第 17 卷 第 5 期
2011 年 10 月

上海大学学报(自然科学版)
JOURNAL OF SHANGHAI UNIVERSITY(NATURAL SCIENCE)

Vol. 17 No. 5
Oct. 2011

doi: 10.3969/j. issn. 1007-2861. 2011. 05. 009

L^2 基的组态空间中修正 Pöschl-Teller 势的精确解

陈发堂[1]， 张民仓[2]

(1. 上海电力学院 数学物理系，上海 200090; 2. 陕西师范大学 物理学与信息技术学院，西安 710062)

摘要: 在完全平方可积的 L^2 空间中求解修正 Pöschl-Teller 势满足的 Schrödinger 方程. 由于 L^2 空间能够负载波算子的三对角化矩阵表示，因而求解修正 Pöschl-Teller 势满足的 Schrödinger 方程转变为寻求波函数展开系数满足的一个三项递推关系式. 研究结果表明，相应的束缚态波函数可以由 Jacobi 多项式表示，束缚态的能谱方程可以由波函数展开系数递推关系式的对角化条件得到.

关键词: 修正 Pöschl-Teller 势; 三对角化矩阵方案; 平方可积空间; 正交多项式

中图分类号: O 413.1　　**文献标志码**: A　　**文章编号**: 1007-2861(2011)05-0620-04

Exact Solutions of Modified Pöschl-Teller Potential in Configuration Space of L^2 Basis

CHEN Fa-tang[1]， ZHANG Min-cang[2]

(1. Department of Mathematics and Physics, Shanghai University of Electric Power, Shanghai 200090, China;
2. College of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China)

Abstract: The Schrödinger equation with the modified Pöschl-Teller potential is studied by working in a complete square integrable basis that carries a tridiagonal matrix representation of the wave operator. In this program, solving the Schrödinger equation is translated into finding solutions of a resulting three-term recursion relation for expansion coefficients of the wave functions. It is shown that with the tridiagonal representation, the wave function of the Schrödinger equation is expressed in terms of the Jacobi polynomial and the discrete spectrum of the bound states is obtained by diagonalization of the recursion relation.

Key words: modified Pöschl-Teller potential; tridiagonal matrix program; square integrable basis; orthogonal polynomials

在量子力学中，寻求给定势场波动方程的精确解析解始终是人们感兴趣的问题. 首先，详尽地分析这些解析解能够加深对相关物理问题的理解，进而能够为修正和完善原有的物理学理论提供有力的支撑[1-2]；其次，为了研究更为复杂的物理学系统，需要建立新的模型并引入新的计算方法，而这些解析解对于检验所建模型是否正确及进一步完善新的计算方法具有重要的意义. 一般来说，获得精确解析解的

收稿日期:2011-03-04

基金项目:国家教育部重点实验室资助项目(P201006)；上海市教委科研创新基金资助项目(11ZZ172)；上海市教委重点学科建设资助项目(G51304)；上海市自然科学基金资助项目(09ZR1413000)

通信作者:陈发堂(1955 ~)，男，副教授，研究方向为基础物理学与仪器设备的可靠性分析. E-mail: chenfatang@126.com

方法是把给定势场的波动方程转化为确定的广义超几何方程,而方程的解能够由各类相应的正交多项式表示. 量子力学中的可解势问题可分为三类,即精确可解势问题、有条件的精确可解势问题和准精确可解势问题. 精确可解势问题是指当势函数参数在其定义域内连续变化时,波动方程存在解析解,并能够得到全部的能量谱;有条件的精确可解势问题则是指当势函数参数取特定值时,波动方程才存在解析解及相应的能量谱;而准精确可解势问题则是指那些只有部分能量谱可以确定的势场[3-4]. 为了方便地研究量子力学中的可解势问题,已经提出和发展了许多新的理论和方法,其中包括目前广泛应用的因子分解方法[5]、群理论方法[6-7]、超对称量子力学和形不变势方法[8-9]等.

在可解势问题的研究中,重要的工作是找出波动方程 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 的解,其中 H 为所研究体系的哈密顿量,E 为体系的能量. 束缚态时,E 取分立值;散射态时,E 取连续值. 在大多数情况下,尤其是在寻求本征值波动方程的数值解或者解的代数结构时,要求波函数 ψ 在一个平方可积的函数空间上,能够由函数空间的基 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 展开为 $|\psi(\boldsymbol{r},E)\rangle = \sum_n f_n(E)|\varphi_n(\boldsymbol{r})\rangle$,其中 $\boldsymbol{r}$ 为空间的坐标. 基函数 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 的定义域必须与体系哈密顿量的定义域相一致并满足所研究问题的边界条件,同时要求 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 必须能够负载体系哈密顿量 H 的对角化表示,或者说,基函数的选择必须满足条件 $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$.

1　三对角化矩阵方案

2005 年,Alhaidari[10] 提出并完善了研究波动方程的三对角化矩阵方案. 这一方案的核心是弱化了平方可积函数空间中哈密顿量 H 的矩阵表示必须是对角化的限制,只要求波算子在该函数空间中的矩阵表示是三对角化,并具有对称性. 这样使得波算子作用于函数空间的基函数具有 $(H-E)|\varphi_n\rangle \approx |\varphi_n\rangle + |\varphi_{n-1}\rangle + |\varphi_{n+1}\rangle$ 的形式,从而再作左投影 $\langle\varphi_n|$,得到

$$\langle\varphi_n|H-E|\varphi_m\rangle = (a_n - z)\delta_{n,m} + b_n\delta_{n,m-1} + b_{n-1}\delta_{n,m+1}. \tag{1}$$

由方程(1)容易得到,波函数展开系数满足的三项递推关系式如下:

$$zf_n = a_nf_n + b_{n-1}f_{n-1} + b_nf_{n+1}, \tag{2}$$

式中,z 和系数 $\{a_n,b_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为实数,并且通常是能量、角动量和势场参数的函数. 于是求解波动方程的解析解就转化为寻求波函数 ψ 的展开系数所满足的一个三项的递推关系式. 如果得到如式(2)所示的递推关系式,就获得了波动方程解的相关信息. 在大多数情况下,这个递推关系式容易由相应的正交多项式的相关性质得到. 另外,方程(1)也表明波动方程的分立能谱可以由展开系数的对角化条件得到. 这要求对于所有的整数 $n(n=0,1,\cdots)$,存在

$$b_n = 0,\quad a_n - z = 0. \tag{3}$$

对于一维问题,或者说在以空间坐标 x 表示的 L^2 基的组态空间中,波函数 $\psi_E(x)$ 能够展开为 $\sum_{n=0}^{\infty} f_n(E)\varphi_n(x)$,而基函数 $\varphi_n(x)$ 通常可表示为

$$\varphi_n(x) = A_nw_nP_n(x), \tag{4}$$

式中,A_n 为归一化常数,$P_n(x)$ 为空间坐标 x 的 n 阶多项式,w_n 为满足条件 $w_n(x_\pm)=0$ 的权函数,其中 $x_-(x_+)$ 分别为空间的左(右)边界. 在求解一维势场的波动方程时,有两类空间是经常用到的,其中第一类空间的 $x_\pm$ 是有限的,并且

$$w_n(x) = (x-x_-)^{\alpha}(x-x_+)^{\beta},$$
$$P_n(x) = {}_2F_1(-n,b,c;x); \tag{5}$$

而另一类空间是半边有限的,即 x_- 是有限的,而 x_+ 是无限的,并且

$$w_n(x) = (x-x_-)^{\alpha}\mathrm{e}^{-\beta(x-x_-)},$$
$$P_n(x) = {}_1F_1(-n,c;x), \tag{6}$$

式中,${}_2F_1(-n,b,c;x)$ 为超几何函数,${}_1F_1(-n,c;x)$ 为合流超几何函数. 参数 α,β,b 和 c 均为实数,并且 α 和 β 为正数. 这些参数一般都与所研究的问题相关,而对于束缚态,这些参数也与指标 n 相关.

众所周知,量子力学中可精确求解的问题或者说可精确求解的势场是非常有限的. Alhaidari 最初提出和建立三对角化矩阵方案的动机和目的就是为了得到那些用传统方法无法求解的问题的解析解,例如非有心电偶极矩势 $V(\boldsymbol{r},\theta) = \frac{\cos\theta}{\boldsymbol{r}^2}$[11] 以及 Yukawa 势[12]等. 当然,对于用其他方法可精确求解的问题,三对角化矩阵方案也显示出其独有的优势[13]. 本工作是在 L^2 基的组态空间中求解一维修正 Pöschl-Teller 势满足的 Schrödinger 方程. 修正 Pöschl-Teller 势可以用于描述双原子分子模型中的吸引势,其一维形式为[14]

$$V(y) = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\lambda^2\gamma(\gamma-1)}{\cosh^2\lambda y}, \tag{7}$$

式中，参数 γ 取整数时，平面波经此势不发生反射，因而，修正 Pöschl-Teller 势也称为无反射势. 由于无反射势在 KDV 孤子理论等问题的研究中也有重要作用，因而，近年来一直受到人们的重视[15].

2 修正 Pöschl-Teller 势的精确解

质量为 M 的粒子在一维势场 $V(y)$ 中运动时满足的与时间无关($\hbar=M=1$)的 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+V(y)-E\right]\psi(y)=0. \tag{8}$$

若令体系的哈密顿量 $H=-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+V(y)$，则方程(8)可写为

$$(H-E)\mid\psi\rangle=0. \tag{9}$$

作变量替换 $x=\tanh\lambda y$，则对应于 $y\in[-\infty,\infty]$，$x\in[-1,+1]$，因而，一维修正 Pöschl-Teller 势满足的 Schrödinger 方程符合式(5)给出的具有边界 $x=\pm1$ 的情况. 由于超几何函数 ${}_2F_1(-n,b,c;x)$ 可以由 Jacobi 多项式 $P_n^{(\mu,\nu)}(x)$ 表示，于是在 L^2 空间中满足边界条件的基函数可以选为

$$\varphi_n(x)=A_n(1+x)^{\alpha}(1-x)^{\beta}P_n^{(\mu,\nu)}(x), \tag{10}$$

式中，$\alpha,\beta>0$，$\mu,\nu>-1$，并且归一化常数为

$$A_n=\sqrt{\frac{\lambda(2n+\mu+\nu+1)\Gamma(n+1)\Gamma(n+\mu+\nu+1)}{2^{\mu+\nu+1}\Gamma(n+\mu+1)\Gamma(n+\nu+1)}}. \tag{11}$$

利用下面所给的 Jacobi 多项式满足的微分方程和微分公式[10]：

$$\left\{(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-[(\mu+\nu+2)x+\mu-\nu]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+n(n+\mu+\nu+1)\right\}P_n^{(\mu,\nu)}=0, \tag{12}$$

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_n^{(\mu,\nu)}=-n\left(x+\frac{\nu-\mu}{2n+\mu+\nu}\right)P_n^{(\mu,\nu)}+2\frac{(n+\mu)(n+\nu)}{2n+\mu+\nu}P_{n-1}^{(\mu,\nu)}=0, \tag{13}$$

可以得到

$$-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi_n(y)=\frac{\lambda^2}{2}(1-x^2)\left\{\left[n\left(x+\frac{\nu-\mu}{2n+\mu+\nu}\right)\cdot\left(\frac{\mu-2\beta}{1-x}-\frac{\nu-2\alpha}{1+x}\right)+n(n+\mu+\nu+1)+(2\alpha\beta+\alpha+\beta)-\alpha^2\left(\frac{1-x}{1+x}\right)-\beta^2\left(\frac{1+x}{1-x}\right)\right]\varphi_n-2\frac{(n+\mu)(n+\nu)}{2n+\mu+\nu}\left(\frac{\mu-2\beta}{1-x}-\frac{\nu-2\alpha}{1+x}\right)\cdot\frac{A_n}{A_{n-1}}\varphi_{n-1}\right\}. \tag{14}$$

在式(14)的推导中利用了如下关系式：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}=\lambda(1-x^2)\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}.$$

修正 Pöschl-Teller 势属于精确可解势的范畴，因此，势场参数的取值应该满足三对角化矩阵表示的要求. 虽然参数 α 和 β 可以有不同的选择，但由式(14)可以看出，如果 $\alpha=\frac{\nu}{2}$，$\beta=\frac{\mu}{2}$，则式(14)中的 φ_{n-1} 项被消去，同时 φ_n 项中与坐标 x 相关的部分也被消去. 于是，可以得到波动方程(9)的最简表示式：

$$\frac{2}{\lambda^2}\mid H-E\mid\varphi_n\rangle=(1-x^2)\left[n(n+\mu+\nu+1)+\frac{1}{2}(\mu\nu+\mu+\nu)-\frac{\nu^2}{4}\left(\frac{1-x}{1+x}\right)-\frac{\mu^2}{4}\left(\frac{1+x}{1-x}\right)+\frac{2}{\lambda^2(1-x^2)}(V-E)\right]\varphi_n. \tag{15}$$

若式(15)中的势场 V 为式(7)所定义的一维修正 Pöschl-Teller 势，则对式(15)作左投影 $\langle\varphi_m\mid$. 注意到，$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y=\frac{1}{\lambda}\int_{-1}^{1}\frac{1}{(1-x^2)}\mathrm{d}x$，并利用如下熟知的 Jacobi 多项式的正交关系[16]：

$$\int_{-1}^{1}(1+x)^{\mu}(1-x)^{\nu}P_n^{(\mu,\nu)}P_m^{(\mu,\nu)}\mathrm{d}x=\frac{2^{\mu+\nu+1}\Gamma(n+\mu+1)\Gamma(n+\nu+1)}{(2n+\mu+\nu+1)\Gamma(n+1)\Gamma(n+\mu+\nu+1)}\delta_{n,m}. \tag{16}$$

最后，可以得到

$$\frac{2}{\lambda^2}\langle\varphi_m\mid H-E\mid\varphi_n\rangle=\left[\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}\right)^2-\frac{1}{4}-\gamma(\gamma-1)\right]\delta_{n,m}, \tag{17}$$

式中，参数 ν 和 μ 必须满足关系 $\nu=\mu$，并且

$$E=-\left[\left(\frac{\lambda\nu}{2}\right)^2+\left(\frac{\lambda\mu}{2}\right)^2\right]. \tag{18}$$

由式(18)可以看出，参数 ν 和 μ 与能量相关. 由于能量是负的，因而一维修正 Pöschl-Teller 势满足的与时间无关的 Schrödinger 方程必存在 $E<0$ 的束缚态解. 另外，波函数系数的展开式(17)中并没有出现式(2)中的 $b_n\delta_{n,m-1}$ 和 $b_{n-1}\delta_{n,m+1}$ 项，这是因为，对参数 α 和 β 的合适选取能够实现三对角化矩阵的对角

化. 由式(3)和(18),容易求出与束缚态相对应的分立能谱为

$$E_n = -\frac{\lambda^2}{2}(n+1-\gamma)^2. \tag{19}$$

这一结论与其他方法得到的结果相一致[2]. 由于$n=0,1,\cdots$,因而从方程(19)可以看出,当参数 $\gamma=n+1$,即 γ 取整数时,一维修正 Pöschl-Teller 势无束缚态存在. 最后,得到的束缚态波函数为

$$\psi_n(y)=\sqrt{\lambda\frac{(2n+\mu+\nu+1)\Gamma(n+1)\Gamma(n+\mu+\nu+1)}{2^{\mu+\nu+1}\Gamma(n+\mu+1)\Gamma(n+\nu+1)}}\cdot (1+\tanh\lambda y)^{\frac{\nu}{2}}(1-\tanh\lambda y)^{\frac{\mu}{2}}P_n^{(\mu,\nu)}(\tanh\lambda y). \tag{20}$$

3 结 束 语

本工作是在 L^2 基的组态空间中求解了一维修正 Pöschl-Teller 势满足的 Schrödinger 方程,由于 L^2 函数空间能够负载波算子的三对角化矩阵表示,因而求解 Schrödinger 方程转化成为寻求波函数展开系数满足的三项递推关系式. 在大多数情况下,这个递推关系式容易由熟知的正交多项式的相关性质得到,而束缚态的能谱方程可以由这个递推关系式的对角化条件得到. 以上的研究过程表明,合适地选择势场相关参数,能够容易实现波函数展开系数递推关系式的对角化. 另外一维修正 Pöschl-Teller 势的 Schrödinger 方程具有 $E<0$ 的束缚态解,相应的束缚态波函数可以由 Jacobi 多项式表示;当势场参数 γ 取整数时,一维修正 Pöschl-Teller 势无束缚态存在.

参考文献:

[1] SCHIFF L I. Quantum mechanics [M]. 3rd ed. New York: McGraw-Hill, 1955.

[2] FLÜGGE S. Practical quantum mechanics [M]. Berlin: Springer, 1974.

[3] DE SOUZA-DUTRA A. Conditionally exactly solvable class of quantum potentials [J]. Physical Review: A, 1993, 47:R2435.

[4] NAG N, ROYCHOUDHURY R, VARSHNI Y P. Conditionally exactly solvable potentials and supersymmetry [J]. Physical Review: A, 1994, 49: 5098-5099.

[5] DONG S H. Factorization method in quantum mechnics [M]. Netherlands: Springer, 2007.

[6] BANDER M, ITZYKSON C. Group theory and the hydrogen atom (Ⅰ) [J]. Reviews of Modern Physics, 1968, 38:330-345.

[7] ALHASSID Y, GURSEY F, IACHELLO F. Potential scattering, transfer matrix, and group theory [J]. Physical Review Letters, 1983, 50:873-876.

[8] COOPER F, KHARE A, SUKHATME U. Supersymmetry and quantum mechanics [J]. Physics Reports, 1995, 251:267-385.

[9] 黄博文,王德云. 含有非谐振势系统能谱的研究[J]. 物理学报,2002,51:1163-1166.

[10] ALHAIDARI A D. An extended class of L^2-series solutions of the wave equation [J]. Annals of Physics, 2005, 317:152-174.

[11] ALHAIDARI A D, BAHLOULI H. Electron in the field of a molecule with an electric dipole moment [J]. Physical Review Letters, 2008, 100:110401.

[12] BAHLOULI H, ABDELMONEM, M S, NASSER I M. Analytical treatment of the Yukawa potential [J]. Physica Scripta, 2010, 82:065005.

[13] EL AAOUD E, BAHLOULI H, ALHAIDARI A D. One-dimensional solvable potentials in a tridiagonal representation space [J]. International Review of Physics, 2008, 2:5.

[14] 陈刚,楼智美. 无反射势阱中相对论粒子的束缚态[J]. 物理学报,2003,52:1071-1074.

[15] NOGAMI Y, TOYAMA F M. Transparent potential for the one-dimensional Dirac equation [J]. Physical Review: A, 1992, 45:5258-5261.

[16] 刘式适,刘式达. 特殊函数[M]. 2 版. 北京:气象出版社,2002.

(编辑:孟庆勋)