DOI:10.11721/cqnuj20140120

变形莫尔斯势条件下薛定谔方程的近似解析解*

胡 文 江
(重庆邮电大学 光电工程学院，重庆 400065)

摘要:本文借助拉普拉斯变换和标度变换，求解了 3 维变形莫尔斯势条件下的薛定谔方程的近似解析解。通过将标度变换后的 3 维变形莫尔斯势作级数展开，忽略高阶微小量；合理选择相关参数，使得无解析解的情形转化为近似解析解存在；拉普拉斯变换中合理应用终值定理与卷积定理以及广义拉盖尔函数的正交性条件；获得了量子系统能谱的显式表示和归一化的本征波函数 $U_{nl}(\rho)=\left(\frac{n!\ (2\beta)^{2k+1}}{\rho(2\kappa+n+1)}\right)^{1/2}e^{-\beta_2\rho}\rho^k L_n^{2k}(2\beta_2\rho)$；最后进行了适当的讨论。

关键词:变形莫尔斯势；薛定谔方程；普拉斯变换；本征波函数

中图分类号:O562.5; O562.1　　**文献标志码**:A　　**文章编号**:1672-6693(2014)01-0094-05

在原子物理和分子物理中，求解各种形式势场条件下薛定谔方程和狄拉克方程中波函数及能谱具有重要意义。除库仑势和谐振子势以外，简单幂函数的叠加势已经能够精确获得量子系统波函数的解析解。人们已经找到了某些特定正幂与逆幂势函数的线性叠加的一个解析解，例如文献[1]得到了势函数 $V(r)=ar^2+br^{-4}+cr^{-6}$ 的一个解析解；文献[2]得到了非谐振子势 $V(x)=x^2/2+g/(2x^2)$ 的能级本征值的精确解；文献[3]得到了分子晶体势函数 $V(r)=A_1r^{-10}-A_2r^{-6}$ 的一个能级本征值的精确解；文献[4-7]研究了环形非谐振子势的精确解；文献[8]研究了势函数 $V(r)=a_1r^6+a_2r^2+a_3r^{-4}+a_4r^{-6}$ 的一系列定态波函数解析解以及相应的能级结构，一般通过数学物理方法中的分离变量法与 Nikiforov-Uvarov(NU)方法进行求解[9]。

以物理学家 Philip M. Morse 的名字命名的 Morse 势是一种对于双原子分子间势能的简易分析模型。$V(r)=D_e\ [1-e^{-a(r-r_e)}]^2$。$r$ 是核间距，r_e 是平衡键长，D_e 是 Morse 势的阱深，a 是用于调节的势阱宽度，a 越小，势阱越宽。Morse 势与谐振子势相比，它更能真实反映分子振动能级间距的非均匀性。一般将 $V(r)=D_e\ [1-e^{-a(r-r_e)}]^2$ 作泰勒级数展开至一阶，然后比照谐振子势求解薛定谔方程[10]。本文对 Morse 势作了一定改进。$V(r)=D_e\ [q-e^{-a(r-r_e)}]^2$，$q$ 并非恒等于 1，使得双原子分子系统的势阱深度因各种条件的起伏而有所变化。本文不是比照谐振子势的方式去求解薛定谔方程，而是借助于拉普拉斯变换和标度变换程[11]，通过将标度变换后的 3 维变形莫尔斯势作级数展开，忽略高阶微小量；合理选择相关参数，使得无严格解析解的情形转化为近似解析解存在，并且在拉普拉斯变换中合理应用终值定理与卷积定理，求得了相应变形 Morse 势条件下的近似解析解。

1 拉普拉斯变换求解径向薛定谔方程

采用里德伯(Ry)能量单位及相关单位程[12-13]，中心场条件下的径向薛定谔方程[12]为

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\ \frac{\partial}{\partial r}\right)+l(l+1)r^{-2}+\frac{1}{2}V(r)\right]R(r)=ER(r) \tag{1}$$

其中 $V(r)$ 为变形的莫尔斯势

$$V(r)=D_e\ [q-e^{-a(r-r_e)}]^2 \tag{2}$$

设

$$R(r)=\frac{u(r)}{r} \tag{3}$$

有

$$-\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}+l(l+1)\frac{u(r)}{r^{-3}}+V(r)\frac{u(r)}{2r}=E\frac{u(r)}{r}$$

* 收稿日期:2013-01-29　　网络出版时间:2014-01-16 08:16
作者简介:胡文江，男，副教授，研究方向为理论物理、电磁场理论，E-mail: huwj@cqupt.edu.cn
网络出版地址:http://www.cnki.net/kcms/detail/50.1165.N.20140116.0816.018.html

$$\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2}-l(l+1)\frac{u(r)}{r^{-2}}-V(r)\frac{u(r)}{2}+Eu(r)=0 \tag{4}$$

如果量子系统的轨道量子数 $l=0$,可以通过使用常用的数学物理方法求出定态波函数 $u(r)$的精确解析解。对于 $l\neq0$ 的定态,径向坐标 $r=0$ 为方程的非正则奇点,作者发现如果直接采用级数解法求解(4)式,方程(4)对应的指标方程的指标数程[14]将成为复数,直接导致径向坐标 r 成为复数,而且无穷多项的级数是发散的,不满足波函数的标准条件,即有界性、单值性、分段连续性。这也说明方程(4)没有严格的解析解。需要通过变换求解方程(4)的符合物理要求的近似解析解。

1.1 标度变换与级数展开

作变换 $x=\dfrac{r-r_e}{r_e}$,并且 $\alpha=ar_e$,由(4)式可得

$$\frac{\mathrm{d}^2u(x)}{\mathrm{d}x^2}+(\varepsilon_1-V_{eef}(x))u(x)=0 \tag{5}$$

其中

$$V_{eef}(x)=\varepsilon_2(e^{-2\alpha x}-2qe^{-\alpha x})+\frac{l(l+1)}{(1+x)^2} \tag{6}$$

$$\varepsilon_1=Er_e^2-\frac{D_er_e^2q^2}{2} \tag{7}$$

$$\varepsilon_2=\frac{D_er_e^2}{2} \tag{8}$$

将方程(5)中的离心势能项作级数展开

$$V_l(x)=\frac{\gamma}{(1+x)^2}=\gamma[1-2x+3x^2-O(x)] \tag{9}$$

这里 $\gamma=l(l+1)$。借助指数函数展开

$$\begin{aligned}\tilde{V}_l(x)&=\gamma[A_0+A_1e^{-\alpha x}+A_2e^{-2\alpha x}]=\\ &\gamma\left[A_0+A_1(1-\alpha x+\frac{\alpha^2x^2}{2!}-O(x^3))+A_2(1-2\alpha x+\frac{4\alpha^2x^2}{2!}-O(x^3))\right]=\\ &\gamma\left[A_0+A_1+A_2-(A_1+2A_2)\alpha x+(\frac{A_1}{2}+2A_2)\alpha^2x^2-O(x^3)\right]\end{aligned} \tag{10}$$

比较(9)和(10)式可得　$A_0=1-\dfrac{3}{\alpha}(1-\dfrac{1}{\alpha})$,　$A_1=\dfrac{4}{\alpha}-\dfrac{6}{\alpha^2}$,　$A_2=\dfrac{3}{\alpha^2}-\dfrac{1}{\alpha}$。

于是可用指数函数代替 $l(l+1)/(1+x)^2$,得到

$$\tilde{V}_{eef}(x)=A_0\gamma+(\gamma A_1-2q\varepsilon_2)e^{-\alpha x}+(\gamma A_2+\varepsilon_2)e^{-2\alpha x} \tag{11}$$

将(11)式代入(5)式有

$$\frac{\mathrm{d}^2u(x)}{\mathrm{d}x^2}+(\varepsilon_1-\gamma A_0+(2q\varepsilon_2-\gamma A_1)e^{-\alpha x}-(\varepsilon_2+\gamma A_2)e^{-2\alpha x})u(x)=0 \tag{12}$$

再作变量变换 $\rho=e^{-\alpha x}$,并且设定

$$\kappa^2=-\frac{\varepsilon_1-\gamma A_0}{\alpha^2},\quad \beta_1^2=-\frac{2q\varepsilon_2-\gamma A_1}{\alpha^2},\quad \beta_2^2=\frac{\varepsilon_2+\gamma A_2}{\alpha^2} \tag{13}$$

于是径向薛定谔方程具有如下形式

$$\frac{\mathrm{d}^2u(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}u(\rho)}{\mathrm{d}\rho}-\left(\frac{\kappa^2}{\rho^2}-\frac{\beta_1^2}{\rho}+\beta_2^2\right)u(\rho)=0 \tag{14}$$

1.2 拉普拉斯变换

考虑方程(14)当 $\rho\to0$ 和 $\rho\to\infty$时,径向波函数的渐近态中包含要素函数 $\rho^\kappa e^{-\beta_2\rho}$,可设

$$u(\rho)=\rho^\kappa e^{-\beta_2\rho}\zeta(\rho) \tag{15}$$

为了借助拉普拉斯变换求解(14)式,再将 $u(\rho)$改写成

$$u(\rho)=\rho^\sigma f(\rho) \tag{16}$$

这里

$$f(\rho)=\rho^{\kappa-\sigma}e^{-\beta_2\rho}\zeta(\rho) \tag{17}$$

在(17)式中引入指数因子 σ 的目的在于拉普拉斯变换的分析与求解。使用新设定后,方程(14)变为

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\left(\frac{2\sigma+1}{\rho}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\sigma^2-\kappa^2}{\rho^2}+\frac{\beta_1^2}{\rho}-\beta_2^2\right]f(\rho)=0 \tag{18}$$

由于(18)式中包含$\frac{\sigma^2-\kappa^2}{\rho^2}$项,对其实施拉普拉斯变换不能将(18)式变换为二阶常微分方程。如果选择的参变数$\sigma=\pm\kappa$,则$\frac{\sigma^2-\kappa^2}{\rho^2}$将从(18)式中消失,就可以对(18)式进行拉普拉斯变换。进一步分析显示:如果选择$\sigma=+\kappa$,(16)式中的$u(\rho)$将随$\rho\to\infty$而发散,因此必须选择$\sigma=-\kappa$,于是有

$$u(\rho)=\rho^{-\kappa}f(\rho) \tag{19}$$

(18)式变为

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2f(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2}+(1-2\kappa)\frac{\mathrm{d}f(\rho)}{\mathrm{d}\rho}+(\beta_1^2-\beta_2^2\rho)f(\rho)=0 \tag{20}$$

2.3 能量本征值

对(20)式实施拉普拉斯变换

$$L[f(\rho)]=y(s)=\int_0^\infty e^{-s\rho}f(\rho)\mathrm{d}\rho \tag{21}$$

根据拉普拉斯变换相关定理,可以证明

$$L[\rho f(\rho)]=-\frac{\mathrm{d}y(s)}{\mathrm{d}s},L[\frac{\mathrm{d}f(\rho)}{\mathrm{d}\rho}]=sy(s) \tag{22}$$

$$L[\rho\frac{\mathrm{d}^2f(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2}]=-2sy(s)-s^2\frac{\mathrm{d}y(s)}{\mathrm{d}s} \tag{23}$$

对(20)式实施拉普拉斯变换的结果,得到像函数$y(s)$所满足的一阶常微分方程如下

$$(s^2-\beta_2^2)\frac{\mathrm{d}y(s)}{\mathrm{d}s}+[(2\kappa+1)s-\beta_1^2]y(s)=0 \tag{24}$$

对(24)式的解比较容易求得

$$y(s)=C(s-\beta_2)^{\frac{2\kappa+1}{2}-\frac{\beta_1^2}{2\beta_2}}(s+\beta_2)^{\frac{2\kappa+1}{2}+\frac{\beta_1^2}{2\beta_2}} \tag{25}$$

其中C是积分常数。由(16)式和拉普拉斯变换的终值定理[15]

$$\lim_{\rho\to\infty}f(\rho)=\lim_{s\to0}sy(s) \tag{26}$$

当$\rho\to\infty$,由波函数标准条件(单值性、有界性、分段连续性),函数$u(\rho)$及$y(s)$收敛。终值定理表明,当$s=\beta_2$,像函数$y(s)$存在的必要条件是$\frac{2\kappa+1}{2}-\frac{\beta_1^2}{2\beta_2}$不能为负值,并且为了避免$s\to\beta_2$时$y(s)$多值分支的出现,必有

$$\frac{2\kappa+1}{2}-\frac{\beta_1^2}{2\beta_2}=n\quad(n=1,2,3,\cdots) \tag{27}$$

借助(6)~(8)和(13)式,可获得量子系统的显式能谱

$$E=\frac{D_eq^2}{2}-\frac{\gamma A_0}{r_e^2}-\left(\frac{(D_eqr_e^2-\gamma A_1)}{r_e\sqrt{2D_er_e^2+4\gamma A_2}}-a(n-\frac{1}{2})\right)^2= \\ \frac{D_eq^2}{2}-\frac{l(l+1)A_0}{r_e^2}-\left(\frac{(D_eqr_e^2-l(l+1)A_1)}{r_e\sqrt{2D_er_e^2+4l(l+1)A_2}}-a(n-\frac{1}{2})\right)^2 \tag{28}$$

1.4 径向波函数

对像函数$y(s)$进行逆拉普拉斯变换[15]产生$f(\rho)$,即

$$f(\rho)=L^{-1}[y(s)]$$

将(27)式代入(25)式

$$y(s)=C(s+\beta_2)^{-\Lambda}(s-\beta_2)^{-\Omega} \tag{29}$$

其中$\Lambda=(2\kappa+1)+n$,　$\Omega=-n$

由(16),(17)及(25)式,可对(29)式中的组成部分分别进行逆拉普拉斯变换

$$L^{-1}[(s+\beta_2)^{-\Lambda}]=g(\rho)=\frac{\rho^{\Lambda-1}e^{-\beta_2\rho}}{\Gamma(\Lambda)} \tag{30}$$

$$L^{-1}[(s-\beta_2)^{-\Omega}]=h(\rho)=\frac{\rho^{\Omega-1}e^{-\beta_2\rho}}{\Gamma(\Omega)} \tag{31}$$

于是逆拉普拉斯变换可被表示成卷积形式[16]

$$L^{-1}[y(s)]=f(\rho)=C(g(\rho)*h(\rho))=C\int_0^\rho g(\rho-\tau)h(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{32}$$

$$f(\rho)\text{ 变为 } f(\rho)=\frac{C}{\Gamma(\Omega)\Gamma(\Lambda)}e^{-\beta_2\rho}\int_0^\rho(\rho-\tau)^{\Lambda-1}\tau^{\Omega-1}e^{2\beta_2\tau}\mathrm{d}\tau \tag{33}$$

(33)式的积分将产生合流超几何函数[14]

$$\int_0^\rho(\rho-\tau)^{\Lambda-1}\tau^{\Omega-1}e^{2\beta_2\rho}\mathrm{d}\tau=\rho^{\Lambda+\Omega-1}\ {}_1F_1(\Omega,\Lambda+\Omega;2\beta_2\rho) \tag{34}$$

从而得到

$$f(\rho)=\frac{C}{\Gamma(\Omega)\Gamma(\Lambda)}e^{-\beta_2\rho}\rho^{\Lambda+\Omega-1}\,{}_1F_1(\Omega,\Lambda+\Omega;2\beta_2\rho)$$

$$f(\rho)=\frac{C}{\Gamma(\Omega)\Gamma(\Lambda)}e^{-\beta_2\rho}\rho^{2\kappa}\,{}_1F_1(-n,2\kappa+1;2\beta_2\rho) \tag{35}$$

(35)式代入(16)式,可获得径向波函数

$$f(\rho)=C'e^{-\beta_2\rho}\rho^{\kappa}\ {}_1F_1(-n,2\kappa+1;2\beta_2\rho) \tag{36}$$

其中 C' 为(35)式中的常数。

利用合流超几何函数与广义拉盖尔函数关系[14-16]

$${}_1F_1(-n,p+1;z)=\frac{n!\ \Gamma(p+1+n)}{\Gamma(p+1)}L_n^p(z) \tag{37}$$

于是径向波函数

$$u_{nl}(\rho)=C''e^{-\beta_2\rho}\rho^{\kappa}L_n^{2\kappa}(2\beta_2\rho) \tag{38}$$

利用广义拉盖尔函数关系的正交关系和径向波函数的正交归一性[14],可求得(38)式中的归一常数

$$C''=\left(\frac{n!\ (2\beta_2)^{2\kappa+1}}{\Gamma(2\kappa+n+1)}\right)^{1/2} \tag{39}$$

最后求得归一化径向波函数

$$u_{nl}(\rho)=\left(\frac{n!\ (2\beta_2)^{2\kappa+1}}{\Gamma(2\kappa+n+1)}\right)^{1/2}e^{-\beta_2\rho}\rho^{\kappa}L_n^{2\kappa}(2\beta_2\rho) \tag{40}$$

3 结论与讨论

本文研究了薛定谔方程中包含变形莫尔斯势的求解问题。通过标度变换并对离心势项作级数展开,忽略 3 阶及更高阶微小量,再合理设置径向波函数的幂指数因子,将原来的径向波函数方程不可能进行的拉普拉斯变换成为可能;通过拉普拉斯变换将原来的二阶微分方程转化为像函数满足的一阶常微分方程,再经过运用终值定理及合理分析,使得该量子系统的主量子数 n 必为正整数,从而进一步获得了该量子系统能谱的显示表示式;通过逆拉普拉斯变换并运用波函数的标准条件,获得了相应系统的归一化波函数。本文的研究仅仅局限于纯理论的分析与推导,从获得的能谱显示表示式来看,其能级间距为非均匀分布显然与普通莫尔斯势的结果是相符的,本文所得的结果有待从实验上精心设置变形莫尔斯势并且进行测试与分析,对上述结果进行验证。

参考文献:

[1] Znojil M. Singular anharmonicities and the analytic continued fractions[J]. J Math Phys, 1990, 31(1): 108-112.

[2] 陈昌远,刘友义. 非谐振子势的精确解和双波函数描述[J]. 物理学报, 1998, 47(4): 536-541.

Chen C Y, Liu Y Y. The exact solution of anharmonic oscillator potential and the description of double wave function[J]. Acta Physica Sinica, 1998, 47(4): 536-541.

[3] 蔡清. 具有势函数 $V_{(r)}=ar^{-10}+6r^{-6}$ 的分子晶体的 Hamiltonian 本征方程的精确解[J]. 原子与分子物理学报, 1996, 13(2): 234-239.

Cai Q. Exact solution of the Hamiltonial eigenvalue equation of the molecular crystal with potential $V_{(r)}=ar^{-10}+6r^{-6}$[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 1996, 13(2): 234-239.

[4] 马涛,倪致祥. 两类新的条件精确可解势及其非线性谱生成代数[J]. 物理学报, 1999, 48(6): 987-991.

Ma T, Ni Z X. Two new classes of conditionally exactly solvable potential and their nonlinear spectrum generating Aagebras[J]. Acta Phys Sin, 1999, 48(6): 987-991.

[5] 李文博. 用赝角动量方法求解同调谐振子[J]. 物理学报, 2001, 50(12): 2356-2359.

Li W B. Solving the eigenvalue equation of an isotonic os-

cillator by pseupo angular momentum method[J]. Acta Phys Sin, 2001, 50(12): 2356-2362.
[6] 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(6): 1163-1165.
Huang B W, Wang D Y. Study on energy spectra of the oscillator with nonharmonic potential[J]. Acta Phys Sin, 2002, 51(6): 1167-1170.
[7] 陆法林,陈昌远.非球谐振子势 Schrödinger 方程的精确解[J].物理学报,2004,53(4): 688-692.
Lu F L, Chen C Y. Exact solutions to the Schrödinger equation for the anharmonic oscillator potential[J]. Acta Phys Sin, 2004,53(4): 688-692.
[8] 胡先权,许杰,马勇,等.高次正幂与逆幂势函数的叠加的径向薛定谔方程的解析解[J].物理学报,2007, 56(9): 5060-5065.
Hu X Q, Xu J, Ma Y, et al. The analytic solution of the radial Schrödinger eqution for the superposed potential of high order power and inverse power potential functions[J]. Acta Phys Sin, 2007, 56(9): 5060-5065.
[9] Nikiforov A F, Uvarov V B. Special functions of mathematical physics: a unified introduction with applications[M]. Bassel: Birkhäuser, 1988: 1-33, 76-99, 295-380.
[10] 杨国春,陈世洁.用莫尔斯势对双原子分子振动光谱的理论研究[J].东北师大学报:自然科学版, 2004, 36(1): 50-54.
Yang G C, Chen S J. The theory study of Vibrating Spectrum of diatomic molecules by using P. M. morse potential[J]. Journal of Northeast University: Nature Science Edition, 2004, 36(1): 50-54.
[11] 梁昆淼.数学物理方法[M].北京:高等教育出版社,1979.
Liang K M. The method ofmathematica physics[M]. Beijing: Higher Education Press, 1979.
[12] 徐克尊.高等原子分子物理学[M].北京:科学出版社, 2000.
Xu K Z. Advanced atomic and molecular physics[M]. Beijing: Science Press, 2000.
[13] 王帮美,胡先权.非球谐环形振子势的 Schrödinger 方程的解析解[J].重庆师范大学学报:自然科学版, 2008, 25(2): 62-66.
Wang B M, Hu X Q. Analytic solution of the Schrdödinger equation in the non-spherical ring shaped oscillator[J]. Journal of Chongqing Normal University: Natural Science, 2008, 25(2) :62-66.
[14] 王竹溪,郭敦仁.特殊函数概论[M].北京:科学出版社, 1979.
Wang Z X, Guo D R. Introduction to special function[M]. Beijing: Science Press, 1979.
[15] Schiff J L. The laplace transform: theory and applications[M]. Germany: Springer-Verlag, SpringerLink, 1999.
[16] Gradshteyn I S, Ryzhik I M. Table of integreale, series, and products[M]. United States: Academic Press, 2007.

Operations Research and Cybernetics

The Approximate Analytical Solutions of the 3-dimensional Schroödinger for *q*-deformed Morse Potential

HU Wen-jiang
(College of Electroning, Chongqing University of Posts and Telecommunications, Chongqing 400065, China)

Abstract: Using Laplace integral transformation and the estimate transformation, the approximate analytical solutions of the 3-dimensional Schrödingere quation for q-deformed Morse potential are obtained. By means of expanding q-deformed Morse potential into the power series until the three order little terms and smaller are ignored; looking for reasonably the parameter of wave function, make its analytical solution not be existence change into the approximate analytical solution existence; using reasonably terminal-value theorem and the convolution of Laplace integral transformation, and by applying the orthogonal condition of general Laguerre function; the explicit press of energy spectrum and the radial normalization eigenfunction of the quantum system are acquired $u_{nl}(\rho)=\left(\frac{n!\,(2\beta_2)^{2\kappa+1}}{\Gamma(2\kappa+n+1)}\right)^{1/2} e^{-\beta_2\rho}\rho^{\kappa}L_n^{2\kappa}(2\beta_2\rho)$ and meanwhile, proper discussion and some conclusions are presented.

Key words: deformed Morse potential; Schrödinger equation; laplace integral transformation; eigenfunction

（责任编辑　游中胜）