

双环形氢原子势束缚态的精确解

柏于杰

(盐城工学院 基础教学部, 江苏 盐城 224051)

摘要:若氢原子势被一个双环形状的平方反比势环绕,即称为双环形氢原子势。采用解析方法研究了双环形氢原子势束缚态的精确解,首先将双环形氢原子势的 Schrödinger 方程在球坐标系中进行分离变量,然后利用超几何方程和合流超几何方程求解角向方程和径向方程,给出了精确的能谱方程,获得了用超几何函数表示的归一化的角向波函数和用拉盖尔多项式表示的归一化径向波函数。

关键词:双环形氢原子势;Schrödinger 方程;束缚态;精确解

中图分类号: O413.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-5322(2009)04-0013-04

量子力学中寻求束缚态的能量本征值及相应的归一化波函数是一项基本任务。在物理学中,球谐振子模型在非相对论量子力学中可以精确求解,具有极其广泛的应用。然而在研究实际问题中,由于球谐振子模型过于简化,不能用它来很好的描述实际问题,因此人们提出了一些非球谐振子模型,它们是在球谐振子势上附加其它形式的势。若一个三维球谐振子被环状的平方反比势环绕,便称为环形振子(Ring-Shaped Oscillator,简称 RSO)^[1-2],RSO 的势能函数表示为

$$V(r, \theta) = \alpha r^2 + \frac{\gamma}{(r \sin \theta)^2} \quad (1)$$

若一个三维球谐振子被一个双环形状的平方反比势环绕,即称为双环形振子(Double Ring-Shaped Oscillator,简称 DRSH)。1989年, M. V. Carpio-Bernido 等人采用柱坐标系下的费曼路径积分的方法讨论了环形振子和双环形振子^[3]。在球坐标系下 DRSH 势能函数表示为

$$V(r, \theta) = \alpha r^2 + \frac{\beta}{(r \cos \theta)^2} + \frac{\gamma}{(r \sin \theta)^2} \quad (2)$$

根据文献^[1,3,4],当 $\beta=0$ 时,双环形振子势退化为环型振子势;当 $\beta=0, \gamma=0$ 时,双环形振子势将退化为球谐振子势。环形势是重要的势函数,能够用来描述环状分子的模型及变形核子之间的相互作用,在量子化学及核物理研究中有重要的

应用。因而研究一些环形振子模型具有十分重要的意义。最近,国内有许多物理工作者从各个方面讨论了环形振子势量子力学问题^[5-8],文献[9]采用超对称性和形不变性方法对双环形氢原子势(DRSH)(即在氢原子势外面再加上一个双环形状的平方反比势)进行了研究。由于该模型势是在讨论类似于苯环分子结构的基础上提出的,在分子和原子物理中有着广泛的应用。本文采用另一种方法——解析法来研究可以精确求解的双环形氢原子势,并与文献[9]的研究结果进行比较。

双环形氢原子势的表达式为

$$V(r, \theta, \varphi) = V(r) + \frac{V(\theta)}{r^2} + \frac{V(\varphi)}{(r \sin \theta)^2} \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned} V(r) &= -\alpha/r, \\ V(\theta) &= \beta(\sec \theta)^2 + \gamma(\csc \theta)^2, \\ V(\varphi) &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

上式中为 α, β, γ 无量纲的系数。本文采用变量分离的方法来讨论双环形氢原子势。首先是在球坐标系中对 DRSH 势的 Schrödinger 方程进行变量分离,得到角向方程和径向方程,其次通过变量代换和函数代换,分别将角向方程和径向方程转化为超几何方程和合流超几何方程,再利用归一化公式和雅可比多项式的积分公式和拉盖尔

收稿日期:2009-06-12

作者简介:柏于杰(1983-),男,江苏响水人,助教,硕士,主要研究方向为量子力学和纳米材料的物性计算。

多项式的积分公式得到归一化常数,从而获得双环形氢原子势的能谱和波函数。

1 球坐标系中变量分离 DRSH 的 Schrödinger 方程

DRSH 势的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar}{2\mu}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \quad (5)$$

根据文献[10],相应的波函数写为

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{R(r)}{r} \frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin \theta}} K(\varphi) = \frac{R(r)}{r} Y(\theta, \varphi) \quad (6)$$

为了简便起见,取 $2\mu = \hbar = 1$,那么在球坐标系下 Schrödinger 方程为

$$-\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2(\sin\theta)^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Psi = (E - V)\Psi \quad (7)$$

其中 $V = V(r, \theta, \varphi)$ 。

由文献[10],方程(7)可以分离成 $K(\varphi)$, $H(\theta)$ 和 $R(r)$ 分别满足的微分方程

$$-\frac{d^2K(\varphi)}{d\varphi^2} + V(\varphi)K(\varphi) = m^2K(\varphi) \quad (8a)$$

$$-\frac{d^2H(\theta)}{d\theta^2} + [V(\theta) + (m^2 - \frac{1}{4})(\csc\theta)^2]H(\theta) = l^2H(\theta) \quad (8b)$$

$$-\frac{d^2R(r)}{dr^2} + [V(r) + \frac{l^2 - 1/4}{r^2}]R(r) = ER(r) \quad (8c)$$

其中 m 和 l 为本征值, $H(\theta)$ 和 $K(\varphi)$ 表示角向波函数, $R(r)$ 表示径向波函数。对应于双环形氢原子势,可以得到双环形氢原子势 $K(\varphi)$, $H(\theta)$, $R(r)$ 分别满足的微分方程为

$$-\frac{d^2K(\varphi)}{d\varphi^2} = m^2K(\varphi) \quad (9a)$$

$$-\frac{d^2H(\theta)}{d\theta^2} + [\beta(\sec\theta)^2 + (m^2 + \gamma - \frac{1}{4})(\csc\theta)^2]H(\theta) = l^2H(\theta) \quad (9b)$$

$$-\frac{d^2R(r)}{dr^2} + [-\frac{\alpha}{r} + \frac{l^2 - 1/4}{r^2}]R(r) = ER(r) \quad (9c)$$

对于(9a)式,利用归一化条件 $\int_0^{2\pi} K(\varphi)K(\varphi)d\varphi = 1$ 和周期边界条件 $K(\varphi) = K(\varphi + 2\pi)$ 可得

$$K(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots (10)$$

可以看出,此处角向的波函数与文献[9]的研究相一致。下面两节着重讨论微分方程(9b)和(9c)式的解。

2 角向波函数

令 $\beta = A(A-1)$, $A = 1/2\sqrt{1+4\beta} + 1/2$, $m^2 + \gamma - 1/4 = B(B-1)$, $B = \sqrt{m^2 + \gamma} + 1/2$ 则方程(9b)式转化为

$$-\frac{d^2H(\theta)}{d\theta^2} + [A(A-1)(\sec\theta)^2 + B(B-1)(\csc\theta)^2]H(\theta) = l^2H(\theta) \quad (11)$$

令 $y = (\sin\theta)^2$ 和 $H(y) = y^{\frac{B}{2}}(1-y)^{\frac{A}{2}}F(y)$ 代入(11)式得

$$y(1-y)\frac{d^2F(y)}{dy^2} + \left[(B + \frac{1}{2}) - y(A + B + 1)\right]\frac{dF(y)}{dy} + \frac{1}{4}[l^2 - (A + B)^2]F(y) = 0 \quad (12)$$

方程(12)式是一个标准超几何方程^[11]

$$z(1-z)\frac{d^2u}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z]\frac{du}{dz} - \alpha\beta u = 0 \quad (13)$$

(13)式的解是

$$F(z) = F(\alpha, \beta, \gamma, z) \quad (14)$$

所以方程(12)式的解是

$$F(y) = F(\alpha, \beta, \gamma, y) \quad (15)$$

其中: $\alpha = -1/2(l - A - B)$, $\beta = 1/2(l + A + B)$, $\gamma = B + 1/2$ 。

当 $y \rightarrow 1$ 时,波函数有限,有

$$\alpha = -1/2(l - A - B) = -s, \quad s = 0, 1, 2, \dots, l = 2s + A + B \quad (16)$$

所以 $F(y) = F(-s, A + B + s, B + 1/2, y)$ (17)

因此,角向波函数为

$$H(\theta) = N_h(\sin\theta)^B(\cos\theta)^A \quad F(-s, A + B + s, B + 1/2, (\sin\theta)^2) \quad (18)$$

其中 N_h 为归一化常数。应用归一化条件

$$\int_0^\pi \left[\frac{H(\theta)}{\sqrt{\sin\theta}} \right]^2 \sin\theta d\theta = 1 \quad (19)$$

和利用雅可比多项式的积分公式^[11]

$$\int_0^1 W_{(n)} W_{(m)} Z^{(\gamma-1)} (1-Z)^{(p-\gamma)} dZ = \frac{(p+n)_n \Gamma(\gamma) \Gamma(p+n-\gamma+1) n! \delta_{nm}}{(\gamma)_n \Gamma(p+2n+1)} \quad (20)$$

得归一化常数

$$N_h^2 = \frac{(B + 1/2)_s \Gamma(A + B + 2s + 1)}{\Gamma(B + 1/2)_s \Gamma(A + s + 1/2) (A + B + s)}, \quad (21)$$

再利用伽马函数^[11]

$$\begin{aligned}(z)_n &= z(z+1)(z+2)\cdots(z+n-1) \\ \Gamma(z+n) &= \\ (z+n-1)(z+n-2)\cdots(z+1)z\Gamma(z)\end{aligned}\quad (22)$$

由(21)和(22)式得归一化常数为

$$N_u = \sqrt{\frac{l(B+1/2)\Gamma(A+B+s)}{\Gamma(A+s+1/2)\Gamma(B+1/2)s!}} \quad (23)$$

到此,角向波函数就完全给出:

$$\begin{aligned}H(\theta) &= \sqrt{\frac{l(B+1/2)\Gamma(A+B+s)}{\Gamma(A+s+1/2)\Gamma(B+1/2)s!}} \\ (\sin\theta)^B (\cos\theta)^A F(-s, A+B+s, \\ B+1/2, (\sin\theta)^2)\end{aligned}\quad (24)$$

我们与文献[9]研究的角向波函数也进行了比较,虽然表达形式不一样,但通过伽马函数变形之后它们是完全一致的。

3 径向波函数

根据文献[12],当 $r \rightarrow \infty$, (9c)式的解为

$$R(r) = Ce^{-\sqrt{-E}r} \quad (25)$$

当 $r \rightarrow 0$, (9c)式的解为

$$R(r) = r^{l+1/2} \quad (26)$$

令: $R(r) = r^{l+1/2} e^{-\chi r} u(r)$ $\chi = \sqrt{-E}$ (27)

把(27)代入(9c)式,并作变量代换 $\lambda = 2\chi r$ 得

$$\begin{aligned}\lambda \frac{d^2 u}{d\lambda^2} + \frac{du}{d\lambda} \left[2\left(l + \frac{1}{2}\right) - \lambda \right] - \\ \left[\left(l + \frac{1}{2}\right) - \frac{\alpha}{2\chi} \right] u = 0\end{aligned}\quad (28)$$

方程(28)式是合流超几何方程^[11]

$$\lambda \frac{d^2 u}{d\lambda^2} + \frac{du}{d\lambda} (\gamma - \lambda) - \beta u = 0 \quad (29)$$

方程(29)式的解为

$$u(\lambda) = F(\beta, \gamma, \lambda) \quad (30)$$

所以方程(28)式的解为

$$u(\lambda) = F\left(l + \frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2\chi}, 2l + 1, \lambda\right) \quad (31)$$

当 $\lambda \rightarrow \infty$ 时,波函数有限,有

$$l + \frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2\chi} = -n, \quad (32)$$

令: $n = n_r + l + 1/2, n = 0, 1, 2, \dots$ 有关系

$$\chi = \frac{\alpha}{2n}, E = -\frac{\alpha^2}{4n^2} \quad (33)$$

到此,我们给出了能谱方程。在文献[9]中,由于他令 $l' = l - 1/2$,因此我们只要把 $l = l' + 1/2$ 代入到上式就可以得到一致的结果。由文献[12]可知,径向波函数为

$$\begin{aligned}R(r) &= N_u \lambda^{l+1/2} e^{-\frac{\alpha}{2\chi} \lambda} u(\lambda) = \\ N_u \lambda^{l+1/2} e^{-\frac{\alpha}{2\chi} \lambda} F(-n_r, 2l+1, \lambda)\end{aligned}\quad (34)$$

利用径向波函数归一化条件和库末方程与拉革尔多项式的关系^[11]

$$\int_0^\infty \left(\frac{R(r)}{r} \right)^2 r^2 dr = 1 \quad (35)$$

$$F(-n, u+1, z) = \frac{n! \Gamma(u+1)}{\Gamma(n+u+1)} L_n^u(z) \quad (36)$$

再由拉革尔递推关系和拉革尔多项式的积分公式^[11]

$$\begin{aligned}L_n^u(z) &= L_{n+1}^u(z) - L_{n-1}^u(z) \\ \int_0^\infty z^u e^{-z} L_n^u(z) L_m^u(z) dz &= \frac{\Gamma(n+u+1)}{n!} \delta_{nm}\end{aligned}\quad (37)$$

得出径向波函数归一化常数为

$$N_u = \frac{1}{\Gamma(2l+1)} \sqrt{\frac{\Gamma(n+l+1/2)}{(n-l-1/2)! 2n}} \quad (39)$$

最终得到了双环形氢原子势的波函数为

$$\begin{aligned}\Psi(r, \varphi, \theta) &= \\ \frac{\sqrt{l(B+1/2)\Gamma(A+B+s)(n-l-1/2)!}}{\sqrt{2\pi\Gamma(A+s+1/2)\Gamma(B+1/2)s! 2n\Gamma(n+l+1/2)}} \times \\ (\sin\theta)^B (\cos\theta)^A e^{i\varphi} r^{l+1/2} e^{-r/2} L_{n_r}^{2l}(r) \\ F(-s, A+B+s, B+1/2, (\sin\theta)^2)\end{aligned}\quad (40)$$

4 结语

综合上述,本文对双环形氢原子势的Schrödinger方程在球坐标系中进行了分离变量,使之分离成径向和角向方程,然后分别解出径向方程和角向的方程。根据上面的分析,得到了双环形氢原子势的能量和用超几何函数和伽马函数表示的归一化的角向波函数和用合流超几何函数和拉革尔多项式表示的归一化的径向波函数。并与文献[9]的研究进行了比较,发现两种方法研究的结果是一致的。到此双环形氢原子势的束缚态解已全部给出,这将有助讨论原子核结构等问题,本文说明部分双环形势是可以精确求解的。

参考文献:

- [1] 陈昌远,孙东升. 环型振子势的精确解[J]. 光子学报, 2001, 30(1): 104 - 107.
- [2] 黄博文. 双环型振子的超对称性[J]. 高能物理与核物理, 2003, 27(9): 770 - 774.
- [3] Carpio - Bernido M V, Bernido C C. An exact solution of ring - shaped oscillator plus a $r^{-2} \csc^2 \theta$ potential[J]. Phys. Lett. A, 1989, 134(7): 395 - 399.
- [4] Quesne C. A new ring - shaped potential and its dynamical invariance algebra[J]. J. Phys. A, 1988, 21(14): 3 093 - 3 103.
- [5] 陈昌远,孙东升,刘友文,等. 环形非球谐振子径向矩阵元的通项公式及其递推关系[J]. 物理学报, 2002, 51(3): 468 - 473.
- [6] 王德云,黄博文. 用超对称性和形不变性方法求解环形振子的能谱和波函数[J]. 高能物理与核物理, 1999, 23(11): 1 078 - 1 082.
- [7] 张民仓,王振邦. 一类环状非球谐振子势场中相对论粒子的束缚态解[J]. 物理学报, 2007, 56(7): 3 688 - 3 692.
- [8] 王振邦,张民仓. 一类环状球谐振子势 Klein - Gordon 方程的束缚态解[J]. 陕西师范大学学报:自然科学版, 2008, 36(2): 50 - 53.
- [9] 陆法林,庄国策,陈昌远. 双环形 Coulomb 势 Schrödinger 方程束缚态的精确解[J]. 原子与分子物理学报, 2006, 23(3): 493 - 498.
- [10] Chen G, Yuan Q Y. Accurate bound state solutions of generalized oscillatory potential[J]. J. At. Mol. Phys., 2004, 21(1): 143 - 148.
- [11] 王竹溪,郭敦仁. 特殊函数概论[M]. 北京:科学出版社, 1979.
- [12] 苏汝铿. 量子力学[M]. 2 版. 北京:高等教育出版社, 2002.

Exact Bound State Solutions of the Double Ring - shaped Hydrogen Potential

BAI Yu-Jie

(Department of Fundamental Science Teaching, Yancheng Institute of Technology, Jiangsu Yancheng 224051, China)

Abstract: If the hydrogen potential is surrounded by double ring - shaped inversed square potential, it is defined as double ring - shaped hydrogen potential. This paper deals with the bound state exact solutions of double ring - shaped hydrogen potential with interpreting method. First, the Schrödinger equation of double ring - shaped hydrogen potential is solved in spherical polar coordinates by adopting the variable separation. Then the angular and radial functions are handled respectively by using the hyper geometric equation and the confluent hyper geometric equation, therefore the exact energy spectrum is obtained. The normalized angular wave functions expressed in terms of the standard hyper geometric function and the normalized radial wave functions expressed by means of the Lagurre polynomials are presented.

Keywords: double ring - shaped hydrogen potential; schrödinger equation; bound state; exact solutions

(责任编辑:张英健;校对:沈建新)