第41卷 第4期 物 理 学 报 Vol. 41, No. 4
1992年4月 ACTA PHYSICA SINICA Apr., 1992

关于量子基态的一种解法

朱栋培 石名俊 陈银华
中国科学技术大学近代物理系，合肥，230026

1991年4月15日收到

通过一个积分变换，量子系统的能量本征值问题可转化为求解非线性的 Riccati 方程。由它可以容易地求出基态能量及相应的波函数。讨论了此方法与通常的因子化方法的关系并以各种常见的系统作为显示此方法优越性的示范。

PACC: 0365

寻求量子系统束缚态的能量本征值及相应的波函数是量子力学的一项最基本的任务。人们不断在发展求解本征值特别是基态本征值的方法[1]。本文提出一种寻求基态本征值的方法，其特点是通过一个积分变换把量子力学本征值问题转化为一个非线性方程。由于方程形式简单，而基态波函数又有一些特别的性质，我们可以避开特殊函数的困扰，通过简捷的计算求得基态本征值并同时得到基态波函数。

考虑质量为 μ 的粒子在位势 $V(x)$ 中作一维运动，则相应的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x)+(-E+V(x))\phi(x)=0. \tag{1}$$

波函数 $\phi(x)$ 应当满足标准条件，如连续、有界、单值和平方可积等。对于束缚态，一个显然的边界条件为

$$\phi|_{|x|\to\infty}=0. \tag{2}$$

改写方程 (1)，得

$$\phi''=(v(x)-\varepsilon)\phi, \tag{3}$$

其中，

$$v(x)=2\mu V(x)/\hbar^2,\ \ \varepsilon=2\mu E/\hbar^2. \tag{4}$$

现作一积分变换，令

$$\phi(x)=N\exp\left(\int_a^x Z(t)dt\right), \tag{5}$$

其中 N 为归一化系数，依赖于积分下限 a 的选择。把 (5) 式代入方程 (3)，则得 Z 的一个方程

$$Z'+Z^2=v(x)-\varepsilon. \tag{6}$$

这是标准的 Riccati 方程。稍有不同之点是本征值 ε 要与解 Z 一起决定。

由于一维运动束缚态波函数总可取为实的，因此 $Z(x)$ 可以是一个实函数，而束缚态边界条件 (2) 式意味着

$$\int^{x} Z(t)dt \to -\infty \quad (|x| \to \infty). \tag{7}$$

它对函数 Z 的选取特别是其中领头项的符号有着直接的限制。当然，波函数的标准条件对 Z 的选取也有明显的约束。例如 Z 中极点项的系数要是正的以保证波函数有界。

这样，求解量子系统能量本征值的问题就变为求解一个非线性的 Riccati 方程。这相当于直接把位势作一特殊的分解，在分解过程中得到本征值和 Z 函数，再由 (5) 式积分得到相应的波函数。对于基态，由于波函数在基本区域内无节点，函数 $Z(x)$ 取特别简单的形式，Riccati 方程的解可以很容易得到。

这一方法与通常的因子化方法有着密切的关系。方程 (3) 对应于下面的哈密顿量：

$$h = 2\mu H/\hbar^2 = -d^2/dx^2 + v(x). \tag{8}$$

在因子化方法中，h 可以被改写为下面的因子乘积形式：

$$h = b^+b + \varepsilon_0, \tag{9}$$

其中

$$b = d/dx - Z(x), \quad b^+ = -d/dx - Z(x). \tag{10}$$

把 (10) 式代入 (9) 式中并与 (8) 式比较，则得

$$Z' + Z^2 = v(x) - \varepsilon_0. \tag{11}$$

这正是 Riccati 方程。对于基态 ψ_0，可以要求一个辅助条件，即

$$b\psi_0 = 0. \tag{12}$$

积分此方程可得

$$\psi_0 = N\exp\left(\int^{x} Z(t)dt\right). \tag{13}$$

这正是我们积分变换的形式。

现在讨论这一方法在求解常见位势中基态上的应用。

1. 谐振子势

$$V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2, \quad v(x) = \alpha^4x^2, \quad \alpha \equiv (\mu\omega/\hbar)^{1/2}. \tag{14}$$

$$Z' + Z^2 = \alpha^4x^2 - \varepsilon_0. \tag{15}$$

令

$$Z = ax, \tag{16}$$

代入方程 (15)，则有

$$a + a^2x^2 = \alpha^4x^2 - \varepsilon_0,$$

于是得

$$a^2 = \alpha^4, \quad \varepsilon_0 = -a.$$

由边界条件知，a 必须为负数，故得

$$a = -\alpha^2, \quad \varepsilon_0 = \alpha^2.$$

而系统的基态能量为

$$E_0 = \hbar^2\varepsilon_0/2\mu = \hbar\omega/2, \tag{17}$$

相应的波函数为

$$\psi_0 = N\exp\left(\int^x(-\alpha^2 t)dt\right) = N\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right). \tag{18}$$

2. Pöschl-Teller 势

$$V(x) = \frac{1}{2}V_0\left(\frac{x(x-1)}{\sin^2\alpha x} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2\alpha x}\right)\quad V_0 = \frac{\hbar^2\alpha^2}{\mu},\ \alpha > 0,$$

$$x > 1,\ \lambda > 1,\ 0 \leqslant x \leqslant \frac{\pi}{2\alpha}, \tag{19}$$

$$v(x) = \beta/\sin^2\alpha x + \gamma/\cos^2\alpha x\quad \beta = \mu V_0 x(x-1)/\hbar^2,\ \gamma = \mu V_0\lambda(\lambda-1)/\hbar^2. \tag{20}$$

令

$$Z = A\tan\alpha x + B\cot\alpha x, \tag{21}$$

代入 Riccati 方程,比较 $1/\sin^2\alpha x$ 和 $1/\cos^2\alpha x$ 前面的系数,得

$$\varepsilon_0 = (A-B)^2,\ B^2 - B\alpha = \beta,\ A^2 + A\alpha = \gamma. \tag{22}$$

为使波函数满足标准条件,必须有 $A < 0$, $B > 0$, 于是从上面方程可解出 A 与 B

$$A = -\lambda\alpha,\ B = \alpha x. \tag{23}$$

代入 ε_0 的表达式,得

$$\varepsilon_0 = \alpha^2(\lambda + x)^2. \tag{24}$$

由此基态能量和相应的波函数为

$$E_0 = \frac{1}{2}V_0(\lambda + x)^2, \tag{25}$$

$$\psi_0 = N\cos^\lambda\alpha x\sin^x\alpha x. \tag{26}$$

3. 修正 Pöschl-Teller 势

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2\lambda(\lambda-1)/\mathrm{ch}^2\alpha x\quad \lambda > 1, \tag{27}$$

$$v(x) = -\beta/\mathrm{ch}^2\alpha x\quad \beta = \alpha^2\lambda(\lambda-1). \tag{28}$$

取

$$Z(x) = A\mathrm{th}\alpha x + B, \tag{29}$$

代入 Riccati 方程,得关系式:

$$\varepsilon_0 = -(A^2 + B^2),\ \alpha A - A^2 = -\beta,\ 2AB = 0. \tag{30}$$

A 必须非零,故 $B = 0$, 由此

$$A = \alpha(1-\lambda),\ \varepsilon_0 = -\alpha^2(\lambda-1)^2,$$

则基态能量和波函数如下:

$$E_0 = -\hbar^2\alpha^2(\lambda-1)^2/2\mu, \tag{31}$$

$$\psi_0 = N/(\mathrm{ch}\alpha x)^{\lambda-1}, \tag{32}$$

4. isotonic 谐振子

$$V(x) = V_0(a/x - x/a),\ V_0 a, x > 0, \tag{33}$$

$$v(x) = v_0(a/x - x/a),\ \ v_0 = 2\mu V_0/\hbar^2. \tag{34}$$

设

$$Z = A/x - x/B,\quad B \neq 0, \tag{35}$$

则可从方程 (6) 得

$$v_0 a^2 - A^2 + A = 0,\ \ v_0/a^2 - 1/B^2 = 0,\ \ \varepsilon_0 = -2v_0 + 1/B + 2A/B. \tag{36}$$

由波函数的有界性知 $A > 0$，$B > 0$，故得

$$A = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 4v_0 a^2}),\quad B = a/\sqrt{v_0},$$

$$\varepsilon_0 = 2\sqrt{v_0}/a + 2v_0(\sqrt{1 + 1/4v_0 a^2} - 1). \tag{37}$$

由此求得了基态能量和波函数:

$$E_0 = \frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\sqrt{1 + 8\mu V_0 a^2/\hbar^2} - \sqrt{8\mu V_0 a^2/\hbar^2}\right], \tag{38}$$

$$\psi_0 = N x^{\frac{1}{2}(1+\sqrt{1+8\mu V_0 a^2/\hbar^2})} e^{-\sqrt{2\mu V_0}x^2/2a\hbar}. \tag{39}$$

5. δ 势阱

$$V(x) = -V_0\delta(x),\quad V_0 > 0, \tag{40}$$

$$v = -v_0\delta(x),\quad v_0 = 2\mu V_0/\hbar^2. \tag{41}$$

令

$$Z(x) = A\theta(x) + B\theta(-x),\ \theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}, \tag{42}$$

把此 Z 代入方程 (6)，利用 θ 函数性质:

$$\theta^2(x) = \theta(x),\ \ \theta'(x) = \delta(x),\ \ \theta(x) + \theta(-x) = 1,$$

可得

$$A - B = -v_0,\ \ A^2 - B^2 = 0,\ \ \varepsilon_0 = -B^2. \tag{43}$$

A 必须小于零，由此解出

$$B = -A = v_0/2, \tag{44}$$

$$\varepsilon_0 = -v_0^2/4. \tag{45}$$

故得能量本征值和相应的波函数为

$$E_0 = -\mu V_0^2/2\hbar^2, \tag{46}$$

$$\psi_0 = N\exp[(x\theta(-x) - x\theta(x))/2] = N\exp(-\mu V_0|x|/\hbar^2). \tag{47}$$

6. d 维各向同性谐振子

d 维 ($d \geqslant 2$) 空间各向同性谐振子，在把角向部分坐标分离后，可得到径向的等效哈密顿算符[2]:

$$H_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\left[l + \frac{1}{2}(d-1)\right]\left[l + \frac{1}{2}(d-1) - 1\right]\Big/ r^2$$

$$+ \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2,\qquad r^2 = \sum_{i=1}^{d} x_i^2. \tag{48}$$

这时它成为一个一维半空间问题：

$$H_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + V(r), \tag{49}$$

等效位势为

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{k(k+1)}{r^2}, \quad k \equiv l + \frac{1}{2}(d-1) - 1, \tag{50}$$

$$v(x) = \alpha^4 r^2 + k(k+1)/r^2, \quad \alpha \equiv \sqrt{\mu\omega/\hbar}. \tag{51}$$

令

$$Z(r) = A_1 r + A_{-1} r^{-1}, \tag{52}$$

代入 Riccati 方程，比较系数有

$$\varepsilon_0 = -(A_1 + 2A_1 A_{-1}), \ A_1^2 = \alpha^4, \ A_{-1}^2 - A_{-1} = k(k+1). \tag{53}$$

波函数在无限处的行为要求 $A_1 < 0$，而在原点的有限性导致 $A_{-1} > 0$，故解得

$$A_1 = -\alpha^2, \ A_{-1} = k+1, \ \varepsilon_0 = \alpha^2(2k+3) = \alpha^2(2l+d). \tag{54}$$

这样就得到 d 维各向同性谐振子径向基态能量和相应的波函数径向部分

$$E_{0l} = \hbar\omega(2l+d)/2, \tag{55}$$

$$R_{0l}(r) = N r^{l+\frac{1}{2}(d-1)-1} e^{-\mu\omega r^2/2\hbar}. \tag{56}$$

7. d 维类氢原子

对 d 维空间（$d \geqslant 2$）类氢原子，在分离变量后，径向运动的等效位势为[3]

$$V(r) = -ze^2/r + \hbar^2 k(k+1)/2\mu r^2, \quad k = l + \frac{1}{2}(d-1) - 1, \tag{57}$$

$$v(r) = -\sigma/r + k(k+1)/r^2, \quad \sigma = 2\mu z e^2/\hbar^2. \tag{58}$$

设

$$Z = A/r + B, \tag{59}$$

则 Riccati 方程导致

$$\varepsilon_{0l} = -B^2, \ A^2 - A = k(k+1), \ 2AB = -\sigma. \tag{60}$$

波函数的标准条件要求 $A > 0$，$B < 0$，故得

$$A = k+1, B = -\sigma/2(k+1), \ \varepsilon_{0l} = -\sigma^2/4(k+1)^2. \tag{61}$$

于是 d 维类氢原子径向基态的能级和相应的波函数为

$$E_{0l} = -\frac{1}{2}\frac{\mu(ze^2)^2}{\hbar^2}\frac{1}{\left[l + \frac{1}{2}(d-1) - 1\right]^2}$$

$$= -\frac{1}{2}\mu c^2(z\alpha)^2 \Big/ \left[l + \frac{1}{2}(d-1) - 1\right]^2, \quad \alpha \equiv e^2/\hbar c, \tag{62}$$

$$R_{0l} = N r^{l+\frac{1}{2}(d-1)-1} e^{-2\mu z\alpha c r/(2l+d)\hbar}. \tag{63}$$

8. Hulthen 势

$$V(r) = -V_0/(\exp(r/a) - 1), \quad V_0 > 0, \tag{64}$$

$$v(r) = -\beta/[\exp(r/a) - 1], \quad \beta = 2\mu V_0/\hbar^2. \tag{65}$$

令

$$Z = A/[\exp(r/a) - 1] + B, \tag{66}$$

代入 Riccati 方程求得

$$A = 1/a, \ B = 1/2a - a\beta/2, \ \varepsilon_0 = -B^2 = -a^2(1/a^2 - \beta)^2/4. \tag{67}$$

由此求得相应的波函数为

$$\psi_0 = N[1 - \exp(r/a)]\exp\{(2\mu V_0 a^2/\hbar^2 - 1)r/2a\}. \tag{68}$$

要使束缚态边界条件得到满足，必须

$$V_0 a^2 \geqslant \hbar^2/2\mu. \tag{69}$$

这也是 Hulthen 势中束缚态存在的条件，相应的基态能量为

$$E_0 = V_0/2 - \hbar^2/8\mu a^2 - \mu V_0^2 a^2/2\hbar^2. \tag{70}$$

9. Kratzer 势

加上转动修正的 Kratzer 分子势为

$$V(r) = -2D(a/r - a^2/2r^2) + \hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2, D, a > 0, \tag{71}$$

$$v(r) = -\sigma/r + [\gamma^2 + l(l+1)]/r^2, \quad \sigma = 4\mu Da/\hbar^2, \ \gamma^2 = 2\mu Da^2/\hbar^2. \tag{72}$$

令

$$Z = A/r + B, \tag{73}$$

则 Riccati 方程给出

$$A^2 - A = \gamma^2 + l(l+1), \ 2AB = -\sigma, \ \varepsilon_0 = -B^2. \tag{74}$$

由于 A 必须取正根，故解得

$$A = \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \gamma^2},$$

$$B = -\sigma/2(1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 + \gamma^2}),$$

$$\varepsilon_0 = -\sigma^2/4(1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 + \gamma^2})^2. \tag{75}$$

于是得到相应的基态能量为

$$E_0 = -2\mu D^2 a^2/[\hbar/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2\hbar^2 + 2\mu Da^2}]^2. \tag{76}$$

而基态波函数为

$$\psi_0 = N r^{1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + \gamma^2}} \exp[-\sigma r/(1 + 2\sqrt{(l + 1/2)^2 + \gamma^2})]. \tag{77}$$

10. Morse 势

$$V(r) = D[\exp(-2\alpha x) - 2\exp(-\alpha x)], \quad D, \alpha > 0, \quad x \equiv r/a - 1, \ a > 0, \tag{78}$$

$$v(r) = \beta^2[\exp(-2\alpha x) - 2\exp(-\alpha x)], \quad \beta^2 = 2\mu D/\hbar^2. \tag{79}$$

相应的 Riccati 方程为

$$\frac{d}{dr} Z + Z^2 = v(r) - \varepsilon_0. \tag{80}$$

改用 x 作为自变量，方程变为

$$\frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}Z + Z^2 = v - \varepsilon_0. \tag{81}$$

设

$$Z = A\exp(-\alpha x) + B, \tag{82}$$

则由方程 (81) 给出

$$A^2 = \beta^2,\ 2AB - \alpha A/a = -2\beta^2,\ B^2 = -\varepsilon_0. \tag{83}$$

由于领头项系数 B 必须为负数，故得

$$A = \beta,\ B = -(\beta - \alpha/2a),\ \varepsilon_0 = -(\beta - \alpha/2a)^2. \tag{84}$$

此时相应的波函数为

$$\psi_0 = N\exp\{-\beta a\exp(-\alpha x)/\alpha - a(\beta - \alpha/2a)x\}. \tag{85}$$

要使 ψ_0 满足束缚态边界条件，必须

$$\beta - \alpha/2a \geqslant 0$$

或

$$8\mu Da^2/\hbar^2 \geqslant \alpha^2. \tag{86}$$

这是 Morse 分子势中最低束缚态存在的条件。此时相应的基态能量为

$$E_0 = -D + (a\alpha\sqrt{2\mu D/\hbar^2} - \alpha^2/4)\hbar^2/2\mu a^2. \tag{87}$$

从上面的例子可以看到，这一方法在寻求基态能量和波函数方面确实十分方便简捷。在基态波函数可以用初等函数表示的时候最为明显。我们可以用此方法探求具精确解系统的基态。对于激发态，也可以用此方法逐步求解，有关的工作也已完成。反过来，给定一个满足条件的 Z 函数，可以得到一个位势 $V(x)$，这相当于位势的波函数表示[4]。这对于发现更新的可精确求解系统显然是十分有利的。

[1] U. Larsen, *Phys. Lett.* **105A**(1984), 179.
[2] V. A. Kostelecky, M. N. Nieto and D. R. Truax, *Phys. Rev.* **D32**(1985), 2627.
[3] M. Nieto, *Am. J. Phys.*, 47(1979), 1067.
[4] G. Gozzi, *Phys. Lett.*, **129B**(1983), 432.

A METHOD FOR FINDING THE EIGENVALUE OF QUANTUM GROUND STATE

ZHU DONG-PEI SHI MING-JUN CHEN YIN-HUA

Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, 230026

(Received 15 April 1991)

ABSTRACT

With an integral transformation, the energy eigenvalue problem of a quantum system is converted into the solving of a non-linear Riccati equation. It is easy to find the ground state energy and the corresponding wavefunction. The relation with usual factorization method is discussed. The ground states of various quantum systems are calculated to show the advantage of this new method.

PACC: 0365