第 51 卷 第 6 期 2002 年 6 月
1000-3290/2002/51(06)/1163-04
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.51, No.6, June, 2002
©2002 Chin. Phys. Soc.

含有非谐振势系统能谱的研究*

黄博文　王德云
(首都师范大学物理系，北京　100037)

(2001 年 9 月 27 日收到；2001 年 11 月 9 日收到修改稿)

非谐振势 $V(x)=\lambda x^4$ 有着广泛的应用，对其能谱的研究有着重要的意义．采用超对称量子力学和变分法，求解含有非谐振势系统的能谱．

关键词：超对称量子力学，变分法，非谐振势
PACC：0365

1．引　　言

非谐振势 $V(x)=\lambda x^4$ 在分子物理学、原子物理学、量子光学、固态物理学等领域有着重要的意义，因而，含有非谐振势系统的问题一直引起人们的关注[1-3]．

20 世纪 70 年代建立和发展起来的超对称量子力学(SSQM)，为人们研究量子力学问题独辟蹊径，从而使更多的有意义的势求得能谱和波函数[4]．

我们在研究中发现，将超对称量子力学和变分法相结合，是研究含有非谐振势系统问题的一种有效方法，能够方便地求解出这类问题的能谱；而且，所得结论更具参考价值．

本文简要介绍了超对称量子力学和变分法相结合处理问题的基本方法；运用这种方法求解含有非谐振势系统的能谱．

2．变分法与 SSQM

假设量子体系的 Hamiltonian 算符为 H，那么体系能量的本征值可以在一定边值条件下，通过解 Schrödinger 方程

$$H\Psi = E\Psi \tag{1}$$

得到．设 Ψ 满足归一化条件

$$\int \Psi^{*}\Psi \mathrm{d}\tau = 1, \tag{2}$$

那么，体系在任意状态 Ψ 的能量平均值为

$$\overline{E}(\Psi) = \int \Psi^{*} H\Psi \mathrm{d}\tau . \tag{3}$$

显然，$\overline{E}$ 是状态波函数 Ψ 的泛函，记作 $\overline{E}(\Psi)$．可以证明[5]，求解 Schrödinger 方程(1)式等价于解变分方程

$$\delta\overline{E}(\Psi) = 0, \tag{4}$$

该式称为量子力学中的能量变分原理．

在一维量子力学问题中，若要通过能量变分原理确定能级，首先要假设归一化的试探波函数 $\Phi_m(x,b)$，使其满足 Schrödinger 方程，即

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\Phi_m(x,b) = \overline{E}_m(b)\Phi_m(x,b), \tag{5}$$

其中能级 $\overline{E}_m(b)$ 可通过下式求出

$$\overline{E}_m(b) = \int \Phi_m^{*}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\Phi_m \mathrm{d}x, \tag{6}$$

而参数 b 满足方程

$$\frac{\delta\overline{E}_m(b)}{\delta b} = 0. \tag{7}$$

对于非破缺的 SSQM[6]，首先应知道基态波函数 Ψ_0，并且 Ψ_0 满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_-(x)\right]\Psi_0 = 0. \tag{8}$$

则超势 $W(x)$ 为

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\frac{\Psi_0'}{\Psi_0}, \tag{9}$$

* 北京市自然科学基金(批准号：1952004)资助的课题．

依 Riccati 方程,相应的伙伴势分别是

$$V_-(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}W'(x), \quad (10a)$$

$$V_+(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}W'(x). \quad (10b)$$

将 SSQM 与变分法相结合,由(5)式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) - \bar{E}_m\right]\Phi_m(x,b) = 0, \quad (11)$$

可以看出 $\Phi_m(x,b)$便是非破缺的 SSQM 中的基态波函数 Ψ_0,即

$$\Psi_0 = \Phi_m(x,b) = \Phi_m^{(-)}(x,b), \quad (12)$$

从而,超势为

$$W_m(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\frac{\Phi_m'}{\Phi_m}, \quad (13)$$

其伙伴势为

$$V_-(x) = V(x) - \bar{E}_m = W_m^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}W_m', \quad (14a)$$

$$V_+(x) = W_m^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}W_m' = V_-(x) + \frac{2\hbar}{\sqrt{2\mu}}W_m'. \quad (14b)$$

由 SSQM 可知,$V_-(x)$的能级 $E_{m+n}^{(-)}$和 $V_+(x)$的能级 $E_{m+n}^{(+)}$以及波函数$\Phi_{m+n}^{(-)}$和$\Phi_{m+n}^{(+)}$分别满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\mu}}\frac{d^2}{dx^2} + V_-(x)\right]\Phi_{m+n}^{(-)} = E_{m+n}^{(-)}\Phi_{m+n}^{(-)}, \quad (15a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\mu}}\frac{d^2}{dx^2} + V_+(x)\right]\Phi_{m+n}^{(+)} = E_{m+n}^{(+)}\Phi_{m+n}^{(+)}; \quad (15b)$$

并且满足关系式

$$E_{m+n}^{(+)} = E_{m+n+1}^{(-)}, (n = 0,1,2,\cdots), \quad (16)$$

$$\Phi_{m+n}^{(+)} = [E_{m+n+1}^{(-)}]^{\frac{1}{2}}A_m\Phi_{m+n+1}^{(-)}, \quad (17a)$$

$$\Phi_{m+n+1}^{(-)} = [E_{m+n}^{(+)}]^{\frac{1}{2}}A_m^+\Phi_{m+n}^{(+)}. \quad (17b)$$

其中

$$A_m = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\frac{d}{dx} + W_m(x), \quad (18a)$$

$$A_m^+ = -\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\frac{d}{dx} + W_m(x). \quad (18b)$$

如果超对称伙伴势 $V_-(x,a_1)$和 $V_+(x,a_0)$满足关系[7]

$$V_+(x,a_0) = V_-(x,a_1) + R(a_1), \quad (19)$$

则称 V_-和 V_+具有形不变性.其中 a_0 是一组参数,a_1 是 a_0 的函数,即 $a_1 = f(a_0)$,余项 $R(a_1)$与 x 无关.具有形不变性的系统很容易求出能量本征值,其方法是构造一个 Hamiltonian 量序列.

$$H^{(s)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + V_-(x,a_s) + \sum_{k=1}^{s}R(a_k), \quad (20)$$

$s = 0,1,2,3,\cdots, a_s = f^s(a_0)$,即 f 作用于 a_0 共 s 次.依照(19)式和(20)式有

$$\begin{aligned} H^{(s+1)} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + V_-(x,a_{s+1}) + \sum_{k=1}^{s+1}R(a_k) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + V_+(x,a_s) + \sum_{k=1}^{s}R(a_k). \quad (21)\end{aligned}$$

我们称 $H^{(s)}$和 $H^{(s+1)}$为一对超对称伙伴 Hamiltonian 量,除了 $H^{(s)}$的最低一级能级外,它们具有相同的能谱,由(19)式和 $E_m^{(-)} = 0$ 可得出 $H^{(s)}$的最低一级能谱为

$$E_m^{(-)} = \sum_{k=1}^{s}R(a_k). \quad (22)$$

按照上述方法,由 $H^{(s)}$回到 $H^{(s-1)}, H^{(s-2)},\cdots$直至 $H^{(1)}$和 $H^{(0)}$,于是我们得到(15a)式的能量本征值为

$$E_{m+n}^{(-)} = \sum_{k=1}^{n}R(a_k), \qquad E_m^{(-)} = 0. \quad (23)$$

3. 含有非谐振势的能量本征值

假设某一系统的 Hamiltonian 算符为

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 + \lambda x^4 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (24)\end{aligned}$$

其中 μ 为粒子的质量,ω 为圆频率,λ 为比例系数,

$$V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 + \lambda x^4. \quad (25)$$

即表示一维谐振子在 λx^4 势作用下的量子力学问题.求解方法如下:

令该系统的试探波函数为

$$\Phi_m(bx) = C_0H_m\left(\frac{bx}{\alpha}\right)\exp\left(-\frac{b^2}{2\alpha^2}x^2\right), \quad (26)$$

其中 $\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$, $H_m\left(\frac{bx}{\alpha}\right)$为厄米多项式,$m = 1,2,3,\cdots$.

由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi_m^*(bx)\Phi_m(bx)dx = 1 \quad (27)$$

知

$$\Phi_m(bx) = \left(\frac{1}{2^m m!\sqrt{\frac{1}{\pi\alpha^2}}}\right)^{\frac{1}{2}}b^{\frac{1}{2}}H_m\left(\frac{bx}{\alpha}\right)$$

$$\times \exp\left(-\frac{b^2}{2\alpha^2}x^2\right). \qquad (28)$$

将(25)式和(28)式代入(5)式,根据(3)式,该系统的能量平均值为

$$\begin{aligned}\overline{E}_m(b) &= \int_{-\infty}^{+\infty}\Phi_m^* H\Phi_m \mathrm{d}x \\ &= \left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{\omega\hbar}{2}b^2 + \left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{\omega\hbar}{2}\frac{1}{b^2} \\ &+ \frac{3\lambda\hbar^2}{4(\mu\omega)^2}\frac{1}{b^4}(2m^2+2m+1). \qquad (29)\end{aligned}$$

由(7)式知,b 满足方程

$$b^6 - b^2 - \frac{6\lambda\hbar}{\mu\omega^2}\frac{(2m^2+2m+1)}{2m+1} = 0. \qquad (30)$$

将(30)式的结果代入(29)式,得到该系统能量平均值简捷的表达式

$$\overline{E}_m(b) = \left(m+\frac{1}{2}\right)\omega\hbar\left(\frac{3}{4}b^2+\frac{1}{4b^2}\right). \qquad (31)$$

若(24)式中的 $\lambda=0$,便归于通常的谐振子情况,并由(30)式可得到 $b=1$.将其代入(31)式后正是谐振子情况的能级.

根据能量变分原理得到的能级 $\overline{E}_m(b)$显然满足方程

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\Phi_m(bx) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x^4\right]\Phi_m(bx) \\ &= \overline{E}_m(b)\Phi_m(bx), \qquad (32)\end{aligned}$$

即

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)-\overline{E}_m(b)\right]\Phi_m(bx) = 0. \qquad (33)$$

按照非破缺 SSQM 处理问题的方法,应有

$$V_-(x) = V(x) - \overline{E}_m(b), \qquad (34)$$

$V_-(x)$的基态波函数 Ψ_0 为

$$\Psi_0 = \Phi_m(bx) = \Phi_m^{(-)}(bx), \qquad (35)$$

依(13)式和(14)式,该系统的超势是

$$W_m(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\frac{b}{\alpha}\left[\frac{bx}{\alpha}-\frac{H_{m+1}\left(\frac{bx}{\alpha}\right)}{H_m\left(\frac{bx}{\alpha}\right)}\right], \qquad (36)$$

相应的伙伴势

$$V_-(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x^4-\overline{E}_m(b), \qquad (37a)$$

$$\begin{aligned}V_+(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x^4-\left(m+\frac{1}{2}\right)\omega\hbar \\ &\times\left(\frac{3}{4}b^2+\frac{1}{4b^2}\right)-\omega\hbar b^2+\omega\hbar b^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\frac{H_{m+1}(z)}{H_m(z)}, \qquad (37b)\end{aligned}$$

其中 $z=\frac{bx}{\alpha}$,$V_-(x)$和 $V_+(x)$具有相同的能级

$$E_{m+n}^{(+)} = E_{m+n+1}^{(-)},(n=0,1,2,\cdots). \qquad (38)$$

将方程(32)式中的 m 换成 $m+n$ 有

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\Phi_{m+n}(bx) \\ &= \overline{E}_{m+n}(b)\Phi_{m+n}(bx), \qquad (39)\end{aligned}$$

(39)式两边同时减去 $\overline{E}_m(b)\Phi_{m+n}(bx)$,得到

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)-\overline{E}_m(b)\right]\Phi_{m+n}(bx) \\ &= [\overline{E}_{m+n}(b)-\overline{E}_m(b)]\Phi_{m+n}(bx), \qquad (40)\end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_-(x)\right]\Phi_{m+n}^{(-)}(bx) \\ &= [\overline{E}_{m+n}(b)-\overline{E}_m(b)]\Phi_{m+n}^{(-)}(bx). \qquad (41)\end{aligned}$$

从而得到 $V_-(x)$的第 n 级能量本征值为

$$\overline{E}_{m+n}^{(-)}(b) = \overline{E}_{m+n}(b)-\overline{E}_m(b); \qquad (42)$$

由(38)式得到 $V_+(x)$的第 n 级能量本征值为

$$\overline{E}_{m+n}^{(+)}(b) = \overline{E}_{m+n+1}(b)-\overline{E}_m(b). \qquad (43)$$

由于(37b)式中的 m 可取 $0,1,2,\cdots$一系列数,这样便可得到一类含有非谐振势 λx^4 的势,这些势的能级均可按上述方法确定.这类势为

$$\begin{aligned}m=0:V_+(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x^4 \\ &-\frac{\omega\hbar}{2}\left(\frac{3}{4}b^2+\frac{1}{4b^2}\right)+\omega\hbar b^2, \qquad (44a)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}m=1:V_+(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x^4 \\ &-\frac{3\omega\hbar}{2}\left(\frac{3}{4}b^2+\frac{1}{4b^2}\right)+\omega\hbar b^2+\frac{\omega\hbar b^2}{z^2}, \qquad (44b)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}m=2:V_+(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x^4 \\ &-\frac{5\omega\hbar}{2}\left(\frac{3}{4}b^2+\frac{1}{4b^2}\right)+\omega\hbar b^2 \\ &+\omega\hbar b^2\left[\frac{4}{2z^2-1}+\frac{8}{(2z^2-1)^2}\right], \qquad (44c)\end{aligned}$$

$$\cdots$$

其中 $z=\frac{bx}{\alpha}$.

当 $m=0$ 时,为通常的含有四次幂的谐振子情况,而当 $m=1$ 时,给出了一个新的含有 λx^4 的系统,即一维谐振子受到四次幂势的影响,同时又受到

平方反比势的作用,这时系统的能量本征值问题仍可由上面的方法确定.对于 $m=2$ 时,又给出了一个新的情况,这时势 $V_+(x)$ 存在两个奇点,将一维空间分成了三个部分.至于 $m=3,4,\cdots$ 都给出一些新的含有 λx^4 的势,其能谱都可按上述方法确定.因此,这种方法具有普遍性和实用性.为求解这类势提供了一种有效的方法.

综上所述,我们采用 SSQM 和变分法相结合的方法,讨论了含有非谐振势 λx^4 的一类势的能量本征值问题.它们的能级都可按(43)式来计算.例如,当 $m=1$ 时,(44b)式系统的能级为

$$\bar{E}_{n+1}^{(+)} = \bar{E}_{n+2}(b) - \bar{E}_1(b), \tag{45}$$

其中的 $\bar{E}_{n+2}(b)$ 和 $\bar{E}_1(b)$ 可由(30)式和(31)式很容易确定.关于这一类系统的波函数,亦可按(17)式和(18)式来求出,此处不再叙述.

[1] Alvayez G, Graffi S and Silverstone H J 1988 *Phys. Rev.* A **38** 1687

[2] Chen C Y and Liu Y W 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 363 (in Chinese) [陈昌远、刘友文 1998 物理学报 **47** 363]

[3] Girard M F 1992 *J. Phys. A Math. Gen.* **25** 4199

[4] Jing H and Shi Q Y 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1581 (in Chinese) [景 辉、时庆云 1999 物理学报 **48** 1581]

[5] Messish A 1986 *Quantum Mechanics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [梅西亚 A 1986 量子力学(北京 科学出版社)]

[6] Cooper F, Khare A and Sukhatme U 1995 *Phys. Rep.* **251** 267

[7] Dutt R, Khare A and Sukhatme U 1988 *Am. J. Phys.* **56** (2) 163

Study on energy spectra of oscillator with nonharmonic potential*

Huang Bo-Wen Wang De-Yun

(*Department of Physics, Capital Normal University, Beijing* 100037, *China*)

(Received 27 September 2001; revised manuscript received 9 November 2001)

Abstract

Energy spectra of oscillator with nonharmonic potential is solved by using method of Supersymmetry quantum mechanics and Calculus of variations.

Keywords: nonharmonic potential, supersymmetry quantum mechanics, calculus of variations

PACC: 0365

* Project supported by the Natural Science Foundation of Beijing, China (Grant No. 1952004).