

# 双阱势 Fokker-Planck 方程准确解模型

郑 伟 谋

(中国科学院理论物理研究所)

1985 年 2 月 14 日收到

## 提 要

采用 Darboux 变换和一个积分变换, 获得了两类双阱势 Fokker-Planck 方程准确解模型。严格解的结果同 Kramers 近似作了比较。

## 一、引 言

Fokker-Planck 方程方法在量子光学、表面催化化学反应、超离子电导、隧道结 Josephson 流涨落等问题中都很重要, 一维非谐振子势特别是双阱势中的扩散过程, 可用于描述各种各样的实际问题, 所以, 大量文献讨论了这种过程的准确解模型<sup>[1,2]</sup> 和近似求解方法<sup>[3]</sup>。过去的准确解模型, 完全可解的势均为单阱, 而双阱势取分段连接势或由之演变而得的势场, (因为须求解由连接条件给出的超越方程) 相应的本征值问题只能部分地近似求解, 并没有严格意义下的准确解。我们曾用 Darboux 变换和另一积分变换讨论了 Weber 方程的变换<sup>[4]</sup>, 获得了一类完全可解的双阱势模型<sup>[5]</sup>。本文再提出本征值谱较为复杂且可调参数较多的另二类双阱势准确解模型。

## 二、模型及其准确解

本节将只详细讨论两类势模型中的一类。对另一类势将只给出势的表达式, 不作进一步讨论。这里所考虑的第一类势模型为

$$U(x) = 2 \ln u_c(x) \quad (1a)$$

$$\equiv 2 \ln \left[ \cos^{\lambda} x F \left( \frac{\lambda + k}{2}, \frac{\lambda - k}{2}; \frac{1}{2}; \sin^2 x \right) \right]. \quad (1b)$$

此处  $\lambda$  和  $k$  为满足适当条件的常数, 函数  $u_c(x)$  是 Pöschl-Teller 势<sup>[6]</sup> 薛定谔型方程

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \left[ k^2 - \frac{\lambda(\lambda - 1)}{\cos^2 x} \right] u = 0 \quad \left( -\frac{\pi}{2} < x < \frac{\pi}{2}, \lambda > 1 \right) \quad (2)$$

的偶解,  $F(a, b; c; z)$  为超几何函数<sup>[7]</sup>。于是, 描述在势场  $U(x)$  中扩散过程的 Fokker-Planck 方程为

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [U'(x)P(x, t)] + \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3)$$

考虑初始概率分布密度为在  $x = x_0$  处的  $\delta$  函数峰, 则初条件为

$$P(x, 0) = \delta(x - x_0). \quad (4)$$

参照 van Kampen 等人的工作<sup>[2,8]</sup>, 方程 (3) 满足初条件 (4) 式的解可表为

$$P(x, t) = C_{gr}^{-2} \phi_{gr}^2(x) + \frac{\phi_{gr}(x)}{\phi_{gr}(x_0)} \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{-2} \phi_m(x) \phi_m(x_0) \exp[-(E_m - E_{gr})t], \quad (5)$$

此处  $\phi_m$  和  $E_m$  为薛定谔方程

$$\phi'' + [E - V(x)]\phi = 0 \quad (6)$$

的本征函数和本征值,  $\phi_{gr}$  和  $E_{gr}$  对应于基态, 系数  $C_{gr}^2$  和  $C_m^2$  为归一因子, 而薛定谔势  $V(x)$  和 Fokker-Planck 势  $U(x)$  之间有关系式

$$V(x) = e^{\frac{U}{2}} (e^{-\frac{U}{2}})'' \quad (7)$$

将 (1) 式代入上式, 得

$$V(x) = u_c \left( \frac{1}{u_c} \right)'' \quad (8)$$

利用 Darboux 变换和另一积分变换<sup>[4]</sup>, 我们已经求得方程 (6) 在势  $V(x)$  取 (8) 式时的解<sup>[9]</sup>. 这些解写成微分形式为

$$\phi_m = u_c \frac{d}{dx} \left( \frac{u_m}{u_c} \right), \quad (9a)$$

也可写成积分形式

$$\tilde{\phi}_m = \frac{1}{u_c} \int^x u_m u_c dx, \quad (9b)$$

相应的本征值为

$$E_m = k_m^2 - k^2; \quad (9c)$$

另有基态

$$\phi_{gr} = \frac{1}{u_c}, \quad E_{gr} = 0. \quad (10)$$

以上  $u_m$  和  $k_m^2$  为 Pöschl-Teller 势薛定谔方程的本征函数和本征值:

$$u_{2n} = \cos^2 x F\left(\lambda + n, -n; \frac{1}{2}; \sin^2 x\right), \quad (11a)$$

$$k_{2n} = \lambda + 2n;$$

$$u_{2n+1} = \cos^2 x \sin x F\left(\lambda + 1 + n, -n; \frac{3}{2}; \sin^2 x\right), \quad (11b)$$

$$k_{2n+1} = \lambda + 2n + 1.$$

我们也已求得了所有的归一因子

$$C_{gr}^2 = \frac{\Gamma\left(\frac{\lambda + k}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\lambda - k}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\lambda + k + 1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\lambda - k + 1}{2}\right)}; \quad (12a)$$

$$C_m^2 = E_m I_m,$$

$$I_{2n} = \frac{n! \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) \Gamma(n + \lambda) \Gamma\left(n + \lambda + \frac{1}{2}\right)}{(2n + \lambda) \Gamma^2(2n + \lambda)},$$

$$I_{2n+1} = \frac{n! \Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right) \Gamma(n + \lambda + 1) \Gamma\left(n + \lambda + \frac{1}{2}\right)}{(2n + \lambda + 1) \Gamma^2(2n + \lambda + 1)}. \quad (12b)$$

由表达式(5)及关系式(9)至(12), 可写出对应于模型势(1)的解.

如果在(1a)式中代替  $u_e$  取方程(2)的偶解  $u_e$  和奇解  $u_o$  的线性组合  $(u_e + \beta u_o)$ , 则可得非对称的  $U(x)$ . 适当选择参数  $\lambda$ ,  $k$  和  $\beta$ ,  $U(x)$  可为双阱势.  $\lambda=2.5$ ,  $k=2.2$ ,  $\beta=0$  和  $0.059$  时, 由 Pöschl-Teller 势产生的 Fokker-Planck 势  $U(x)$ . 此时势为对称的 ( $\beta=0$ ) 和非对称的 ( $\beta \neq 0$ ) 双阱如图 1 所示.

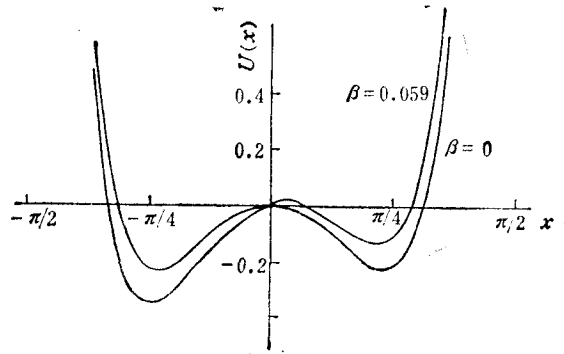


图 1

此外, 我们还可由改型 Pöschl-Teller 势<sup>[6]</sup>薛定谔方程出发, 作 Darboux 变换和积分变换, 然后找出相应的 Fokker-Planck 势  $U(x)$ . 这个第二类势的具体函数形式为

$$U(x) = 2 \ln \left[ \operatorname{sech}^{\kappa} x F\left(\frac{\lambda + \kappa}{2}, \frac{-\lambda + \kappa + 1}{2}; 1 + \kappa; \operatorname{sech}^2 x\right) \right], \quad (13)$$

此处  $\lambda$  和  $\kappa$  为适当的势参数.

### 三、几个特例

本节讨论(未必为双阱势的)几个特例.

#### 1. $x_0 = 0$ 的情形

由(9a)式可以看出, 只有  $m = 2n + 1$  的项对(5)式中的求和有贡献. 由(9a)和(11b)式可验证  $\phi_{2n+1}(0) = 1$ , 所以, 由(5)式得

$$P(x, t) = C_{gr}^{-2} \phi_{gr}^2(x) + \phi_{gr} \sum_{n=0}^{\infty} C_{2n+1}^{-2} \phi_{2n+1}(x) e^{-E_{2n+1} t}. \quad (14)$$

#### 2. $\lambda = k$ 的情形

此时由(1)式得

$$u_e(x) = \cos^{\lambda} x F\left(\lambda, 0; \frac{1}{2}; \sin^2 x\right) = \cos^{\lambda} x. \quad (15)$$

于是,

$$U(x) = 2\lambda \ln \cos \lambda \xrightarrow{x \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} -\infty, \quad (16)$$

$U(x)$  为势垒, 不存在稳定的平衡态.

### 3. $k = 1/2$ 的情形

此时由 (1) 式得

$$u_c(x) = \cos^{\lambda} x F\left(\frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4}, \frac{\lambda}{2} - \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \sin^2 x\right). \quad (17)$$

利用关系式<sup>[7]</sup>

$$F\left(a, \frac{1}{2} + a; \frac{1}{2}; z^2\right) = \frac{1}{2} [(1+z)^{-2a} + (1-z)^{-2a}], \quad (18)$$

并记  $z = \sin x$ , 可得

$$u_c = \frac{1}{2} [(1-z)^{\frac{\lambda}{2}} (1+z)^{\frac{1-\lambda}{2}} + (1-z)^{\frac{1-\lambda}{2}} (1+z)^{\frac{\lambda}{2}}]. \quad (19)$$

注意到  $\lambda > 1$ , 于是,

$$U(x) = 2\ln \left\{ \frac{1}{2} [(1-z)^{\frac{\lambda}{2}} (1+z)^{\frac{1-\lambda}{2}} + (1-z)^{\frac{1-\lambda}{2}} (1+z)^{\frac{\lambda}{2}}] \right\} \quad (20)$$

为单阱势, 满足

$$U(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm \frac{\pi}{2}} +\infty.$$

### 4. $\lambda \geq k$ 的双阱情形

由 (9c) 和 (11a) 式知, 此时第一激发态和基态能级之间的距离

$$E_0 - E_{gr} = \lambda^2 - k^2 \geq 0 \quad (21)$$

为非常小的正数. 记  $y = \sin^2 x$ , 由 (1) 式有

$$u_c = (1-y)^{\frac{\lambda}{2}} F\left(\frac{\lambda+k}{2}, \frac{\lambda-k}{2}; \frac{1}{2}; y\right), \quad (22a)$$

$$U(x) = 2\ln \left[ (1-y)^{\frac{\lambda}{2}} F\left(\frac{\lambda+k}{2}, \frac{\lambda-k}{2}; \frac{1}{2}; y\right) \right]. \quad (22b)$$

根据正弦和对数函数在所考虑的  $x$  或  $y$  取值范围内的简单性质, 只须讨论  $u_c$  随  $y$  的变化, 就可知  $U(x)$  随  $x$  变化的趋势.

由 (22a) 式, 在  $y \geq 0$  时,

$$\frac{du_c}{dy} \approx -\frac{\lambda}{2} + \frac{(\lambda+k)(\lambda-k)}{2} \approx -\frac{\lambda}{2} < 0. \quad (23)$$

由  $\lambda = k$  时(见情形 3) 势为垒, 可推测当  $\lambda \geq k$  而势变为双阱时, 阱的极小值点非常靠近  $y = 1$ . 利用超几何函数的线性变换公式

$$\begin{aligned} F(a, b; c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} F(a, b; a+b-c; 1-z) \\ &\quad + (1-z)^{c-a-b} \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times F(c-a, c-b; c-a-b+1; 1-z), \\ & |\arg(1-z)| < \pi, \end{aligned} \quad (24)$$

对于  $y \lesssim 1$ , 记  $\xi = 1 - y$ , 可得

$$u_c \approx \alpha \xi^{\frac{\lambda}{2}} + \beta \xi^{\frac{1-\lambda}{2}}, \quad (25)$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\lambda\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda+k}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda-k}{2}\right)} \approx 1, \\ \beta &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\lambda+k}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\lambda-k}{2}\right)} \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2}(\lambda-k) \frac{\Gamma\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(\lambda)}. \end{aligned}$$

于是, 极小值点的方程为

$$\lambda \alpha \xi_{cx}^{\frac{\lambda}{2}} = (\lambda-1)\beta \xi_{cx}^{\frac{1-\lambda}{2}},$$

即

$$\xi_{cx}^{\lambda-\frac{1}{2}} = \frac{(\lambda-1)\beta}{\lambda\alpha}, \quad (26)$$

以变量  $x$  写出为

$$\cos^{2\lambda-1} x_{cx} = \frac{(\lambda-1)\beta}{\lambda\alpha} \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\lambda-1}{\lambda} \frac{\Gamma\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(\lambda)} (\lambda-k) \approx 0,$$

的确极值点非常靠近  $y = 1$  或  $x = \pm \frac{\pi}{2}$ . 由 (25) 和 (26) 式可得

$$\begin{aligned} u_c^2(x_{cx}) &= \left[ \frac{2\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\alpha}{\lambda-1} \right]^2 \frac{(\lambda-1)\beta}{\lambda\alpha} \xi_{cx}^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{4\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)^2 \alpha\beta}{\lambda(\lambda-1)} \xi_{cx}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (27)$$

下节将用这里得到的结果同近似方法作比较.

另外, 当  $t \gg 1$  时, 级数解 (5) 式中的求和可只保留  $m = 0$  的一项, 这时穿越势垒的概率流为

$$\begin{aligned} J(x=0, x_0, t \gg 1) &= \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} \\ &\approx \left\{ -\frac{C_0^{-2}\phi_0(x_0)}{\phi_{gr}(x_0)} \frac{d^2}{dx^2} \left[ \frac{u_0(x)}{u_c(x)} \right] \Big|_{x=0} \right\} e^{-(\lambda^2-k^2)t} \\ &= \frac{\lambda^2\phi_0(x_0)}{C_0^2\phi_{gr}(x_0)} e^{-(\lambda^2-k^2)t}. \end{aligned} \quad (28)$$

## 四、和 Kramers 近似公式的比较

在  $\lambda \approx k$  的深阱势情形下, 对扩散过程可定义一长时间尺度, 它对应于第一本征态  $\psi_0$  和基态  $\psi_{gr}$  的本征值之差的倒数, 具体地说, 对于上节情形 4 有

$$(\tau_i)^{-1} = \lambda^2 - k^2 \approx 2\lambda(\lambda - k). \quad (29)$$

Kramers 曾给出一个著名的近似公式<sup>[10]</sup>为

$$(\tau_i)^{-1} = \frac{1}{\pi} [U''(x_{cx})|U''(0)|]^{1/2} e^{-[U(0)-U(x_{cx})]}. \quad (30)$$

将上节讨论所得结果代入上式, 可得

$$\begin{aligned} (\tau_i)^{-1} &= \frac{1}{\pi} \left\{ 2 \left[ \frac{\lambda(\lambda-1)}{\xi} - k^2 \right] \cdot 2 |[\lambda(\lambda-1) - k^2]| \right\}^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \frac{4 \left( \lambda - \frac{1}{2} \right)^2 \alpha \beta}{\lambda(\lambda-1)} \xi^{\frac{1}{2}} \\ &\approx \left[ 4 \sqrt{\frac{\lambda-1}{\pi}} \left( \frac{\lambda-1/2}{\lambda} \right)^2 \frac{\Gamma(\lambda-1/2)}{\Gamma(\lambda)} \right] \cdot 2\lambda(\lambda-k). \end{aligned} \quad (31)$$

可以看到, 近似公式只给出  $(\tau_i)^{-1}$  与  $(\lambda - k)$  成正比的定性结果, 具体数值结果和准确结果非常不同. 我们曾经讨论了准确解和近似结果可差一因子  $\sqrt{\pi}/2 \approx 1.1$  的一些情形<sup>[11]</sup>, 对于这里提出的模型, 两者之间的偏差更大.

## 参 考 文 献

- [1] E. Wong, Am. Math. Soc. Proceedings of 16th symposium on Appl. Math., Rhode Island, (1964), p. 264; M. San Miguel, Z. Phys., B33, (1979), 307; M. Mörsch, H. Risken and H. D. Vollmer, Z. Phys., B32(1979), 245; F. de Pasquale and P. Tombesi, Phys. Lett., 72A(1979), 7.
- [2] N. G. van Kampen, J. Stat. Phys., 17 (1977), 71.
- [3] M. Suzuki, Adv. Chem. Phys., 46 (1981), 195; B. Cardi, C. Cardi, B. Roulet and D. Saint-James, Physica, 108A (1981), 233.
- [4] W. M. Zheng, J. Math. Phys., 25 (1984), 88; J. Phys., A16 (1983), 43.
- [5] M. O. Hongler and W. M. Zheng, J. Stat. Phys., 29(1982), 317; J. Math. Phys., 24(1983), 336; W. M. Zheng, Physica, 122A (1983), 431.
- [6] G. Pöschl and E. Teller, Z. Phys., 83 (1933), 143; S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer, New York, (1974).
- [7] M. Abramovitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, (1965)
- [8] H. Tomita, A. Ito and H. Kidachi, Prog. Theor. Phys., 56, (1976), 786.
- [9] W. M. Zheng, Double-Well Potentials (Thesis), Université libre de Bruxelles, Brussels, (1984).
- [10] H. A. Kramers, Physica, 7(1940), 284.
- [11] W. M. Zheng, Physica, 117A (1983), 171.

---

## EXACTLY SOLVABLE MODELS FOR THE FOKKER-PLANCK EQUATION

ZHENG WEI-MOU

*(Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica)*

### ABSTRACT

By means of the Darboux transformation and an integral transformation, two classes of solvable double-well potential models are obtained for the Fokker-Planck equation. The exact results are compared with Kramers' approximation.