

高次正幂与逆幂势函数的叠加的径向薛定谔方程的解析解*

胡先权[†] 许杰 马勇 殷霖

(重庆师范大学物理学与信息技术学院, 重庆 400047)

(2006 年 11 月 6 日收到, 2006 年 12 月 10 日收到修改稿)

当薛定谔方程中出现高次非谐振子势, 电偶极矩势, 分子晶体势, 极化等效势等高次正幂与逆幂势函数以及它们的叠加时, 薛定谔方程的求解变得非常复杂. 采用奇点邻域附近的级数解法与求解渐近解相结合, 在多种相互作用幂函数紧密耦合的条件下, 得到势函数为 $V(r) = a_1 r^6 + a_2 r^2 + a_3 r^{-4} + a_4 r^{-6}$ 的径向薛定谔方程的一系列定态波函数解析解以及能级结构.

关键词: 级数解法, 幂势函数, 径向波函数, 渐近解

PACC: 0365, 0230

1. 引言

在一般文献中, 对于薛定谔方程的解析解的研究, 只讨论了势函数为库仑势或谐振子势时的本征波函数及其本征值(能级)的严格求解, 对于复杂的原子体系, 其能量状态是由组成原子的各个粒子之间的相互作用力决定的. 各个电子除受到原子核的中心库仑力的作用外, 各个电子与电子之间还存在非中心静电力的作用以及磁相互作用, 加上内壳层电子对原子核的屏蔽作用, 电子与电子之间的关联作用. 上述作用力的存在以及中心场近似方法的使用使得复杂的原子体系的薛定谔方程中有可能出现高次非谐振子势, 电偶极矩势, 极化等效势等高次正幂与逆幂势函数以及它们的叠加, 这时薛定谔方程的求解变得非常复杂, 一般情况下无法求得解析解, 只能求得近似解^[1-5].

众所周知, 高次非谐振子势与电子的径向半径 r 有关, 一般正比于 r^3, r^4 等, Stark 效应中外电场与原子的相互作用势正比于 cr , 电偶极矩势正比于 r^{-3} , 碱金属原子里德伯态相应的极化等效势^[1]正比于 $\alpha r^{-4} + \beta r^{-6} + \gamma r^{-8}$, 超强度外磁场中的氢原子除

库仑势之外, 还有与 r^2 成正比的磁相互作用势^[2], 总的势函数正比于 $\alpha r^{-1} + \gamma r^2$, 离子与中性原子之间的相互作用势正比于 r^{-4} , 分子晶体中的 Lennard-Jones 势^[6]正比于 $c_1 r^{-6} + c_2 r^{-12}$, 对于这样的高次正幂与逆幂势函数, 很难求出薛定谔方程的解析解, 一般采用单电子近似, 先获得零级波函数, 再通过微扰法获得一级能级修正, 进而获得一级波函数, 再次通过微扰法获得二级能级修正, 进而获得二级波函数等.

近年来, 有不少学者寻求高次正幂与逆幂势函数薛定谔方程的解析解^[7-16], 这对于丰富和完善量子理论及其应用具有重要作用. 人们已经找到了某些特定正幂与逆幂势函数的线性叠加的一个解析解, 例如文献 [7] 得到了势函数 $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$ 的一个解析解; 文献 [13] 得到了非谐振子势 $V(x) = x^2/2 + g(2x^2)$ 的一个解析解; 文献 [15] 得到了分子晶体势函数 $V(r) = A_1 r^{-10} - A_2 r^{-6}$ 的一个能级本征值的精确解; 文献 [16] 得到了谐振子势与库仑势的叠加势 $V(r) = A_1 r^2 - A_2 r^{-1}$ 的一个能级本征值的精确解. 一般而言, 在目前的情形下, 为了要得到上述势函数的一个精确解, 需要对于各幂次项的系数加以适当限制并且存在一定的关系. 本文根据

* 国家自然科学基金(批准号: 10147207), 重庆市科委自然科学基金(批准号: 2005BB8267)和重庆市教委基础理论研究基金(批准号: KJ060813)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: huxquan2003@yahoo.com.cn

量子系统波函数必须满足单值、有界和连续的标准条件,首先求出径向坐标 $r \rightarrow \infty$ 以及 $r \rightarrow 0$ 时的渐近解,然后采用奇点邻域附近的级数解法与求得的渐近解相结合,通过幂级数系数比较法得到势函数为 $V(r) = a_1 r^6 + a_2 r^2 + a_3 r^{-4} + a_4 r^{-6}$ 的径向薛定谔方程的一系列定态波函数解析解以及相应的能级结构,并进行了适当讨论.本文解法与采用试探波函数仅仅求出系统一个能级的解法大相径庭,但非常严谨.更重要的是,本文解法对多种相互作用幂函数紧密耦合的条件下,寻求系统的解析解提供了一种严谨而有效的方法.

2. 径向薛定谔方程的渐近解

中心场条件下的径向薛定谔方程^[17]为

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{\mathcal{K}(l+1)}{r^2} \right] (rR) = 0, \quad (1')$$

记 $\chi(r) = rR(r)$, 得到如下的径向薛定谔方程

$$\chi''(r) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{\mathcal{K}(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0. \quad (1)$$

采用原子单位,得到

$$\chi''(r) + \left[2E - 2V(r) - \frac{\mathcal{K}(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0, \quad (2)$$

其中势函数为

$$V(r) = a_1 r^6 + a_2 r^2 + a_3 r^{-4} + a_4 r^{-6}. \quad (3)$$

设最高正幂项系数 a_1 与最低逆幂项系数 a_4 恒大于零,即

$$a_1 > 0, a_4 > 0,$$

令 $\varepsilon = 2E$, $\alpha_1 = 2a_1$, $\alpha_2 = 2a_2$, $\beta_1 = 2a_4$, $\beta_2 = 2a_3$, 径向薛定谔方程可写为

$$\chi''(r) + [\varepsilon - \alpha_1 r^6 - \alpha_2 r^2 - \beta_2 r^{-4} - \beta_1 r^{-6} - \mathcal{K}(l+1)r^{-2}] \chi(r) = 0, \quad (4)$$

其中

$$\alpha_1 > 0, \beta_1 > 0, \quad (5)$$

$r=0$, $r=\infty$ 是(4)式的两个非正则奇点.需要讨论奇点附近的渐近解.

当径向坐标 $r \rightarrow \infty$ 或者 $r \rightarrow 0$ 时,由(4)式得到相应的渐近方程

$$\chi''(r) - \alpha_1 r^6 \chi(r) = 0, \quad (r \rightarrow \infty), \quad (6)$$

$$\chi''(r) - \beta_1 r^{-6} \chi(r) = 0, \quad (r \rightarrow 0). \quad (7)$$

(6)式中的势函数只有一项,方程总共才两项,其解 $\chi(r)$ 必须为指数函数,考虑到当 $r \rightarrow \infty$ 时对 $\chi(r)$ 的导函数中只须保留幂函数的最高次幂即可,容易由(6)式求得渐近解

$$\chi(r) \sim \exp\left(-\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4\right). \quad (8)$$

考虑到当 $r \rightarrow 0$ 时对 $\chi(r)$ 的导函数中只须保留幂函数的最低次幂即可,容易由(7)式求得渐近解

$$\chi(r) \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right). \quad (9)$$

3. 径向薛定谔方程的定态波函数解析解和能级

同时考虑渐近解(8)(9)的存在,径向薛定谔方程(4)的通解可写成

$$\chi(r) = f(r) \cdot \exp\left(-\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4 - \frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right). \quad (10)$$

为了使波函数 $\chi(r)$ 保持有限性,要求 $f(r)$ 为洛浪(Laurent)级数退化成的有限项幂函数之和

$$f(r) = \sum_{k=-n}^n b_k r^{2k+s}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

其中指标 s 一般由指标方程^[18]确定,在本文中,势函数各项的幂指数均为整数,因而指标 s 为零或者为正整数.本文将在后面介绍用另外的方法——由势函数各幂次项的系数满足的约束条件确定指标 s .

如所周知,指数函数随变量增加的增长速度高于幂函数随变量增加的增长速度,因而有

$$\begin{aligned} & \lim_{r \rightarrow \infty} r^{2n+s} \exp\left(-\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4 - \frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right) \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{r^{2n+s}}{\exp\left(\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4\right)} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

同理

$$\begin{aligned} & \lim_{r \rightarrow 0} r^{-2n} \exp\left(-\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4 - \frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right) \\ &= \lim_{r \rightarrow 0} \frac{r^{-2n}}{\exp\left(\frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right)} \\ &= \lim_{\rho \rightarrow \infty} \frac{\rho^{2n}}{\exp\left(\frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}\rho^2\right)} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

由(12)(13)和(11)式知,波函数满足有限性要求.

对 $\chi(r)$ 求微商

$$\begin{aligned} \chi'(r) &= \exp\left(-\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4 - \frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right) \\ &\times \left(-\sqrt{\alpha_1}r^3 + \sqrt{\beta_1}r^{-3}\right) \cdot f(r) + f'(r) \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4 - \frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right), \\ \chi''(r) &= \left[(\alpha_1 r^6 + \beta_1 r^{-6} - 2\sqrt{\alpha_1\beta_1} - 3\sqrt{\alpha_1}r^2 \right. \\ &\quad \left. - 3\sqrt{\beta_1}r^{-2})f(r) + \mathcal{A} - \sqrt{\alpha_1}r^3 \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\beta_1}r^{-3}\right]f'(r) + f''(r) \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{4}\sqrt{\alpha_1}r^4 - \frac{1}{2}\sqrt{\beta_1}r^{-2}\right). \quad (14) \end{aligned}$$

将(14)和(11)式代入径向薛定谔方程(4)

$$\begin{aligned} &\sum_{k=-n}^n b_k r^{2k+s} \left\{ r^{-4} [(4k+2s-3)\sqrt{\beta_1} - \beta_2] \right. \\ &\quad \left. + r^{-2} [(2k+s)(2k+s-1) - l(l+1)] \right\} \\ &+ \sum_{k=-n}^n b_k r^{2k+s} \left\{ E + 2\sqrt{\alpha_1\beta_1} \right. \\ &\quad \left. - r^2 [(4k+2s+3)\sqrt{\alpha_1} - \alpha_2] \right\} = 0, \quad (15) \end{aligned}$$

令

$$\begin{aligned} \sigma_k &= (2k+s)(2k+s-1) - l(l+1), \\ E' &= E - 2\sqrt{\alpha_1\beta_1}, \end{aligned} \quad (16)$$

(15)式可改写为

$$\begin{aligned} &\sum_{k=-n}^n b_k r^{2k+s} \left\{ [(4k+2s-3)\sqrt{\beta_1} - \beta_2] r^{-4} \right. \\ &\quad \left. + \sigma_k r^{-2} + E' - r^2 [(4k+2s+3)\sqrt{\alpha_1} + \alpha_2] \right\} \\ &= 0. \quad (17) \end{aligned}$$

为了使得到的波函数满足简洁性的要求,不妨令(11)式中的 $n=1$ 并且 $b_0=1$. 将(15)式展开,经化简得

$$\begin{aligned} &-r^{s+4} b_1 [(2s+7)\sqrt{\alpha_1} + \alpha_2] \\ &+ r^{s+2} b_1 [b_1 E' - (2s+3)\sqrt{\alpha_1} + \alpha_2] \\ &+ r^s [b_1 \sigma_1 + E' - b_{-1} ((2s-1)\sqrt{\alpha_1} + \alpha_2)] \\ &+ r^{s-2} [b_{-1} E' + \sigma_0 + b_1 ((2s+1)\sqrt{\beta_1} - \beta_2)] \\ &+ r^{s-4} [(2s-3)\sqrt{\beta_1} - \beta_2 + b_{-1} \sigma_{-1}] \\ &+ b_{-1} r^{s-6} [(2s-7)\sqrt{\beta_1} - \beta_2] = 0, \quad (18) \end{aligned}$$

r 为独立变量,由(17)式得到指标 s ,角动量量子数 l 以及幂函数各项系数 α_i, β_j 之间必须满足的联立方程组

$$(2s+7)\sqrt{\alpha_1} + \alpha_2 = 0, \quad (19)$$

$$(2s-7)\sqrt{\beta_1} + \beta_2 = 0, \quad (20)$$

$$(2s-3)\sqrt{\beta_1} - \beta_2 + b_{-1} \sigma_{-1} = 0, \quad (21)$$

$$b_1 E' - (2s+3)\sqrt{\alpha_1} + \alpha_2 = 0, \quad (22)$$

$$b_1 \sigma_1 + E' - b_{-1} ((2s-1)\sqrt{\alpha_1} + \alpha_2) = 0, \quad (23)$$

$$b_{-1} E' + \sigma_0 + b_1 ((2s+1)\sqrt{\beta_1} - \beta_2) = 0. \quad (24)$$

进而获得

$$\beta_2 / \sqrt{\beta_1} = 2s - 7, \quad (19')$$

$$\alpha_2 / \sqrt{\alpha_1} = -(2s + 7), \quad (20')$$

$$b_{-1} = -4\sqrt{\beta_1} / \sigma_{-1}, \quad (21')$$

$$b_1 = (128\beta_1 \sqrt{\sigma_1} - \sigma_0 \sigma_{-1}^2) (4\sqrt{\beta_1} \sigma_{-1} (2\sigma_{-1} + \sigma_1)), \quad (22')$$

$$8\sigma_1 (64\beta_1)^2 + 64\beta_1 \sqrt{\alpha_1} \sigma_{-1} [(2\sigma_{-1} + \sigma_1)^2 - 2\sigma_0 (2\sigma_{-1} - \sigma_1)] - \sigma_1 \sigma_0^2 \sigma_{-1}^3 = 0, \quad (23')$$

$$E' = 2\sqrt{\alpha_1\beta_1} - \frac{16\sqrt{\alpha_1\beta_1} \sigma_{-1} (2\sigma_{-1} + \sigma_1)}{128\beta_1 \sqrt{\alpha_1} - \sigma_0 \sigma_{-1}^2}. \quad (24')$$

为了得到定态波函数 $\chi(r)$ 和能级 E' , 必须进一步确定(11)式中的指标 s , 为此, 先设定量子数 l , 再由判定条件(23')确定指标 s , 进而确定 $\alpha_i, \beta_j, \sigma_k$, 最后得到定态波函数 $\chi(r)$ 和能级 E' .

举例 设 $l=0, s=0$, 由(19')式得 $\beta_2 / \sqrt{\beta_1} = -7, \alpha_2 / \sqrt{\alpha_1} = -7$, 虽然满足(5)式, 但是由(23')式得 $\beta_1 \sqrt{\alpha_1} = -147, \beta_1$ 却不满足(5)式, 因而当 $l=0$ 时, $s \neq 0$.

设 $l=0, s=1$, 由(23')式得 $\beta_1 \sqrt{\alpha_1} = -\frac{25}{64}$, 不满足(5)式, 因而当 $l=0$ 时, $s \neq 1$.

设 $l=0, s=2$, 由(23')式得 $\beta_1 \sqrt{\alpha_1} = 0$, 不满足(5)式, 因而当 $l=0$ 时, $s \neq 2$.

设 $l=0, s=3$, 由(23')式得 $\beta_1 \sqrt{\alpha_1} = 0$, 不满足(5)式, 因而当 $l=0$ 时, $s \neq 3$.

设 $l=0, s=4$, 由(16)式得 $\sigma_{-1} = 2, \sigma_0 = 12, \sigma_1 = 30$; 由(23')式得

$$\beta_1 \sqrt{\alpha_1} = \left(-\frac{445}{64} + \sqrt{\left(\frac{445}{64}\right)^2 + \frac{4 \times 135}{128}} \right) / 2 = 0.1485.$$

β_1 满足(5)式, 因而当 $l=0$ 时, $s=4$. 并求得

$$\beta_1 = 0.1485 \alpha_1^{-1/4}, \quad \beta_2 = \beta_1,$$

$$\alpha_2 = -(2s+7) \alpha_1^{1/2} = -15 \alpha_1^{1/2},$$

$$b_{-1} = -\frac{4\sqrt{\beta_1}}{\sigma_{-1}} = -0.771 \alpha_1^{-1/4},$$

$$b_1 = (128\beta_1 \sqrt{\sigma_1} - \sigma_0 \sigma_{-1}^2) (4\sqrt{\beta_1} \sigma_{-1} (2\sigma_{-1} + \sigma_1))$$

$$= -0.277\alpha_1^{1/4}.$$

径向波函数

$$\chi(r) = (1 - 0.277\alpha_1^{1/4} r^2 - 0.771\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) r^4$$

$$\times \exp\left(-\frac{1}{4}\alpha_1^{1/2} r^4 - 0.192\alpha_1^{-1/4} r^{-2}\right),$$

能级

$$E_{l=0, s=4} = 2\sqrt{\alpha_1 \beta_1} - \frac{16\sqrt{\alpha_1 \beta_1} \sigma_{-1} (2\sigma_{-1} + \sigma_1)}{128\beta_1 \sqrt{\alpha_1} - \sigma_0 \sigma_{-1}^2}$$

$$= 15.232\alpha_1^{1/4}.$$

遵循同样的途径可求得量子数 l 等于其他数时对应的指标 s , 如表 1 所示.

根据表 1 所列数据并利用(24') (10)和(11)式, 可求得相关能级及对应的波函数, 如表 2 所示.

表 1 角动量子数 l 与对应的指标 s 以及 $\alpha_i, \beta_j, \sigma_k$ 之间的关系

l	s	σ_{-1}	σ_0	σ_1	$\beta_1(\alpha_1^{-1/2})$	$\beta_2(\alpha_1^{-1/4})$	$\alpha_2(\alpha_1^{1/2})$	$b_{-1}(\alpha_1^{-1/4})$	$b_1(\alpha_1^{1/4})$
0	4	2	12	30	0.1485	0.3854	-15.0	-0.771	-0.277
1	2	-2	0	10	0.141	-1.125	-11.0	-0.750	-1.000
2	3	-6	0	14	0.0234	-0.153	-13.0	0.102	-0.0625
3	0	-6	-12	-10	6.557	-17.924	7.0	1.707	0.751
4	0	-14	-20	-18	57.422	-53.046	7.0	2.165	0.577
5	0	-24	-30	-28	256.02	-112.00	7.0	2.667	0.428
6	0	-36	-42	-40	816.10	-199.97	7.0	3.174	0.345

表 2 几个低激发态能级与对应的定态径向波函数

能级编号	(l, s)	能量($\alpha_1^{1/4}$)	径向波函数 $\chi(r)$
E_1	3 0	0.8673	$(1 + 0.751\alpha_1^{1/4} r^2 + 1.707\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) \exp(-0.25\alpha_1^{1/2} r^4 - 1.28\alpha_1^{-1/4} r^{-2})$
E_2	1 2	4.7500	$(1 - \alpha_1^{1/4} r^2 + 0.75\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) \exp(-0.25\alpha_1^{1/2} r^4 - 1.86\alpha_1^{-1/4} r^{-2})$
E_3	4 0	8.2280	$(1 + 0.577\alpha_1^{1/4} r^2 + 2.165\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) \exp(-0.25\alpha_1^{1/2} r^4 - 3.789\alpha_1^{-1/4} r^{-2})$
E_4	2 3	10.100	$(1 - 0.0625\alpha_1^{1/4} r^2 + 0.102\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) \exp(-0.25\alpha_1^{1/2} r^4 - 0.0765\alpha_1^{-1/4} r^{-2})$
E_5	0 4	15.232	$(1 - 0.277\alpha_1^{1/4} r^2 - 0.771\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) \exp(-0.25\alpha_1^{1/2} r^4 - 0.192\alpha_1^{-1/4} r^{-2})$
E_6	5 0	22.671	$(1 + 0.428\alpha_1^{1/4} r^2 + 2.667\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) \exp(-0.25\alpha_1^{1/2} r^4 - 8\alpha_1^{-1/4} r^{-2})$
E_7	6 0	45.535	$(1 + 0.345\alpha_1^{1/4} r^2 + 3.174\alpha_1^{-1/4} r^{-2}) \exp(-0.25\alpha_1^{1/2} r^4 - 14.284\alpha_1^{-1/4} r^{-2})$

4. 讨论与结论

本文对势函数为 $V(r) = a_1 r^6 + a_2 r^2 + a_3 r^{-4} + a_4 r^{-6}$ 的径向薛定谔方程进行了求解, 根据量子系统波函数必须满足单值、有界和连续的标准条件, 首先求出径向坐标 $r \rightarrow \infty$ 以及 $r \rightarrow 0$ 时的渐近解, 然后采用奇点邻域附近的级数解法与求得的渐近解相结合, 确定指标 s 以及幂函数各项系数的约束关系, 通过幂级数系数比较法得到该势函数条件下的径向薛定谔方程的一系列定态波函数解析解以及相应的能级结构. 本文解法与采用试探波函数仅仅求出系统一个能级的解法大相径庭, 但非常严谨. 更重要的是, 本文解法是对多种相互作用幂函数紧密耦合的条件下, 寻求系统的解析解提供了一种严谨而有效的方法.

1. 要得到上述势函数的径向波函数 $\chi(r)$ 的满足有限性要求的解析解, 幂函数各项的系数之间必然存在某种约束关系, 如(19') (20')和(23')式所示. 换言之, 幂函数之间存在紧密耦合关系.

2. 在求解库仑势对应的径向薛定谔方程时, 主量子数 n , 径向主量子数 n_r 与角量子数 l 之间存在关系 $n = n_r + l + 1$. 本文不存在这种关系, 本文(16)式中的 l 可取任何正整数.

3. 本文中的各能级均大于 0, 系统各态都处于正能量状态. 这与谐振子势条件下, 系统均处于正能量状态类似.

4. 当 $l \geq 4$ 时, 可求得对应的指标 s 均等于 0, 并且能级随 l 增加而增加. 这是由于随 l 增加, 电子椭圆轨道的贯穿效应和极化效应明显减弱, 势函数项 r^6 的效应明显增强的缘故. 当 $l = 0$ 时, 求得对应的指标 $s = 4$, 这时 $E_{l_s} = E_{04}$ 大于 E_{12}, E_{23}, E_{30} 三能

级,估计这也是由于对 $s = 4$ 而言,定态波函数发生扩展,同样使得电子椭圆轨道的贯穿效应和极化效应明显减弱,势函数项 r^{-6} 的效应明显增强的缘故.

5. 当取(11)式中 $n = 2$ 时,通过比较系数法,可求得(1)式的另一套波函数与能级.可视为(1)式的解析解的另一分支,前述求得的波函数与能级可视

为(1)式的解析解的主值分支,对于 $n = 2$ 的情形,此时指标 s ,角动量量子数 l ,以及幂函数各项系数 α_i, β_i 之间必须满足不同于(18)–(23)式的联立方程组.解析解的数学形式将更为复杂.从简单性出发,我们在主值分支内考虑问题即可.

- [1] Hu X Q, Hu W J, Kong C Y 2002 *Chin. Phys.* **11** 120
- [2] Hu X Q, Lin Z Q 1997 *Commun. Theor. Phys.* **27** 279
- [3] Wang J H, Chen J H, Zhan W S, Zhao J G 1987 *Acta. Phys. Sin.* **36** 172 (in Chinese) [王京汉、陈金昌、詹文山、赵见高 1987 物理学报 **36** 172]
- [4] Liu J B, Cai X P 2001 *Acta. Phys. Sin.* **50** 820 (in Chinese) [刘剑波、蔡喜平 2001 物理学报 **50** 820]
- [5] Li X X, Xu Z Z, Tang Y 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 267 (in Chinese) [李学信、徐至展、汤燕 1997 物理学报 **46** 267]
- [6] Feng D, Jin G J 2003 *Condensed matter physics* (Volume I) (Beijing : Higher education press) 377 (in Chinese) [冯端、金国钧 2003 凝聚态物理学(上卷)(北京:高等教育出版社)第 377 页]
- [7] Znojil M 1990 *J. Math. Phys.* **31** 108
- [8] Kaushal R S 1990 *Phys. Lett. A* **145** 299
- [9] Papp E 1991 *Phys. Lett. A* **157** 192
- [10] Stileyman O 1991 *Phys. Lett. A* **152** 145
- [11] Landtman M 1993 *Phys. Lett. A* **175** 147
- [12] Vashni Y P 1993 *Phys. Lett. A* **183** 9
- [13] Chen C Y, Liu Y Y 1998 *Acta. Phys. Sin.* **47** 536 (in Chinese) [陈昌远、刘友义 1998 物理学报 **47** 536]
- [14] Ma T, Ni Z X 1999 *Acta. Phys. Sin.* **48** 987 (in Chinese) [马涛、倪致祥 1999 物理学报 **48** 987]
- [15] Cai Q 1996 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* **13** 234 (in Chinese) [蔡清 1996 原子与分子物理学报 **13** 234]
- [16] Cai T F, Yu S X 2002 *College Physics* **21** 1 (in Chinese) [蔡天芳、余守宪 2002 大学物理 **21** 1]
- [17] Zeng J Y 1982 *Quantum mechanic* (Beijing : Science Press) 207 (in Chinese) [曾谨言 1982 量子力学(北京:科学出版社) 207]
- [18] Wang Z X, Guo D R 2000 *Introduction to Special function* (Beijing : Beijing University Press) 65 (in Chinese) [王竹溪、郭敦仁 2000 特殊函数论(北京大学出版社)第 65 页]

The analytic solution of the radial Schrödinger equation for the superposed potential of high-order power and inverse-power potential functions *

Hu Xian-Quan Xu Jie Ma Yong Yin Lin

(College of Physics and Information Technology ,Chongqing Normal University , Chongqing 400047 ,China)

(Received 6 November 2006 ; revised manuscript received 10 December 2006)

Abstract

When the Schrödinger equation involves high-order power and inverse power potential functions or the superposed potential function of high-order anharmonic oscillatory potentials , introduced by the presence of electric dipole moment potential , molecular crystal potential , or the polarized equivalent potential , the solution of the Schrödinger equation becomes very complicated. In this paper , with the help of a combination of series solutions and asymptotic solutions utilized near the singular points , a series analytic solution of the wave functions of stationary state for radial Schrödinger equation with potential function $V(r) = a_1 r^6 + a_2 r^2 + a_3 r^{-4} + a_4 r^{-6}$ and the corresponding energy level structure are obtained under the tightly-coupled condition of the interacting power potential functions. Meanwhile , the paper gives a proper discussion and some important conclusions are drawn.

Keywords : solution method using series , power potential function , radial wave function , asymptotic solution

PACC : 0365 , 0230

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10147207) , the Natural Science Foundation of Chongqing (Grant No. 2005BB8267) and the Basic Research of Chongqing Education Committee (Grant No. KJ060813) .