半径（即排斥壁的位置）略微增大，而势能极小值则降低。

C. 总结

总结我们的结果：我们考察了超越单通道效应对三体势的影响，特别关注共振强度如何影响埃菲莫夫有效势中排斥壁的位置和吸引势阱的深度。我们发现，上述有效势的性质与绝热能量景观中的两类避免交叉有关。第一类在图 9 中标记为 P_1，发生在接近三体形变超半径处，此时埃菲莫夫轨道被迫发生变换 [60]。对于宽共振到中间共振区的共振，与单通道模型中的情况一样，跨越这一避免交叉的能隙会在埃菲莫夫有效势中产生排斥壁。将费什巴赫共振强度从宽共振调节至中间共振区，会使排斥壁向外移动，这与 [34] 中的观察结果一致。在窄共振极限下，势会获得第二个内侧势阱，因此势垒取代了势壁。对于窄共振，排斥势垒形成于避免交叉区域之外，而通过 P_1 和 P_{2a} 进行绝热态去绝热化，会形成内侧势阱以及有效势的第二个零能交叉。

V. 结论

我们开发了一种方法，将 Feshbach共振处物理的多通道特性显式纳入以超球绝热方程表述的三体系统薛定谔方程中。利用这一模型，我们可以研究由有限共振宽度引起的效应。我们的计算重点关注

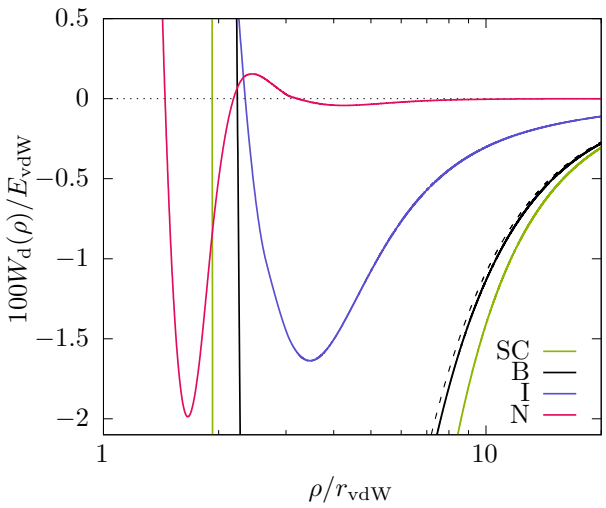

图12. 在宽（$s_{\rm res}=1$）、中间（$s_{\rm res}=0.09$）和窄（$s_{\rm res}=0.0002$）共振区间的绝热交叉埃菲莫夫有效势曲线 $W_{\rm d}$，以及单通道模型中具有一个 s波束缚态时的有效势。黑色虚线表示普适 Efimov 吸引。请注意，对于窄共振，对应于类 Efimov 吸引的是局部极大值外侧非常浅的势阱。

钠 ^{23}中的窄共振至中等强度共振，但该方法也很容易应用于其他系统。

本文分析了埃菲莫夫有效势，发现排斥壁的位置、能量极小值的深度以及尾部收敛性都明显取决于共振强度。随着 $s_{\rm res}$减小，我们观察到与 Efimov 效应相关的势穿过零能时所对应的超半径增大，而势阱深度相应减小。因此，特征性的埃菲莫夫三聚体能谱开始出现的条件被推向极弱束缚能和相应的较大长度尺度，使其难以在实验中探测到。

范德瓦耳斯普适性是埃菲莫夫超球面势中所形成的吸引势阱具有普适形式的结果。这反过来又源于排斥壁的位置与长程趋近于普适埃菲莫夫吸引之间的相互作用：排斥壁总是出现在接近形变超半径的位置，而后者取决于 Feshbach共振的内禀长度。因此显然，由 r^* 控制的势会偏离具有范德瓦耳斯普适性的势所特有的普适中间区域超径向形式。因此，范德瓦耳斯普适性必然会在窄共振极限下失效。

本文中的所有结果均针对无限散射长度，并且仅限于对这些势的研究。我们预计，在有限 a 的情况下，只有当 $|a|\gg r^*$ 和 $|a|\gg r$vdW 时，埃菲莫夫势才可能包含具有正确普适标度的三聚体态。随后，具有普适标度的第一个三聚体态的尺寸必须与无标度区域起始处的 ρ 保持宇称一致，因而与共振内禀长度成正比。由于对于所考察的所有共振，埃菲莫夫势都具有一个位于 $\rho\sim 3-4r_{\rm vdW}$ 区域的能量极小值，因此还可能存在能量更低的三聚体，其基态尺寸由平衡超半径决定；此外，也可能存在不表现出普适几何标度性质的更高能级。这将是未来研究的主题。

致谢

我们衷心感谢瑞典研究理事会（VR）提供的资助，资助项目 2017-03822。

计算工作得以开展，得益于瑞典国家超级计算学术基础设施（NAISS）和瑞典国家计算基础设施（SNIC）在瑞典皇家理工学院 PDC 高性能计算中心以及于默奥大学北部高性能计算中心（HPC2N）提供的资源；相关资源部分由瑞典研究理事会通过资助协议编号 2022-06725 和 2018-05973 提供资助。

表 V. 前两行展示了超冷散射实验中对 ^{23}钠原子 [41] 发现的两个 Feshbach共振的物理性质，以及三体计算中用于模拟这些共振的参数。磁矩之差为 $\delta\mu/\mu_{\rm B}$，其中 $\mu_{\rm B}$ 为玻尔磁子。后几行展示了用于生成具有不同 $s_{\rm res}$ 的 Feshbach共振的输入参数。

物理性质				模型参数		
B_0(毫特斯拉)	ΔB(毫特斯拉)	$s_{\rm res}$	$r^*/r_{\rm vdW}$	B_c(毫特斯拉)	$W_0\times10^6$(原子单位)	$B_0^\dagger$(毫特斯拉)
90.7	0.1	0.09	10.4	90.75620	49.6228	90.71084
85.3	2.5×10^{-4}	0.0002	4170	85.30014	2.48114	85.30003
85.3	1.0905×10^{-3}	0.001	956	85.30061	5.18196	85.30012
85.3	5.4525×10^{-3}	0.005	191	85.30306	11.5872	85.30059
90.7	8.7240×10^{-3}	0.008	119	90.70490	14.6568	90.70089
90.7	1.0905	1	0.956	91.31291	163.868	90.83035

参考文献

[1] V. Efimov, Physics Letters B **33**, 563 (1970).[2] P. Naidon 和 S. Endo, Reports on Progress in Physics**80**, 056001 (2017).[3]S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H. J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, 和 W. Ketterle, 《自然》 **392**, 151 (1998).[4] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, 和 A. Axelsson, Phys. Rev. A **51**, 4852 (1995). [5] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H. C. Nägerl, 和 R. Grimm, 《自然》 **440**, 315 (2006). [6] N. Gross, Z. Shotan, S. Kokkelmans, 和 L. Khaykovich, 《物理评论快报》 **103**, 163202 (2009). [7] S. E. Pollack, D. Dries, 和 R. G. Hulet, 《科学》 **326**, 1683 2009( ).[8] M. Zaccanti, B. Deissler, C. D' Errico, M. Fattori, M. Jona-Lasinio, S. Müller, G. Roati, M. Inguscio, 和 G. Modugno, 《自然·物理》 **5**, 586 (2009). [9] R. Chapurin, X. Xie, M. J. Van de Graaff, J. S. Popo wski, J. P. D'Incao, P. S. Julienne, J. Ye, 和 E. A. Cornell, 《物理评论快报》 **123**, 233402 (2019). [10] X. Xie, M. J. Van de Graaff, R. Chapurin, M. D. Frye, J. M. Hutson, J. P. D' Incao, P. S. Julienne, J. Ye, 和 E. A. Cornell, 《物理评论快报》 **125**, 243401 (2020). [11] R. J. Wild, P. Makotyn, J. M. Pino, E. A. Cornell, 和 D. S. Jin, 《物理评论快报》 **108**, 145305 (2012). [12] G. Barontini, C. Weber, F. Rabatti, J. Catani, G. Thal- hammer, M. Inguscio, 和 F. Minardi, 《物理评论快报》 **103**, 043201 (2009). [13] L. J. Wacker, N. B. Jørgensen, D. Birkmose, N. Winter, M. Mikkelsen, J. Sherson, N. Zinner, 和 J. J. Arlt, 《物理评论快报》 **117**, 163201 (2016). [14] R. S. Bloom, M.-G. Hu, T. D. Cumby, 和 D. S. Jin, 《物理评论快报》 **111**, 105301 (2013). [15] R. A. W. Maier, M. Eisele, E. Tiemann, 和 C. Zimmer- mann, 《物理评论快报》 **115**, 043201 (2015). [16] S.-K. Tung, K. Jiménez-García, J. Johansen, C. V. Parker, 和 C. Chin, 《物理评论快报》 **113**, 240402 (2014).[17]R. Pires, J. Ulmanis, S. Häfner, M. Repp, A. Arias, E. D. Kuhnle 和 M. Weidemüller, 《物理评论快报》 **112**, 250404 (2014).[18]J. R. Williams, E. L. Hazlett, J. H. Huckans, R. W. Stites, Y. Zhang 和 K. M. O'Hara, 《物理评论快报》**103**, 130404 (2009).[19] A. N. Wenz, T. Lompe, T. B. Ottenstein, F. Serwane, G. Zürn 和 S. Jochim, Phys. Rev. A **80**, 040702(R) (2009). [20] T. Lompe, T. B. Ottenstein, F. Serwane, A. N. Wenz, G. Zürn 和 S. Jochim, 《科学》**330**, 940 (2010). [21] B. Huang, K. M. O'Hara, R. Grimm, J. M. Hutson 和 D. S. Petrov, Phys. Rev. A **90**, 043636 (2014). [22] M. Kunitski, S. Zeller, J. Voigtsberger, A. Kalinin, L. P. H. Schmidt, M. Schöffler, A. Czasch, W. Schöllkopf, R. E. Grisenti, T. Jahnke, D. Blume 和 R. Dörner, Sci- ence **348**, 551 (2015). [23] M. Berninger, A. Zenesini, B. Huang, W. Harm, H.-C. Nägerl, F. Ferlaino, R. Grimm, P. S. Julienne 和 J. M. Hutson, Phys. Rev. Lett. **107**, 120401 (2011). [24] J. Wang, J. P. D'Incao, B. D. Esry 和 C. H. Greene, Phys. Rev. Lett. **108**, 263001 (2012). [25] S. Jonsell, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**37**, S245 (2004). [26] N. P. Mehta, S. T. Rittenhouse, J. P. D'Incao 和 C. H. Greene, Phys. Rev. A **78**, 020701(R) (2008). [27] P. K. Sørensen, D. V. Fedorov 和 A. S. Jensen, Few- Body Systems **54**, 579 (2013). [28] P. K. Sørensen, D. V. Fedorov, A. S. Jensen 和 N. T. Zinner, Phys. Rev. A **86**, 052516 (2012). [29] A. O. Gogolin, C. Mora 和 R. Egger, 《物理评论快报》**100**, 140404 (2008). [30] M. Jona-Lasinio 和 L. Pricoupenko, 《物理评论快报》**104**, 023201 (2010). [31] Y. Yudkin 和 L. Khaykovich, Phys. Rev. A **103**, 063303 (2021).[32]Y. Wang 和 P. S. Julienne, 《自然·物理》**10**, 768 (2014).[33] T. Secker, J.-L. Li, P. M. A. Mestrom 和 S. J. J. M. F.

Kokkelmans, Phys. Rev. A **103**, 022825 (2021).[34] J. van de Kraats, D. J. M. Ahmed-Braun, J.-L. Li 和 S. J. J. M. F. Kokkelmans, Phys. Rev. A **107**, 023301 (2023).[35]P. M. A. Mestrom, J. Wang, C. H. Greene 和 J. P. D'Incao, Phys. Rev. A **95**, 032707 (2017).[36]S. Roy, M. Landini, A. Trenkwalder, G. Semeghini, G. Spagnolli, A. Simoni, M. Fattori, M. Inguscio 和 G. Modugno, Phys. Rev. Lett. **111**, 053202 (2013). [37] J. Johansen, B. J. DeSalvo, K. Patel 和 C. Chin, 《自然·物理》**13**, 731 (2017). [38] F. H. Mies, E. Tiesinga 和 P. S. Julienne, Phys. Rev. A **61**, 022721 (2000). [39] N. Nygaard, B. I. Schneider 和 P. S. Julienne, Phys. Rev. A **73**, 042705 (2006). [40] T. Köhler, K. Góral 和 P. S. Julienne, 《现代物理评论》**78**, 1311 (2006). [41] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne 和 E. Tiesinga, 《现代物理评论》**82**, 1225 (2010). [42] R. M. C. Ahn, J. P. H. W. v. d. Eijnde 和 B. J. Verhaar, 《物理评论B》**27**, 5424 (1983). [43] H. T. C. Stoof, J. M. V. A. Koelman 和 B. J. Verhaar, 《物理评论B》**38**, 4688 (1988). [44] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar 和 A. Axelsson, Phys. Rev. A **51**, 4852 (1995). [45] B. Gao, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**36**, 2111 (2003). [46] A. Derevianko, W. R. Johnson, M. S. Safronova 和 J. F. Babb, 《物理评论快报》**82**, 3589 (1999). [47] G. F. Gribakin 和 V. V. Flambaum, Phys. Rev. A **48**, 546 1993( ). [48] P. S. Julienne, E. Tiesinga 和 T. Köhler, 《现代光学杂志》**51**, 1787 (2004). [49] F. H. Mies 和 M. Raoult, Phys. Rev. A **62**, 012708

(2000).[50] D. S. Petrov, 《物理评论快报》**93**, 143201 (2004).[51]Y. Wang、J. P. D'Incao 和 B. D. Esry，载于《原子、分子与光学物理进展》，《原子、分子与光学物理进展》，第 62 卷，E. Arimondo、P. R. Berman 和 C. C. Lin 编（学术出版社，2013），第 1–115 页。[52] B. R. Johnson, 《化学物理学杂志》**73**, 5051 (1980)。[53] R. C. Whitten 和 F. T. Smith, 《数学物理学杂志》**9**, 1103 (1968)。[54] H. Hellmann, 《物理学杂志》**85**, 180 (1933)。[55] R. P. Feynman，Phys. Rev. **56**, 340 (1939)。[56] J. Wang，量子三体理论的超球面方法，博士论文，科罗拉多大学博尔德分校（2012）。[57] D. Blume 和 C. H. Greene，Phys. Rev. A **66**, 013601 (2002)。[58] D. A. Varshalovich、A. N. Moskalev 和 V. K. Khersonskii, 《角动量量子理论》（世界科学出版社，1988）。[59] P. Soldán、M. T. Cvitaš 和 J. M. Hutson，Phys. Rev. A **67**, 054702 (2003)。[60] P. Naidon、S. Endo 和 M. Ueda, Phys. Rev. A **90**, 022106 (2014)。[61] L. Landau，载于《*L. D. Landau*文集》，D. TER HAAR 编（培格蒙出版社，1965），第 63–66 页。[62] C. Zener 和 R. H. Fowler，《伦敦皇家学会会刊 A 辑：数学与物理特辑》**137**, 696 (1932)。[63] A. Devaquet, 《纯粹与应用化学》**41**, 455 (1975)。