第 58 卷 第 4 期 2009 年 4 月
1000-3290/2009/58(04)/2168-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.58, No.4, April, 2009
©2009 Chin. Phys. Soc.

幂函数叠加势的径向薛定谔方程的解析解*

胡先权† 罗 光 马 燕 崔立鹏
(重庆师范大学物理学与信息技术学院,重庆 400047)

(2008 年 7 月 3 日收到;2008 年 8 月 28 日收到修改稿)

研究多种正幂势函数与逆幂势函数紧密耦合条件下薛定谔径向方程解析解的求解方法.对势函数为 $V(r)=\alpha_1 r^8+\alpha_2 r^3+\alpha_3 r^2+\beta_3 r^{-1}+\beta_2 r^{-3}+\beta_1 r^{-4}$ 的径向薛定谔方程存在解析解的条件以及精确的解析解进行了研究.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 $r\to\infty$ 以及 $r\to 0$ 时的渐近解,然后采用非正则奇点邻域附近的波函数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径向薛定谔方程在势函数系数紧密耦合条件下的一系列定态波函数解析解以及相应的能级结构,并作适当讨论与结论.

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

在教科书中,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加上外部对原子的作用,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、环形非球振子势、Hartmann 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—12].

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[12]正比于 $\alpha r^{-4}+\beta r^{-6}+\lambda r^{-8}$,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[8],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[13]正比于 $c_1 r^{-6}+c_2 r^{-12}$,环形非球谐振子势和 Hartmann 势[14—16]与 r^{-1} 和 r^{-2} 有关,各种不同幂次形式势和有理形式势在量子化学、低能物理和真空物理等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、波函数进行了近似求解或者数值求解.对于高次正幂与逆幂势函数的叠加,很难求出薛定谔方程的解析解,在量子理论中,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[17—35],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[17]得到了势函数 $V(r)=ar^2+br^{-4}+cr^{-6}$ 的一个解析解;文献[19]得到了非谐振子势 $V(x)=x^2/2+g/(2x^2)$ 的能级本征值的精确解;文献[20]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[21—24]研究了环形非谐振子势的精确解;文献[25]研究了势

* 国家自然科学基金(批准号:10575140)和重庆市教育委员会基础理论研究基金(批准号:KJ080825)资助的课题.

† E-mail:huxquan2003@yahoo.com.cn

函数 $V(r)=a_1r^6+a_2r^2+a_3r^{-4}+a_4r^{-6}$ 的一系列定态波函数解析解以及相应的能级结构．一般而言，在目前的情形下，为了要得到上述势函数的精确解，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．本文研究多种正幂势函数与逆幂势函数紧密耦合条件的求解方法．多路光波可以叠加，但不一定能够形成干涉，多路光波必须满足相干条件才能形成干涉，产生不同于入射光波的图像．一般说来，多种势叠加的条件下薛定谔方程只有近似解，不存在解析解．有时可以通过试探解的方法求得多种势叠加的薛定谔方程的一个波函数，一般不能求出其能级结构及对应的波函数系列．本文在文献[25]的基础上，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 $r\to\infty$ 以及 $r\to 0$ 时的渐近解，然后采用非正则奇点邻域附近的波函数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 $V(r)=\alpha_1r^8+\alpha_2r^3+\alpha_3r^2+\beta_3r^{-1}+\beta_2r^{-3}+\beta_1r^{-4}$ 的径向薛定谔方程在势函数的系数之间存在紧密耦合条件下的一系列定态波函数解析解以及相应的能级结构，并作适当讨论与结论．本文的解法对多种相互作用幂函数紧密偶合的条件下，寻求系统的解析解提供了一种可资借鉴的有效方法．

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[36]为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2}{2\mu}l(l+1)r^{-2}+V(r)\right]R(r)=ER(r),\tag{1}$$

其中幂函数和逆幂函数叠加势为

$$V(r)=\alpha_1r^8+\alpha_2r^3+\alpha_3r^2+\beta_3r^{-1}+\beta_2r^{-3}+\beta_1r^{-4}\quad(\alpha_1>0,\beta_1>0).\tag{2}$$

令 $R(r)=\dfrac{\chi(r)}{r}$，采用里德伯(Ry)能量相关单位，则简化的径向薛定谔方程为

$$\chi''(r)+[E-V(r)-l(l+1)r^{-2}]\chi(r)=0,\tag{3}$$

其中 l 是角量子数，$(l=0,1,2,\cdots)$．$r=0$，$r=\infty$ 是(3)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 $r\to\infty$ 或者 $r\to 0$ 时，由(3)式得到相应的渐近方程

$$\chi''(r)-\alpha_1r^8\chi(r)=0\quad(r\to\infty),\tag{4}$$

$$\chi''(r)-\beta_1r^{-4}\chi(r)=0\quad(r\to 0).\tag{4′}$$

(4)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 $r\to\infty$ 时对 $\chi(r)$ 的导函数中只需保留幂函数的最高次幂即可，容易由(4)式求得渐近解

$$\chi(r)\sim\exp\left(-\frac{1}{5}\sqrt{\alpha_1}\,r^5\right).\tag{5}$$

考虑到当 $r\to 0$ 时对 $\chi(r)$ 的导函数中只需保留幂函数的最低次幂即可，容易由(4′)式求得渐近解

$$\chi(r)\sim\exp\left(-\sqrt{\beta_1}\,r^{-1}\right).\tag{5′}$$

分别考虑 $r\to\infty$ 和 $r\to 0$ 时径向波函数的有限性条件，可以求得(3)式的渐近解

$$\chi(r)\sim\exp[g(r)]=\exp\left(-\frac{1}{5}\sqrt{\alpha_1}\,r^5-\sqrt{\beta_1}\,r^{-1}\right),\tag{6}$$

其中

$$g(r)=-\frac{1}{5}\sqrt{\alpha_1}\,r^5-\sqrt{\beta_1}\,r^{-1}.\tag{7}$$

3．径向薛定谔方程的定态波函数解析解和能级

设径向波函数 $\chi(r)$ 为

$$\chi(r)=f(r)\exp[g(r)].\tag{8}$$

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

$$f(r)=\sum_{k=0}^{n}b_kr^{s+k}\qquad(n=0,1,2,\cdots),\tag{9}$$

其中指标 s 一般由指标方程[37]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．

对 $\chi(r)$ 求出二阶导数

$$\begin{aligned}\chi''(r)=&[(\alpha_1r^8+\beta_1r^{-4}-2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\,r^2-4\sqrt{\alpha_1}\,r^3\\&-2\sqrt{\beta_1}\,r^{-3})f(r)]\exp[g(r)]\\&+[2(\sqrt{\beta_1}\,r^{-2}-\sqrt{\alpha_1}\,r^4)f'(r)\\&+f''(r)]\exp[g(r)].\end{aligned}\tag{10}$$

将(5)，(10)式代入(3)式得

$$\sum_{k=0}^{n}b_kr^{s+k}\exp[g(r)]\,\{[(\alpha_1r^8+\beta_1r^{-4}-2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\,r^2-4\sqrt{\alpha_1}\,r^3-2\sqrt{\beta_1}\,r^{-3})$$

$$+2\left(\sqrt{\beta_1}r^{-2}-\sqrt{\alpha_1}r^4\right)(s+k)r^{-1}$$
$$+(s+k)(s+k-1)r^{-2}]$$
$$+[E-\alpha_1 r^8-\alpha_2 r^3-\alpha_3 r^2$$
$$-\beta_3 r^{-1}-\beta_2 r^{-3}-\beta_1 r^{-4}$$
$$-l(l+1)r^{-2}]\}=0. \quad (11)$$

将(11)式化简得

$$\sum_{k=0}^{n} b_k r^{k+s}\{[2(s+k-1)\sqrt{\beta_1}-\beta_2]r^{-3}+\eta_k r^{-2}$$
$$-\beta_3 r^{-1}+E-\left(\alpha_3+2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\right)r^2$$
$$-[2(k+s+2)\sqrt{\alpha_1}+\alpha_2]r^3\}=0. \quad (12)$$

为方便起见,在(12)式中已令

$$\eta_k=(s+k)(s+k-1)-l(l+1). \quad (13)$$

为了使得到的波函数满足简洁性的要求,不妨令(11)式中的 $n=2$,并且 $b_0=1$. 将(12)展开,经化简得

$$b_0 r^s\left\{[2(s-1)\sqrt{\beta_1}-\beta_2]r^{-3}+\eta_0 r^{-2}\right.$$
$$-\beta_3 r^{-1}+E-\left(\alpha_3+2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\right)r^2$$
$$\left.-[2(s+2)\sqrt{\alpha_1}+\alpha_2]r^3\right\}$$
$$+b_1 r^s\left\{\left(2s\sqrt{\beta_1}-\beta_2\right)r^{-2}+\eta_1 r^{-1}\right.$$
$$-\beta_3 r^0+Er^1-\left(\alpha_3+2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\right)r^3$$
$$\left.-[2(s+3)\sqrt{\alpha_1}+\alpha_2]r^4\right\}$$
$$+b_2 r^s\left\{[2(s+1)\sqrt{\beta_1}-\beta_2]r^{-1}+\eta_2 r^0\right.$$
$$-\beta_3 r^1+Er^2-\left(\alpha_3+2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\right)r^4$$
$$\left.-[2(s+4)\sqrt{\alpha_1}+\alpha_2]r^5\right\}=0.$$

r 为独立变量,由上式得到指标 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

$$2(s-1)\sqrt{\beta_1}-\beta_2=0, \quad (14)$$
$$\eta_0+b_1\left(2s\sqrt{\beta_1}-\beta_2\right)=0, \quad (15)$$
$$b_1\eta_1-\beta_3+b_2[2(s+1)\times\sqrt{\beta_1}-\beta_2]=0, \quad (16)$$
$$E-b_1\beta_3+b_2\eta_2=0, \quad (17)$$
$$(b_1 E-b_2\beta_3)r=0, \quad (18)$$
$$b_2 E-\left(\alpha_3+2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\right)=0, \quad (19)$$
$$2(s+2)\sqrt{\alpha_1}+\alpha_2+b_1\left(\alpha_3+2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\right)=0, \quad (20)$$
$$b_1[2(s+3)\sqrt{\alpha_1}+\alpha_2]+b_2\left(\alpha_3+2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\right)=0, \quad (21)$$
$$b_2[2(s+4)\sqrt{\alpha_1}+\alpha_2]=0, \quad (22)$$

由(14)—(22)式得到各参数之间的制约关系

$$\beta_2=2(s-1)\sqrt{\beta_1}, \quad (23)$$
$$\alpha_2=-2(s+4)\sqrt{\alpha_1}, \quad (24)$$
$$\alpha_3=-2\sqrt{\alpha_1\beta_1}\left(\frac{\eta_0+4}{\eta_0}\right), \quad (25)$$
$$\beta_3=256\eta_0^{-4}\sqrt{\alpha_1}\beta_1^2, \quad (26)$$
$$b_1=-\frac{\eta_0}{2\sqrt{\beta_1}}, \quad (27)$$
$$b_2=\frac{\eta_0^2}{8\beta_1}, \quad (28)$$
$$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=\frac{\eta_0^5(\eta_0-\eta_1)}{512}, \quad (29)$$
$$E=-64\frac{\sqrt{\alpha_1\beta_1^3}}{\eta_0^3}, \quad (30)$$
$$\chi(r)=\left(1-\frac{\eta_0 r}{2\sqrt{\beta_1}}+\frac{\eta_0^2 r^2}{8\beta_1}\right)r^s \times\exp\left(-\frac{1}{5}\sqrt{\alpha_1}r^5-\sqrt{\beta_1}r^{-1}\right), \quad (31)$$

为了得到定态径向波函数 $\chi(r)$或者 $R(r)$和能级 E,必须进一步确定(9)中的指标 s,为此,先设定量子数 l,再由判定条件(29)确定指标 s,进而确定 α_i,β_i,b_i,η_k,最后得到定态波函数 $R(r)$和能级 E.

例 设 $l=0$,$s=0$,这时,$\eta_0=\eta_1=0$,但由(29)式得$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=0$,不满足(2)式,因而当 $l=0$ 时,$s\neq 0$.

设 $l=0$,$s=1$,由(29)式得$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=0$,不满足(1)式,因而当 $l=0$ 时,$s\neq 1$.

当 $l=0$ 时,$\eta_0\geqslant 0$,$\eta_0-\eta_1=s(s-1)-s(s+1)=-2s\leqslant 0$,得$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}\leqslant 0$,这与题设条件 α_1,β_1 均大于零相矛盾,说明 $l=0$ 时,α_1,α_2,α_3,β_1,β_2,β_3 之间不存在紧密耦合关系,此时径向薛定谔方程无解析解.

设 $l=1$,$s=0$,$\eta_0-\eta_1=0$,得$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=0$,不满足(1)式,因而当 $l=1$ 时,$s\neq 0$.

设 l 为任意正整数,$s=0$,由于 $\eta_0=\eta_1=-l(l+1)$,得$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=0$,此时 α_1,α_2,α_3,β_1,β_2,β_3 之间不存在紧密耦合关系.

设 l 为任意正整数，$s=1$，这时 $\beta_2=0$. 说明 β_2 对应势能项与其他势能项之间不存在耦合，只存在部分项耦合.

设 $l=1$，$s=2$，得 $\eta_0=0$，得$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=0$，$\Rightarrow s\neq 2$.

设 $l=1$，$s\geqslant 3$，有 $\eta_0\geqslant 0$，$\eta_0-\eta_1\leqslant 0$，$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}\leqslant 0$，此时 α_1，α_2，α_3，β_1，β_2，β_3 之间不存在紧密耦合关系.

设 $l=2$，$s=2$，得 $\eta_0=-4$，$\eta_1=0$，$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=\eta_0^6/512=8$. 满足(1)式，因而当 $l=2$ 时，$s=2$，并求得

$$\alpha_1=64\beta_1^{-5}，\alpha_2=-96\beta_1^{-5/2}，\alpha_3=0；$$

$$\beta_2=2\beta_1^{1/2}，\beta_3=8\beta_1^{-1/2}；$$

$$b_1=2\beta_1^{-1/2}，b_2=2\beta_1^{-1}；$$

能量 $E_{l=2,s=2}=8\beta_1^{-1}$.

由于 $\alpha_3=0$，说明只存在 5 项势函数耦合.

径向波函数：$\chi_{l=2,s=2}(r)=(1+2\beta_1^{-1/2}r+2\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-1.6\beta_1^{-5/2}r^5-\beta_1^{1/2}r^{-1})$

设 $l=4$，$s=2$，得 $\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=9^5/4$，$\alpha_2=-177147\beta_1^{-5/2}$，$\alpha_3=-22963.5\beta_1^{-2}$，$b_1=9\beta_1^{-1/2}$，$b_2=40.5\beta_1^{-1}$.

径向波函数：

$$\chi_{l=4,s=2}(r)=(1+9\beta_1^{-1/2}r+40.5\beta_1^{-1}r^2)r^2\times\exp(-2952.45\beta_1^{-5/2}r^5-\beta_1^{1/2}r^{-1})$$

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、表 2 所示. 需强调一点 表 1 和表 2 中所列数据均为精确数据，不是近似计算值.

表 1　角动量量子数 l 与对应的指标 s 以及 α_i，β_i，b_i 之间的关系

l	s	$\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}$	$\alpha_2(\beta_1^{-5/2})$	$\alpha_3(\beta_1^{-2})$	$\beta_2(\beta_1^{1/2})$	$\beta_3(\beta_1^{-1/2})$	$b_1(\beta_1^{-1/2})$	$b_2(\beta_1^{-1})$
1	1	1/8	−5/4	1/4	0	2	1	1/2
2	2	8	−96	0	2	8	2	2
3	2	781.25	−9375	−937.5	2	20	5	12.5
4	2	14762.25	−177147	−22963.5	2	36	9	40.5
5	2	134456	−1613472	−230496	2	56	14	98
6	2	800000	−9600000	−1440000	2	80	20	200
7	2	3587226.75	−43046721	−79716150	2	108	27	364.5
8	2	13130468.75	−157565625	−24760312	2	140	35	612.5

表 2　几个低激发态能级与对应的定态径向波函数 $\chi_{ls}(r)$

能级数	l	s	能量 β_1^{-1}	径向波函数 $\chi_{ls}(r)$
E_1	1	1	1	$(1+\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+0.5\beta_1^{-1}r^2)r\exp(-0.025\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$
E_2	2	2	8	$(1+2\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+2\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-1.6\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$
E_3	3	2	50	$(1+5\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+12.5\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-156.25\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$
E_4	4	2	162	$(1+9\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+40.5\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-2952.45\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$
E_5	5	2	392	$(1+14\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+98\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-26891.2\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$
E_6	6	2	800	$(1+20\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+200\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-160000\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$
E_7	7	2	1458	$(1+27\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+364.5\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-717445.35\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$
E_8	8	2	2450	$(1+35\beta_1^{-\frac{1}{2}}r+612.56\beta_1^{-1}r^2)r^2\exp(-2626093.75\beta_1^{-\frac{5}{2}}r^5-\beta_1^{\frac{1}{2}}r^{-1})$

4. 结 论

本文对势函数为 $V(r)=\alpha_1 r^8+\alpha_2 r^3+\alpha_3 r^2+\beta_3 r^{-1}+\beta_2 r^{-3}+\beta_1 r^{-4}$ 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 $r\to\infty$ 以及 $r\to 0$ 时的渐近解，然后采用非正则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．本文精确求解的方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，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可资借鉴的有效方法．

1）本文的推导与计算所得数据均为精确数据，不是近似计算值．因此本文所得的解为 6 项正幂和逆幂函数叠加条件下的薛定谔方程的精确解析解．

2）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，本文选择势函数 $V(r)$ 中 r^{-4} 的作用强度 β_1 作为基准，精确地确定了系统存在解析解时，各幂函数之间的紧密耦合关系．

3）系统的基态能量 $E_{l=1,s=1}=1\beta_1^{-1}$．为了便于比较，设 $\beta_1=1$，这时基态能量刚好等于 1，$E_{1,1}=1$，$\beta_2=0$，幂函数 $\beta_2 r^{-3}$ 对系统能量的贡献为 0．严格说来，各幂势函数之间不存在紧密耦合关系，而且 $\sqrt{\alpha_1\beta_1^5}=1/8$，即 $\alpha_1=\beta_1^{-5}/64$，这时 $\alpha_1=1/64$，$\alpha_2=-5/4$，$\alpha_2=1/4$，$\beta_3=2$，各幂势函数的作用强度都不大，系统能量最低．随角量子数 l 的增加，各幂势函数的作用强度急剧增加．

4）在求解纯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(13)中的 l 可取任何正整数．

5）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．此外，本方法同样适用于正能区的散射或势场逃逸问题，例如(e,2e)实验可以探测原子分子的能级结构、波函数和各种相互作用知识[38]．本方法的严格理论计算结果可与实验测量的结果比较，并与各种近似计算的结果相比较，从而更精确地确定原子分子内部的相互作用和能级结构．

6）从表 2 中可以看出，随角量子数 l 的增加，系统的能量急剧增加．从径向波函数 $\chi_{ls}(r)$ 的表达式清晰地看出这一点，因为 l 愈大，径向波函数衰减愈厉害，即波函数 $\chi_{ls}(r)$ 随径向坐标 r 的增加而急剧衰减，说明几率密度急剧衰减，径向波函数受到强烈压缩，同时这时幂函数 r^{-4} 以及 r^{-3} 对能级的贡献愈来愈大，而且各幂函数的作用强度急剧增加，导致系统的能量急剧增加．通过对波函数的分析可说明高 l 产生的困难，这比通过计算散射截面来说明高 l 的困难更简明扼要．

[1] Rogers F J，Graboske H C 1991 *Phys*. *Rev*. A **44** 1577

[2] Whitten B L，Lane N F，Wesisheit J C 1984 *Phys*. *Rev*. A **29** 945

[3] Korobov V I 2000 *Phys*. *Rev*. A **61** 502

[4] Drake G W，Zhong C Y 1994 *Chem*. *Phys*. *Lett*. **229** 396

[5] Flugge S 1974 *Practical Quantum Mechanics*（Berlin：Springer-Verlag）

[6] Wang J H，Chen J H，Zhan W S，Zhao J G，Shen B G，Wang X W，Li D X 1987 *Acta Phys*. *Sin*. **36** 172（in Chinese）[王京汉、陈金昌、詹文山、赵见高、沈保根、王绪威、李德修 1987 物理学报 **36** 172]

[7] 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]

[8] Hu X Q，Lin Z Q 1997 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **27** 279

[9] Hu X Q，Hu W J，Ma Y 2002 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **38** 601

[10] Hu X Q，Xu J，Ma Y，Zheng R L 2006 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **45** 906

[11] Hu X Q，Hu W J，Kong C Y 2002 *Chin*. *Phys*. **11** 120

[12] Hu X Q，Xu J，Luo G，Ma Y 2007 *Chin*. *Phys*. **16** 3631

[13] Feng D，Jin G J 2003 *Condensed Matter Physics*（Vol. Ⅰ）（Beijing：Higher Education Press）p377（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]

[14] Kibler M，Winternitz P 1987 *J*. *Phys*. A **20** 4097

[15] Quesne C 1988 *J*. *Phys*. A **21** 3093

[16] Carpido M V，Bernido C C 1989 *Phys*. *Lett*. A **134** 315

[17] Znojil M 1989 *J*. *Math*. *Phys*. **30** 23

[18] Znojil M 1990 *J*. *Math*. *Phys*. **31** 108

[19] Chen C Y，Liu Y Y 1998 *Acta Phys*. *Sin*. **47** 536（in Chinese）[陈昌远、刘有义 1998 物理学报 **47** 536]

[20] Cai Q 1996 *Chin*. *J*. *At*. *Mol*. *Phys*. **13** 234（in Chinese）[蔡清 1996 原子与分子物理学报 **13** 234]

[21] Chen C Y, Liu C L, Sun D S 2002 *Phys. Lett.* A **305** 341
[22] Yasuk F, Berkdemir C, Berkdemir A 2005 *J. Phys.* A **38** 6579
[23] Lu F L, Chen C Y, Sun D S 2005 *Chin. Phys.* **14** 463
[24] Dong S H, Sun G H, Lozada C M 2005 *Phys. Lett.* A **340** 94
[25] Hu X Q, Xu J, Ma Y, Yin L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5060 (in Chinese) [胡先权、许 杰、马 勇、殷 霖 2007 物理学报 **56** 5060]
[26] Kaushal R S 1990 *Phys. Lett.* A **145** 299
[27] Papp E 1991 *Phys. Lett.* A **157** 192
[28] Süleyman O 1991 *Phys. Lett.* A **152** 145
[29] Landtman M 1993 *Phys. Lett.* A **175** 147
[30] Vashni Y P 1993 *Phys. Lett.* A **183** 9
[31] Domguez A F 1989 *Phys. Lett.* A **136** 175
[32] Talukdar B, Yunus A, Amin M R 1989 *Phys. Lett.* A **141** 326
[33] Luban M 1989 *Appl. Phys. Lett.* **54** 1997
[34] Sutherland B 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3678
[35] Zhu D P 1987 *J. Phys.* A **20** 4331
[36] Zeng J Y 1982 *Quantum Mechanics* (Beijing: Science Press) p207 (in Chinese) [曾谨言 1982 量子力学 (北京:科学出版社)第 207 页]
[37] Wang Z X, Guo D R 2000 *Introduction to Special Function* (Beijing: Peking University Press) p65 (in Chinese) [王竹溪、郭敦仁 2000 特殊函数论 (北京:北京大学出版社) 第 65 页]
[38] Xu K Z 2006 *Advanced Atomic and Molecular Physics* (Beijing: Science Press) p17 (in Chinese) [徐克遵 2006 高等原子分子物理学 (北京:科学出版社)第 17 页]

The analytic solution of the radial Schrödinger equation for the superposed potentials*

Hu Xian-Quan† Luo Guang Ma Yan Cui Li-Peng

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

(Received 3 July 2008; revised manuscript received 28 August 2008)

Abstract

The method of solving the radial Schrödinger equation is studied by under the tight coupling condition of several positive-power and inverse-power potential functions. The precise analytic solutions and the conditions that determine the existence of analytic solution are searched when the potential of the radial Schrödinger equation is $V(r) = \alpha_1 r^8 + \alpha_2 r^3 + \alpha_3 r^2 + \beta_3 r^{-1} + \beta_2 r^{-3} + \beta_1 r^{-4}$. According to the single valued, bounded and continuous stipulations of wave function in a quantum system, firstly, the asymptotic solution is solved when the radial coordinate $r \to \infty$ and $r \to 0$; secondly, the asymptotic solutions are combined with the series solutions in the neighborhood of irregular singularities; and then the power series coefficients are compared. A series of analytic solutions of the stationary state wave function and the corresponding energy level structure are deduced by tight coupling between the coefficients of potential functions for the radial Schrödinger equation. And the solutions are discussed and the conclusions are made.

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. 10575140) and the Basic Research of Chongqing Education Committee, China (Grant No. KJ080825).

† E-mail: huxquan2003@yahoo.com.cn