我的期刊论文编号（由编辑填写）

玻色子的超球簇模型：在氦滴亚阈值晕态中的应用

N.K. Timofeyuk

arXiv:2304.06679v1 [nucl-th] 13 Apr 2023

收稿日期：日期 / 接受日期：日期

摘要 为描述从少体或多体系统中移除一个粒子的长程行为，我们建立了超球簇模型，并将其应用于由五、六、八和十个原子组成的氦滴基态和第一激发态；这些原子之间通过二体软高斯势相互作用。我们研究了超球簇谐波展开在结合能、均方根半径以及相差一个原子的两个氦滴波函数重叠方面的收敛性。结果表明，随着模型空间增大，这类重叠在大距离处的函数形式会收敛至正确的渐近行为。我们计算了用于量化该区域内重叠幅度的渐近归一化系数。结果还表明，在第一激发态中，一个氦原子与其余原子相距甚远，形成二体分子或晕。晕原子处于空间经典禁阻区内的概率取决于该区域的定义以及氦滴中的原子数。重叠积分的总范数，即谱因子，代表多体态划分为一个选定的系统态与一个被移除粒子的划分数。我们计算了谱因子并讨论了其求和规则，从而进一步揭示了氦滴的结构。

关键词 超球谐函数 · 玻色子系统 · 氦滴 · 晕 · 重叠积分 · 渐近归一化系数 · 谱因子 · 戴森轨道

N.K. Timofeyuk，萨里大学物理系，英国英格兰萨里郡吉尔福德 GU2 7XH 电子邮件：n.timofeyuk@surrey.ac.uk

1 引言

求解少体和多体系统薛定谔方程的大多数方法，都会将波函数展开到某些基态集合上。选择超球谐函数（HH）作为基底，可将薛定谔方程化为一组耦合方程；无论粒子数 A 有多少，方程都只涉及一个动力学变量 [1]，因此它是研究量子系统的有力工具。超球谐展开常用于描述少体核 [2]系统和原子 [3]系统中的各种过程，也已应用于较重的系统，例如参见 [1；4；5；6； 7]。任何基底展开方法的缺点是，随着系统中基态数目随粒子数增加，求解薛定谔方程的问题会变得难以处理。然而，可以预期，并非所有基态对于描述某个 A 体系统的特定性质都很重要。因此，需要一种有效的方法来减少基态的数量。如何选出其中最重要的基态，取决于需要计算的观测量。

所有少体和多体计算的主要关注点都是结合能。对于短程成对相互作用，紧密束缚系统的能量取决于其波函数在内部区域的描述精度。然而，最有趣的物理现象大多发生在不同系统彼此反应并经历各种重排的过程中。这类过程取决于总系统的波函数对其不同子系统间大距离区域的描述精度。为处理长程行为，文献 [8] 针对费米子系统提出了超球簇模型（HCM）。HCM 选取特定的超球谐函数（HH）态，用以描述一个核子处于经典禁阻区域时的行为。该模型已在一个玩具模型 ^{5}He 案例中接受检验，其中该原子核被人为设定为束缚态。构造了 ^{5}He 波函数在 ^{4}He 波函数上的投影，证明随着 HCM 基态数量增加，该投影会收敛到正确的渐近形式。然而，在一种特定的超径向势计算方法中，模型空间的增大导致必须对许多相差超过 16 个数量级的项求和，从而在计算中引入较大的不确定性，并使 HCM 无法进一步应用。

本文从理论和计算两方面重新审视了超球簇模型（HCM），并对其进行了重新表述，以避免原始版本存在的问题。为仅关注波函数的坐标部分，本文针对零自旋玻色子系统对该模型进行了推导，并将其应用于氦滴的数值计算。人们对这类系统颇感兴趣，因为 He-He 二聚体中的束缚极弱，使其某些性质呈现出普适性。在该二聚体中，原子彼此相距甚远，处于经典禁阻区域。氦三聚体的能谱很好地体现了 Efimov 物理 [9] ，该理论研究由弱相互作用组分构成的系统。氦三聚体有一个深束缚态和一个浅束缚态，其能量之比接近普适

性值，该值由 Efimov [10]预测。浅束缚 Efimov 第一激发态已在 [11] 中通过实验观测到；它由一个二聚体和一个与之弱束缚的第三个氦原子构成，后者距二聚体中两个原子的距离更远 [12]。在 [13; 14; 15] 中，研究表明，在含有三个以上原子的氦滴中，低于单原子移除阈值的浅激发态依然存在。可以预期，在这类态中，一个氦原子也会远离其余原子，延展至经典禁阻区域，并形成二体分子。在核物理中，这种现象称为“晕” [16] ，并已使用少体模型 [17]进行了广泛研究。超球簇模型旨在处理单粒子的长程行为，因此应非常适合研究晕态。

为了 выяс定随着原子数增加，氦滴第一激发态中的晕是否仍然存在，构造了 A 与 $A-1$体波函数之间的重叠积分。这类重叠在核物理中很常见，并作为核子移除反应计算的输入 [18]。在原子物理中，它们被称为戴森轨道 [19] ，并用于光电子能谱学和（$e, 2e$）电离实验。对氦滴计算得到的重叠积分应能够量化单个原子在整个系统中的空间行为，从而估计二体分子的大小，而其范数则给出分子态的谱学强度。

本文首先在第2节中定义超球谐函数展开，随后在第3节中构建超球簇谐函数基。下面的超球簇模型应用采用软高斯势；对于该势，随着氦滴中原子数的增加，基态结合能的收敛性显著改善 [20]。因此，本文采用最低阶近似来描述 A体系统的 $A-1$核芯，其相关内容将在第4节中介绍。第5节给出了含有 $A=5$,6,8,10个原子的氦滴的结合能和均方根半径的数值结果，第6节则讨论了它们的重叠积分计算。第7节总结了这项工作并给出结论性意见，附录则提供了与超球簇模型发展相关的重要但篇幅较长的数学细节。

2 超球谐函数展开与薛定谔方程 n

超球坐标可以有多种选择。这里我们采用一种规范选择，它基于一组 $A-1$ 归一化的雅可比坐标 $\boldsymbol{\xi}_1$，$\boldsymbol{\xi}_2$，……，$\boldsymbol{\xi}_{A-1}$ 定义如下：

$$\boldsymbol{\xi}_{A-i}=\sqrt{\frac{i}{i+1}}\left(\frac{1}{i}\sum_{j=1}^{i}\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_{i+1}\right), \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{r}_i$ 是第 i个物体的单体坐标。为简化下文中的符号，本定义在式 (1) 左侧使用 $\boldsymbol{\xi}_{A-i}$，而非标准选择 $\boldsymbol{\xi}_i$

雅可比坐标构成了一个 $(A-1)$ 维向量 $\boldsymbol{\rho}$，其长度由超半径 ρ给出，

$$\rho^2 = \sum_{i=1}^{A-1} \boldsymbol{\xi}_i^2 = \sum_{i=1}^{A} \boldsymbol{r}_i^2 - \boldsymbol{R}^2 = \frac{1}{A}\sum_{i<j}^{A} (\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)^2, \tag{2}$$

其中， $\boldsymbol{R} = (\sum_{i=1}^{A} \boldsymbol{r}_i)/\sqrt{A}$ 是质心的归一化坐标。其他超球坐标为超角 $\hat{}$ $\rho \equiv \{\theta_{3A-4}, \theta_{3A-3}, .., \theta_2, \theta_1\}$；在超球簇模型中，最后两个超角选取如下

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \rho \cos\theta_1, \\ \xi_2 &= \rho \sin\theta_1 \cos\theta_2. \end{aligned} \tag{3}$$

$\hat{}$ 超球坐标中的动能算符 T 由超径向部分和超角部分组成，

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\rho^{n-1}}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^{n-1}\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{1}{\rho^2}\Delta_{\hat{\rho}}\right), \tag{4}$$

其中， m 是玻色子的质量， $n = 3A-3$ 是由雅可比坐标构成的空间维数。超角部分 $\Delta_{\hat{\rho}}$ 的本征函数 $Y_{K\gamma}(\hat{}\rho)$，

$$\Delta_{\hat{\rho}} Y_{K\gamma}(\hat{\rho}) = K(K+n-2) Y_{K\gamma}(\hat{\rho}), \tag{5}$$

其中， K 是超动量，它们构成一组完备的正交归一基，称为超球谐函数（HH）。它们可能高度简并，因此，属于同一 K 的不同谐函数用 γ 标记。对于玻色子系统，超球谐函数的构造对粒子置换对称。

将 A 体系统的波函数 $\Psi(\boldsymbol{\rho})$ 在完备的超球谐函数（HH）组上展开后，

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}) = \rho^{-\frac{n-1}{2}} \sum_{K\gamma} \chi_{K\gamma}(\rho) Y_{K\gamma}(\hat{\rho}), \tag{6}$$

可得到关于径向部分$\chi_{K\gamma}(\rho)$的无穷组耦合微分方程:

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\mathcal{L}_K(\mathcal{L}_K+1)}{\rho^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_{K\gamma,K\gamma}(\rho)\right)\right)\chi_{K\gamma}(\rho) \\ &\qquad = -\frac{2m}{\hbar^2}\sum_{K'\gamma'\neq K\gamma} V_{K\gamma,K'\gamma'}(\rho)\chi_{K'\gamma'}(\rho). \end{aligned} \tag{7}$$

Here

$$\mathcal{L}_K = K + \frac{n-3}{2} \tag{8}$$

是广义角动量， m 是粒子的质量，而超径向势 $V_{K\gamma,\ K'\gamma'}(\rho)$ 是 HHs 之间相互作用势 V 的矩阵元，

$$V_{K\gamma,K'\gamma'}(\rho) = \langle Y_{K\gamma}(\hat{\rho})|\hat{V}|Y_{K'\gamma'}(\hat{\rho})\rangle. \tag{9}$$

3 超球簇基态的构造。

下面将按照 [8] 中的建议构造超球簇谐波（HCH）态，即将超球谐波态重新组织成类似于微观簇模型 [21] 所用簇波函数的形式。具体做法是将一个（已知的）核芯 $A-1$ 的完全对称超球谐函数 $Y_{K_c\gamma_c}(\hat{\boldsymbol{\rho}}_c)$（它是超角 $\hat{\boldsymbol{\rho}}_c$ 的函数）与一个相对超角函数 $\varphi_{K_c\nu lm}(\theta_1,\ \xi_1)$ 的乘积进行对称化

$$\mathcal{Y}_{K\gamma}(\hat{\boldsymbol{\rho}})=\mathcal{N}_{K\gamma}^{-1}\ \mathcal{S}\left[Y_{K_c\gamma_c}(\hat{\boldsymbol{\rho}}_c)\ \times\varphi_{K_c\nu l}(\theta_1,\hat{\xi}_1)\right]_{LM} \tag{10}$$

这里，K_c 是超动量，$\gamma_c=\{\beta_c L_c M_c\}$、$L_c$ 是核芯 $A-1$ 的总轨道角动量，而 β_c 表示属于同一 K_c的不同简并谐波。量子数集合 $K\gamma$ 包含 $\gamma=\{K_c\gamma_c\nu l\ LM\}$。核芯超球谐函数与相对超角函数耦合为总轨道角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_c+\boldsymbol{l}$。此外，$\mathcal{N}_{K\gamma}$ 是归一化因子，并且

$$\mathcal{S}=\frac{1}{A^{1/2}}\left(1+\sum_{i=1}^{A-1}P_{iA}\right) \tag{11}$$

是对称化算符，它将第 A个玻色子与 $A-1$ 核芯中的玻色子进行置换。与最后一个核子相关联的相对超球谐波由下式给出 [1]

$$\varphi^{(n)}_{K_c\nu lm}(\theta,\hat{\xi})=N^{(n)}_{K_c\nu l}\ \cos^l\theta\sin^{K_c}\theta\,P_\nu^{K_c+\frac{n-5}{2},l+\frac{1}{2}}(\cos 2\theta)Y_{lm}(\hat{\xi}), \tag{12}$$

其中，归一化由下式给出

$$N^{(n)}_{nK_cl}=\left(\frac{2\nu!\,(2\nu+K_c+l+(n-2)/2)\Gamma(\nu+K_c+l+(n-2)/2)}{\Gamma(\nu+l+3/2)\,\Gamma(\nu+K_c+(n-3)/2)}\right)^{1/2}. \tag{13}$$

ˆ 由于 $Y_{K_c\gamma_c}(\hat{\rho}_c)$和 $\varphi_{K_c\nu lm}(\theta,\xi_1)$是ˆ动能算符在与变量$\hat{\boldsymbol{\rho}}_c$ 和 $\{\theta_1,\xi_1\}$ 相关的子空间中的本征函数，并且动能算符与超角函数(10)关于任意玻色子置换均具有对称性，因此函数$\mathcal{Y}_{K\gamma}(\hat{\boldsymbol{\rho}})$也是 $\Delta_{\hat{\rho}}$的本征函数，满足方程(5)，故它是超动量为 $K=K_c+2\nu+l$的超球谐函数。具有不同 K 值的HCHs $\mathcal{Y}_{K\gamma}(\hat{\boldsymbol{\rho}})$ 彼此正交；然而，对于相同的 K和不同的 γ，它们可能并不正交

$$\langle\mathcal{Y}_{K'\gamma'}(\hat{\boldsymbol{\rho}})|\mathcal{Y}_{K\gamma}(\hat{\boldsymbol{\rho}})\rangle=\delta_{KK'}\mathcal{I}_{K\gamma\gamma'}, \tag{14}$$

这在采用反对称化的多道簇模型中不同道函数之间很常见。在这种情况下，可以进行正交化。

在参考文献 [8] 中，基于HCHs与平移不变谐振子簇模型基态之间的联系，构造了HCM超径向势$V_{K\gamma,\ K'\gamma'}(\rho)$。文献 [8] 中的形式采用了核芯$A-1$ 谐振子波函数的分数母系展开，随后将谐振子波函数的乘积改写为最便于进行解析积分的坐标形式。这里不使用HCHs的谐振子表象，而是采用核超球谐函数 $Y_{K_c\gamma_c}(\hat{\rho}_c)$的分数母系展开，随后进行涉及超角 θ_1 和 θ_2的坐标变换。尽管已有计算分数母系展开系数的方法（见 [1] 或 [22], ），但在现代少体与多体应用中很少使用。为满足HCM的需要而调整这些方法，还需付出额外努力。不过，由于本文旨在构建一种仅处理长程行为的方法，因此这里先考虑 $K_c = 0$ 的情形。作此选择后，对于下文所考虑的软二体势， $A-1$ 核芯的结合能与收敛结果相差不大，并且随着玻色子数量 [20]增加而逐渐接近该结果。由于 $K_c = 0$ 的HH只是一个常数，其分数母系展开是平凡的。将一个玻色子与其余玻色子分离后，可将 $Y_{K_c=0}(\hat{\rho}_c)$分解为函数 $\prod_{i=1}^{A-2}\varphi_{000}^{(3i)}(\theta_i,\ \hat{\xi}_i)$的乘积；根据式（12），这些函数 φ_{000} 均为常数。

4 $K_c = 0$ 情形

我们考虑 $K_c = 0$、 $L_c = 0$ 的情形，此外，还将保留 $l = 0$ ，以描述基态和第一激发 0^+ 态。在这种情况下

$$\mathcal{Y}_\nu(\hat{\boldsymbol{\rho}}) = \mathcal{N}_\nu^{-1}\mathcal{S}\left[Y_0(\hat{\rho}_c)\varphi_{0\nu 0}^{(n)}(\theta_1,\hat{\xi}_1)\right]. \tag{15}$$

对于固定的 K ，采用这种选择时，只有一个超球簇谐波可用，其$K = 2\nu$ ，且集合 (15) 是正交归一的， $\langle\mathcal{Y}_\nu(\hat{\boldsymbol{\rho}})\mid\mathcal{Y}_{\nu'}(\hat{\boldsymbol{\rho}})\rangle = \delta_{\nu,\ \nu'}$。

众所周知，对于玻色子系统，无法构造具有 $K = 2$ 的超球谐函数。容易验证，对于 $\nu = 1$

$$\mathcal{S}\left[Y_0(\hat{\boldsymbol{\rho}}_c)\,\phi_{010}(A)\right] \sim \left(\frac{n}{2}\frac{A}{A-1} - \frac{3}{2}A\right)Y_0(\hat{\boldsymbol{\rho}}), \tag{16}$$

由此得到 $\mathcal{Y}_1 = 0$。因此，在玻色波函数的超球谐簇函数展开中，将缺少 $K = 2$ 项。

4.1 计算 HCH 范数

由于在 $K_c = 0$ 情况下，HCHs 并不简并，因此范数 $\mathcal{N}_\nu$ 根据 $\langle\mathcal{Y}_\nu(\hat{\boldsymbol{\rho}})|\mathcal{Y}_\nu(\hat{\boldsymbol{\rho}})\rangle = 1$ 计算；将 $\varphi_{000}^{(n-3)}(\theta_2,\hat{\xi}_2)$ 从

$Y_0(\hat{}\rho_c)$ 的形式为

$$\langle \mathcal{Y}_\nu(\hat{\boldsymbol{\rho}})|\mathcal{Y}_\nu(\hat{\boldsymbol{\rho}})\rangle = \mathcal{N}_\nu^{-2}\,(1+(A-1)$$
$$\times\,\langle\,\varphi_{000}^{(n-3)}(\theta_2',\hat{\xi}_2')\varphi_{0\nu 0}^{(n)}(\theta_1',\hat{\xi}_1')\mid\varphi_{000}^{(n-3)}(\theta_2,\hat{\xi}_2)\varphi_{0\nu 0}^{(n)}(\theta_1,\hat{\xi}_1)\rangle\Big)\,. \tag{17}$$

向量 $\boldsymbol{\xi}_2'$，$\boldsymbol{\xi}_1'$ 与 $\boldsymbol{\xi}_2'$，$\boldsymbol{\xi}_1'$ 一同显示在图 1 中。附录中证明，对于坐标变换

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\xi}_1 &= \gamma_1\boldsymbol{\xi}_1' + \gamma_2\boldsymbol{\xi}_2'\\ \boldsymbol{\xi}_2 &= -\gamma_2\boldsymbol{\xi}_1' + \gamma_1\boldsymbol{\xi}_2'\end{aligned} \tag{18}$$

其中 $\gamma_1^2+\gamma_2^2=1$，乘积 $\varphi_{000}^{(n-3)}(\theta_2,\ \hat{}\xi_2)\varphi_{0\nu 0}^{(n)}(\theta_1,\ \hat{}\xi_1)$ 可通过以坐标 $(\theta_1',\ \xi_1',$ $\theta_2',\ \xi_2')$ 表示的本征函数的乘积表示为

$$\varphi_{000}^{(n-3)}(\theta_2,\hat{\xi}_2)\varphi_{0\nu 0}^{(n)}(\theta_1,\hat{\xi}_1) = \sum_{\nu_1+\nu_2+l=\nu} T^{(n)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\gamma_2)$$
$$\times\,[\varphi_{0\nu_2 l}^{(n-3)}(\theta_2',\hat{\xi}_2')\times\varphi^{(n)}_{2\nu_2+l\,\nu l}(\theta_1',\hat{\xi}_1')]_0. \tag{19}$$

新坐标中的超角函数可能具有不同的角动量，但它们耦合后的总角动量为零。系数 $T_{\nu}^{(n)},_{\nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\ \gamma_2)$ 是著名的 Raynal-Revai 系数 [23] 的类似形式，用于计算三体问题中的超径向势。它们满足

$$\sum_{\nu_1+\nu_2+l=\nu} T^{(n)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\gamma_2)T^{(n)}_{\nu',\nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\gamma_2) = \delta_{\nu,\nu'}. \tag{20}$$

对于正交归一超球谐函数，可得

$$\mathcal{N}_\nu = \left[1+(A-1)T^n_{\nu,\nu 00}(\gamma_1^{\mathcal{N}},\gamma_2^{\mathcal{N}})\right]^{1/2} \tag{21}$$

with

$$\gamma_1^{\mathcal{N}} = -\frac{1}{A-1}, \qquad \gamma_2^{\mathcal{N}} = \sqrt{\frac{A(A-2)}{(A-1)^2}}. \tag{22}$$

容易验证，对于 $\nu=1$

$$1+(A-1)T^{(n)}_{1,100}\left(\gamma_1^{\mathcal{N}},\gamma_2^{\mathcal{N}}\right)=0, \tag{23}$$

因此，$\mathcal{Y}_1$ 的范数没有定义。

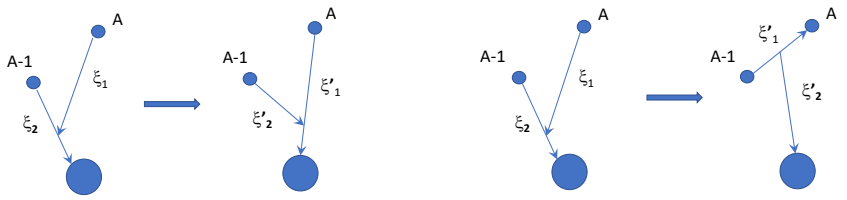

图 1 用于计算 HCH 范数（左图）以及玻色子 A 与 $A-1$ 之间相互作用对超径向势的直接贡献（右图）的坐标变换。

4.2 超径向势的计算

核芯 $A-1$的矩阵元 $\langle \mathcal{S}\psi_{\alpha'}|V|\mathcal{S}\psi_{\alpha}\rangle$ 介于任意波函数 $\psi_\alpha = \varphi_{\alpha_1}(1, 2, ..., A-1)\varphi_{\alpha_2}(A)$之间，并包含对称波函数 $\varphi_{\alpha_1}(1, 2, ..., A-1)$，可拆分为直接项和交换项，

$$\langle \mathcal{S}\psi_{\alpha'}|V|\mathcal{S}\psi_{\alpha}\rangle = V_{dir} + (A-1)V_{ex}. \tag{24}$$

直接项

$$V_{dir} = \langle \phi_{\alpha'_1}(1,...,A-1)\varphi_{\alpha'_2}(A)|V|\phi_{\alpha_1}(1,...,A-1)\varphi_{\alpha_2}(A)\rangle \tag{25}$$

可分为两部分，

$$\begin{aligned} V_{dir} &= V^{(1)}_{dir} + V^{(2)}_{dir} \\ &= \langle \phi_{\alpha'_1}(1,...,A-1)\varphi_{\alpha'_2}(A)|\sum_{i<j}^{A-1} V_{ij}|\phi_{\alpha_1}(1,...,A-1)\varphi_{\alpha_2}(A)\rangle \\ &+ \langle \phi_{\alpha'_1}(1,...,A-1)\varphi_{\alpha'_2}(A)|\sum_{i=1}^{A-1} V_{iA}|\phi_{\alpha_1}(1,...,A-1)\varphi_{\alpha_2}(A)\rangle, \end{aligned} \tag{26}$$

其中第一部分，$V_{(1)dir}$，包含核芯中 $A-1$ 粒子之间的相互作用，而第二项 $V^{(2)}_{dir}$ 则涉及粒子 A与核芯粒子 $A-1$之间的相互作用。交换势，

$$V_{ex} = \langle \phi_{\alpha'_1}(1,...,A)\varphi_{\alpha'_2}(A-1)|V|\phi_{\alpha_1}(1,...,A-2,A-1)\varphi_{\alpha_2}(A)\rangle \tag{27}$$

可以分为四项，

$$V_{ex} = V^{(1)}_{ex} + V^{(2)}_{ex} + V^{(3)}_{ex} + V^{(4)}_{ex}, \tag{28}$$

根据以下两体相互作用势的分解：

$$\sum_{i<j}^{A} V_{ij} = V_{A-1,A} + \sum_{i=1}^{A-2} V_{iA} + \sum_{i=1}^{A-2} V_{iA-1} + \sum_{i<j}^{A-2} V_{ij}. \tag{29}$$

超球簇模型的超径向耦合势

$$V_{\nu\nu'}(\rho) = \langle \mathcal{Y}_\nu(\hat{\boldsymbol{\rho}}) \mid \sum_{i<j} V_{ij} \mid \mathcal{Y}_{\nu'}(\hat{\boldsymbol{\rho}}) \rangle \tag{30}$$

随后由六项给出，其形式表达式相当繁复，因此将其移至附录。为验证数值计算，检查了用常数或二体谐振子相互作用替换二体高斯势后，结果是否为 $V_{\nu'\nu}(\rho) = {}^{A}{}_{(A-1)\ 2}\ \ \delta_{\nu,\ \nu'}$。还验证了对于高斯相互作用$V_{1,\ \nu}(\rho) = 0$ 对所有 ν均成立。计算式（30）中的超球角一维积分（相关内容见附录）时，使用了高斯-雅可比求积公式，并借助 [24]中的子程序。计算基态结合能时，只需 10 个积分点即可使超径向势达到较高精度；而要使超径向波函数在极大距离处达到相近精度，则将积分点数增加至 30。

5 氦滴结合能和半径的数值应用

本节采用超球簇模型，使用与 [25] 和 [20]相同的软高斯氦-氦二体势，计算 $A = 5$、6、8、10个氦原子组成的氦滴的结合能：

$$V_{ij}(r) = V_0 \exp\left(-\frac{r^2}{a_0^2}\right) \tag{31}$$

其中 $V_0 = -1.227$ K，且 $a_0 = 10.03$ 原子单位。 $\hbar^2/m = 41.281307$ (原子单位)^{2}K的取值用于耦合微分方程组（7）。通过对 [27] 中为适用于多体超球谐方法而修改的拉格朗日-拉盖尔网格法 [26]进行改进，求解该方程组。只需 ~ 10 个网格点，即可将基态结合能计算到五位有效数字的精度。要使第一激发态能量达到类似精度，则需要更多网格点，约18个。

采用完整超球谐基计算的结合能（此前已发表于 [25； 20][1]。）以及采用超球簇模型计算的结合能，均列于表1，并以 $K_{\max} = 2\nu_{\max}$ 为函数。基态能量收敛极快，只需 $K_{\max} \sim 10$ 即可获得五位稳定的有效数字。表1还证实了[20] 关于随着 A 增大，收敛性有所改善的观察。对于激发态，超球谐能量在更高的 $K_{\max}$ 值处才达到收敛，具体取决于玻色子数，范围为14至22；不过，随着 A 增大，收敛性也会改善。表中显示，仅选取与长程行为相关的超球簇谐基态，对结合能也有显著贡献。

[1] 对于 $A = 8$ 和10个氦原子组成的氦滴，其未发表的第一激发态超球谐能量取自2012年研究 [20]留下的笔记。

表1 采用完整超球谐基和超球簇模型计算的氦原子系统基态和第一激发态 0^+的结合能绝对值（单位：K），对应 $K_{\max}=2\nu_{\max}$ 的若干取值。

	$A=5$				$A=6$			
	g.s.		1ex		g.s.		1ex	
$K_{\max}$	HH	HCM	HH	HCM	HH	HCM	HH	HCM
0	1.9131	1.9131	0.64284	0.64284	3.7731	3.7731	2.0107	2.0107
4	1.9412	1.9366	0.74601	0.73503	3.8076	3.8024	2.0109	2.1260
6	1.9441	1.9381	0.77879	0.75940	3.8099	3.8034	2.1662	2.1448
8	1.9450	1.9385	0.80247	0.77666	3.8108	3.8038	2.1886	2.1606
10	1.9452	1.9386	0.81388	0.78694	3.8109	3.8038	2.1964	2.1672
12	1.9452	1.9386	0.82087	0.79250	3.8109	3.8038	2.2008	2.1706
14	1.9452	1.9386	0.82484	0.79608	3.8109	3.8038	2.2027	2.1723
16			0.82723	0.79817			2.2036	2.1731
18			0.82867	0.79949			2.2040	2.1736
20			0.82958	0.80032			2.2041	2.1738
22			0.83015	0.80085			2.2042	2.1739
24			0.83050	0.80119			2.2042	2.1740

	$A=8$				$A=10$			
	g.s.		1ex		g.s.		1ex	
$K_{\max}$	HH	HCM	HH	HCM	HH	HCM	HH	HCM
0	9.7159	9.7159	7.1217	7.1217	18.855	18.854	15.551	15.551
4	9.7607	9.7551	7.2720	7.2568	18.908	18.902	15.709	15.695
6	9.7623	9.7557	7.2882	7.2685	18.909	18.902	15.720	15.703
8	9.7632	9.7560	7.3053	7.2794	18.910	18.902	15.734	15.711
10	9.7633	9.7560	7.3089	7.2822	18.910	18.902	15.736	15.712
12	9.7633	9.7561	7.3108	7.2834	18.910	18.902		15.713
14	9.7633	9.7561		7.2839				15.713
16				7.2840				
18				7.2841				

超球簇模型基态能量与精确超球谐结果的偏差分别为0.3%、0.2%、0.1%和0.04%，对应 $A=5$，6，8，10。对于第一激发态，偏差略大，分别为3.7%、1.4%、0.4%和0.2%。

均方根半径由下式计算

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{A}\sum_{i=1}^{A}(\boldsymbol{r}_i - R_{c.m.}) = \frac{1}{A}\langle\rho^2\rangle \tag{32}$$

$$\langle\rho^2\rangle = \sum_{\nu}\int_0^{\infty} d\rho\,\rho^2\chi_\nu^2(\rho) \tag{33}$$

条件是 $\sum_\nu \int_0^\infty d\rho\,\chi_\nu^2(\rho) = 1$，在计算中始终验证这一条件成立。超球簇模型（HCM）得到的均方根半径 $r_m = \sqrt{\langle r^2\rangle}$ 汇总于表~~II~~。对于基态，若要使 r_m 值收敛至五位有效数字，$A=5$ 分别需要取 12 和 6-10。对于激发态，相同有效数字位数下的 r_m 收敛性可通过 $K_{\max}=60$，46，24，22 达到。随着 A 增大，基态和第一激发态的均方根半径均减小，这正如预期：对于通过软二体势相互作用并经历

表 2 在超球簇模型中，对于由 A 个氦原子组成的系统，取 $K_{\max}$ 的若干值时，基态和第一激发 0^+ 态的均方根物质半径 r_m 。还给出了 A-体的两个态之间的重叠与基态 $A-1$-体波函数之间重叠的均方根半径r_v 。所有半径均以原子单位表示。

	$A=5$				$A=6$			
	r_m		r_v		r_m		r_v	
$K_{\max}$	g.s.	1ex	g.s.	1ex	g.s.	1ex	g.s.	1ex
0	6.9383	10.950	8.7840	17.319	6.3848	8.7198	7.7241	14.193
4	7.0091	11.200	8.8400	19.280	6.4375	8.9417	7.7663	15.773
6	7.0194	11.388	8.8599	20.053	6.4418	9.0326	7.7747	16.215
8	7.0234	11.623	8.8639	20.947	6.4440	9.1542	7.7770	16.746
10	7.0247	11.859	8.8658	21.693	6.4444	9.2407	7.7777	17.072
12	7.0250	12.057	8.8662	22.289	6.4445	9.3058	7.7778	17.305
14	7.0251	12.242	8.8663	22.816	6.4445	9.3529	7.7778	17.465
16	7.0251	12.393	8.8664	23.234	6.4445	9.3847	7.7778	17.571
18	7.0251	12.523	8.8664	23.580	6.4445	9.4063	7.7778	17.641
20	7.0251	12.630	8.8664	23.852	6.4445	9.4205	7.7778	17.686
22	7.0251	12.717	8.8664	24.062	6.4445	9.4297	7.7778	17.715
24	7.0251	12.788	8.8664	24.220	6.4445	9.4356	7.7778	17.733
26	7.0251	12.844	8.8664	24.336	6.4445	9.4394	7.7778	17.745
28	7.0251	12.889	8.8664	24.420	6.4445	9.4417	7.7778	17.752
30	7.0251	12.924	8.8664	24.479	6.4445	9.4432	7.7778	17.756
32	7.0251	12.952	8.8664	24.519	6.4445	9.4442	7.7778	17.759
34	7.0251	12.974	8.8664	24.548	6.4445	9.4448	7.7778	17.760
36	7.0251	12.991	8.8664	24.567	6.4445	9.4451	7.7778	17.761
38	7.0251	13.004	8.8664	24.580	6.4445	9.4454	7.7778	17.762
40	7.0251	13.014	8.8664	24.589	6.4445	9.4455	7.7778	17.762
42	7.0251	13.021	8.8664	24.596	6.4445	9.4456	7.7778	17.762
44	7.0251	13.027	8.8664	24.600	6.4445	9.4456	7.7778	17.762
46	7.0251	13.031	8.8664	24.603	6.4445	9.4457	7.7778	17.762
48	7.0251	13.035	8.8664	24.605	6.4445	9.4457	7.7778	17.763
50	7.0251	13.037	8.8664	24.606	6.4445	9.4457	7.7778	17.763
52	7.0251	13.039	8.8664	24.607	6.4445	9.4457	7.7778	17.763
54	7.0251	13.041	8.8664	24.608	6.4445	9.4457	7.7778	17.763
56	7.0251	13.042	8.8664	24.608	6.4445	9.4457	7.7778	17.763
58	7.0251	13.043	8.8664	24.609	6.4445	9.4457	7.7778	17.763
60	7.0251	13.044	8.8664	24.609	6.4445	9.4457	7.7778	17.763
	$A=8$				$A=10$			
0	5.7014	6.8970	6.5448	11.407	5.2659	6.0329	5.8681	10.015
4	5.7349	7.0201	6.5719	12.509	5.2898	6.1086	5.8876	10.866
6	5.7362	7.0472	6.5746	12.707	5.2904	6.1198	5.8889	10.980
8	5.7371	7.0820	6.5756	12.923	5.2909	6.1332	5.8894	11.093
10	5.7372	7.0975	6.5758	13.007	5.2909	6.1376	5.8895	11.125
12	5.7373	7.1067	6.5758	13.054	5.2910	6.1398	5.8895	11.140
14	5.7373	7.1112	6.5758	13.076	5.2910	6.1406	5.8895	11.146
16	5.7373	7.1134	6.5758	13.086	5.2910	6.1409	5.8895	11.148
18	5.7373	7.1145	6.5758	13.091	5.2910	6.1411	5.8895	11.149
20	5.7373	7.1150	6.5758	13.093	5.2910	6.1411	5.8895	11.149
22	5.7373	7.1152	6.5758	13.094	5.2910	6.1412	5.8895	11.149
24	5.7373	7.1154	6.5758	13.095	5.2910	6.1412	5.8895	11.149

发生塌缩。对于激发态，这种下降更为显著；这与随 A 增大而增加的单玻色子分离能有关，如表 III 所示。

由方程（2）和（33）可知，液滴中两个玻色子之间的均方根平均距离为 $r_{ij} = \sqrt{\frac{2A}{A-1}}\, r_m$。因此，在含有 $A = 5$、6、8、10 个玻色子的液滴基态中，任意两个玻色子之间的距离分别为 11、10、8.7 和 7.9 原子单位。

6 重叠积分

6.1 形式方面

HCM 最有趣的应用是将 A 个粒子的多体波函数 Ψ_A 投影到 $A-1$ 体系统的波函数 Ψ_{A-1} 上。在核物理中，这种投影称为重叠积分；在原子与分子物理中，则称为戴森轨道，其定义为

$$I(\boldsymbol{r}) = \sqrt{A}\langle \Psi_{A-1}(1,...,A-1)|\Psi_A(1,...,A-1,A),\rangle \tag{34}$$

其中，Ψ_{A-1} 和 Ψ_A 具有平移不变性，积分是在 $A-1$的 $A-2$ 个内部雅可比坐标上进行的。这些雅可比坐标未经归一化（也就是说，定义（1）中没有 $\sqrt{i/(i+1)}$ 因子），因此 $\boldsymbol{r}$ 是 $A-1$ 的质心与不属于 $A-1$ 的粒子 A 之间的实际距离。定义中加入 $\sqrt{A}$ 因子，是为了考虑核反应计算中全同粒子之间需要进行（反）对称化。

核物理中讨论的重叠积分最有趣的性质是谱因子和渐近归一化系数（ANC）。谱因子

$$S_l = \int_0^\infty dr\, r^2 I_l^2(r), \tag{35}$$

定义为 $I(\boldsymbol{r})$中对应轨道角动量 l的径向部分 $I_l(r)$的范数。谱因子可与多体系统 [28]中单粒子轨道的占据数相关联。它也可解释为 A中所选定状态内的（$A-1$）系统的数目。此类解释的一个示例见 [29]。在原子物理中，S_l与特定电离道的概率相关，通常称为概率因子或极点强度 [30]。

$I_l(r)$满足薛定谔型非齐次方程，其源项由$\langle \Psi_{A-1}|\sum_{i\in(A-1)} V_{iA}|\Psi_A\rangle$ [31]确定。对于短程两体势，该源项在 r较大时趋于零，因此 $I_l(r)$呈指数衰减，衰减常数为 $\kappa = \sqrt{2m\mu(E_{A-1} - E_A)}/\hbar$，其中 $\mu = (A-1)/A$ 是核芯与一个玻色子组成的体系的约化质量数

，该值由 $A-1$ 和 A的（负）结合能之差 E_{A-1} 和E_A 确定。对于 $l=0$，这种渐近行为为

$$I_{as}(r) = C\,\frac{\exp(-\kappa r)}{r}, \tag{36}$$

其中， C 是渐近归一化系数。它与最后一个玻色子处于经典禁阻区的概率振幅有关，也可通过一个简单的重整化因子与$A \to (A-1)+1$ 衰变的顶点常数（或壳上振幅）联系起来；这一量传统上用于粒子物理学。渐近归一化系数和顶点常数都对计算中所采用的二体相互作用的选择非常敏感 [32]。在微观计算中再现 $I(r)$的正确形式，对于预测那些对空间中一个粒子远离其余粒子时所处区域敏感的反应截面至关重要。核物理学涉及许多此类反应，而这些反应往往是天体物理应用所需要的 [33]。超球谐函数和超球簇谐波基非常适合这一用途。已有研究表明，随着超球谐函数模型空间增大， $I(r)$会收敛，见 [8; 34]。关于重叠积分计算中的未决问题，综述见 [31]。

在构造重叠积分时，为了与对 $A-1$ A核芯的描述保持一致， Ψ_{A-1} 波函数取为超球谐展开的最低阶 $K=0$。其超径向部分仅由一个函数 $\chi_0^{(A-1)}$ (ρ_c)给出。 Ψ_A 取自超球簇模型（HCM），其径向部分记为 $\chi_\nu^{(A)}(\rho)$。基于这些假设，按照参考文献 [8], ，可以很容易地推导出该重叠的径向部分 $I(r)$的表达式，其定义为 $I(\boldsymbol{r}) = I(r)Y_{00}(\hat{r})$，即

$$I(r) = \mu^{3/4} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}} N_{0\nu 0}^{(n)} \sqrt{\mathcal{N}_\nu}$$
$$\times \int_0^\infty d\rho_c \, \frac{\rho_c^{\frac{n-4}{2}} \chi_0^{(A-1)}(\rho_c)\, \chi_\nu^{(A)}\left(\sqrt{\rho_c^2+\mu r^2}\right)}{\left(\rho_c^2+\mu r^2\right)^{\frac{n-1}{2}}} P_\nu^{\frac{n-5}{2},\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu r^2-\rho_c^2}{\mu r^2+\rho_c^2}\right). \tag{37}$$

这里的 $\mu^{3/4}$ 因子之所以出现，是因为超球谐函数（HH）和超球簇模型中的超径向坐标与超角都是基于归一化的雅可比坐标构造的，而重叠通常是被移除粒子与核芯之间物理距离的函数。

6.2 数值计算：重叠及其 半径

进行数值计算时，考虑了两种收敛性：在固定 $\nu_{\max}$ 的情况下，随着拉格朗日-拉盖尔网格点数量增加， $I(r)$的收敛性；以及随着 $\nu_{\max}$增加时的收敛性。网格点数量较少（10 到 20 个）时，仅足以在较小的 r 下获得准确的 $I(r)$值。为使其在较大距离 $r \sim 60-80$ 原子单位处收敛，需要最多 50 个网格点。因此，本文给出的所有重叠计算

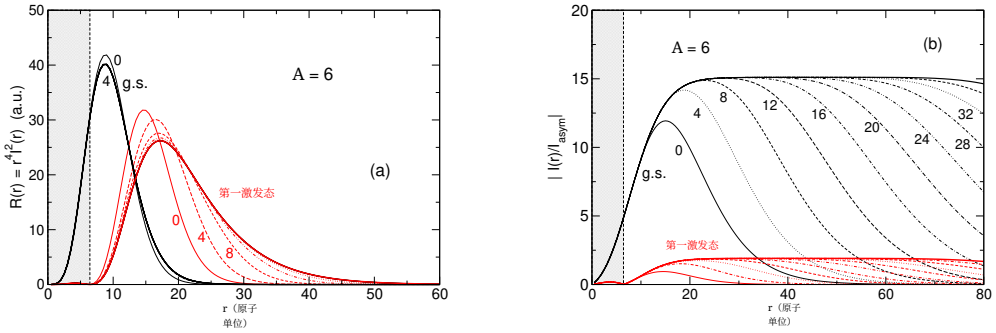

图 2 (*a*) $R(r)$ 的 $= r^4 I^2(r)$ 函数，以及 (*b*) $I(r)/I_{as}(r)$ 的绝对值，针对 $A = 6$ 的基态和第一激发态，展示了 $K_{\max}$ 从 0 到 40、步长为 4 时的结果。灰色区域对应于 $r < r_m$(g.s.)。

表 3 A 个氦原子构成的系统中基态和第一激发态的分离能 $\varepsilon = |E_A - E_{A-1}(K_c = 0)|$（单位：K）、谱因子 S以及渐近归一化系数 C（单位：原子单位$^{-1/2}$）。

	g.s.			1ex		
A	ε	S	C	ε	S	C
5	1.213	4.6666	7.9618	0.0752	1.3608	-0.80711
6	1.891	5.7356	15.109	0.2288	1.3206	-1.9075
8	3.396	41.733	7.7788	0.9791	1.2501	-6.8833
10	5.030	9.7892	94.365	1.8414	1.2073	-18.051

均采用 50 个网格点完成。图 2a 展示了一个典型示例，说明 $\nu_{\max}$ 增加时，$R(r) = r^4 I^2(r)$ 对于 $A = 6$的收敛情况。该函数包含有关 $I(r)$对均方根半径$r_v = \left(\int_0^\infty dr R(r) / \int_0^\infty dr S(r)\right)^{1/2}$ 的贡献信息，其中 $S(r) = r^2 I^2(r)$，可将其视为最后一个（或价）粒子轨道的半径。 r_v值与 $R(r)$中的极大值位置非常接近。表1列出了它们随 $K_{\max} = 2\nu_{\max}$变化的情况。对于基态， $R(r)$和 r_v 很快就能收敛；而激发态则需要大得多的模型空间。这与 $I(r)$和 $R(r)$在较大 r（最大可达 50 原子单位）处对 r_v 有显著贡献有关，因此需要在该区域对这些函数作出准确的渐近描述。图 2b 展示了 $I(r)/I_{as}(r)$对于 $A = 6$的收敛情况。随着模型空间增大，它在 22 原子单位之后收敛到一个常数（渐近归一化系数 C）。对于其他氦滴，$I(r)$、 $R(r)$、 r_v 和 C（此处未展示）的收敛情况与 $A = 6$ 类似； $I(r)$的渐近行为也大致在相同区域实现，即 20 至 25 原子单位之间。本文所研究的所有氦滴的渐近归一化系数值以及谱因子S 列于表 3。

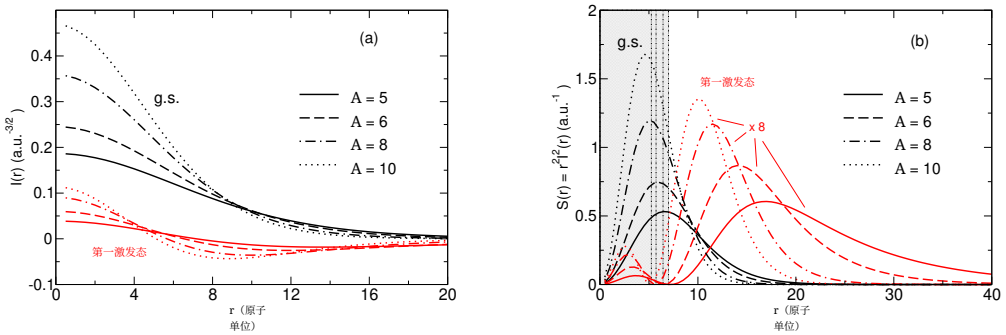

图 3 计算得到的 5、6 和 10 个氦原子基态及第一激发态的重叠积分 $I(r)$ (a)，以及相应的 $S(r)$ $= r^2 I(r)^2$ 值 (b)。灰色区域对应基态下的$r < r_m$ （针对 $A = 5$ ），其他灰色竖线则从右到左分别表示 6、8 和 10 个原子的 r_m 值。

6.3 经典禁阻区与晕

图 2a 显示，在浅激发态中，最外层（或价）原子远在液滴的均方根 r_m 之外，形成一个二体分子。基于此，这种状态可称为“晕”。然而，“晕”这一概念通常与在经典禁阻区内找到价粒子的概率显著相关。考察不同 r 区域中的重叠 $I(r)$ 及其对谱因子 $S(r)$的贡献，有助于理解浅激发态中的晕形成。

图 3a 展示了 Ψ_A 与 Ψ_{A-1} 的基态波函数$A-1$之间收敛的重叠，对于 $A = 5, 6, 8, 10$ 而言。对于 A的基态，它们呈现出典型的 $0s$单粒子波函数形状；而对于第一激发态，它们有一个节点，正如预期的那样，类似于 $1s$单粒子波函数。图 3b 所示的量 $S(r)$，表明一个氦原子可能位于氦滴内的何处。对于基态， $S(r)$的最大值位于氦滴的均方根半径 A附近；对于五、六、八和十个原子，该半径分别约为 7、6.4、5.7 和 5.3 原子单位。在所有情况下，超过 20 原子单位后，$S(r)$都可忽略不计。对于位于该处的玻色子，它与位于氦滴表面的原子之间的相互作用强度（由式（31）给出），约为两个玻色子位于氦滴内部、平均距离为 r_{ij}时相互作用强度的 20–30%。因此，可以说，氦滴基态中的所有原子都被限制在其相互作用范围之内。

$S(r)$在浅激发态中的极大值明显向r_m 外侧移动，这表明最后一个原子远离 $A-1$ 核芯的概率很大（见图 3b）。这个区域是否可以与经典禁阻区联系起来，取决于对后者的定义。关于这种定义，有两种思考方式。

– 经典禁阻区 $r_{\rm c.f.}$ 可以定义为 r 的这样一个区域：在该区域内，$I(r)$由其渐近形式 $I_{as}(r)$决定，该形式由（36）给出。在这个区域中，一个从双体薛定谔方程生成 $I(r)$的、等价性显而易见的局域有效势为零。图 2b 表明，对于 $A = 6$，这样的区域在超过 20 原子单位之后的某处开始；对于基态和激发态都是如此，远远超出氦滴的半径 r_m 。在 $r_m < r < 20$ 原子单位的中间区域内，氦-氦相互作用仍然能够影响 $I(r)$的行为，因为其作用范围为 10.03 原子单位。对于所考虑的所有其他系统，也会出现类似情况，其范围为 $r_{\rm c.f.} \sim$ 20-25 原子单位。按照$r_{\rm c.f.}$ 的这种定义，即使对于 $A = 5$ ，弱束缚玻色子停留在经典禁阻区内的概率也并不大，因此这类态不能称为“晕”，尽管它们表现出发育良好的分子结构，并且位于 r_m之外。

– 在二体问题中，经典禁阻区域对应于粒子动能为负的空间区域。类似地，可以将满足 $-\frac{\hbar^2}{2\mu m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} I(r) < 0$的区域视为 $r_{\rm c.f.}$的定义。对于 $A = 5$,6, 8, 10 的激发态，这一数值分别为 19、16、13 和 12 原子单位，并且在 $r_{\rm c.f.}$以外区域发现最后一个玻色子的概率相当大。均方根半径 r_v 的主要贡献也来自这一区域。然而，对于基态，所有 $r_{\rm c.f.}$都在 4–5 原子单位左右；按照这一定义，即使是束缚较紧的基态，发现最后一个玻色子处于经典禁阻区域内的概率也会相当大，尽管 $r_{\rm c.f.}$ 远小于 He–He 相互作用范围。

无论采用何种定义，一个原子远离其余原子的概率都取决于其分离能。对于所选的氦-氦相互作用，随着 A 减小，分离能增大（见表 2），使浅激发态中的二体分子尺寸缩小。进一步增大 A ，可以预期第一激发态中的价原子将主要位于氦-氦相互作用的作用范围内，这进一步表明，仅通过软二体力相互作用的玻色子系统会发生塌缩。引入排斥性三体力可以避免塌缩 [7] ，但这超出了本研究的范围。

6.4 谱因子和求和规则

图 3a 显示，重叠的绝对值随 A 增大而增大，并且基态的重叠远大于激发态的重叠，这一点反映在表 4 所示的谱因子中。对于谐振子二体相互作用，基态之间的谱因子应等于 A。对于其他任何相互作用，由于A 的波函数与 $A-1$ 的任意态的波函数存在非零重叠，因此谱因子会更小。谱因子满足求和规则 $\sum_i S_i^{(m)} = A$，其中 $S_i^{(m)}$ 与 m的第...态的重叠相关

表 4 氦原子体系中基态和第一激发态与 $A-1$ 的多个激发态重叠所对应的谱因子 S。

	$A=5$		$A=6$		$A=8$		$A=10$	
$A-1$	g.s.	1ex	g.s.	1ex	g.s.	1ex	g.s.	1ex
g.s.	4.67	1.36	5.74	1.32	7.78	1.25	9.79	1.21
1ex	0.11	1.39	0.17	3.31	0.16	5.85	0.14	8.03
2ex		0.03	0.02	0.25	0.01	0.30	0.01	0.27
3ex	0.01	0.09		0.01		0.04		0.02
4ex	0.01	0.13		0.02		0.01		
5ex	0.02	0.15		0.02				
6ex	0.02	0.15		0.03				
7ex	0.02	0.13		0.03				
8ex	0.02	0.12		0.03				
9ex	0.02	0.10		0.03				
10ex	0.02	0.08		0.03				
11ex	0.01	0.07		0.03				
12ex	0.01	0.05		0.03				
13ex	0.01	0.04		0.02				
14ex	0.01	0.03		0.02				
15ex	0.01	0.02		0.02				
sum	4.97	3.94	5.93	5.21	7.95	7.45	9.94	9.53
max	5	5	6	6	8	8	10	10

该态与 $A-1$的第 i 态之间的重叠。该求和规则由 Ψ_A 的正交归一性推出，并通过将因子 A 纳入谱因子的定义而得到。

对于此处使用的软势， $S_{g.s.}^{(g.s.)}$ 值接近允许的最大值，并随着 A 增大而趋近于该值。对于十个原子，该结果几乎耗尽了求和规则。其余贡献来自 A 基态与 $A-1$ 激发态的重叠，表 4 仅列出了大于 0.01 的数值。仅加入一个激发浅束缚态后，对 $A=5$，6，8，10 个原子体系的求和规则贡献分别达到 95%、98%、99.2% 和 99.3%。其余部分来自解体阈值以上的 $A-1$ 激发态，图中仅显示了 $A=5$ 的结果。这一贡献广泛分布在正能量范围内的第 3 至第 15 个激发态之间，能量范围为 0.1 至 5 K。

浅激发态与A的基态之间的重叠情况则大不相同。 $S_{g.s.}^{1ex}$ 值介于 1.36 和 1.21 之间，这可以解释为：在该态中，约有一个划分对应于由 $A-1$ 基态和 $1s$价原子形成的分子。进一步考察发现，浅态的求和规则主要由其与 $A-1$ 浅激发态的重叠贡献（见表 4）。这是因为，在 A 浅分子激发态的 $A-1$核芯中，每个原子相对于由其余 $A-2$ 核芯原子和 A价原子组成的其他 $A-1$ 原子，都处于 $0s$ 态。鉴于可从 A激发态的核芯中选出 $A-1$ 个原子，“ $A-1$ 激发态加上一个紧束缚的 $0s$原子”这一划分的数量应接近 $A-1$，这也反映在表 4 中。较大的 S_{1ex}^{1ex} 值可能会使移除一个原子的反应截面增大

而不是移除其价原子的反应截面增大。在核物理中，这一现象已在晕核 ^{11}Be 的（d, p）反应中通过实验观察到：该晕核由 ^{10}Be 核芯和一个价中子组成；当核芯 ^{10}Be 处于激发的弱束缚态时，其反应截面 [35]更大。随着浅束缚态结合能降低，$A-1$ 高于解体阈值的激发态对求和规则的贡献会增加。对于八个和十个原子，这一贡献较小；但对于五个和六个原子，即使计入 15 个激发态，求和规则也分别只达到 78% 和 86%（见表 4）。

7 总结与结论

为描述少体或多体系统中单个粒子的长程行为，本文提出了一种采用 HCH 基展开的模型。这些基态的结构类似于微观簇模型中用于全同粒子的结构。它由核芯的 HH 与一组基于雅可比多项式、用于描述价粒子相对运动的超角函数构成的对称化乘积表示。模型空间的大小由雅可比多项式的节点数决定；获得收敛结果所需的节点数取决于待计算物理量的性质以及所选的二体相互作用。

本文采用软高斯势描述含有至多十个原子的轻氦滴。与采用完整超球谐基的计算结果比较后发现，超球簇模型对氦滴的结合能有显著贡献。基态结合能收敛得非常快，而浅层第一激发态则需要更多 HCHs，尤其是含五个和六个原子的较轻氦滴。均方根半径也呈现类似的收敛规律：基态收敛较快，而第一激发态收敛较慢。

在超球簇模型（HCM）中计算得到的相差一个原子的两个液滴的波函数重叠（或戴森轨道）表明，在基态下，这个原子最有可能位于液滴表面。在第一浅激发态中，它停留在该表面之外很远处，形成一个二体分子，但仍处于氦-氦相互作用的作用范围内。若将分子的大小定义为重叠的均方根值，则随着单原子分离能增加，分子的大小会因 A 而减小。对于五个和六个原子，该原子停留在重叠呈渐近形式的空间区域内的概率相当大；但对于八个和十个原子，这一概率则很小。对于后两种情况，基态谱因子接近求和规则给出的值；而对于五个和六个原子，激发核芯态对求和规则有显著贡献。浅激发态与核芯的浅束缚态有很强的重叠，而它们与核芯基态的重叠所对应的谱因子约为 1。对于五个和六个原子，单原子移除阈值以上的四体和五体激发态对求和规则有显著贡献。

本研究采用了最简单结构的核芯超球谐函数，因此所得的重叠虽然能够给出正确的定性图像，但可能不足以满足其进一步应用的精度要求，

此外，这些结果应当 strongly 取决于哈密顿量的选择。众所周知，为避免玻色子系统（例如氦滴）随着原子数增加而发生塌缩，可以引入三体相互作用。未来的工作将进一步发展超球簇模型，以解决这些问题。

最后，上文描述的超球簇模型版本可以推广到全同费米子系统。鉴于对于内禀自旋 J，只有 $2J+1$ 费米子才能用具有 $K_c = 0$ 的超球簇谐波表示，因此，开发适用于超角函数任意乘积的坐标变换至关重要。获得适用于任意角动量的分数亲系数也很关键。例如，这些系数可以取自 [22]。

附录

A 变换系数

本文所建立的超球簇模型在很大程度上依赖于使用式（19）给出的变换来计算各种矩阵元。对于三体问题，这类变换由 Raynal-Revai 系数 [23] 给出。对于多体问题， [1] 中提到了一种类似的变换，它也是 [36； 37] 中超球谐技术发展的组成部分。

采用当前的 $K_c = 0$ 选择时，只需要计算部分变换系数。第一个系数 $T_0^{(n)}{}_{,\ 000}(\gamma_1,\ \gamma_2)$ 等于 1。其余系数 $T^n_{\nu+1,\ \nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\ \gamma_2)$ 则由 $T^n_{\nu,\ \nu_1'\nu_2' l'}(\gamma_1,\ \gamma_2)$ 得出，如下所示。

这一推导的出发点是超角函数的递推关系 $\varphi^{(n)}_{K\nu lm}$，它可以很容易地从 Jacobi 多项式的递推关系中得到 [38]

$$\begin{aligned}\varphi^{(n)}_{K\nu+1lm}(\theta,\hat{\xi}) = &\frac{\mathcal{N}^{(n)}_{K\nu+1l}}{\mathcal{N}^{(n)}_{K\nu l}} a^{(n)}_{K\nu l}\varphi^{(n)}_{K\nu lm}(\theta,\hat{\xi}) + \frac{\mathcal{N}^{(n)}_{K\nu+1l}}{\mathcal{N}^{(n)}_{K\nu l}} b^{(n)}_{K\nu l}\cos 2\theta\varphi^{(n)}_{K\nu lm}(\theta,\hat{\xi}) \\ &- \frac{\mathcal{N}^{(n)}_{k\nu+1l}}{\mathcal{N}^{(n)}_{K\nu-1l}} c^{(n)}_{K\nu l}\varphi^{(n)}_{K\nu-1lm}(\theta,\hat{\xi}),\end{aligned} \tag{A.1}$$

其中，系数 a, b, c 由下式给出

$$\begin{aligned}a^{(n)}_{K\nu l} &= \frac{(2\nu+n/2+l-1)(n/2-l-3)(n/2+l-2)}{2(\nu+1)(\nu+n/2+l-1)(2\nu+n/2+l-2)}, \\ b^{(n)}_{K\nu l} &= \frac{(2\nu+K+n/2+l)(2\nu+K+n/2+l-1)}{(\nu+1)(n+2\nu+2K+2l-2)}, \\ c^{(n)}_{K\nu l} &= \frac{(2\nu+n-5)(\nu+l+1/2)(2\nu+n/2+l)}{2(\nu+1)(\nu+n/2+l-1)(2\nu+n/2+l-2)}.\end{aligned} \tag{A.2}$$

变换系数 $T^{(n)}_{\nu+1,\nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\gamma_2)$ 定义为乘积 $\varphi^{(n-3)}_{000}(\theta_2,\hat{}\xi_2)\varphi^{(n)}_{0\nu+10}(\theta_1,\hat{}\xi_1)$ 在坐标 $\{\theta_2,\hat{}\xi_2,\theta_1,\hat{}\xi_1\}$ 下，与超角函数 $\hat{}\,\hat{}$ 的乘积 $[\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 l}(\theta'_2,\hat{}\xi'_2)\times\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta'_1,\hat{}\xi'_1)]_0$ 在新坐标 $\{\theta'_2,\xi'_2,\theta'_1,\xi'_1\}$ 下的重叠，其中新坐标与原坐标之间的关系由式 (18) 给出。对 $\varphi^{(n)}_{0\nu+10}(\theta_1,\hat{}\xi_1)$ 使用 (A.1)，正交关系为

$$\langle\varphi^{(n)}_{K\nu l}(\theta,\hat{\xi})\mid\varphi^{(n)}_{K\nu' l}(\theta,\hat{\xi})\rangle=\delta_{\nu\nu'} \tag{A.3}$$

并利用（19）在新坐标系中重新表示 $\varphi^{(n)}_{0\nu+10}(\theta_1,\hat{}\xi_1)$，可得

$$T^{(n)}_{\nu+1,\nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\gamma_2)=\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu0}}b^{(n)}_{0\nu0}\sum_{\nu'_1+\nu'_2+l''=\nu}T^{(n)}_{\nu,\nu'_1\nu'_2 l''}(\gamma_1,\gamma_2)$$
$$\times\langle[\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 l}(\theta'_2,\hat{\xi}'_2)\times\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta'_1,\hat{\xi}'_1)]_0\mid\left[\varphi^{(n-3)}_{0\nu'_2 l''}(\theta'_2,\hat{\boldsymbol{\xi}}'_2)\times\cos2\theta_1\varphi^{(n)}_{K''\nu'_1 l''}(\theta'_1,\hat{\xi}'_1)\right]_0\rangle, \tag{A.4}$$

其中 $K''=2\nu'_2+l''$。接下来，利用

$$\cos2\theta_1=2\cos^2\theta_1-1=2\,\frac{(\gamma_1\boldsymbol{\xi}'_1+\gamma_2\boldsymbol{\xi}'_2)^2}{\rho^2}-1$$
$$=2\gamma_1^2\cos^2\theta'_1+4\gamma_1\gamma_2\cos\theta'_1\sin\theta'_1\cos\theta'_2\,(\hat{\boldsymbol{\xi}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\xi}}_2)+2\gamma_2^2\cos^2\theta'_2\sin^2\theta'_1-1 \tag{A.5}$$

$\hat{}$其中 $\boldsymbol{\xi}$ 是沿 $\boldsymbol{\xi}$ 方向的单位向量，变换系数可简化为以下四项，

$$T^{(n)}_{\nu+1,\nu_1\nu_2 l}(\gamma_1,\gamma_2)=(T.1)+(T.2)+(T.3)+(T.4), \tag{A.6}$$

它们分别对应 $\cos2\theta_1$ 中的四个不同项。其中最后一项（$T.4$）为零，因为它包含矩阵元 $\langle[\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 l}(\theta'_2,\hat{}\xi'_2)\times\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta'_1,\hat{}\xi'_1)]_0\left[\varphi^{(n-3)}_{0\nu'_2 l''}(\theta'_2,\hat{}\boldsymbol{\xi}'_2)\times\varphi^{(n)}_{K''\nu'_1 l''}(\theta'_1,\hat{}\xi'_1)\right]_0\rangle$，其中 $\nu_1+\nu_2+l'=\nu+1\neq\nu=\nu'_2+\nu'_1+l''$。其余三项的表达式将在下文推导。

A.1 来自（*T.1*）的贡献

该项来自 $2\gamma_1^2\cos^2\theta'_1$，其表达式如下：

$$(T.1)=\gamma_1^2\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu0}}b^{(n)}_{0\nu0}\sum_{\nu'_1+\nu'_2+l''=\nu}T^{(n)}_{\nu,\nu'_1\nu'_2 l''}\,\langle[\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 l}(\theta_2,\hat{\xi}_2)\otimes\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1,\hat{\xi}_1)]_{00}\mid$$
$$\times\left[\varphi^{(n-3)}_{0\nu'_2 l''}(\theta_2,\hat{\boldsymbol{\xi}}_2)\otimes(1+\cos2\theta_1)\varphi^{(n)}_{K''\nu'_1 l''}(\theta_1,\hat{\xi}_1)\right]_{00}\rangle. \tag{A.7}$$

由 (A.1) 可得

$$(1+\cos 2\theta)\varphi^{(n)}_{K\nu lm}(\theta,\hat{\xi}) = A^{(n)}_{K\nu l}\varphi^{(n)}_{K\nu+1lm}(\theta,\hat{\xi}) + (1-B^{(n)}_{K\nu l})\varphi^{(n)}_{K\nu lm}(\theta,\hat{\xi}) + C^{(n)}_{K\nu l}\varphi^{(n)}_{K\nu-1lm}(\theta,\hat{\xi}), \tag{A.8}$$

其中

$$A^{(n)}_{K\nu l} = \frac{N^{(n)}_{K\nu l}}{b^{(n)}_{K\nu l}N^{(n)}_{K\nu+1l}}, \qquad B^{(n)}_{K\nu l} = \frac{a^{(n)}_{K\nu l}}{b^{(n)}_{K\nu l}}, \qquad C^{(n)}_{K\nu l} = \frac{c^{(n)}_{K\nu l}}{b^{(n)}_{K\nu l}}\frac{N^{(n)}_{K\nu l}}{N^{(n)}_{K\nu-1l}}. \tag{A.9}$$

于是很容易得到

$$(T.1) = \gamma_1^2 t^{(1)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l} T^{(n)}_{\nu,\nu_1-1\nu_2 l}, \tag{A.10}$$

其中

$$t^{(1)}_{\nu,\nu_1\nu_2,l} = \frac{b^{(n)}_{0\nu 0}}{b^{(n)}_{K'\nu_1-1l}}\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}\frac{N^{(n)}_{K'\nu_1-1l}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}. \tag{A.11}$$

A.2 来自 *(T.2)* 的贡献

ˆˆ 这一项来自 $\cos 2\theta_1$ 中的 $4\gamma_1\gamma_2\cos\theta_1'\sin\theta_1'\cos\theta_2'(\boldsymbol{\xi}_1\cdot\boldsymbol{\xi}_2)$。

$$(T.2) = 4\gamma_1\gamma_2\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}b^{(n)}_{0\nu 0}\sum_{\nu_1'+\nu_2'+l''=\nu} T^{(n)}_{\nu,\nu_1'\nu_2'l''}\langle[\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 l}(\theta_2,\hat{\xi}_2)\times\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1,\hat{\xi}_1)]_{00}\,| \times\Big[\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2'l''}(\theta_2,\hat{\boldsymbol{\xi}}_2)\times(\hat{\boldsymbol{\xi}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\xi}}_2)\cos\theta_1'\cos\theta_2'\sin\theta_1'\varphi^{(n)}_{K''\nu_1'l''}(\theta_1,\hat{\xi}_1)\Big]_{00}\rangle. \tag{A.12}$$

使用

$$(\hat{\boldsymbol{\xi}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\xi}}_2)[Y_{l''}(\hat{\xi}_1)\times Y_{l''}(\hat{\xi}_2)]_{00} = -\sum_L\sqrt{\frac{2l''+1}{2L+1}}(10l''0|L0)^2[Y_L(\hat{\xi}_1)\times Y_L(\hat{\xi}_2)]_{00} \tag{A.13}$$

（A.12）可以进一步拆分为两个不同的项，即（$T.2.-$）和 $T.2.+$），分别对应于 $L=l''-1$ 和 $L=l''+1$。在继续推导它们之前，先引入以下记号会很有帮助:

$$\varphi^{(n)}_{K\nu lm}(\theta,\hat{\xi}) = \phi^{(n)}_{K\nu l}(\theta)Y_{lm}(\hat{\xi}) \tag{A.14}$$

来自（$T.2.-$）的贡献

推导此项时使用了以下矩阵元:

$$\begin{aligned}
&\langle\ \varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 lm}(\theta_2,\hat{\xi}_2)\mid \cos\theta_2\,\phi^{(n-3)}_{0\nu_2' l''}(\theta_2)\,Y_{l''-1m}(\hat{\xi}_2)\rangle\\
&=\delta_{l''-1,l}\delta_{\nu_2',\nu_2}\delta_{K'',K'+1}\frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l+1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}}\frac{\nu_2+l+3/2}{2\nu_2+(n-5)/2+l+1}\\
&+\delta_{l''-1,l}\delta_{\nu_2'+1,\nu_2}\delta_{K'',K'-1}\frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2-1 l+1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}}\frac{\nu_2}{2\nu_2+(n-5)/2+l-1},
\end{aligned}\tag{A.15}$$

这些可以通过具有不同节点数但其他参数相同的雅可比多项式之间的递推关系轻松得到。之后，需要对 $\cos\theta_1 \sin\ \theta_1$ 与超径向函θ_1,ξ_1的乘积进行积分。这需要特别注意，因为使用相同的递推关系会得到如下类型的矩阵元：$\langle\phi^{(n)}_{K\nu l}(\theta_1,\hat{}\xi_1)\mid\phi^{(n)}_{K'\nu l}(\theta_1,\hat{}\xi_1)\rangle$，它们并不等于$\delta_{KK'}$。因此，$\phi^{(n)}_{K''\nu_1' l''}(\theta_1)$被重新排列为关于 ν_1''的超角函数 $\phi^{(n)}_{K'\nu_1'' l}(\theta_1)$之和。在 $K''=K'+1$情形下，结果为

$$\begin{aligned}
&\langle\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1,\hat{\xi}_1)\mid\cos\theta_1\sin\theta_1\,\phi^{(n)}_{K'+1\nu_1' l+1}(\theta_1)\,Y_{lm}(\hat{\xi}_1)\rangle\\
&=-\delta_{\nu_1'+2,\nu_1}\frac{N^{(n)}_{K'+1\,\nu_1-2\,l+1}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}\frac{4(\nu_1-1)\nu_1}{(n+4\nu)(n+4\nu-2)}+...,
\end{aligned}\tag{A.16}$$

其中，... 表示不满足 $\nu_1+\nu_2+l=\nu+1$、因此不会对 $(T.2.-)$ 产生贡献的项。对于 $K''=K'-1$ 情况，得到如下结果，

$$\begin{aligned}
&\langle\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1,\hat{\xi}_1)|\cos\theta_1\sin\theta_1\phi^{(n)}_{K'-1\nu_1' l+1}(\theta_1)Y_{lm}(\hat{\xi}_2)\rangle\\
&=\delta_{\nu_1'+1,\nu_1}\frac{N^{(n)}_{K'-1\nu_1-1l+1}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}\frac{\nu_1(2\nu+n/2-\nu_1)}{(2\nu+n/2-1)(2\nu+n/2)}+...
\end{aligned}\tag{A.17}$$

其中，... 再次表示不满足 $\nu_1+\nu_2+l=\nu+1$ 且不对 $(T.2.-)$ 作出贡献的项。将所有内容汇总起来，得到

$$(T.2-)=-\gamma_1\gamma_2\left(t^{(2-+)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}T^{(n)}_{\nu\nu_1-2\nu_2 l+1}+t^{(2--)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}T^{(n)}_{\nu\nu_1-1\nu_2-1l+1}\right)\tag{A.18}$$

其中

$$\begin{aligned}
t^{(2-+)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}&=-\frac{l+1}{\sqrt{(2l+3)(2l+1)}}\frac{\nu_2+l+3/2}{2\nu_2+(n-5)/2+l+1}\frac{4(\nu_1-1)\nu_1}{(n+4\nu)(n+4\nu-2)}\\
&\times\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}b^{(n)}_{0\nu 0}\frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l+1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}}\frac{N^{(n)}_{K'+1\,\nu_1-2\,l+1}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}
\end{aligned}\tag{A.19}$$

and

$$t^{(2--)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l} = \frac{l+1}{\sqrt{(2l+3)(2l+1)}} \frac{4\nu_1(2\nu+n/2-\nu_1)}{(2\nu+n/2-1)(2\nu+n/2)} \frac{\nu_2}{2\nu_2+(n-5)/2+l-1} \times \frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}} b^{(n)}_{0\nu 0} \frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2-1l+1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}} \frac{N^{(n)}_{K'-1\nu_1-1l+1}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}. \tag{A.20}$$

贡献来自$(T.2.+)$

为推导这一项，使用以下公式:

$$\begin{aligned} &\langle\ \varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 lm}(\theta_2,\hat{\xi}_2) \mid \cos\theta_2\, \phi^{(n-3)}_{0\nu'_2 l''}(\theta_2)\, Y_{l''+1m}(\hat{\xi}_2)\rangle \\ &= \delta_{l''+1,l}\delta_{\nu'_2,\nu_2}\delta_{K'',K'-1} \frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l-1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}} \frac{\nu_2+(n-5)/2+l-1}{2\nu_2+(n-5)/2+l-1} \\ &+ \delta_{l''+1,l}\delta_{\nu'_2-1,\nu_2}\delta_{K'',K'+1} \frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2+1l-1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}} \frac{\nu_2+(n-5)/2-1/2}{2\nu_2+(n-5)/2+l+1} \end{aligned} \tag{A.21}$$

与前述 $(T.2.-)$ 的情况相同，对于涉及 $(\theta_1,\ \xi_1)$ 的超角函数的矩阵 ˆ 元素，需要进行特殊处理。采用与上述类似的策略，可得 $K''=K'-1$

$$\begin{aligned} &\langle\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1,\hat{\xi}_1)|\cos\theta_1\sin\theta_1\phi^{(n)}_{K'-1\nu'_1 l-1}(\theta_1)Y_{lm}(\hat{\xi}_2)\rangle \\ &= \delta_{\nu'_1,\nu_1}\frac{N^{(n)}_{K'-1\nu'_1 l-1}}{N^{(n)}_{K'\nu'_1 l}}\left(1-\frac{2\nu_1}{n+4\nu-2}\right)\left(1-\frac{2\nu_1}{n+4\nu}\right)+... \end{aligned} \tag{A.22}$$

而对于 $K''=K'+1$

$$\begin{aligned} &\langle\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1,\hat{\xi}_1)\mid\cos\theta_1\sin\theta_1\,\phi^{(n)}_{K'+1\nu'_1 l-1}(\theta_1)\,Y_{lm}(\hat{\xi}_1)\rangle \\ &= -\delta_{\nu'_1+1,\nu_1}\frac{N^{(n)}_{K'+1\nu_1-1l-1}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}\frac{2\nu_1}{n+4\nu-2}\frac{n+4\nu-2\nu_1}{n+4\nu}+... \end{aligned} \tag{A.23}$$

在 (A.22) 和 (A.23) 中，... 表示不满足$\nu_1+\nu_2+l=\nu+1$的项，因此不会对 $(T.2.+)$ 作出贡献。将所有结果汇总后，可得

$$(T.2.+)=\gamma_1\gamma_2\left(t^{(2+-)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}T^{(n)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l-1}+t^{(2++)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}T^{(n)}_{\nu,\nu_1-1\nu_2+1l-1}\right), \tag{A.24}$$

其中

$$t^{(2+-)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}=-4b^{(n)}_{0\nu 0}\frac{l}{\sqrt{(2l-1)(2l+1)}}\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}\frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l-1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}}\frac{N^{(n)}_{K'-1\nu_1 l-1}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}$$

$$\times \left(1-\frac{2\nu_2}{n+4\nu_2+2l-7}\right)\left(1-\frac{2\nu_1}{n+4\nu-2}\right)\left(1-\frac{2\nu_1}{n+4\nu}\right) \quad (A.25)$$

$$t^{(2++)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l} = 4b^{(n)}_{0\nu 0}\frac{l}{\sqrt{(2l-1)(2l+1)}}\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}\frac{N^{(n-3)}_{0\nu_2+1l-1}}{N^{(n-3)}_{0\nu_2 l}}\frac{N^{(n)}_{K'+1\nu_1-1l-1}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}}$$
$$\times \left(1-\frac{\nu_2+l+3/2}{2\nu_2+(n-3)/2+l}\right)\frac{2\nu_1}{n+4\nu-2}\frac{n+4\nu-2\nu_1}{n+4\nu}. \quad (A.26)$$

A.3 来自 $(T.3)$ 的贡献

该项源自 $\cos 2\theta_1$ 的 $2\gamma_2^2\cos^2\theta_2'\sin^2\theta_2'$ 部分，其表达式为

$$(T.3) = \gamma_2^2 b^{(n)}_{0\nu 0}\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}\sum_{\nu_1'+\nu_2'+l''=\nu} T^{(n)}_{\nu,\nu_1'\nu_2' l''}\langle[\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2 l}(\theta_2',\hat{\xi}_2')\times\varphi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1',\hat{\xi}_1')]_{00}\mid$$
$$\times\left[(1+\cos 2\theta_2')\,\varphi^{(n-3)}_{0\nu_2' l''}(\theta_2',\hat{\boldsymbol{\xi}}_2')\times\sin^2\theta_1'\varphi^{(n)}_{K''\nu_1' l''}(\theta_1',\hat{\xi}_1')\right]_{00}.\rangle \quad (A.27)$$

将 (A.8) 应用于 $(1+\cos 2\theta_2')\ \varphi^{(n-3)}_{0\nu_2' l''}(\theta_2',\hat{\boldsymbol{\xi}}_2')$ 后，$(T.3)$ 进一步分成三项，其中包含 $\langle\phi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1')\mid\sin^2\theta_1'|\phi^{(n)}_{K''\nu_1' l}(\theta_1')\rangle$ 以及 $K''=K'-2, K'$和 $K'+2$。为处理这些项，使用以下关系式：

$$(1-\cos 2\theta)\varphi^{(n)}_{K\nu lm}(\theta,\hat{\xi}) = -A^{(n)}_{K\nu l}\varphi^{(n)}_{K\nu+1lm}(\theta,\hat{\xi})+\left[1+B^{(n)}_{K\nu l}\right]\varphi^{(n)}_{K\nu lm}(\theta,\hat{\xi})$$
$$-C^{(n)}_{K\nu l}\varphi^{(n)}_{K\nu-1lm}(\theta,\hat{\xi}). \quad (A.28)$$

将此关系应用于 $K''=K$，即可得到其对 $(T.3)$ 的贡献，其中包含与 $(T.1)$ 中相同的量 $t^{(1)}_{\nu\ ,\nu_1\nu_2 l}$。对于 $K''=K'-2$，将关系式 (A.28) 应用于 $\langle\phi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1')\sin^2\theta_1'\mid$，然后借助雅可比多项式的递推关系，将 $K'-2$ 在 $\mid\phi^{(n)}_{K'-2\nu_1' l}(\theta_1')\rangle$ 中提高两个单位。这样便可使用正交关系 (A.3)。类似地，对于 $K''=K'+2$，将关系式 (A.28) 应用于 $\mid\sin^2\theta_1'\phi^{(n)}_{K'+2\nu_1' l}(\theta_1')\rangle$，然后将 K' 在 $\langle\phi^{(n)}_{K'\nu_1 l}(\theta_1')\mid$ 中提高两个单位。上述操作的最终结果为

$$(T.3) = \gamma_2^2 t^{(3.1)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}T^{(n)}_{\nu,\nu_1\nu_2-1l}-\frac{1}{2}\gamma_2^2\left(1-B^{(n-3)}_{0\nu_2 l}\right)t^{(1)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}T^{(n)}_{\nu,\nu_1-1\nu_2 l}$$
$$+\gamma_2^2 t^{(3.3)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l}T^{(n)}_{\nu,\nu_1-2\,\nu_2+1\,l}, \quad (A.29)$$

其中

$$t^{(3.1)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l} = \frac{(\nu_1+K'+n/2+l-3)_2}{(2\nu_1+K'+n/2+l-3)_2}b^{(n)}_{0\nu 0}A^{(n-3)}_{0\nu_2-1l}\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}\frac{N^{(n)}_{K'-2\nu_1 l}}{N^{(n)}_{K'\nu_1 l}} \quad (A.30)$$

and

$$t^{(3.3)}_{\nu,\nu_1\nu_2 l} = b^{(n)}_{0\nu 0}\frac{N^{(n)}_{0\nu+10}}{N^{(n)}_{0\nu 0}}\,\frac{N^{(n)}_{2\nu_2+l+2,\nu_1-2l}}{N^{(n)}_{2\nu_2+l,\nu_1 l}}\,\frac{\nu_1(\nu_1-1)}{(2\nu+n/2)(2\nu+n/2-1)}C^{(n-3)}_{0\nu_2+1\,l}. \tag{A.31}$$

超径向势的 B 矩阵元

B.1 项 $V^{(1)}$ 方向

该项包含 $A-1$ 核芯内玻色子之间的相互作用。有两种处理方法。

(1) 可以先对 $A-1$ 系统的超球角进行积分，得到 $\langle Y_0\ 1\ 2\ \ldots\ A-1\ \mid \sum_{i<j}^{A-1} V_{ij}\ \mid Y_0\ 1\ 2\ \ldots\ A-1\ \rangle = V_{A-1}\ \rho\quad\theta$ 31

(, , ,) (, , ,) (sin)。对于高斯相互作用( )，该式可用合流超几何函数 M(3 2 , $\frac{n-3}{2}$, _ $2\rho^2\sin_{a^2}{}^{2}\theta$) [20]表示。然后再对角度 θ进行积分。这种方法不包含任何$\delta_{\nu\nu'}$。(2) 本文所有数值计算均采用另一种方法，即选择不同的超球坐标 $\theta_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}|\boldsymbol{r}_{A-1} - \boldsymbol{r}_i|/\rho_c$，其中 $\rho_c = \rho\sin\theta_1$，同时保持cos θ_1的选择不变。在这些坐标中，二体势$V_{A-1,i}$ 是 $A-1$ 和 i之间的相互作用势；两者均属于 $A-1$ 核芯，该势是$\sqrt{2}\rho\sin\theta_1\cos\ \theta_2$的函数。将坐标($\gamma_1 = 0, \gamma_2 = 1$)变换为由 $\boldsymbol{\xi}'_1 = \boldsymbol{\xi}_2$ 和$\boldsymbol{\xi}'_2 = -\boldsymbol{\xi}_1$ 定义的新超球坐标后，$V_{A-1,i}$ 仅取决于$\cos\theta'_1$，因此计算 $V^{(1)}$ dir只需进行一次积分。由此得到以下表达式 $V^{(1)}$ dir：

$$\begin{aligned} V^{(1)}_{\mathrm{dir};\nu\nu'}(\rho) = {} & \frac{(A-1)(A-2)}{2}\,(\mathcal{N}_\nu\mathcal{N}_{\nu'})^{-1}\sum_{\nu_2=0}^{\min(\nu,\nu')}\delta_{\nu_1,\nu-\nu_2}\delta_{\nu'_1,\nu'-\nu_2} \\ & \times T^{(n)}_{\nu,\nu_1\nu_2 0}(0,1)\,T^{(n)}_{\nu',\nu'_1\nu_2 0}(0,1)\,v^{(n)}_{2\nu_2\nu'_1 0;\,2\nu_2\nu_1 0}(\rho), \end{aligned} \tag{B.1}$$

其中

$$v^{(n)}_{K'\nu' l;K'\nu l}(\rho) = \langle\phi^{(n)}_{K'\nu' l}(\cos\theta)|V(\rho\cos\theta)|\phi^{(n)}_{K'\nu l}(\cos\theta)\rangle. \tag{B.2}$$

B.2 术语 $V^{(2)}$ 方向和 V(1)例

超径向势中直接贡献的第二部分 $V^{(2)}$ dir 和交换贡献的第一部分 $V^{(1)}_{ex}$由 (26) 和 (27) 给出，二者非常相似。它们包含编号为 $A-1$ 和 A 的玻色子之间的相互作用。从 $V_{(2)\,\mathrm{dir}}$ 中的 Y_0 中取出玻色子 $A-1$，从 (1, ..., $A-2, A$) 中取出玻色子 A Y_0，并

从 $V_{(1)\mathrm{ex}}$ 中的 $(1,...,A-2,A-1)$ 取出玻色子 $A-1$ Y_0，随后进行图 1 所示的坐标变换，可得

$$V^{(2)}_{\mathrm{dir};\nu\nu'} + (A-1)V^{(1)}_{\mathrm{ex};\nu\nu'} = (A-1)\left(\mathcal{N}_\nu\mathcal{N}_{\nu'}\right)^{-1} \times \sum_{\nu_2 l}\left[1+(-)^l\right]\delta_{\nu_1,\nu-\nu_2-l}\delta_{\nu'_1,\nu-\nu'+\nu'_1}\delta_{K',2\nu_2+l} \times T^{(n)}_{\nu;\nu_1\nu_2 l}(\gamma^{(1)}_1,\gamma^{(1)}_2)\; T^{(n)}_{\nu';\nu'_1\nu_2 l}(\gamma^{(1)}_1,\gamma^{(1)}_2)\; v^{(n)}_{K'\nu'_1 l;K'\nu_1 l}(\rho) \tag{B.3}$$

with

$$\gamma^{(1)}_1 = \sqrt{\frac{1}{2}\frac{A}{(A-1)}}, \qquad \gamma^{(1)}_2 = \sqrt{\frac{1}{2}\frac{A-2}{A-1}} \tag{B.4}$$

B.3 项 $V_{(2)\mathrm{ex}}$ 和 $V^{(3)}_{\mathrm{ex}}$。

交换项 $V^{(2)}_{ex}$和 $V_{(3)ex}$ 相似。它们的和可写为

$$V^{(2)}_{\mathrm{ex};\nu\nu'} + V^{(3)}_{\mathrm{ex};\nu\nu'} = (A-2)\left(\mathcal{N}_\nu\mathcal{N}_{\nu'}\right)^{-1} \times \left[\langle Y_0(1,...,A-2,A)\varphi^{(n)}_{0\nu 0}(A-1)|V_{A-2,A}|Y_0(1,...,A-2,A-1)\varphi^{(n)}_{0\nu' 0}(A)\rangle + \langle Y_0(1,...,A,A-2)\varphi^{(n)}_{0\nu 0}(A-1)|V_{A-2,A-1}|Y_0(1,...,A-1,A-2)\varphi^{(n)}_{0\nu' 0}(A)\rangle\right]. \tag{B.5}$$

在第二项的记号中交换 A 和 $A-1$ 后可以看出，$V^{(2)}{}_{\mathrm{ex};\nu\nu'} = V^{(3)}{}_{\mathrm{ex};\nu'\nu}$。通过将 HCHs 中玻色子 A、$A-1$和 $A-2$的超角函数分离，并进行图 4 所示的坐标变换，可以计算其中任意一项。然后

$$V^{(2)}_{ex;\nu'\nu}(\rho) + V^{(3)}_{\mathrm{ex};\nu\nu'} = (A-2)\sum_{\nu_2=0}^{\nu} T^{(n-3)}_{\nu_2,\nu_2\,00}(\gamma^{(2)}_1,\gamma^{(2)}_2) \times \left[\; T^{(n)}_{\nu',\nu'_1\nu_2 0}(0,1)\,T^{(n)}_{\nu,\nu_1\nu_2 0}(\gamma^{(1)}_1,\gamma^{(1)}_2) + T^{(n)}_{\nu',\nu'_1\nu_2 0}(0,1)\,T^{(n)}_{\nu,\nu_1\nu_2 0}(\gamma^{(1)}_1,\gamma^{(1)}_2)\right] \times \delta_{\nu_1,\nu-\nu_2}\delta_{\nu'_1,\nu'-\nu_2}v^{(n)}_{K'\nu'_1 l;K'\nu_1 l}(\rho), \tag{B.6}$$

其中 $\gamma^{(2)}_{1\,2}$，为:

$$\gamma^{(2)}_1 = -\sqrt{\frac{2}{(A-2)(A-1)}}, \qquad \gamma^{(2)}_2 = \sqrt{\frac{(A-3)A}{(A-2)(A-1)}} \tag{B.7}$$

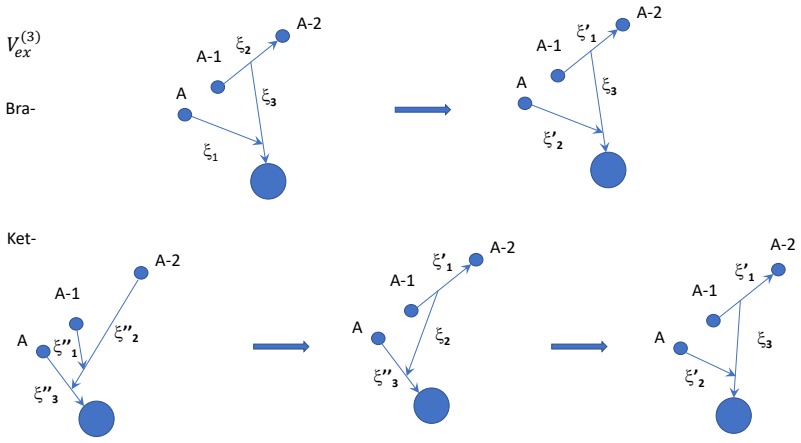

图 4 用于计算的坐标变换 $V^{(3)}$ 方向

B.4 术语 $V_{\rm ex}^{(4)}$

超径向势中最后一个交换项的计算，

$$V_{{\rm ex};\nu\nu'}^{(4)} = \frac{(A-2)(A-3)}{2}\left(\mathcal{N}_\nu \mathcal{N}_{\nu'}\right)^{-1} \times \langle Y_0(1,...,A-2,A)\varphi_{0\nu 0}^{(n)}(A-1)|V_{A-2,A-3}|Y_0(1,...,A-2,A-1)\varphi_{0\nu' 0}^{(n)}(A)\rangle, \tag{B.8}$$

基于分离玻色子 A、$A-1$、$A-2$ 和 $A-3$ 的超角函数，并进行图 5 所示的坐标变换。这将导致

$$V_{{\rm ex};\nu'\nu}^{(4)} = \frac{(A-2)(A-3)}{2}\sum_{\nu_2=0}^{\min(\nu,\nu')} T_{\nu,\nu_1\nu_2 0}^{(n)}(0,1)T_{\nu',\nu'_1\nu_2 0}^{(n)}(0,1)\,T_{\nu_2,\nu_2 00}^{(n-3)}(\gamma_1^{\mathcal{N}},\gamma_2^{\mathcal{N}}) \times \delta_{\nu_1,\nu-\nu_2}\delta_{\nu'_1,\nu'-\nu_2}v_{K'\nu'_1 l;K'\nu_1 l}^{(n)}(\rho). \tag{B.9}$$

致谢 本研究得到英国科学技术设施委员会（STFC）项目资助，资助编号为 ST/V001108/1。

参考文献

1. Yu. F. Smirnov 和 K.V. Shitikova，K谐波方法与壳模型，《苏联粒子与原子核杂志》，**8**，344（1977）

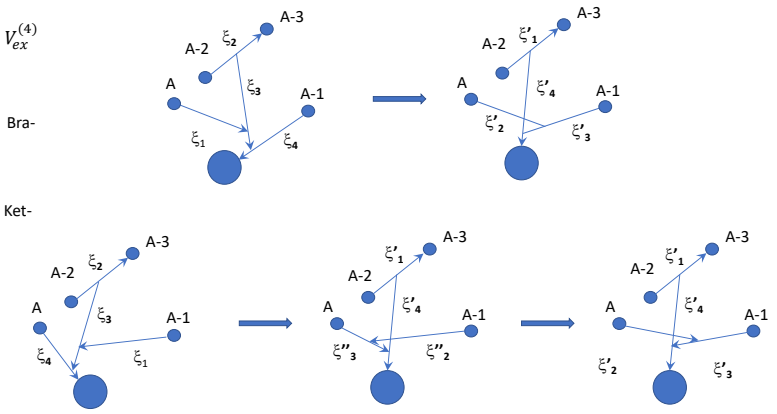

图 5 用于开发 $V_{\rm ex}^{(4)}$ 的坐标变换

2. L.E. Marcucci、J. Dohet-Eraly、L. Girlanda、A. Gnech、A. Kievsky、M. Viviani：《超球谐方法：检验和改进核相互作用模型的工具》，《物理学前沿》8，69（2020） 3. J. Avery，《超球谐函数与广义斯特姆函数》，Kluwer 学术出版社，2000 4. N.Barnea、W.Leidemann、G.Orlandini，含有 $A > 4$ 的原子核在超球形式下的基态波函数，《核物理》A650，427（1999） 5. R. Adam、S. Sofianos、H. Fiedeldey、M. Ripelle，适用于更大原子核的积分微分方程方法。《物理学杂志 G》18，1365，（1999） 6. N.K. Timofeyuk，改进N体问题中超球基的构造方法：在玻色子系统中的应用，《物理评论》**C** 78，054314（2008） 7. A. Kievsky、A. Polls、B. Juli´a-D´ıaz 和 N. K. Timofeyuk，领先阶描述下氦滴的饱和性质。《物理评论 A》90，96 040501(R)（2017） 8. N.K. Timofeyuk，超球形式下价核子的长程行为，《物理评论 C》76，044309（2007） 9. P. Naidon 和 S. Endo，《Efimov物理：综述》，《物理学进展报告》80，056001（2017） 10. Efimov, V.：三体系统中共振两体力产生的能级。《物理快报 B》33，563（1970） 11. M. Kunitski 等，氦三聚体Efimov态的观测，《科学》，第348卷，第6234期，第551页（2015） 12. M. Kunitski，《通过库仑爆炸成像研究小氦团簇》。载于：Slenczka, A.、Toennies, J.P.（编）《超流氦纳米液滴中的分子》。《应用物理专题》第145卷。施普林格，查姆。（2022） 13. M. Gattobigio 和 A. Kievsky，Efimov物理N体领域中的普适性与标度，《物理评论 A》90，012502（2014） 14. A. Kievsky、N. K. Timofeyuk 和 M. Gattobigio，离散尺度不变性下的N玻色子谱，《物理评论 A》90，032504（2014） 15. A.Kievsky、M.Gattobigio、N.K.Timofeyuk，粒子数增加的玻色子系统中的Efimov谱，《少体系统》55，945（2014） 16 1994 17 66，1105 1 . K. Riisager，核晕态，《现代物理评论》——1994年7月出版。Bhasin, V.S.、Mazumdar, I.《晕核结构性质与Efimov效应的三体方法》。载于：《少体动力学、Efimov效应与晕核》。

《物理学讲义》。施普林格，查姆。（2021年）18. G.R. Satchler，
Direct Nuclear Reactions（牛津大学出版社，纽约，1983年）19. Ortiz, J. V. 布吕克纳轨道、戴森轨道和关联势。《国际量子化学杂志》，100，1131（2004年）20. N.K. Timofeyuk，随着玻色子系统中粒子数增加，超球谐展开的收敛性，《物理评论》**A** 86，032507（2012年）21. P. Descouvemont 和 M. Dufour，微观簇模型，载于：《原子核中的簇》，《物理学讲义》848(2)：1-66（2012年）22. N. Barnea 和 A. Novoselsky，《物理年鉴》（纽约）256，192（1997年）；《物理评论》A 57，48（1998年）23. J. Raynal 和 J. Revai，《新物理学杂志A辑》68，612（1970年）24. J. Burkardt，https://people.math.sc.edu/Burkardt/f src/jacobi rule/jacobi rule.f90（2010年）25. M. Gattobigio、A. Kievsky 和 M. Viviani，利用软核势计算多达六个原子的氦簇能谱，《物理评论》**A** 84，052503（2011年）26. D. Baye，拉格朗日网格法，《物理报告》565，1（2015年）27. N.K. Timofeyuk 和 D. Baye，一维玻色子系统的拉格朗日网格超球谐函数展开，《少体系统》58，157（2017年）28. M. H. Macfarlane 和 J. B. French，《现代物理评论》32，567（1960年）29. R.Schiavilla、V.R.Pandharipande、R.B.Wiringa，$= 3$ 和4核中的动量分布，《核物理》A449，219（1986年）30. Ortiz, J. V. 用于描述分子中电子的戴森轨道概念。《化学物理学杂志》153，070902（2020年）31. N. K. Timofeyuk，反应理论中的重叠函数：挑战与未决问题，《物理学杂志》**G** 41 094008（2014年）32. D.Baye、N.K.Timofeyuk，生成坐标法中的顶点常数与核子-核子势问题，《物理快报》293B，13（1992年）33. A.M.Mukhamedzhanov、L.D.Blokhintsev，核反应与核天体物理学中的渐近归一化系数，《欧洲物理学杂志》A 58，29（2022年）34. N.K.Timofeyuk、I.J.Thompson，镜像三体系统中的谱因子和渐近归一化系数，《物理评论》C 78，054322（2008年）35. J.S. Winfield 等，利用放射性束流通过（p, d）反应从 ^{11}Be$_{gs}$ 中进行单中子转移，《核物理》A683，48（2001年）36. M. Viviani，A体系统的超球谐函数变换系数，《少体系统》25，177（1998年）37. J Dohet-Eraly、M Viviani，计算对称或反对称超球谐函数的正交归一基，《计算物理通讯》253，107183（2020年）38. M. Abramowitz、I. A. Stegun，《数学函数手册》，多佛出版社，纽约（1965年）