arXiv:2602.12225v1 [cond-mat.quant-gas] 12 Feb 2026

^{4}He 四聚体的第二激发态

A. Deltuva*Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lithuania*（收稿日期：2025年10月13日）

四玻色子普适性表明，冷 ^{4}He原子系统中存在第二激发四聚体态。该态并不束缚，但可能在原子-三聚体散射中表现为共振。本文采用动量空间跃迁算符框架，结合两种现实原子间势，对这一过程进行了严格计算。 S波相移和散射截面在激发三聚体阈值以下呈现共振行为，但P 波和 D 波也有显著的非共振贡献。本文确定了共振态的位置和宽度，并发现后者存在显著的有限程效应。

I. 引言

原子 ^{4}He少体系统是自然实现Efimov物理 [1, 2]的最典型实例之一。双原子散射长度 a 远大于原子间范德瓦耳斯相互作用 $r_{\rm vdW}$ 的作用范围和有效程，仅支持一个极弱束缚的双原子态，即 S波二聚体，其结合能为 $B_2 \sim \hbar^2/m_a a^2 \sim 1$ 毫开尔文， m_a 为原子质量。因此 [3–5], 由三个和四个 ^{4}He原子组成的系统中也应存在若干弱束缚态。事实上，采用现实相互作用模型 [6, 7] 进行的多项计算预测了三聚体 [8–16], 的两个态：一个深束缚态，结合能为 $B_3 \sim 100\,B_2$；另一个浅束缚态，靠近原子-二聚体阈值， $B_2 < B_3^* < 2\,B_2$。类似地，预测还表明，四原子系统 [8, 10, 14, 15, 17], 中也存在两个束缚态：一个深束缚态，另一个浅束缚态，靠近原子-三聚体阈值。对于后一种情况，各项计算预测的结合能存在显著差异，只有三项最先进的计算 [10, 15, 17]结果较为一致。上述四聚体态与三聚体基态相关，其结合能分别约为 $B_4 \sim 4.5\,B_3$和 $B_4^* \sim 1.01\,B_3$。

在理想的 Efimov 情景中，每个三聚体态 [18–20]都应对应两个四聚体态。与三聚体激发态对应的四聚体并非真正的束缚态，而是位于连续谱中的类共振不稳定束缚态（UBS）[21, 22]。利用简单的可分离势，已高精度地计算出它们的性质 [20, 22, 23]。文献 [23] 的结果表明，对于对应于真实 ^{4}He 原子系统的 B_3^*/B_2 取值，只有一个与之对应且可观测的四聚体，即较深的那个。当 $1/a$从幺正极限增大并趋近物理点时，较浅的四聚体会经由二聚体-二聚体阈值转变为虚态，并远离物理区域，因此变得不可观测。图 1 展示了 ^{4}He 四原子系统中能级和阈值的示意图

对于由 ^{4}He 原子组成的真实体系，第二激发

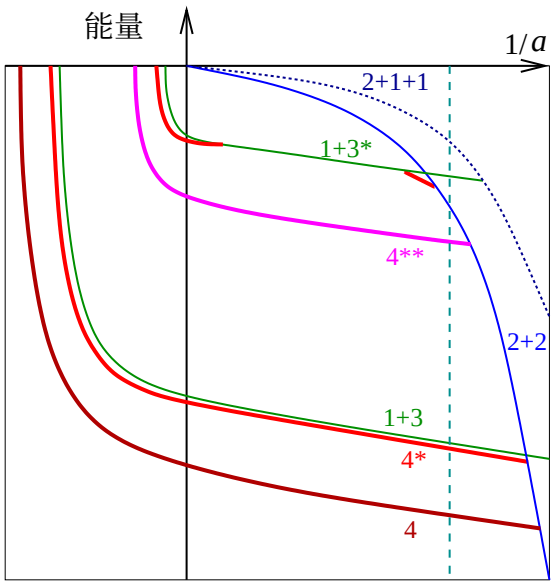

图 1.（在线彩色）四个 ^{4}He 原子组成的体系的 Efimov图示意图，即能级和阈值随双原子散射长度的倒数变化的关系图。图中仅展示了两族态。四聚体的能量以粗曲线表示；标记为 4、4* 和 4** 的曲线分别对应基态、第一激发态和第二激发态。细曲线表示少体团簇阈值。竖直虚线标示物理的 ^{4}He 点。

四聚体态此前从未被计算过。相关的主要困难有两个：（i）该态并非束缚态，而是位于双团簇阈值之上的高能原子-三聚体散射态；然而，绝大多数 ^{4}He四体计算针对的都是束缚态[8, 14, 15] 或原子-三聚体阈值附近的态 [10]；（ii）两个 ^{4}He原子之间的真实相互作用具有微弱吸引性的范德瓦耳斯尾和极强的短程排斥 [6, 7, 24], , 使数值求解极具挑战性，且对细节非常敏感，尤其是对空间延展态而言。近期，人们采用Alt、Grassberger和Sandhas（AGS）方程 [25] 求解四粒子跃迁算符，并结合“软化与外推”方法 [17], 克服了这些困难；该方法逐渐减弱

短程排斥的强度，从而能够精确求解动力学方程，随后再将结果外推回原始势。文献 [17] 在动量空间求解四体方程，不仅得到了四聚体结合能，还计算了原子-三聚体和二聚体-二聚体散射长度。

本工作的目的是将参考文献 [17] 中的动量空间方法应用于激发三聚体阈值附近的原子-三聚体散射计算，并提取共振态（四聚体的第二激发态）的性质。我们还将进一步讨论该态的可观测性、对模型的依赖性以及有限程效应的重要性。

第二节简要回顾了利用跃迁算符描述四体散射的方法，并介绍计算中的关键方面。第三节给出共振态附近原子-三聚体散射的结果。讨论和结论汇总于第六节。

II. 原子-三聚体散射方程

AGS方程 [25] 可视为Faddeev-Yakubovsky方程 [26]的积分形式。后者以波函数分量的形式表述，而AGS方程

$$\mathcal{U}_{11} = P_{34}(G_0 t G_0)^{-1} + P_{34}U_1 G_0 t G_0 \mathcal{U}_{11} + U_2 G_0 t G_0 \mathcal{U}_{21}, \tag{1a}$$

$$\mathcal{U}_{21} = (1+P_{34})(G_0 t G_0)^{-1} + (1+P_{34})U_1 G_0 t G_0 \mathcal{U}_{11}, \tag{1b}$$

则将四粒子跃迁算符 $\mathcal{U}_{\beta\alpha}$ 与二粒子跃迁算符联系起来

$$t = v + vG_0 t \tag{2}$$

以及 3+1 和 2+2子系统跃迁算符

$$U_\alpha = P_\alpha G_0^{-1} + P_\alpha t G_0 U_\alpha. \tag{3}$$

上述方程假设满足玻色对称性， v 是二体势，

$$G_0 = (E + i0 - H_0)^{-1} \tag{4}$$

是系统可用能量 E下的自由四体预解算子， H_0 是动能算符。希腊字母下标 $\alpha = 1$ (2) 表示 3+1 (2+2) 簇分组， $P_1 = P_{12}\,P_{23} + P_{13}\,P_{23}$和 $P_2 = P_{13}\,P_{24}$，其中 P_{ab}是粒子 a 和 b的置换算符。

AGS方程 (1) 在动量空间分波表示$|k_x k_y k_z[(l_x l_y) j l_z] J M\rangle_\alpha$中求解，转化为一个包含三个连续变量 k_x, k_y, k_z 的积分方程组，这些变量是雅可比动量 [27] 的大小。对其

表I. 以毫开尔文为单位计算得到的二聚体和三聚体结合能。数值误差最多为最后一位有效数字的1。最后一行包含使用 l_x、$l_y \le 8$得到的 LM2M2 结果。

	B_2	B_3^*	B_3
PCJS	1.6125	2.646	131.58
LM2M2	1.3094	2.277	126.30
LM2M2(8)	1.3094	2.278	126.50

离散化后，可得到一个大型线性代数方程组。轨道角动量 l_x, l_y, l_z 分别与雅可比动量 k_x, k_y, k_z 相关联。它们耦合为总角动量 J，其投影为 M；而 j 是中间角动量。关于求解方法的更多详情，请参见文献 [17, 27]。

原子-三聚体散射的分波振幅作为壳上矩阵元计算得到

$$\mathcal{T}_J(E) = 3\langle \phi p J | \mathcal{U}_{11} | \phi p J \rangle \tag{5}$$

它们是道态$|\phi p J\rangle$ [27]之间的跃迁算符 $\mathcal{U}_{11}$ 的壳上矩阵元。这些态是三聚体基态费德耶夫振幅 ϕ 与自由波的直积，描述原子-三聚体运动，其总角动量为J，相对双簇动量为 p，并与总能量 $E = -B_3 + p^2/2\mu$相关；其中 $\mu = 3m_a/4$ 为约化质量。式（5）中的因子 3 源于对称化。

这一散射振幅与单道 S矩阵及散射相移 δ_J 之间的关系遵循标准形式，即:

$$\mathcal{S}_J(E) = e^{2i\delta_J(E)} = 1 - 2i\pi\mu p \mathcal{T}_J(E). \tag{6}$$

注意，道态的宇称由 $\Pi = (-1)^J$ 给出，因为三聚体的总自旋为零。

III. 结果

结果采用两种真实的原子间^{4}He势计算得出。Aziz 和 Slaman 提出的较早参数化势 LM2M2 [6] 被广泛用作基准，而 Przybytek 等人提出的势（PCJS） [24] 则是最新、最复杂的势之一。两者的 B_2 和 B_3^* 预测相差约 20%，因此可用于探究模型依赖性。与所有真实的 ^{4}He势一样，它们在范德瓦耳斯尾处具有微弱吸引性，在短距离处则有强排斥；采用文献 [17]中的“软化与外推”方法可可靠地处理这一难题。计算纳入了 l_x、 l_y、 $l_z \le 6$ 分波，其中三聚体激发态（基态）的结合能收敛精度优于 0.1%（0.2%）。采用文献 [13] 推荐的 $\hbar^2/m_a = 12.11928\text{K}\,^\circ\text{A}^2$ 值。表I汇总了二聚体和三聚体结合能的数值。

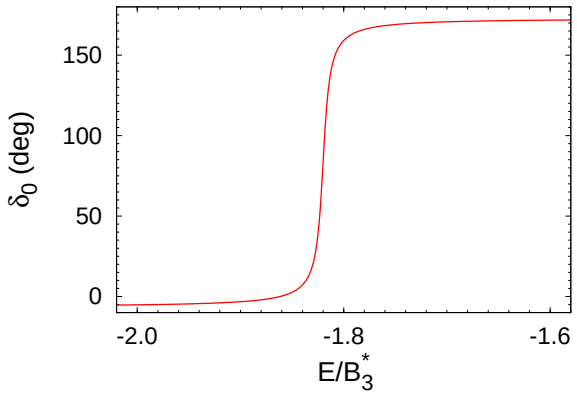

图2.（在线彩色）LM2M2 相互作用模型中第二激发四聚体态附近 $J=0$ 相移的能量依赖性。

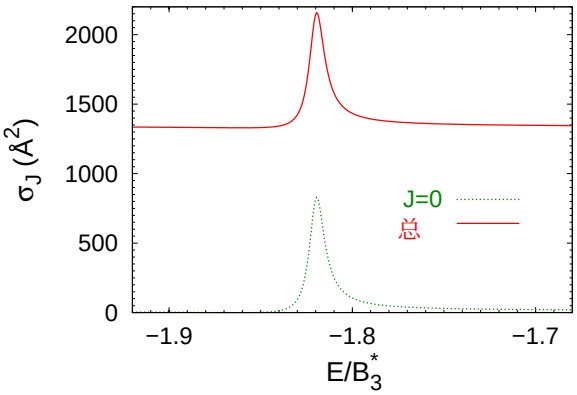

图3。（在线彩色）使用 LM2M2 相互作用模型计算的总截面及其 J =0 贡献随能量的变化，所示范围为第二激发四聚体态附近。

求解原子-三聚体散射方程（1）并计算相移（6），可发现 $J=0$ 态在能量$E\approx -1.8\,B_3^*$附近呈现出非常明显的共振行为。结果表明，在这一区域，相移可以很好地参数化为缓慢变化的背景贡献与共振贡献之和 [28], ，即

$$\delta_J(E)=\varphi_0+\varphi_1\frac{E}{B_3^*}+\arcsin\left[\frac{\Gamma/2}{\sqrt{(E+B_4^{**})^2+(\Gamma/2)^2}}\right]. \tag{7}$$

这里 B_4^{**}参数化了共振位于四个自由粒子的阈值以下的位置，而 Γ 是其宽度，即在复能量平面上，四粒子 S矩阵和跃迁算符的极点位于 $-B_4^{**}-i\Gamma/2$。LM2M2势的相移如图2所示，其中式(7)中各参数的取值为 $\varphi_0=-7.8$(1)度、 $\varphi_1=-0.51$(3)度、$B_4^{**}/B_3^*=1.82$(2)和 $\Gamma/B_3^*=0.010$(1)。由于第二激发四聚体态与第一激发三聚体相关联，在式(7)中选择 B_3^* 作为最自然的能量尺度。尽管如此，也可以采用 B_3 ，其比值取自表I。

$J=0$ 态对总截面的贡献

$$\sigma_J(E)=4\pi(2J+1)\frac{\sin\delta_J(E)}{p^2} \tag{8}$$

如图3所示，呈现出一个尖锐的共振峰；与背景相比，散射截面增大了100倍。

然而，需要牢记的是，所考虑的能区远高于原子-三聚体阈值，因此其他具有 $J>0$ 的分波也会有所贡献。这些分波并未表现出共振行为，在所考虑的能区内，相应的相移和散射截面均无显著变化。它们在 $J=0$ 共振能量处的数值汇总于表 II。它看来，在此能量下， $J=1$ 波和 $J=2$ 波的相移与散射截面数值都相当可观；对于 $J=1$ 情形，其贡献甚至超过了共振贡献。相比之下，在 $J=3$ 波及更高阶波中，相移的绝对值低于 1 度，对总散射截面的贡献完全可以忽略，低于 1 $^\circ$A^2。

表 II. 在对应于 $J=0$散射截面峰的能量处的相移及其对总截面的贡献。结果使用 LM2M2 势计算。

J	δ_J (度)	σ_J ($^\circ$A^2)
0	90.0(1)	830(1)
1	-41.1(1)	1076(3)
2	14.3(1)	253(2)

使用 PCJS 势 [24] 进行的计算得到了非常相似的结果。提取出的 B_4^{**}/B_3^*和 Γ/B_3^*值汇总于表 III。

表 III. 第二激发四聚体态的位置和宽度相对于激发三聚体结合能的比值。普适结果对应于 LM2M2 势的 $B_3^*/B_2=1.74$ 比值。

	B_4^{**}/B_3^*	Γ/B_3^*
PCJS	1.79(2)	0.009(1)
LM2M2	1.82(2)	0.010(1)
普适	1.888(1)	0.0048(1)

IV. 讨论与结论

普适的 Efimov 情景预言，在真实的冷 ^{4}He 原子体系中存在第二激发四聚体态。该态远高于原子加基态三聚体阈值，是连续谱中的不稳定束缚态，可视为原子-三聚体碰撞中的共振。通过采用动量空间跃迁算符框架并结合“软化与外推”方法[17]，我们克服了处理包含范德华势和强排斥势的四体散射时遇到的困难。

$J = 0$ 态中的共振行为非常明显。不过，总角动量较高的态对非共振截面的贡献显著，因此，如图3所示，峰值处原子-三聚体总散射截面的增幅约为60%。这一现象应该可以观测到，尽管其峰值不如由单一 $J = 0$ 态主导的阈值处复合[19, 29], 所预测的峰值那么显著。

另一个重要问题是有限程效应对真实的原子间 ^{4}He 势有何影响，以及它们与严格普适（零程）Efimov 情形相比如何。后者的结果可参见文献 [23]„ 并列于表 III。对于结合能比与 LM2M2 势相同的普适系统，其第二激发四聚体态的特征由$B_4^{**}/B_3^* = 1.888(1)$ 和 $\Gamma/B_3^* = 0.0048(1)$ 给出。将其与 LM2M2 的直接结果比较可见，有限程效应相当显著，尤其是共振宽度，是普适预测值的两倍。模型依赖性通过 LM2M2 与 PCJS 势结果之差估算，显著性要小得多。不过，在共振位置的绝对值上，模型依赖性更为明显：LM2M2 为 $B_4^{**} = 4.14(4)$ 毫开尔文，PCJS 为 4.74(5) 毫开尔文；而宽度几乎相同，分别为 $\Gamma = 0.023(2)$ 毫开尔文和 0.024(2) 毫开尔文。

因此，尽管其部分被高阶波掩盖，第二激发态 ^{4}He四聚体应能在原子-三聚体碰撞中以相当尖锐的共振形式观测到；由于有限程效应，该共振会有所展宽。

[1] V. Efimov，《物理快报B》33，563（1970）。[2] M. Kunitski *et al.*，《科学》348，551（2015）。[3] E. Braaten 和 H.-W. Hammer，《物理报告》428，259（2006）。[4] P. Naidon 和 S. Endo，《物理进展报告》80，056001（2017）。[5] A. Kievsky、M. Gattobigio、L. Girlanda 和 M. Viviani，《核与粒子科学年度评论》71，465（2021）。[6] R. A. Aziz 和 M. J. Slaman，《化学物理学杂志》94，8047（1991）。[7] M. Przybytek、W. Cencek、J. Komasa、G. Lach、B. Jeziorski 和 K. Szalewicz，《物理评论快报》104，183003（2010）。[8] D. Blume 和 C. H. Greene，《化学物理学杂志》112，8053（2000）。[9] P. Barletta 和 A. Kievsky，《物理评论A辑》64，042514（2001）。[10] R. Lazauskas 和 J. Carbonell，《物理评论A辑》73，062717（2006）。[11] H. Suno 和 B. D. Esry，《物理评论A辑》78，062701（2008）。[12] E. Kolganova、A. Motovilov 和 W. Sandhas，《粒子与原子核物理》40，206（2009）。[13] V. Roudnev 和 M. Cavagnero，《物理学B辑：原子、分子与光学物理》45，025101（2011）。[14] T. K. Das、B. Chakrabarti 和 S. Canuto，《化学物理学杂志》134，164106（2011年）。[15] E. Hiyama 和 M. Kamimura，《物理评论A辑》85，022502（2012年）。[16] A. Deltuva，《少体系统》56，897（2015年）。[17] A. Deltuva，《物理评论A辑》105，043310（2022年）。[18] H. W. Hammer 和 L. Platter，《欧洲物理杂志A辑》32，113（2007年）。[19] J. von Stecher、J. P. D’Incao 和 C. H. Greene，《自然·物理》5，417（2009年）。[20] A. Deltuva，《物理评论A辑》82，040701(R)（2010年）。[21] A. M. Badalyan、L. P. Kok、M. I. Polikarpov 和 Y. A. Simonov，《物理报告》82，31（1982年）。[22] A. Deltuva，《欧洲物理快报》95，43002（2011年）。[23] A. Deltuva，《少体系统》54，569（2013年）。[24] M. Przybytek、W. Cencek、B. Jeziorski 和 K. Szalewicz，《物理评论快报》119，123401（2017年）。[25] P. Grassberger 和 W. Sandhas，《核物理B辑》2，181（1967年）；E. O. Alt、P. Grassberger 和 W. Sandhas，联合核子研究所报告 No. E4-6688（1972年）。[26] O. A. Yakubovsky，《苏联核物理学杂志》5，937（1967年）。[27] A. Deltuva 和 A. C. Fonseca，《物理评论C辑》75，014005（2007年）。[28] J. R. Taylor，*Scattering Theory*（约翰·威立父子公司，纽约，1972年）。[29] A. Deltuva，《物理评论A辑》85，012708（2012年）。