

非谐振子势的精确解和双波函数描述

陈昌远 刘友文

(盐城师范专科学校物理系, 盐城 224002)

(1997 年 8 月 21 日收到)

求解了非谐振子势 $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{2}x^2$ 的本征方程, 给出了精确的能谱方程和归一化波函数. 应用双波函数理论, 得到了在非谐振子势场中单粒子运动状态的力学量的时间演化方程.

PACC: 0365; 0320

1 引 言

在量子理论中 **Schrödinger** 方程能精确求解的例子是屈指可数的, 谐振子就是这为数不多的例子之一. 在物理学中, 谐振子有着极其广泛的应用, 然而大量的实际问题如量子光学是偏离谐振模型而必须用非谐振子势来描述, 为此人们提出了一些非谐振子模型, 其中影响比较大研究得比较多的有两种. 第一种是含有 4 次项的非谐振子 (**quartic anharmonic oscillator**, 缩写为 **QAO**), 势函数为

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}ax^4. \quad (1)$$

上式对应的 **Schrödinger** 方程无法精确求解. 为此, 人们提出了不同方法来获得其能级的数值解^[1-6], 其结果可用来研究谐振子相对论束缚态的能谱^[7]. 第二种是含有平方反比项的非谐振子 (**isotonic oscillator**, 缩写为 **IO**), 势函数为

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{2x^2}, \quad (2)$$

它可用来描述一维 3 原子体系^[8,9]. (2) 式对应的 **Schrödinger** 方程能精确求解^[9,10], 文献 [11] 研究了 **IO** 的广义相干态, 揭示出它有与众不同的特点.

自从 1986 年黄湘友发现平面波与自由粒子运动方程之间的一个新的数学关系以来^[12], 以该数学关系的推广而发展起来的双波函数理论已取得了一系列引人注目的结果^[13-18], 双波函数理论使得量子力学能够描述单个粒子的运动.

关于 **IO**, 这方面已有不少工作, 但其讨论过程有进一步完善之处, 为了进一步研究 **IO** 的特点, 并为它的广泛应用打下基础, 本文严格求解了 **IO** 的本征方程, 给出了精确的能谱方程和归一化波函数, 所得的结果在 $g=0$ 的情况下退化为谐振子的结论. 然后用双波函数理论对 **IO** 进行描述, 结果使我们看到在 **IO** 势场中运动的单粒子确实做非简谐运动.

2 束缚态能谱和归一化波函数

在坐标表象中, IO 的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \psi(x) + \frac{g}{2x^2} \psi(x) = E \psi(x). \quad (3)$$

为了避免“粒子向力心坠落”, 要求 $g > -\frac{1}{2}$ ^[10,19]. 束缚态的边界条件是 $\psi|_{x \rightarrow 0} = \text{有限值}$ 和 $\psi|_{x \rightarrow \pm \infty} = 0$. 由于 $V(-x) = V(x)$, 所以 $\psi(x)$ 应有确定的宇称, 这样由 $x > 0$ 的区域的解即可确定能量本征值, 而波函数由奇偶性可开拓得到. 因此我们先研究 $x > 0$ 的区域的解.

$$\text{令} \quad g = l(l+1), \quad (4)$$

做函数代换

$$\psi(x) = x^{l+1} e^{-x^2/2} u(x). \quad (5)$$

考虑到 $x=0$ 邻域的边界条件, 则有 $l+1 \geq 0$. 由(3)式得 $u(x)$ 所满足的微分方程为

$$u''(x) - 2xu'(x) + \frac{2(l+1)}{x}u'(x) + (\lambda - 2l - 3)u(x) = 0, \quad (6)$$

式中 $\lambda = 2E$. 进一步做代换, $y = x^2$, 则(6)式化为合流超几何微分方程

$$y \frac{d^2 u(y)}{dy^2} + (\nu - y) \frac{du(y)}{dy} - \alpha u(y) = 0, \quad (7)$$

式中参数

$$\nu = l + 3/2, \quad \alpha = (2l + 3 - \lambda)/4. \quad (8)$$

因而解为

$$u(x^2) = u(y) = F(\alpha, \nu, x^2). \quad (9)$$

当 α 不等于零和负整数时, $F(\alpha, \nu, x^2) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} e^{x^2}$, 由(5)式知这不满足束缚态的边界条件 $\psi|_{x \rightarrow \infty} = 0$. 因此, 为了得到物理上允许的解, 必须有

$$\alpha = -n = 0, -1, -2, \dots \quad (10)$$

把上式以及 $\lambda = 2E$ 代入(8)式得到能谱方程为

$$E_n = 2n + l + 3/2 \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (11)$$

上式与文献[10]用因子化方法得到的结果是一致的. 而波函数

$$\psi_n(x) = N_n x^{l+1} e^{-x^2/2} F(-n, l + 3/2, x^2) \quad (x > 0). \quad (12)$$

由于 $V(-x) = V(x)$, 且 $V(x)$ 在 $x=0$ 处有奇性, 所以整个一维空间的波函数必须有确定的宇称, 且能级为 2 度简并的, 即一个能级 E_n 有两个波函数与此对应, 分别为偶函数

$$\psi_n^{(+)}(x) = N_n |x|^{l+1} e^{-x^2/2} F(-n, l + 3/2, x^2) \quad (13a)$$

和奇函数

$$\psi_n^{(-)}(x) = N_n x |x|^l e^{-x^2/2} F(-n, l + 3/2, x^2), \quad (13b)$$

式中 N_n 为归一化常数. 利用合流超几何函数和广义拉盖尔多项式的关系^[20]

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(\alpha+1+n)}{n! \Gamma(\alpha+1)} F(-n, \alpha+1, x) \quad (14)$$

以及广义拉盖尔多项式的正交归一性^[20]

$$\int_0^\infty x^\alpha e^{-x} L_m^{(\alpha)}(x) L_n^{(\alpha)}(x) dx = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \delta_{mn}, \quad (15)$$

得归一化常数

$$N_n = \frac{1}{\Gamma(l+3/2)} \sqrt{\frac{\Gamma(n+l+3/2)}{n!}}. \quad (16)$$

至此, 我们已给出了 IO 的精确的能级表达式(11)和相应的归一化波函数(13)式.

在(2)式中若取 $g=0$, 则 IO 退化为谐振子, 因此令 $l+1=0$, 则 $g=0$, 于是(11)和(13)式分别退化为谐振子的偶宇称的能级和波函数

$$E_{2m} = 2m + 1/2, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (17)$$

$$\psi_{2m}(x) = [2^{2m}(2m)! \sqrt{\pi}]^{-1/2} e^{-x^2/2} H_{2m}(x). \quad (18)$$

令 $l=0$, 则 $g=0$, 于是(11)和(13)式分别退化为谐振子的奇宇称的能级和波函数

$$E_{2m+1} = 2m + 1 + 1/2, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (19)$$

$$\psi_{2m+1}(x) = [2^{2m+1}(2m+1)! \sqrt{\pi}]^{-1/2} e^{-x^2/2} H_{2m+1}(x). \quad (20)$$

上述结果与直接求解谐振子的本征方程所得结论完全一致, 这说明本文获得的 IO 的精确解是正确的.

3 双波函数描述

按双波函数理论, 在非谐振子势场中运动的单粒子状态, 由下面一对波函数 $\psi_n^{(p)}(x, t)$ 和 $\varphi(x, t)$ 描述^[12-18]. 在这里称 $\varphi(x, t)$ 为 $\psi_n^{(p)}(x, t)$ 的伴随函数.

$$\psi_n^{(p)}(x, t) = \psi_n^{(p)}(x) \exp[-iE_n(t-t_0)/\hbar], \quad (21)$$

$$\varphi(x, t) = \sum_m \sum_p \psi_m^{(p)}(x, t), \quad (22)$$

式中 $\psi_n^{(p)}$ 和 E_n 分别由(13)和(11)式确定, t_0 为本理论中引进的实参数.

在这一状态中, 任一力学量 f 在时刻 t 的真实测量值由下式给出:

$$\langle f(t) \rangle = \text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x, t) \hat{f} \psi_n^{(p)}(x, t), \quad (23)$$

其中 $\hat{f}$ 为相应力学量 f 的厄密算符. 由(21)–(23)式可得下列结果:

1. 在(23)式中令 $\hat{f} = 1$, 则有

$$\text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x, t) \psi_n^{(p)}(x, t) = 1. \quad (24)$$

此为双波函数理论中的归一化条件.

2. 在(23)式中, 令 $\hat{f} = \hat{H}$, 得能量本征值

$$\langle H \rangle = \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x, t) \hat{H} \varphi_n^{(p)}(x, t) = E_n. \quad (25)$$

3. 在(23)式中令 $\hat{f} = x$, 则有

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x, t) x \varphi_n^{(p)}(x, t) \\ &= \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_m \sum_p \phi_m^{(p)}(x) x \phi_n^{(p)}(x) e^{-i(E_n - E_m)(t - t_0)/\hbar} \\ &= \operatorname{Re} \sum_m 2 N_m N_n \int_0^{\infty} dx x^{2l+3} e^{-x^2} F(-m, l+3/2, x^2) \\ &\quad \times F(-n, l+3/2, x^2) e^{-i(E_n - E_m)(t - t_0)/\hbar} \\ &= \sum_m N_n N_m I_{mn} \cos[\omega_{nm}(t - t_0)], \end{aligned} \quad (26)$$

式中

$$\begin{aligned} \omega_{nm} &= (E_n - E_m)/\hbar, \\ I_{mn} &= 2 \int_0^{\infty} dx x^{2l+3} e^{-x^2} F(-m, l+3/2, x^2) F(-n, l+3/2, x^2) \\ &= \int_0^{\infty} dy y^{l+1} e^{-y} F(-m, l+3/2, y) F(-n, l+3/2, y). \end{aligned} \quad (27)$$

利用(14)式以及含有两个广义拉盖尔多项式的积分公式^[20],

$$\begin{aligned} &\int_0^{\infty} z^\lambda L_n^{(\mu)}(z) L_n^{(\mu')}(z) dz \\ &= (-1)^{n+n'} \Gamma(\lambda+1) \sum_k \binom{\lambda-\mu}{n-k} \binom{\lambda-\mu'}{n'-k} \binom{\lambda+1+k}{k}, \end{aligned} \quad (28)$$

得到

$$\begin{aligned} I_{mn} &= \frac{m! n! [\Gamma(l+3/2)]^2}{\Gamma(l+3/2+m) \Gamma(l+3/2+n)} \int_0^{\infty} dy y^{l+1} e^{-y} L_m^{(l+1/2)}(y) L_n^{(l+1/2)}(y) \\ &= \frac{(-1)^{m+n} \Gamma(l+2) m! n! [\Gamma(l+3/2)]^2}{\Gamma(l+3/2+m) \Gamma(l+3/2+n)} \\ &\quad \times \sum_k \binom{1/2}{m-k} \binom{1/2}{n-k} \binom{l+1+k}{k}. \end{aligned} \quad (29)$$

把(29)式以及归一化常数代入(26)式得到

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \sum_m \sum_k (-1)^{m+n} \Gamma(l+2) \left[\frac{m! n!}{\Gamma(l+3/2+m) \Gamma(l+3/2+n)} \right]^{1/2} \\ &\quad \times \binom{1/2}{m-k} \binom{1/2}{n-k} \binom{l+1+k}{k} \cos[\omega_{nm}(t - t_0)]. \end{aligned} \quad (30)$$

4. 在(23)式中令 $\hat{f} = \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, 并且可以证明

$$\langle p_x \rangle = \mu \frac{d}{dt} \langle x \rangle, \quad (31)$$

从而有

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle = & \sum_m \sum_k (-1)^{m+n+1} \mu \omega_{nm} \Gamma(l+2) \left[\frac{m! n!}{\Gamma(l+3/2+m) \Gamma(l+3/2+n)} \right]^{1/2} \\ & \times \begin{pmatrix} 1/2 \\ m-k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 \\ n-k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l+1+k \\ k \end{pmatrix} \sin[\omega_{nm}(t-t_0)]. \end{aligned} \quad (32)$$

(30)和(32)式表明,单粒子在 IO 场中作非简谐振动.

4 结 论

本文严格求解了 IO 的 Schrödinger 方程,给出精确的能谱方程和归一化波函数,能级是 2 度简并的.在 $g=0$ 的情况下,简并消失,所得结果退化为谐振子的相应结果.应用双波函数理论给出了在 IO 势场中运动的单粒子力学量 x 和 p_x 的时间演化方程,结果表明,此时粒子确实作非简谐运动.

作者之一(陈昌远)感谢复旦大学胡嗣柱教授的帮助和鼓励.

- [1] J. Killingbeck, *Phys. Lett.*, **A62**(1977), 285.
- [2] J. Killingbeck, *J. Phys.*, **A14**(1981), 1005.
- [3] F. M. Fernández, E. A. Castro, *J. Chem. Phys.*, **75**(1981), 2908.
- [4] F. M. Fernández, E. A. Castro, *Phys. Rev.*, **A27**(1983), 663.
- [5] M. F. Marciani, *J. Phys.*, **A17**(1984), 547.
- [6] F. A. de Seavedra, E. Buendia, *J. Phys.*, **A22**(1989), 1933.
- [7] Chen Chang-yuan(陈昌远), Yang Jian-song(杨建宋), *Journal of Hangzhou Teachers College*, (3)(1997), 49 (in Chinese).
- [8] J. Hurley, *J. Math. Phys.*, **8**(1967), 813.
- [9] F. Calogero, *J. Math. Phys.*, **10**(1969), 2191.
- [10] D. Zhu, *J. Phys.*, **A20**(1987), 4331.
- [11] Xu Zi-wen(徐子文), *Acta Physica Sinica*, **45**(1996), 1807(in Chinese).
- [12] X. Y. Huang, *Phys. Lett.*, **A115**(1986), 310.
- [13] X. Y. Huang, *Chinese Phys. Lett.*, **4**(1987), 153.
- [14] Liu Quan-hui(刘全慧), Wang Fa-bo(王发伯), *Acta Physica Sinica*, **40**(1991), 1562(in Chinese).
- [15] Huang Xiang-you(黄湘友), Liu Quan-hui(刘全慧), Tian Xu(田 旭), Qiu Zhong-ping(裘忠平), *Acta Physica Sinica*, **42**(1993), 180(in Chinese).
- [16] Liu Quan-hui(刘全慧), *Acta Physica Sinica*, **42**(1993), 522(in Chinese).
- [17] Lin Kun-zhi(林琨智), *Acta Physica Sinica*, **45**(1996), 360(in Chinese).
- [18] Huang Xiang-you(黄湘友), *Acta Physica Sinica*, **45**(1996), 729(in Chinese).
- [19] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (Pergamon, Oxford, 1977), § 35.
- [20] Wang Zhu-xi(王竹溪), Guo Dun-ren(郭敦仁), *An Introduction to Special Functions*(Science Press, Beijing, 1979), ch. 6(in Chinese).

THE EXACT SOLUTION OF ANHARMONIC OSCILLATOR POTENTIAL AND THE DESCRIPTION OF DOUBLE-WAVE FUNCTION

CHEN CHANG-YUAN LIU YOU-WEN

(*Department of Physics, Yancheng Teachers College, Yancheng 224002*)

(Received 21 August 1997)

ABSTRACT

In this paper, the Schrödinger equation with an anharmonic oscillator potential $V(x) = x^2/2 + g/2 x^2$ is solved. The exact energy equation and the normalized wave function are obtained. The double-wave function quantum theory is applied to gain the time evolution equation to describe the physical quantities of a single motional particle in the anharmonic oscillator.

PACC: 0365; 0320