

无反射势阱的 Schrödinger 方程的精确解

周 光 辉

湖南师范大学物理系, 长沙 410006

1991 年 12 月 7 日收到

将无反射势阱的 Schrödinger 方程作自变量双曲函数变换, 可使其转化为 associated-Legendre 方程。从而得到分别用 associated-Legendre 多项式和函数表示的束缚态和散射态本征函数, 并讨论了散射态的归一化和这种精确本征函数的应用问题。本文给出的解较文献中已有的渐近解或特殊值的解具有一般性。

PACC: 0365; 0340K

一、引 言

量子体系的 Schrödinger 方程, 目前只有少数几个可求得精确解(如谐振子、氢原子等), 但这些问题的精确解具有重大意义。首先, 这些简单问题的精确解可与实验观测一致起来, 从而检验量子力学基本原理的正确性; 复杂问题的近似解, 又是以简单问题的精确解作为出发的基础。

无反射势阱

$$u(x) = -n(n+1) \frac{\hbar^2}{2\mu} \operatorname{sech}^2 x, \quad (n=1, 2, \dots) \quad (1)$$

是一种双原子分子模型势的吸引部分(即修正 Pöchl-Teller 势^[1])参数 n 等于整数时的特殊情形, 因平面波经此势阱不发生反射而得名。无反射势在 KdV 孤子理论等问题的研究中也起十分重要的作用^[2,3]。在量子理论范围, 处在此势阱中的微观粒子既存在有限个束缚态, 又存在连续态, 两种类型的本征函数都可严格求解, 是一维精确可解问题的典型实例。

无反射势的 Schrödinger 方程, 文献中一般采用超几何函数求极限或 Darboux 变换等方法^[3-5]求解。虽求得了精确的能量本征值, 但一般只求得本征函数的渐近表示, 或只能得到参数 n 为较小特定整数时本征函数的精确式。本文采用对无反射势阱的 Schrödinger 方程作自变量双曲函数变换, 得出由 associated-Legendre 多项式和函数分别表示的束缚态和散射态本征函数当 n 为任意正整数时的表达式。较详细地讨论了散射态的归一化问题, 并指出本文给出的精确解的应用前景。

二、束缚态之解

在坐标表象中,无反射势阱的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) - n(n+1) \frac{\hbar^2}{2\mu} \operatorname{sech}^2 x \phi(x) = E \phi(x), \quad (2)$$

式中 E 为能量本征值, $\phi(x)$ 为本征函数. 为了方便,引入参数

$$\varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (3)$$

则方程(2)化为

$$\phi''(x) + [\varepsilon + n(n+1)\operatorname{sech}^2 x] \phi(x) = 0. \quad (4)$$

对(4)式作变换 $y = \tanh x$, 则可化为

$$(1-y^2) \frac{d^2 \phi}{dy^2} - 2y \frac{d\phi}{dy} + \left[n(n+1) + \frac{\varepsilon}{1-y^2} \right] \phi = 0. \quad (5)$$

可见,无反射势(1)式所对应的 Schrödinger 方程(2)可化为 associated-Legendre 方程^[5],一般情况下其解可用超几何函数表示.

对于 $\varepsilon < 0$ (或 $E < 0$) 的束缚态,要将本征函数表示为 associated-Legendre 多项式的有限形式,则必须有 $|\varepsilon|$ 为小于或等于 n^2 的整数. 所以,束缚态能量本征值为

$$\varepsilon = \varepsilon_m = -(n-m)^2 \quad (6a)$$

或

$$E_m = -(n-m)^2 \frac{\hbar^2}{2\mu}, \quad (\text{量子数 } m = 0, 1, 2, \dots, n-1). \quad (6b)$$

而相应的本征函数为

$$\phi_{nm} = A_{nm} P_n^{m-m}(y), \quad (7)$$

式中 n 为势参量, A_{nm} 为归一因子. 由 associated-Legendre 多项式 P_n^{m-m} 的正交关系容易求得

$$A_{nm} = \sqrt{\frac{(n-m)!}{(2n-m)!}}. \quad (8)$$

用 associated-Legendre 多项式的 Ferrer 表示^[5], 可得 n 为任意正整数时束缚态本征函数为 x 的隐式

$$\phi_{nm} = \sqrt{\frac{(n-m)!}{(2n-m)!}} \frac{(1-y^2)^{\frac{n-m}{2}}}{n! 2^n} \frac{d^{2n-m}}{dy^{2n-m}} (y^2-1)^n, \quad (y = \tanh x). \quad (9)$$

为得到本征函数为 x 的显式, 可经下列计算:

$$\begin{aligned} \frac{d^{2n-m}}{dy^{2n-m}} (y^2-1)^n &= \frac{d^{2n-m}}{dy^{2n-m}} [(y+1)^n (y-1)^n] \\ &= \sum_{i=0}^{2n-m} \binom{i}{2n-m} [(y+1)^i]^{(i)} [(y-1)^{n-i}]^{(2n-m-i)}. \end{aligned} \quad (10)$$

上式等号右边第一个因子求导 i 次后只剩下 $i \leq n$ 的项, $i > n$ 的项为零; 同理第二个因

子要求 $i \geq n - m$, 所以(10)式等号右边化为

$$\begin{aligned} \text{RHS} = & \sum_{i=n-m}^n \binom{i}{2n-m} n(n-1)\cdots(n-i+1)(y+1)^{n-i} \\ & \cdot n(n-1)\cdots(n-m+i+1)(y-1)^{m-i}. \end{aligned}$$

将上式的求和指标作代换 $l = n - i$, 代回(10)式有

$$\frac{d^{2n-m}}{dy^{2n-m}}(y^2 - 1) = \sum_{l=0}^m \binom{n-l}{2n-m} \frac{(n!)^2}{l!(m-l)!} (y+1)^l (y-1)^{m-l}. \quad (11)$$

将(11)式等号右边的两个因子 $(y+1)^l$ 和 $(y-1)^{m-l}$ 分别作二项式展开, 令 $y = \tanh x$ 代入(9)式即可得本征函数为 x 的显式为

$$\begin{aligned} \phi_{nm}(x) = & \frac{\sqrt{(n-m)(2n-m)!m!}}{2^n} \operatorname{sech}^{n-m} x \sum_{l=0}^m \frac{(-1)^{m-l}}{(n-m+l)!(n-l)!} \\ & \cdot \sum_{i=0}^l \sum_{j=0}^{m-l} \frac{(-1)^j}{(l-i)!(m-l-j)!i!j!} \tanh^{i+j} x. \end{aligned} \quad (12)$$

可见 n 为任意正整数时束缚态本征函数为 $\operatorname{sech} x$ 的幂与 $\tanh x$ 的多项式的乘积的形式。

作为(12)式的一个应用, 可将 KdV 方程的 n 纯孤子 (n -pure-soliton) 解^[2,3]中所包含的 n 个散射参量 $C_m(0)$ 的一般式求出

$$\begin{aligned} C_m(0) = & \lim_{x \rightarrow \infty} \phi_m(x) e^{\sqrt{|s|}x} \\ = & \frac{\sqrt{(n-m)(2n-m)!m!}}{2^m} \sum_{l=0}^m \frac{(-1)^{m-l}}{(n-m+l)!(n-l)!} \\ & \cdot \sum_{i=0}^l \sum_{j=0}^{m-l} \frac{(-1)^j}{(l-i)!(m-l-j)!i!j!}. \end{aligned} \quad (13)$$

三、散射态之解

对于 $s \geq 0$ 的散射态, 本征值是连续的, 即

$$s = \lambda^2 (-\infty < \lambda < \infty). \quad (14)$$

而本征函数, 即(4)式对于 $s \geq 0$ 的解为复数指标的 associated-Legendre 函数

$$\phi_{n\lambda}(x) = A_{n\lambda} P_n^{i\lambda}(\tanh x), \quad (15)$$

式中 $A_{n\lambda}$ 为归一因子. 由 associated-Legendre 函数的性质^[6]可得递推关系

$$P_n^{i\lambda}(\tanh x) = \frac{(1-2n)\tanh x P_{n-1}^{i\lambda}(\tanh x) + (n-1+i\lambda)P_{n-2}^{i\lambda}(\tanh x)}{(i\lambda - n)}, \quad (16a)$$

$$P_{-(n+1)}^{i\lambda}(\tanh x) = P_n^{i\lambda}(\tanh x). \quad (16b)$$

利用 $P_0^{i\lambda}(\tanh x) = \frac{1}{\Gamma(1-i\lambda)} \left(\frac{1+\tanh x}{1-\tanh x} \right)^{\frac{i\lambda}{2}} \sim e^{i\lambda x}$, 由(16b)式可得

$$P_{-1}^{i\lambda}(\tanh x) = P_1^{i\lambda}(\tanh x) \sim e^{i\lambda x}. \quad (17)$$

反复利用递推关系(16a)式, 得散射态本征函数为

$$\phi_{n\lambda}(x) = \frac{A_{n\lambda}}{\prod_{s=1}^n (i\lambda - s)} \left(\frac{d}{dx} - n \tanh x \right) \left(\frac{d}{dx} - (n-1) \tanh x \right) \cdots \left(\frac{d}{dx} - \tanh x \right) e^{i\lambda x}, \quad (18)$$

与用 Darboux 变换所得结果一致。若将(18)式中的微分算子作用后,可将其展开为 $e^{i\lambda x}$ 与 $\tanh x$ 的幂级数乘积的形式

$$\phi_{n\lambda}(x) = \frac{A_{n\lambda}}{\prod_{s=1}^n (i\lambda - s)} e^{i\lambda x} \sum_{l=0}^n a_{nl}(\lambda) \tanh^l x, \quad (19)$$

式中展开系数为与 x 无关的复常数。

由(18)式取不同 n 逐次展开比较可得系数间的递推关系

$$a_{nl} = -(n+l-1)a_{n-1,l-1} + i\lambda a_{n-1,l} + (l+1)a_{n-1,l+1}. \quad (20a)$$

(19)式代入(16a)式后比较 $\tanh x$ 同次幂得另一等价的展开系数递推关系

$$a_{nl} = (1-2n)a_{n-1,n-1} - [(n-1)^2 + \lambda^2]a_{n-2,l}. \quad (20b)$$

从 $a_{00} = 1$ 出发,利用递推关系不难得展开系数为 $i\lambda$ 的幂级数形式

$$a_{nl}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^{l+k} C_{nl}^k (i\lambda)^{n-l-2k}, \quad (21)$$

式中 $\left[\frac{n}{2}\right]$ 为不超过 $n/2$ 的最大整数, C_{nl}^k 为与 λ 无关的实常数。

由积分

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{n\lambda}^* \phi_{n\lambda'} dx &= \frac{A_{n\lambda'}^* A_{n\lambda}}{\prod_{s=1}^n [\lambda\lambda' + s^2 - 1s(\lambda - \lambda')]} \\ &\cdot \sum_{l=0}^n a_{nl}^*(\lambda') \sum_{l'=0}^n a_{nl'}(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\lambda-\lambda')x} \tanh^{l+l'} x dx \end{aligned} \quad (22)$$

出发可确定归一因子 $A_{n\lambda}$. 上式可分为 $l+l'$ 的两种情况来讨论:

1) 记 $l+l' = 2m$ ($m = 0, 1, \cdots, n$) 为偶数的项为 I_1 , 则有

$$I_1 = \sum_{l,m} a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l}(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\lambda-\lambda')x} \tanh^{2m} x dx,$$

将 $\tanh^{2m} x = (1 - \operatorname{sech}^2 x)^m$ 作二项式展开,不难求得

$$\begin{aligned} I_1 &= \sum_{l,m} a_{nl}^* a_{n,2m-l} \left\{ 2\pi\delta(\lambda - \lambda') + \sum_{j=1}^m \frac{(-1)^j m!}{(m-j)! j!} \frac{2j}{(2j-1)!} \right. \\ &\quad \cdot \left. \left| \Gamma \left[j + \frac{i(\lambda - \lambda')}{2} \right] \right|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (23a)$$

2) 记 $l+l' = 2m-1$ ($m = 1, 2, \cdots, n$) 为奇数的项为 I_2 , 同样方法可求得

$$I_2 = \sum_{l=0}^n \sum_{m=1}^n a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l}(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\lambda-\lambda')x} \tanh^{2m-1} x dx$$

$$= \sum_{l,m} a_{nl}^* a_{n,2m-l-1} \left\{ 2\pi(\lambda - \lambda') + \sum_{j=1}^{2m-1} \frac{(-1)^j (2m-1)!}{(2m-1-j)! j!} \frac{2^j}{(j-1)!} \right. \\ \left. \cdot \Gamma \left[\frac{i(\lambda - \lambda')}{2} \right] \Gamma \left[j - \frac{1(\lambda - \lambda')}{2} \right] \right\}. \quad (23b)$$

由展开系数的幂级数表达式(21), 有

$$a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l}(\lambda) = \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l-m} C_{nlm}^{k,k'}(\lambda) \lambda^{n+l-2m-2k} (\lambda')^{n-l-2k'}, \quad (24a)$$

$$a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l-1}(\lambda) = -i\lambda \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l-m} D_{nlm}^{k,k'}(\lambda) \lambda^{n+l-2m-2k} (\lambda')^{n-l-2k'}, \quad (24b)$$

式中 $C_{nlm}^{k,k'} = C_{nlm}^{k,k'} C_{n,2m-l}^k$, $D_{nlm}^{k,k'} = C_{nlm}^{k,k'} C_{n,2m-l-1}^k$ 为与 λ, λ' 无关的实常数。可见(23a)式 I_1 为实数, 而(23b)式 I_2 为纯虚数形式。

由(22)式中的双重求和, 显然有

$$\sum_{l,m} a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l}(\lambda) = \sum_{l',m} a_{n,2m-l'-1}^*(\lambda') a_{nl'}(\lambda). \quad (25a)$$

将(24a)式代入上式, 有

$$\sum_{l,m} \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l-m} C_{nlm}^{k,k'}(\lambda) \lambda^{n+l-2m-2k} (\lambda')^{n-l-2k'} \\ = \sum_{l',m} \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l'-m} C_{nl'm}^{k,k'}(\lambda') \lambda^{n+l'-2m-2k} (\lambda')^{n-l'-2k'}, \quad (25b)$$

那么与此类似应有

$$\sum_{l,m} \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l-m} D_{nlm}^{k,k'}(\lambda) \lambda^{n+l-2m-2k} (\lambda')^{n-l-2k'} \\ = \sum_{l',m} \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l'-m} D_{nl'm}^{k,k'}(\lambda') \lambda^{n+l'-2m-2k} (\lambda')^{n-l'-2k'}. \quad (26)$$

又由(22)式, 有

$$\sum_{l,m} a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l-1}(\lambda) = \sum_{l',m} a_{n,2m-l'-1}^*(\lambda') a_{nl'}(\lambda) \\ = i\lambda' \sum_{l',m} \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l'-m} D_{nl'm}^{k,k'}(\lambda') \lambda^{n+l'-2m-2k} (\lambda')^{n-l'-2k} \\ = i\lambda' \sum_{l,m} \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l-m} D_{nlm}^{k,k'}(\lambda) \lambda^{n+l-2m-2k} (\lambda')^{n-l-2k'}. \quad (27)$$

所以, 由(24b)式结合(27)式可得

$$\sum_{l,m} a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l-1}(\lambda) = -\frac{i(\lambda - \lambda')}{2} \\ \cdot \sum_{l,m} \sum_{k,k'}^{[\frac{n}{2}]} (-1)^{l-m} D_{nlm}^{k,k'}(\lambda) \lambda^{n+l-2m-2k} (\lambda')^{n-l-2k'}. \quad (28)$$

因 $x\delta(x) = 0$, 可见 (23b) 式 I_2 的第一项为零, 第二项考虑 (28) 式后收敛。而 (23a) 式 I_1 中第二项是收敛的。若忽略积分 (22) 式右边收敛的这两项, 则有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{n\lambda}^* \phi_{n\lambda} dx = \frac{A_{n\lambda}^* A_{n\lambda}}{\prod_{l=1}^n [\lambda\lambda' + s^2 - is(\lambda - \lambda')]} \sum_{l,m}^n a_{nl}^*(\lambda') a_{n,2m-l}(\lambda) \cdot 2\pi\delta(\lambda - \lambda'). \quad (29)$$

所以散射态本征函数中的归一因子可取为

$$A_{n\lambda} = \left[\frac{\prod_{l=1}^n (\lambda^2 + s^2)}{2\pi \sum_{l,m}^n a_{nl}^* a_{n,2m-l}} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (30)$$

因势函数 (1) 式在 $x \rightarrow \infty$ 时严格为零, 此时散射态本征函数趋于平面波, 而在 $x \approx 0$ 的范围为调制的平面波。所以 (22) 式只是近似归一化为 δ 函数。若利用 $\phi_{n\lambda} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} A_{n\lambda} e^{i\lambda x}$ 这一边界条件, 由 (19) 式有

$$\sum_{l=0}^n a_{nl}(\lambda) = \prod_{l=1}^n (i\lambda - s). \quad (31)$$

又由 (22) 和 (29) 式则有

$$\sum_{l,l'}^n a_{nl}^*(\lambda) a_{n,l'}(\lambda) = \sum_{l,m}^n a_{nl}^*(\lambda) a_{n,2m-l}(\lambda) = \prod_{l=1}^n (\lambda^2 + s^2). \quad (32)$$

因此, 在 n 为任意正整数时, 都有

$$A_{n\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad (33)$$

即归一因子与 n, λ 无关。

散射态本征值 $s = \lambda^2$, 故为二重简并, 即

$$\begin{aligned} \phi_{n-1}(x) = & - \frac{1}{\sqrt{2\pi} \prod_{l=1}^n (i\lambda + s)} \left(\frac{d}{dx} - n \tanh x \right) \left(\frac{d}{dx} - (n-1) \tanh x \right) \cdots \\ & \left(\frac{d}{dx} - \tanh x \right) e^{-i\lambda x} = \phi_{n\lambda}^*(x), \end{aligned} \quad (34)$$

也是 (4) 式 $s = \lambda^2$ 时之解。

四、讨 论

(18) 和 (34) 式称为散射问题 (4) 式的基本解 (fundamental solution)^[5], 分别表示粒子从左边或从右边入射, 反射系数为零 (无反射势)。在 λ 的复平面中, 正虚轴上 $\lambda = i(n-m)$ ($m = 0, 1, 2, \dots, n-1$) 的点对于束缚态^[5], 若能得到 (19) 式中展开系数 $a_{nl}(\lambda)$ 的通项表达式 (很难求得), 令 $\lambda = i(n-m)$ 便可由 (19) 式推出束缚态本征函数 (12) 式。

作为一维问题的精确解, 可用来作只能近似求解的一维问题的零级近似。束缚态和散射态本征函数为 $\tanh x$ 的多项式分别与 $\operatorname{sech} x$ 的幂和平面波函数乘积的形式, 此种表示作为零级近似, 可方便于用微扰方法来求解一般 n 不等于整数时 Pöschl-Teller 势的 Schrödinger 方程。在光波导理论设计计算中^[4], 常遇到求高斯类型折射率函数对应的模场分布函数问题, 解相应的 Schrödinger 方程时一般采用谐振子本征函数作零级近似。因高斯函数用抛物线函数代替只在 x 不太大的范围有效, 这将影响到微扰级数的收敛发散问题, 所以预计解此类问题时用本文求得的本征函数作零级近似可提高精度。因无反射势只存在有限个束缚态微扰级数应包括对束缚态的离散求和与对散射态的积分, 这在技术处理上似乎还未见先例。此类问题正在研究中, 有关结果将另行报道。

- [1] G. Pöschl and E. Teller, *Z. Phys.*, 83(1933), 143.
- [2] G.S. Gradner, J.E. Greene, M. D. Kruskal and R. M. Miura, *Commun. Pure and Appl. Math.*, 27(1974), 93.
- [3] G. L. Lamb, Jr., *Elements of Soliton Theory* (John Wiley and Sons, New York, 1986), p. 33.
- [4] L. Landau and E. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory* (Pergamon Press, Inc., New York, 1958).
- [5] S. 福里格著, 宋孝同译, 实用量子力学(上)(人民教育出版社, 北京, 1982), 问题 38, 39.
- [6] 王竹溪、郭敦仁, 特殊函数论(科学出版社, 北京, 1979), 第 235 页
- [7] 文根旺, 中国科学(A 辑), (11)(1990), 1211.

EXACT SOLUTION OF SCHRÖDINGER EQUATION WITH REFLECTIONLESS POTENTIAL WELL

ZHOU GUANG-HUI

Department of Physics, Hunan Normal University, Changsha 410006

(Received 7 December 1991)

ABSTRACT

Using a transformation of hyperbolic function, the Schrödinger equation with reflectionless potential well is transformed into an associated-Legendre equation. Then both bound and scattering state eigenfunctions are expressed in terms of associated-Legendre polynomials and functions respectively. The exact solutions obtained in this paper are more general and systematic than some asymptotic solutions or solutions of reflectionless potential with special parameters in literatures. The normalization of the scattering state is discussed in detail.

PACC: 0365; 0340K