第 53 卷 第 3 期 2004 年 3 月
1000-3290/2004/53(03)/0688-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.53, No.3, March, 2004

非球谐振子势 Schrödinger 方程的精确解*

陆法林　陈昌远

(盐城师范学院物理系，盐城　224002)

(2003 年 3 月 19 日收到；2003 年 6 月 2 日收到修改稿)

将非球谐振子势 $V(r)=ar^2+br^4+cr^6$ 径向波函数展开为指数函数与多项式函数的乘积，应用多项式函数的系数关系确定了体系的能级和波函数. 结果表明，体系处于束缚态时，势参数 a,b,c 必须满足一定的约束条件.

关键词：非球谐振子势 $V(r)=ar^2+br^4+cr^6$，Schrödinger 方程，精确解

PACC：0365，0230

1. 引　　言

求解 Schrödinger 方程是量子力学的一项重要工作. 但众所周知，除了氢原子和谐振子等少数几个势之外，大多数势所对应的能级和波函数的解析形式解却不能给出. 各种不同幂次形式势和有理形式势在物理学许多领域中有着广泛的应用，人们用函数变换法、$SU(2)$ 群法、超对称变分法、数值计算法和升降算符法等多种方法对这类具有较复杂形式势的能级、波函数及其他性质进行了讨论[1—15]. 非球谐振子势 $V(r)=ar^2+br^4+cr^6$ 是光学和分子物理学中一个重要的模型势，在一维和二维情形下，可得到其能级的数值解[8] 和精确解[5]. 本文讨论三维情形下非球谐振子势 $V(r)=ar^2+br^4+cr^6$ 的能级和波函数，采用的方法是将径向波函数展开为指数函数与多项式函数的乘积，得到多项式函数系数之间的递推关系，再应用该关系确定体系能级和波函数. 以低幂次($p=0,1,2$)多项式函数为例，具体给出了所对应能级和波函数的精确解，并讨论了当参数 $b=0$ 时体系能级和波函数的精确解.

2. 非球谐振子能级与波函数精确解

中心势场中粒子的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi)+[-E+V(r)]\psi(r,\theta,\varphi)=0, \tag{1}$$

式中非球谐振子势为

$$V(r)=ar^2+br^4+cr^6 \quad (c>0). \tag{2}$$

取自然单位($\hbar=1,\mu=1/2$)，并令

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi), \tag{3}$$

得径向方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)+\left[E-V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r)=0. \tag{4}$$

作变换

$$u(r)=f(r)\mathrm{e}^{p(r)}, \tag{5}$$

式中 $f(r)$ 为多项式函数，$\mathrm{e}^{p(r)}$ 为指数函数，将(5)式代入(4)式，得

$$f''(r)+2p'(r)f'(r)+\Big[E-V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}+p''(r)+(p'(r))^2\Big]f(r)=0. \tag{6}$$

根据文献[4,5]，令

$$p(r)=\frac{\alpha}{2}r^2+\frac{\beta}{4}r^4, \tag{7a}$$

$$f(r)=\sum_{n=0}^{p}a_nr^{2n+\delta}=r^\delta(a_0+a_1r^2+a_2r^4+\cdots+a_pr^{2p}), \tag{7b}$$

式中 α,β,δ 和多项式函数系数 $a_0,a_1,a_2,\cdots,a_p$ 为待定常数，$p(\geqslant 0)$ 为整数. 将(7)式代入(6)式，并使 $r^{2n+\delta+2}$ 项的系数为零，可得多项式函数系数之间的递推关系为

* 江苏省教育厅自然科学基金(批准号：02KJB140007)资助的课题.

$$A_n a_n + B_{n+1} a_{n+1} + C_{n+2} a_{n+2} = 0, \tag{8}$$

式中

$$A_n = (3 + 2\delta + 4n)\beta + \alpha^2 - a, \tag{9a}$$

$$B_n = E + (1 + 2\delta + 4n)\alpha, \tag{9b}$$

$$C_n = (2n + \delta)(2n + \delta - 1) - l(l + 1), \tag{9c}$$

并有关系

$$2\alpha\beta - b = 0, \tag{10a}$$

$$\beta^2 - c = 0. \tag{10b}$$

由(10) 式可得

$$\beta = \pm\sqrt{c}, \quad \alpha = \frac{b}{2\beta}. \tag{11a}$$

(7b) 式中 $a_0 \neq 0$,多项式函数中幂次低于 δ 的多项式系数为零($a_{-1} = a_{-2} = a_{-3} = \cdots = 0$).由(8)式可知 $C_0 = 0$,再根据(9c)式, 得 $\delta = l + 1$ 和 $\delta = -l$. 为保证径向波函数的有限性, 选取 α,β 和 δ 的数值如下:

$$\beta = -\sqrt{c}, \quad \alpha = -\frac{b}{2\sqrt{c}}, \quad \delta = l + 1. \tag{11b}$$

(7b) 式中 $a_p \neq 0$,多项式函数幂次高于 $2p + \delta$ 的多项式系数为零($a_{p+1} = a_{p+2} = \cdots = 0$),由(8) 式知 $A_p = 0$,再根据(9a)式,可得

$$(3 + 2\delta + 4p)\beta + \alpha^2 - a = 0, \tag{12a}$$

即

$$a = \frac{b^2}{4c} - (5 + 2l + 4p)\sqrt{c}, \tag{12b}$$

或者写成

$$5 + 2l + 4p = \frac{\dfrac{b^2}{4c} - a}{\sqrt{c}}. \tag{12c}$$

(12) 式为势函数中参数 a,b,c 所满足的约束关系,对于不同的 p,l 值,参数 a,b,c 所满足的约束关系不一样,(12c)式也可认为是参数必须满足的量子化约束关系.多项式函数的系数递推关系(8)式可写成矩阵乘积形式

$$\begin{pmatrix} B_0 & C_1 & 0 & \cdots & 0 \\ A_0 & B_1 & C_2 & \cdots & 0 \\ 0 & A_1 & B_2 & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & A_{p-1} & B_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \\ a_{p-1} \\ a_p \end{pmatrix} = 0. \tag{13a}$$

系数 a_0,a_1,a_2,$\cdots$,a_p 不同时为零的条件是系数行列式为零

$$\begin{vmatrix} B_0 & C_1 & 0 & \cdots & 0 \\ A_0 & B_1 & C_2 & \cdots & 0 \\ 0 & A_1 & B_2 & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & A_{p-1} & B_p \end{vmatrix} = 0. \tag{13b}$$

由(13b)式可得能谱方程,再根据(13a)式可依次求得多项式系数 a_1,a_2,$\cdots$,a_p,从而得到任意 p 时能级和波函数的精确解.为方便计算,将(11b)式中 $\delta = l + 1$ 和(12a)式代入(9)式,得系数矩阵的矩阵元为

$$A_n = 4\beta(n - p), \tag{13c}$$

$$B_n = E + (3 + 2l + 4n)\alpha. \tag{13d}$$

$$C_n = 2n(1 + 2l + 2n). \tag{13e}$$

3. 不同 p 时非球谐振子的精确解

下面分别以 $p = 0,1,2$ 为例,具体给出体系相应的能级和波函数的精确解.

当 $p = 0$ 时, 由(13b)式可得 $B_0 = 0$, 再由(13d)式得能级为

$$E_{0,l} = -(3 + 2l)\alpha = \frac{b}{2\sqrt{c}}(3 + 2l). \tag{14}$$

由(5)和(7)式得对应于 $p = 0$ 的径向波函数为

$$R_{0,l}(r) = a_0 r^l \exp\left(-\frac{b}{4\sqrt{c}}r^2 - \frac{\sqrt{c}}{4}r^4\right), \tag{15}$$

式中 a_0 为归一化常数.在此情形下势函数中参数 a,b,c 所满足的约束关系为

$$a = \alpha^2 + (3 + 2\delta)\beta, \tag{16a}$$

即

$$a = \frac{b^2}{4c} - (5 + 2l)\sqrt{c}, \tag{16b}$$

当 $l = 0$ 时,$a = \frac{b^2}{4c} - 5\sqrt{c}$,而当 $l = 1$ 时,$a = \frac{b^2}{4c} - 7\sqrt{c}$,对于不同的 l 值,参数 a,b,c 所满足的约束关系不一样.当 $p = 0$ 和 $l = 0,1$ 时, 取 $a_0 = 1$,并令 $\alpha = -1$ 和 $\beta = -1$(即 $c = 1$ 和 $b = 2$),非球谐振子径向波函数(未归一化)与位置的关系见图 1(a)和(b).

当 $p = 1$ 时, 由(13b) 式可得能谱方程为

$$B_0 B_1 - A_0 C_1 = 0. \tag{17}$$

将(13c),(13d)和(13e)式代入(17)式,得能级为

$$E_{1,l} = -(5 + 2l)\alpha \pm 2\sqrt{\alpha^2 - 2(3 + 2l)\beta}, \tag{18a}$$

用势函数中参数 a,b,c 表示，(18a)式为

$$E_{1,l} = \frac{(5+2l)b}{2\sqrt{c}} \pm \sqrt{\frac{b^2}{c} + 8(3+2l)\sqrt{c}}. \tag{18b}$$

相应于 $p=1$ 的径向波函数为

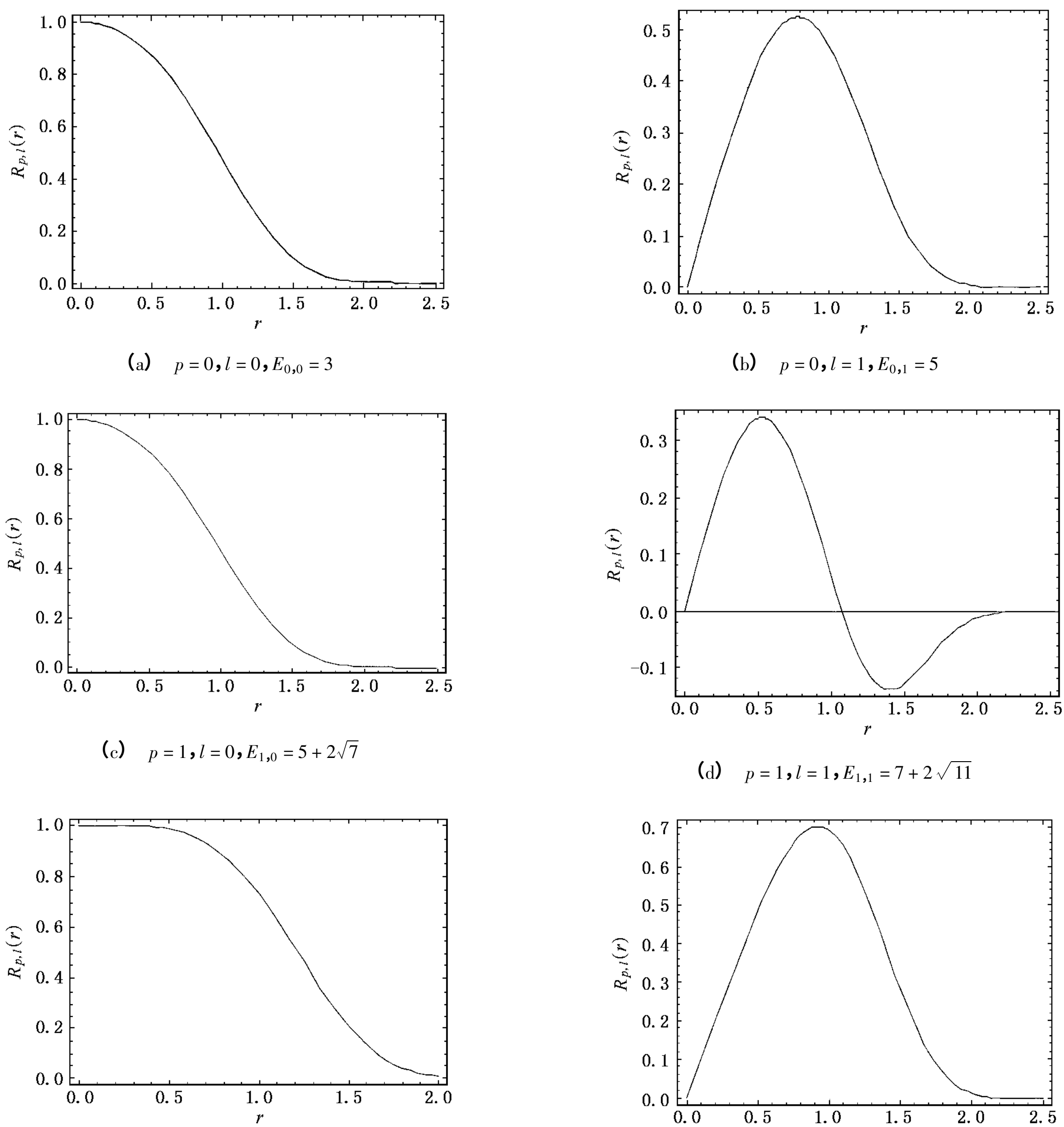
$$R_{1,l}(r) = (a_0 + a_1 r^2) r^l \exp\left(-\frac{b}{4\sqrt{c}} r^2 - \frac{\sqrt{c}}{4} r^4\right). \tag{19}$$

由(13a)式得多项式函数系数为

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{B_0}{C_1} a_0 \\ &= -\frac{1}{3+2l}\left(-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 2(3+2l)\beta}\right) a_0, \end{aligned} \tag{20a}$$

用势函数中参数 a,b,c 表示，(20a)式为

$$a_1 = -\frac{1}{3+2l}\left(\frac{b}{2\sqrt{c}} \pm \sqrt{\frac{b^2}{4c} + 2(3+2l)\sqrt{c}}\right) a_0. \tag{20b}$$



(a) $p=0, l=0, E_{0,0}=3$

(b) $p=0, l=1, E_{0,1}=5$

(c) $p=1, l=0, E_{1,0}=5+2\sqrt{7}$

(d) $p=1, l=1, E_{1,1}=7+2\sqrt{11}$

(e) $p=1, l=0, E_{1,0}=5-2\sqrt{7}$

(f) $p=1, l=1, E_{1,1}=7-2\sqrt{11}$

图1 非球谐振子径向波函数(未归一化)与位置的关系 分别取 $p=0,1$ 和 $l=0,1$，并令 $a_0=1, \alpha=-1, \beta=-1$，即 $c=1, b=2$

可根据归一化条件确定 a_0. 势函数中参数 a, b, c 所满足的约束关系为

$$a = \frac{b^2}{4c} - (9 + 2l)\sqrt{c}. \tag{21}$$

当 $p = 1$ 时,对于任意的 l 值,体系的能级都有两个,相应的波函数也有两个. 分别取 $l = 0$ 和 1, $a_0 = 1$, 并令 $\alpha = -1$ 和 $\beta = -1$(即 $c = 1$ 和 $b = 2$),非球谐振子径向波函数(未归一化)与位置的关系见图 1(c)(d)(e)(f).

当 $p = 2$ 时, 由(13b)式可得能谱方程为

$$B_0(B_1B_2 - A_1C_2) - A_0C_1B_2 = 0. \tag{22}$$

将(13c),(13d)和(13e)式代入(22)式,得能谱方程为

$$[E_{2,l} + (3+2l)\alpha]\{[E_{2,l} + (7+2l)\alpha] \times [E_{2,l} + (11+2l)\alpha] + 16\beta(5+2l)\} + 16\beta(3+2l)[E_{2,l} + (11+2l)\alpha] = 0, \tag{23a}$$

该能谱方程的实数解为

$$E_{2,l} = -7\alpha - 2l\alpha - \frac{2^{1/3}(-48\alpha^2 + 384\beta + 192l\beta)}{3\left(3456\alpha\beta + \sqrt{11943936\alpha^2\beta^2 + 4(-48\alpha^2 + 384\beta + 192l\beta)^3}\right)^{1/3}} + \frac{\left(3456\alpha\beta + \sqrt{11943936\alpha^2\beta^2 + 4(-48\alpha^2 + 384\beta + 192l\beta)^3}\right)^{1/3}}{32^{1/3}}, \tag{23b}$$

相应的径向波函数为

$$R_{2,l}(r) = (a_0 + a_1r^2 + a_2r^4)r^l \times \exp\left(-\frac{b}{4\sqrt{c}}r^2 - \frac{\sqrt{c}}{4}r^4\right). \tag{24}$$

由(13a)式得多项式函数系数为

$$a_1 = -\frac{B_0}{C_1}a_0 = -\frac{1}{2(3+2l)}[E_{2,l} + (3+2l)\alpha]a_0, \tag{25a}$$

$$a_2 = -\frac{A_0a_0 + B_1a_1}{C_2} = -\frac{1}{4(5+2l)} \times [-8\beta a_0 + (E_{2,l} + (7+2l)\alpha)a_1], \tag{25b}$$

式中 $E_{2,l}$ 满足能谱方程(23). 势函数中参数 a, b, c 所满足的约束关系为

$$a = \frac{b^2}{4c} - \sqrt{c}(13 + 2l). \tag{26}$$

同样方法可得 $p = 3, 4, \cdots$ 时非球谐振子的精确解. 相应于 P 的径向波函数为

$$R_{p,l}(r) = (a_0 + a_1r^2 + \cdots + a_pr^{2p})r^l \times \exp\left(-\frac{b}{4\sqrt{c}}r^2 - \frac{\sqrt{c}}{4}r^4\right). \tag{27}$$

多项式系数 $a_0, a_1, a_2, \cdots, a_p$ 满足系数递推关系(13a)式和归一化条件. 势函数中参数 a, b, c 所满足的约束关系为(12)式.

4. 讨　论

势函数中参数除满足(12)式外,还可由(11)式得参数 $c \neq 0$. 当参数 $b = 0$, 势函数为 $V(r) = ar^2 + cr^6$ $(c > 0, a < 0)$,(7a)式中待定常数为 $\alpha = -\frac{b}{2\sqrt{c}} = 0$, $\beta = -\sqrt{c}$,取 $p(r) = \frac{\beta}{4}r^4$. 当 $p = 0$ 时,由(14)—(16)式得能级 $E_{0,l} = -(3+2l)\alpha = 0$,径向波函数为 $R_{0,l}(r) = a_0r^l\exp\left(-\frac{\sqrt{c}}{4}r^4\right)$,参数 a, c 所满足的约束关系为 $a = -\sqrt{c}(5+2l)$. 当 $p = 1$ 时,由(18)—(21)式得能级 $E_{1,l} = \pm 2\sqrt{2(3+2l)\sqrt{c}}$,径向波函数为 $R_{1,l}(r) = (a_0 + a_1r^2)r^l\exp\left(-\frac{\sqrt{c}}{4}r^4\right)$,系数 $a_1 = -\frac{1}{3+2l}\left(\pm\sqrt{2(3+2l)\sqrt{c}}\right)a_0$,参数 a, c 所满足的约束关系为 $a = -\sqrt{c}(9+2l)$.

[1] Flessas G P 1984 *Phys. Lett.* A **100** 383

[2] de Souza Dutra A 1988 *Phys. Lett.* A **131** 319

[3] Pons R and Marcilhacy G 1991 *Phys. Lett.* A **152** 235

[4] Dong S H and Ma Z Q 1998 *J. Phys.* A **31** 9855

[5] Dong S H 2000 *Int. J. Theor. Phys.* **39** 1119

[6] Alberg M and Wilets L 2001 *Phys. Lett.* A **286** 7

[7] Chen J L, Kwek L C, Oh C H and Liu Y 2001 *J. Phys.* A **34** 8889

[8] Liu X S and Ding P Z 2002 *Chin. J. Atomic Molec. Phys.* **19** 119

[9] 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]

[10] Chen C Y, Sun D S, Liu Y W and Cheng T L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 468 (in Chinese) [陈昌远、孙东升、刘友文、成天龙 2002 物理学报 **51** 468]

[11] Li W B 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2356 (in Chinese) [李文博 2001 物理学报 **50** 2356]

[12] Li W B 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 547 (in Chinese) [李文博 2002 物理学报 **51** 547]

[13] She S X 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1054 (in Chinese) [佘守宪 2002 物理学报 **51** 1054]

[14] Huang B W and Wang D Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1163 (in Chinese) [黄博文、王德云 2002 物理学报 **51** 1163]

[15] Long S M 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2256 (in Chinese) [龙姝明 2002 物理学报 **51** 2256]

Exact solutions to the Schrödinger equation for the anharmonic oscillator potential*

Lu Fa-Lin Chen Chang-Yuan

(*Department of Physics, Yancheng Teachers College, Yancheng* 224002, *China*)

(Received 19 March 2003; revised manuscript received 2 June 2003)

Abstract

The radial wave function of Schrödinger equation for the anharmonic oscillator potential $V(r) = ar^2 + br^4 + cr^6$ can be written in the form of a product of an exponential function and a polynomial function. The exact energy and wave function of the potential are obtained by using the relation for the coefficient of the polynomial function. In the bound states, the results show that parameters a, b and c in the model potential have to satisfy relevant restraint conditions.

Keywords: anharmonic oscillator potential $V(r) = ar^2 + br^4 + cr^6$, Schrödinger equation, exact solutions

PACC: 0365, 0230

* Project supported by the Natural Science Foundation from the Education Bureau of Jiangsu Province, China (Grnat No. 02KJB140007).