第 54 卷 第 3 期 2005 年 3 月
1000-3290/2005/54(03)/1044-04
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.54, No.3, March, 2005

基态球谐振子的空间"塌陷"

龙姝明[1)] 冉启武[2)] 熊晓军[1)]

[1)](陕西理工学院物理系, 汉中 723000)

[2)](西安交通大学电气学院, 西安 710049)

(2004 年 5 月 19 日收到; 2004 年 6 月 13 日收到修改稿)

用幂级数方法研究球谐振子定态薛定谔方程解析解,发现波函数球系表示 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 在 $r\sim 0$ 处可以无界,只要 $r\psi(r,\theta,\varphi)$ 在 $r\sim 0$ 处有界,就不违背波函数的玻恩统计解释. 而且基态能量是 $\hbar\omega/2$, 而不是 $3\hbar\omega/2$,这是低能量条件下的振动系统空间"塌陷"现象.

关键词:球谐振子, 基态能量, 波函数, 空间塌陷

PACC:0365

1. 球谐振子能量本征值方程

谐振子模型在量子理论中应用极为广泛[1—8]. 本文用幂级数方法导出了球谐振子能级公式及波函数.我们发现,如果放宽对波函数有界性的限制为 $r\psi(r,\theta,\varphi)$ 处处有界,而不是 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 处处有界,球对称谐振子基态能量将与一维谐振子基态能量相同,这是三维振动系统的空间塌陷现象.可以预言,各向同性固态物质冷却到极低温度时,有可能发生这种空间塌陷现象,这时固态物质的密度、导电性等将有极为明显的变化.

设质量为 μ 的粒子在三维球对称势场

$$V(r)=\mu\omega^2 r^2/2,\qquad 0\leqslant r<+\infty \tag{1}$$

中运动,其中谐振子圆频率 $\omega>0$,且为常数,若取能量单位 $E_0=\hbar\omega$,长度单位 $a=\sqrt{\hbar/(\mu\omega)}$,则有

$$E=\lambda E_0,\qquad r=ax,\qquad x\geqslant 0, \tag{2}$$

$$V(r)=\mu\omega^2 r^2/2=(x^2/2)E_0. \tag{3}$$

三维球对称谐振子在球坐标系中分离变量后[9],波函数径向因子 $R(x)$ 与径向坐标 x 的乘积 $xR(x)$ 记为 $u(x)$,则 $u(x)$ 满足方程

$$(-D^2+x^2+l(l+1)/x^2)u(x)=2\lambda u(x), \tag{4}$$

其中 $l=0,1,\cdots$为角动量量子数,$D=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$,束缚态能量 λ 满足[10]

$$0<\lambda<+\infty. \tag{5}$$

方程(3)可用赝角动量方法[11]、升降算符方法[12]和幂级数方法[13]求解.

2. 球谐振子本征方程的幂级数解

幂级数法解球谐振子定态薛定谔方程的基本思路是:

1)寻找球谐振子波函数的近场($x\sim 0$)近似和远场($x\sim\infty$)近似形式,以此为出发点,对波函数作函数变换简化薛定谔方程;

2)作适当的自变量变换,进一步简化方程;

3) 以幂级数形式试探解代入简化后的方程,将变系数常微分方程求解问题转化为幂级数试探解叠加系数 c_k 满足的邻居关系代数方程求解问题,解出 c_k 代回试探解,得到幂级数形式解;

4)由波函数的有界性要求,将无穷幂级数解截断为多项式解,从而导出能量参数满足的代数方程,并导出能级公式;

5)给出波函数的完整形式,并讨论解的合理性.

波函数的近场($x\sim 0$)近似满足的方程为

$$(-D^2+l(l+1)/x^2)u(x)=0, \tag{6}$$

显见

$$u(x)\sim x^{l+1},x^{-l}, \tag{7}$$

要求波函数在 $x\sim 0$ 处有界,可取 $u(x)\sim x^{l+1}$.

取方程(4)中 $l=0$ 和 $\lambda=1/2$,得到波函数远场($x\sim\infty$)近似形式满足的方程为

$$(-D^2+x^2)u(x)=u(x), \tag{8}$$

其解为

$$u(x)\sim\exp(-x^2/2). \tag{9}$$

综合(7)和(9)式,对波函数作如下变换:

$$u(x) = y(x)x^{l+1}\exp(-x^2/2), \tag{10}$$

于是,方程(4)变换为

$$xy''(x) + 2(l+1-x^2)y'(x) + 2(\lambda - l - 3/2)x\,y(x) = 0, \tag{11}$$

再作自变量变换

$$x^2 = t, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = 2\sqrt{t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}, \tag{12}$$

进一步简化(11)式为合流超几何方程

$$ty''(t) + (l + 3/2 - t)y'(t) + (\lambda/2 - l/2 - 3/4)\,y(t) = 0, \tag{13}$$

令(13)式有幂级数形式解

$$y(t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k t^{k+s}, \tag{14}$$

将(14)式代入(13)式,得到 c_k 和 s 满足的方程为

$$c_0 s(s + l/2 + l) = 0, \tag{15a}$$

$$c_{k+1} = \frac{(k + s + 3/4 + l/2 - \lambda/2)}{(k + s + 3/2 + l)(k + s + 1)}c_k, \quad k = 0,1,\cdots \tag{15b}$$

引入 pochhammer 记号

$$(\beta)_0 = 1, \quad (\beta)_k = \beta(\beta+1)\cdots(\beta+k-1), \tag{16}$$

由(15b)式可导出(13)式的幂级数系数

$$c_k(s) = \frac{(s + 3/4 + l/2 - \lambda/2)_k}{(s + 3/2 + l)_k(s+1)_k}c_0, \qquad k = 0,1,\cdots, \tag{17a}$$

由(15a)式可导出上式中的 s 为

$$s = s_1 = 0, \quad s = s_2 = -1/2 - l. \tag{17b}$$

取 $c_0 = 1$,(13)式的两个线性独立解为

$$y_1(t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(s_1)t^{k+s_1} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(3/4 + l/2 - \lambda/2)_k}{(3/2 + l)_k k!}t^k, \tag{18a}$$

$$y_2(t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(s_2)t^{k+s_2} = t^{-1/2-l}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(1/4 - l/2 - \lambda/2)_k}{(1/2 - l/2)_k k!}t^k. \tag{18b}$$

将(18)和(12)式代入(10)式,得到球谐振子波函数径向因子的可能解为

$$u^{\mathrm{nor}}(x) = y_1(x^2)x^{l+1}\exp(-x^2/2) = x^{l+1}\exp(-x^2/2) \times \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(3/4 + l/2 - \lambda/2)_k}{(3/2 + l)_k k!}x^{2k}, \tag{19a}$$

$$u^{\mathrm{abn}}(x) = y_2(x^2)x^{l+1}\exp(-x^2/2) = x^{-l}\exp(-x^2/2) \times \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(1/4 - l/2 - \lambda/2)_k}{(1/2 - l/2)_k k!}x^{2k}, \tag{19b}$$

式中无穷级数的收敛半径 $R = \infty$,即无穷级数在大 x 处的行为与 $\exp(x^2)$ 的行为一致.考虑到波函数的有界性,必须要求无穷级数退化为 n 次多项式,由 pochhammer 记号的性质可知,若取式中级数系数分子中的 $3/4 + l/2 - \lambda/2$ 和 $1/4 - l/2 - \lambda/2$ 为负整数 $-n$,可将无穷级数截断为 $n(\geqslant 0)$ 次多项式.并且还要求在 $x \sim 0$ 处波函数有界,应取(19b)式中的 $l = 0$,因而有

$$3/4 + l/2 - \lambda/2 = -n, \quad 1/4 - \lambda/2 = -n. \tag{20}$$

由此解得波函数径向因子和能级公式为

$$u_{n,l}^{\mathrm{nor}}(x) = \exp(-x^2/2)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-n)_k}{(3/2 + l)_k k!}x^{2k+l+1}, \tag{21a}$$

$$E_{n,l}^{\mathrm{nor}} = \lambda E_0 = (2n + l + 3/2)E_0, \quad n, l = 0,1,\cdots, \tag{21b}$$

$$u_n^{\mathrm{abn}}(x) = \exp(-x^2/2)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-n)_k}{(1/2)_k k!}x^{2k}, \tag{22a}$$

$$E_n^{\mathrm{abn}} = \lambda E_0 = (2n + 1/2)E_0, \quad n = 0,1,\cdots \tag{22b}$$

完整的波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = K(n,l)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)u_n(r/a)/r, \quad n, l = 0,1,\cdots; m = 0,1,\cdots,l, \tag{23}$$

其中 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 为球谐函数,$K(n,l)$ 为归一化系数,$u_n(r/a) = u_{n,l}^{\mathrm{nor}}(r/a)$ 或 $u_n(r/a) = u_n^{\mathrm{abn}}(r/a)$,$n$ 为径向量子数,l 为轨道角动量量子数,m 为角动分量量子数.

在球系 $r \sim r + \mathrm{d}r$ 的球壳中发现粒子的概率为

$$\mathrm{d}P = r^2\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\,|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 = |K(n,l)|^2|u_n(r/a)|^2\mathrm{d}r, \tag{24}$$

可见在球系中,只要(21a)和(22a)式中波函数径向因子有界,就保证 $r\psi(r,\theta,\varphi)$ 有界和 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 可归一化,即(24)式的概率 $\mathrm{d}P$ 有意义,而波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 在 $r \sim 0$ 处可以无界,这与波函数的玻恩统计解释(即概率解释)并不矛盾.

如果一定坚持要求波函数处处有界,则必须要求 $u_n(0) = 0$,而(22)式的波函数径向因子不满足这一条件,以致于基态能量只能是 $3\hbar\omega/2$.我们认为(24)式的 $\mathrm{d}P$ 有意义(即 $r\psi(r,\theta,\varphi)$ 有界)才是问题的关键.

若定义

$$N = 2n + l + 1; \quad n = 0,1,\cdots; \quad l = -1,0,1,\cdots, \tag{25}$$

则球对称谐振子的能级公式可以写为

$$E = \lambda E_0 = (N + 1/2) E_0, \qquad N = 0,1,\cdots, \tag{26}$$

特别当 $l = -1$ 时, $N = 2n$ 对应(22b)式,显见,球对称谐振子的基态能量为 $\hbar\omega/2$[12],而并非现有量子力学文献[9,14]给出的 $3\hbar\omega/2$.

3. 球对称谐振子基态能量为 $\hbar\omega/2$ 的意义

一维谐振子基态能量为 $\hbar\omega/2$,三维各向异性谐振子可以视为三个独立的一维谐振子,因而其基态能量为

$$E_0 = \hbar(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3)/2,$$

其中 ω_1, ω_2, ω_3 分别为三个方向的振动频率,若三个频率非常接近(但不相等),则各向异性谐振子的基态能量近似为 $E_0 \sim 3\hbar\omega/2$, $\omega \sim \omega_1, \omega_2, \omega_3$,可见各向异性三维振动系统,即使在最低能量状态,也不会塌陷为一维振动系统,因为其基态能量为 $3\hbar\omega/2$.

由(26)式可见,三维球对称谐振子基态能量与一维谐振子基态能量相同,这说明:

1)对称性越高的系统,其基态能量越低,系统越稳定;

2)最低能量状态下的三维球对称谐振子不能分解成三个独立的一维谐振子,因为三维球对称振动系统在最低能量状态时将塌陷为一维振动系统.

三维谐振子是描述固态物质中分子原子在平衡位置附近作热运动的成功模型.固态物质的热运动越剧烈,分子原子的振动能级越高,整块物质的宏观体积在一定限度内也越大,导电性也越差.对于三个方向振动频率相等的各向同性固态物质,如果冷却到极低温度后,物质中的分子原子的振动将塌陷为一维振动,但由于大量分子原子振动方向的随机取向,整块固态物质仍然表现为各向同性.如果有某种机理使所有分子原子的振动方向一致,则整块物质宏观上将在正交于振动方向的方向上具有极小的空间尺度(即极大的密度),而且对于金属材料将有极好的导电性.

[1] Huang C J *et al* 2001 *Acta Phys*. *Sin*. **50** 1064(in Chinese)[黄春佳等 2001 物理学报 **50** 1064]

[2] Feng J *et al* 2001 *Acta Phys*. *Sin*. **50** 1279(in Chinese)[冯 健等 2001 物理学报 **50** 1279]

[3] Gao Y F *et al* 2001 *Acta Phys*. *Sin*. **50** 1496(in Chinese)[高云峰等 2001 物理学报 **50** 1496]

[4] Lin X *et al* 2001 *Acta Phys*. *Sin*. **50** 1689(in Chinese)[林 秀等 2001 物理学报 **50** 1689]

[5] Huang C J *et al* 2001 *Acta Phys*. *Sin*. **50** 1920(in Chinese)[黄春佳等 2001 物理学报 **50** 1920]

[6] Wu S D *et al* 2001 *Acta Phys*. *Sin*. **50** 1925(in Chinese)[吴曙东等 2001 物理学报 **50** 1925]

[7] Wan L *et al* 2002 *Acta Phys*. *Sin*. **51** 84(in Chinese)[万 琳等 2001 物理学报 **51** 84]

[8] Long C Y *et al* 2003 *Acta Phys*. *Sin*. **52** 1858(in Chinese)[龙超云等 2003 物理学报 **52** 1858]

[9] Das A and Melissions A C 1986 *Quantum Mechanics a Modern Introduction*(New York:Gordon and Breach Science Press) p388—395

[10] Long S M 1988 *J*. *Hanzhong Teachers College* **2** 45(in Chinese)[龙姝明 1988 汉中师范学院学报 **2** 45]

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

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

[13] Long S M *et al* 2002 *Mathematics Physics Methods & Mathematica* (Xi'an:Shaanxi People Education Press) p151—153(in Chinese)[龙姝明等 2002 数学物理方法与数学(西安:陕西人民教育出版社)第 151—153 页]

[14] Zeng J Y 1981 *Quantum Mechanics*(Beijing:Science Press) p228—234(in Chinese)[曾谨言 1981 量子力学(北京:科学出版社)第 228—234 页]

The space dent of sphere-symmetry harmonic oscillator in ground state

Long Shu-Ming[1)] Ran Qi-Wu[2)] Xiong Xiao-Jun[1)]

[1)] (*Department of Physics, Shaanxi University of Technology, Hanzhong* 723000, *China*)

[2)] (*College of Electricity, Xi'an Jiaotong University, Xi'an* 710049, *China*)

(Received 19 May 2004; revised manuscript received 13 June 2004)

Abstract

A rigorous solution of Schrödinger equation of an sphere-symmetry harmonic oscillator is studied by the power series method. We found that wave function $\psi(r,\theta,\varphi)|_{r\sim0}$ can be infinite, $r\psi(r,\theta,\varphi)|_{r\sim0}$ must be finite; this is in accord with Born's statistical explanation. The ground-state energy of the sphere-symmetry harmonic oscillator is $\hbar\omega/2$. The space dent will appear in the ground state of the sphere-symmetry harmonic oscillator.

Keywords: sphere-symmetry harmonic oscillator, ground-state energy, wave function, space dent

PACC: 0365