二维混合势的能级与波函数*

郝玉华
(盐城工学院 基础科学部,江苏 盐城 224003)

摘 要:在二维非球谐混合势 $V(r)=ar^2+br^{-4}+cr^{-6}$ 的情况下,运用函数变换求径向本征函数,得到非相对性薛定谔方程一个完备的精确解,其中此势的参数 a,b,c 满足一些约束关系。

关键词:函数变换,非球谐势,径向本征函数。
中图分类号:O413 **文献标识码**:A **文章编号**:1671-5322(2004)01-0017-04

众所周知,求解 Schrödinger 方程,除了氢原子和谐振子等少数几个势之外,大多数势所对应的能级和波函数的解析形式解却不能给出,各种不同幂次形式势和有理形式势在物理学许多领域中有着广泛的应用。近年来,高次非谐的情况已经吸引了众多的科研者很大的注意力,人们用 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、波函数进行了讨论[1~8],低维系统量子力学已经成为一个主要的研究领域,几乎所有的针对三维情况问题的计量技术已经延伸到低维情况,而相关领域的非球谐势势阱在二维情况下的研究也已处于起步阶段[3,4]本文将研究混合势在二维情况下基态和第一激发态的能级和波函数。采用的方法是将径向波函数展开为指数函数与多项式函数的乘积,运用常规的分离变量法和比较系数法确定体系在基态和第一激发态的能级和波函数。

2 基态情况下的能级与波函数

本文取自然单位 $\hbar=1,\mu=\frac{1}{2}$。二维情况下,势阱 $V(r)=ar^2+br^{-4}+cr^{-6}$。根据对称性,运用极坐标表示薛定谔方程如下

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi+V(r)\Psi=E\Psi \tag{1}$$

因为,运用分离变量法,令

$$\Psi(r,\varphi)=r^{-\frac{1}{2}}R_m(r)e^{\pm im\varphi} \tag{2}$$

这里 m 为角动量量子数,选择因子 $m^2-\frac{1}{4}$ 作为分离常数[9],将(2)式代入(1)式得

$$\frac{r\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)[rR_m(r)]}{R_m(r)}+r^2\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]=\frac{\hat{L}^2e^{\pm im\varphi}}{\hbar^2e^{\pm im\varphi}}=m^2-\frac{1}{4} \tag{3}$$

将(3)式分离为角向部分和径向部分,可得

$$\frac{\partial^2R_m(r)}{\partial r^2}+\left[E-V(r)-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{r^2}\right]R_m(r)=0 \tag{4}$$

$$\hat{L}^2e^{\pm im\varphi}=\hbar^2\left(m^2-\frac{1}{4}\right)e^{\pm im\varphi} \tag{5}$$

此处,对基态径向波函数满足的方程进行一个变换

* 收稿日期:2003-11-06
作者简介:郝玉华(1965-),男,江苏盐城人,盐城工学院基础科学部讲师。

$$R_{m_0}(r) = \exp[P_{m_0}(r)] \tag{6}$$

假设
$$P_{m_0}(r) = \frac{1}{2}\alpha r^2 + \frac{1}{2}\beta r^{-2} + \kappa \ln r \tag{7}$$

则
$$P'_{m_0}(r) = \alpha r - \beta r^{-3} + \kappa r^{-1} \tag{8}$$

$$P''_{m_0}(r) = \alpha + 3\beta r^{-4} - \kappa r^{-2} \tag{9}$$

$$(P'_{m_0}(r))^2 = \alpha^2 r^2 + \beta^2 r^{-6} + \kappa^2 r^{-2} - 2\alpha\beta r^{-2} + 2\alpha\kappa - 2\beta\kappa r^{-4} \tag{10}$$

通过简单的计算可得
$$\frac{\partial^2 R_{m_0}(r)}{\partial r^2} - \left[\frac{\partial^2 P_{m_0}(r)}{\partial r^2} + \left(\frac{\partial P_{m_0}(r)}{\partial r}\right)^2\right] R_{m_0}(r) = 0 \tag{11}$$

将(8)、(9)、(10)三式代入(11)式并和(4)式比较可得

$$-\left[E - V(r) - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{r^2}\right] = \alpha + 3\beta r^{-4} - \kappa r^{-2} + \alpha^2 r^2 + \beta^2 r^{-6} + \kappa^2 r^{-2} - 2\alpha\beta r^{-2} + 2\alpha\kappa - 2\beta\kappa^{-4}$$

即
$$\mathrm{a} r^2 + b r^{-4} + c r^{-6} + \left(m^2 - \frac{1}{4}\right) r^{-2} - E = \alpha^2 r^2 + (3\beta - 2\beta\kappa) r^{-4} + \beta^2 r^{-6} + (\kappa^2 - \kappa - 2\alpha\beta) r^{-2} - (2\kappa + 1)\alpha \tag{12}$$

由比较系数法可得能量 E 的本征值、$P_{m_0}(r)$参数的值为

$$E = -(2\kappa + 1)\alpha;\quad \alpha = \pm\sqrt{\mathrm{a}} \quad \beta = \pm\sqrt{c} \quad \kappa = \frac{1}{2} \pm \sqrt{m^2 + 2\sqrt{\mathrm{a}c}} \tag{13}$$

为了得到一个适合趋于零点和趋于无穷大的两个情况的标准解,κ 取正号,α 和 β 取负号,把 α、κ 的值代入,能量的本征值可以表示为
$$E = \sqrt{\mathrm{a}}\left(4 + \frac{b}{\sqrt{c}}\right) \tag{14}$$

相应的径向波函数为
$$R_{m_0}(r) = N_0 r^{\kappa} \exp\left[-\frac{1}{2}(\sqrt{\mathrm{a}} r^2 + \sqrt{c} r^{-2})\right] \tag{15}$$

(N_0 是归一化常数,$\kappa = \frac{1}{2} + \sqrt{m^2 + 2\sqrt{\mathrm{a}c}}$)

3 第一激发态下的能级与波函数

同上方法,对第一激发态的径向本征函数进行变换如下
$$R_{m_1}(r) = f_m(r)\exp[P_{m_1}(r)] \tag{16}$$

把 $f_m(r)$ 和 $P_{m_1}(r)$ 定义为
$$f_m(r) = \mathrm{a}_1 + \mathrm{a}_2 r^2 + \mathrm{a}_3 r^{-2} \tag{17}$$

$$P_{m_1}(r) = \frac{1}{2}\alpha_1 r^2 + \frac{1}{2}\beta_1 r^{-2} + \kappa_1 ln r \tag{18}$$

径向波函数 $R_m(r)$如下的关系

$$R_{m_1}''(r) - \left[P_{m_1}''(r) + (P_{m_1}'(r))^2 + \left(\frac{f_m''(r) + 2P_{m_1}'(r) f_m'(r)}{f_m(r)}\right)\right] R_{m_1}(r) = 0 \tag{19}$$

再由径向方程(5)可以得出第一激发态的径向方程为

$$R_{m_1}''(r) + \left[E - V(r) - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{r^2}\right] R_{m_1}(r) = 0 \tag{20}$$

比较 (19)、(20)两式,可得

$$-\left[E - V(r) - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{r^2}\right] = P_{m_1}''(r) + (P_{m_1}'(r))^2 + \frac{f_m''(r) + 2P_{m_1}'(r) f_m'(r)}{f_m(r)} \tag{21}$$

根据(17)、(18)两式,写出 $f_{m_1}'(r)$,$f_{m_1}''(r)$,$P_{m_1}'(r)$,$P_{m_1}''(r)$

$$f_{m_1}{}'(r) = 2a_2 r - 2a_3 r^{-3};\qquad f_{m_1}{}''(r) = 2a_2 + 6a_3 r^{-4}$$

$$P_{m_1}{}'(r) = \alpha_1 r - \beta_1 r^{-3} + \kappa_1 r^{-1};\qquad P_{m_1}{}''(r) = \alpha_1 + 3\beta_1 r^{-4} - \kappa_1 r^{-2} \tag{22}$$

将(22)式代入(21)式并整理得

$$\left[-E + ar^2 + br^{-4} + cr^{-6} + \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - (\alpha_1 + 3\beta_1 r^{-4} - \kappa_1 r^{-2}) - (\alpha_1 r - \beta_1 r^{-3} + \kappa_1 r^{-1})^2\right](a_1 + a_2 r^2 + a_3 r^{-2})$$
$$= (2a_2 + 6a_3 r^{-4}) + 2(\alpha_1 r - \beta_1 r^{-3} + \kappa_1 r^{-1})(2a_2 r - 2a_3 r^{-3}) \tag{23}$$

两边比较系数可得

$$a_2[E + \alpha_1(2\kappa_1 + 5)] = a_1(a - \alpha_1{}^2) \tag{24}$$

$$a_3[b + \beta_1(2k_1 - 7)] = a_2(c - \beta_1{}^2) \tag{25}$$

$$a_1[E + \alpha_1(2\kappa_1 + 1)] = a_3(a - \alpha_1{}^2) + a_2[m^2 - \frac{1}{4} + 2\alpha_1\beta_1 - \kappa_1{}^2 - 3\kappa_1 - 2] \tag{26}$$

$$-a_1[m^2 - \frac{1}{4} + 2\alpha_1\beta_1 - \kappa_1{}^2 + \kappa_1] = a_2[b + \beta_1(2\kappa_1 + 1)] + a_3[-E - \alpha_1(2\kappa_1 - 3)] \tag{27}$$

$$a_2(c - \beta_1^2) = -a_3[m^2 - \frac{1}{4} + 2\alpha_1\beta_1 - \kappa_1{}^2 + 5\kappa_1 - 6] \tag{28}$$

$$a_2(a - \alpha_1{}^2) = 0 \qquad a_3(c - \beta_1{}^2) = 0 \tag{29}$$

如果角动量量子数 m 在基态和第一激发态取相同的值时,可以从上述方程组中得出以下结论:

$$E_1 = \sqrt{a}(5 + 2\kappa_1) \tag{30}$$

$$\kappa_1 = \frac{b + 7\sqrt{c}}{2\sqrt{c}} \tag{31}$$

$$a_1 = 0 \quad a_2 = \sqrt{a} \quad a_3 = -\sqrt{c} \quad b = -6\sqrt{c} \tag{32}$$

$$\beta_1 = -\sqrt{c} \qquad \alpha_1 = -\sqrt{a} \tag{33}$$

此处 α_1、β_1 取负号,是为了维持方程在 r 趋于零和无穷时的标准解的正确性。而 $b = -6\sqrt{c}$ 是势中参数 b、c 的另一个制约关系。

最后,第一激发态的能级 E_1 和径向本征函数 $R_{m_1}(r)$ 可以表述为:$E_1 = \sqrt{a}\left(12 + \frac{b}{\sqrt{c}}\right)$ (34)

$$R_{m_1}(r) = N_1(a_2 r^2 + a_3 r^{-2}) r^{\kappa_1} \exp\left[-\frac{1}{2}(\sqrt{a} r^2 + \sqrt{c} r^{-2})\right] \tag{35}$$

(N_1 是归一化常数,$\kappa_1 = \frac{b + 7\sqrt{c}}{2\sqrt{c}}$)

事实上,归一化常数 N_0 和 N_1 能够由归一化条件给出,归一化条件为 $\int_0^\infty |R_{m_i}|^2 dr = 1 (i = 0,1)$ (36)

4 讨论

观察所给势的参数值,讨论如下:先确定参数 a 的值,参数 b,c 的值分别由方程(13)和(32)制约。例如,$a = 1$,$c = 4$,$b = -12$,$\kappa = 2.5$,$\kappa_1 = 0.5$,$a_2 = 1$,$a_3 = -2$. 可以得出基态和第一激发态的能级值为 $E_0 = -2$ 和 $E_1 = 6$. 在基态和第一激发态,径向本征函数的主要特征基本相同,把基态和第一激发态时它们的图像进行比较(如图 1、2 所示),可以很容易地发现它们彼此是不同的。原因是在二维情况下,即使参数 a 相同,但由于 b 和 c 的值满足于不同的约束方程其取值不一定相同,使得两种情况下的图像大相径庭。

5 总结

本文讨论了二维情况下,非球谐势 $V(r) = ar^2 + br^{-4} + cr^{-6}$ 的薛定谔方程在基态和第一激发态时

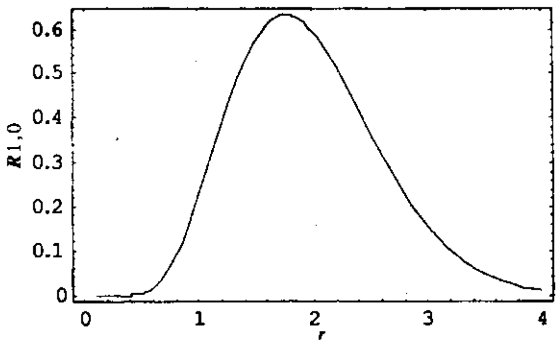

图 1 基态径向本征函数 $R_0^{(0)}(r)(a=1,b=-12,c=4)$，横坐标表示 r 的值,纵坐标表示径向本征函数 $R_0^{(0)}(r)$的值

Fig.1 The ground state wavefunction as a function of r with values $a=1.0$, $b=-12$ and $c=4$. the y – axis denotes the values of radial wavefunction and the x – axis denotes the variable r.

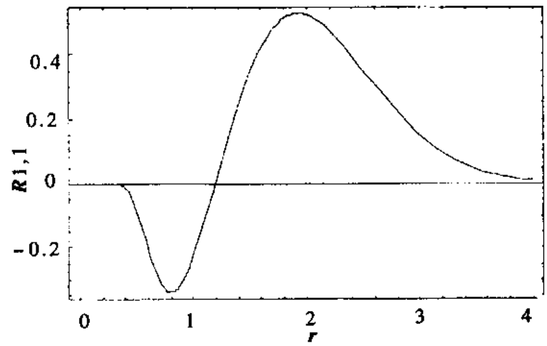

图 2 第一激发态径向本征函数 $R_0^{(1)}(r)(a=1,b=-12,c=4)$，横坐标表示 r 的值,纵坐标表示径向本征函数 $R_0^{(1)}(r)$的值

Fig.2 the first excited state wavefunctions as a function of r with values $a=1.0$, $b=-12$ and $c=4$. the y – axis denotes the values of wavefunction and the x – axis denotes the variable r.

的解,在运用变换求解的同时,对参数的值给定一些约束条件。可以在此基础上运用类似方法得出其它类似的多种混合势情况下(如 $V(r)=ar^2+br^4+cr^6$、$V(r)=ar^2+br^{-4}+cr^{-6}+dr^{-10}$ 等一系列的混合势)薛定谔方程的本征波函数和能量本征值。这种简单直观的方法可以应用到量子力学中与薛定谔方程有关联的一系列物理问题的其它领域进行研究。

参考文献:

[1] Alvaro De Souza Dutra. Exact solutions of the Schrödinger equation for coulomb atoms in the presence of some anharmonic oscillator potentials[J]. Phys. Lett. A, 1988, 131: 319.

[2] Pons R, Marcilhacy G. Quasi – polynomial solution for the interaction potential $V(r)=\frac{r^2+\lambda r^2}{1+gr^2}$ in the N – dimensional case [J]. Phys. Lett. A, 1991, 152: 235.

[3] Shi – Hai Dong and Zhong – Qi Ma. Exact solutions of the Two – Dimensional Schrödinger equation for the potential $V(r)=ar^2+br^{-4}+cr^{-6}$ in two dimensions [J]. J. Phys. A, 1998, 31: 9855.

[4] Shi – Hai Dong. Exact solutions of the Two – Dimensional Schrödinger equation with certain central potentials [J]. Int. J. Theor. Phys, 2000, 39: 1119.

[5] Mary Albery, Wilets L. Exact solutions of the Two – Dimensional Schrödinger equation for the potentials with coulomb and harmonic oscillator terms [J]. Phys. Lett. A, 2001, 286: 7.

[6] Jing – ling Chen, Lckwek, Choh, Yong Liu. Solving the anharmonic oscillator problem with the SU(2) group [J]. J. Phys. A, 2001, 34: 8889.

[7] 陈昌远 刘应文. 非球谐振子势的精确解[J]. 高能物理与核物理, 1999, 23(9): 865 – 872.

[8] Liu Xia – sheng, Ding Pei – Zhu. Numerical experiment of anharmonic oscillators by using the sympathetic scheme – shooting method [J]. Chin. J. Atomic. Molec. Phys, 2002, 19: 119.

[9] 曾谨言. 量子力学[M]. 卷 II (第三版). 北京:科学出版社, 1997.

Eigenvalues and Eigenfuctions to the Schrödinger Equation for the Mixed Potential in Two Dimensions

HAO Yu – hua

(Department of Basic Science of Yancheng Institute of Technology, Jiangsu Yancheng 224003 China)

Abstract: Making use of an ansatz for the eigenfunction, we obtain an exact closed – form solution to the non – relativisitic schrödinger equation with the anharmonic potential $V(r)=ar^2+br^{-4}+cr^{-6}$ in two dimensions, where the parameters of the potential a, b, c satisfy some constraints.

Keywords: ansatz; anharmonic potential; radial eigenfunctions; eigenvalues.