

基于 Kratzer 势的 D 维薛定谔方程的超对称求解*

谭鑫, 罗光, 熊露霖

(重庆师范大学 物理与电子工程学院, 重庆 401331)

摘要:【目的】基于超对称量子力学方法,求解 D 维球对称修正 Kratzer 势和广义 Kratzer 势作用下的薛定谔方程。【方法】通过给出试探解的办法得到这两种势作用下的超势,确定了超对称伴随势,并得出对应的形状不变因子,进而解得两种势对应的 D 维球对称薛定谔方程。【结果】利用形状不变因子和升、降算符的作用分别得到了修正 Kratzer 势和广义 Kratzer 势作用下的 D 维球对称薛定谔方程的基态能量本征值与本征函数,进而得到激发态的能量本征值和本征函数。【结论】计算表明 D 维球对称条件下修正 Kratzer 势和广义 Kratzer 势作用下的薛定谔方程是可以通过超对称量子力学方法求解的,且当 $D=3$ 时,可得三维修正 Kratzer 势和广义 Kratzer 势的能量本征值与本征波函数。

关键词:超对称量子力学;超势;广义 Kratzer 势;修正 Kratzer 势

中图分类号:O413.1

文献标志码:A

文章编号:1672-6693(2021)02-0084-05

求解修正 Kratzer 势^[1]和广义 Kratzer 势^[2]作用下的薛定谔方程,对于研究固体中双原子分子的相关问题极为重要,它也是分子结构光谱、核运动轨迹、电子和原子以及分子间的碰撞、化学反应动力学等领域的研究基础^[3-5]。这两种势都是基于双原子分子振动的 Kratzer 势能函数^[6]。对于修正 Kratzer 势作用下薛定谔方程的求解方法,已有不少文献针对三维情况做了讨论,这些方法主要有级数解法和 Nikiforov-Uvarov(N-U)方法^[1,7]。关于广义 Kratzer 势的薛定谔方程的求解也有文献做了讨论,不过主要是利用了渐近迭代的方法来讨论 N 维情况下方程的求解问题^[2,8]。

在所有关于求解薛定谔方程的方法中,超对称量子力学是一种极为重要的方法^[9-10],但目前该方法并未应用到求解 Kratzer 势作用下的薛定谔方程。基于此,本文采用超对称量子力学方法,对修正的 Kratzer 势和广义 Kratzer 势作用下的 D 维球对称薛定谔方程的求解问题作了详细讨论,计算出了 $D(D \geq 2)$ 维的能量本征值和基态波函数,并给出了用升降算符表示的束缚态波函数的表达式。

1 修正 Kratzer 势的 D 维球对称径向薛定谔方程

修正 Kratzer 势的形式^[1]为:

$$V(r) = D_e \left(\frac{r-r_e}{r} \right)^2. \quad (1)$$

其中:参数 D_e 为离解能, r 为两原子核之间的距离, r_e 为平衡距离。对应的 D 维球对称的径向薛定谔方程为:

$$-\left[\frac{1}{r^{D-1}} \frac{d}{dr} \left(r^{D-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{L_{D-1}^2}{r^2} \right] R(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - D_e \left(\frac{r-r_e}{r} \right)^2 \right] R(r) = 0. \quad (2)$$

其中: $L_{D-1}^2 = l(l+D-2)$ 。为简便计,令 $u(r) = r^{\frac{D-1}{2}} R(r)$ 以及 $2\mu = \hbar^2 = 1$, $\epsilon = E - D_e$ 和 $\left(l + \frac{D-1}{2} \right) \left(l + \frac{D-3}{2} \right) +$

$D_e r_e^2 = L_D(L_D+1)$, 也即: $L_D = \sqrt{\left(l + \frac{D-2}{2} \right)^2 + D_e r_e^2} - \frac{1}{2}$ 。代入(1)式,化简可得:

$$-\frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left[\frac{L_D(L_D+1)}{r^2} - \frac{2D_e r_e}{r} - \epsilon \right] u(r) = 0, \quad (3)$$

* 收稿日期:2020-06-17 修回日期:2020-11-17 网络出版时间:2021-04-14 10:59

资助项目:国家自然科学基金青年项目(No. 11404046);重庆市自然科学基金(No. cstc2012jjA50018);重庆师范大学国家基金预研项目(No. 16XYY31)

第一作者简介:谭鑫,男,研究方向为理论物理,E-mail:txjlja@163.com;通信作者:罗光,男,教授,博士,E-mail:photoncn@cqnu.edu.cn

网络出版地址:https://kns.cnki.net/kcms/detail/50.1165.n.20210414.1011.002.html

即转化成为 Kepler 问题,可以用超对称方法予以讨论。

1.1 D 维修正 Kratzer 势超势的确定

按照 Infeld^[11] 的因子化思想,在采用超对称方法求解时,最重要的是先确定超势 $W(r, m)$ 。于是对于(3)式,可令:

$$V(r, m) = \frac{2D_e r_e}{r} - \frac{L_D(L_D + 1)}{r^2}。 \quad (4)$$

其中: m 为正整数,且遵循等差式的递减或递增变化。再引入超势 $W(x, m)$,从而可以定义升降算子:

$$A_m^\pm = W(r, m) \mp \frac{d}{dr}, \quad (5)$$

进而可以定义伴随哈密顿量 $H_m^\mp: H_m^\mp = A_m^\pm A_m^\mp = -\frac{d^2}{dr^2} + W^2(r, m) \mp \frac{dW(r, m)}{dr}$ 。

根据超势,还可以定义伴随势 $V_\pm(r, m)$:

$$V_\pm(r, m) = W^2(r, m) \mp \frac{dW(r, m)}{dr}。 \quad (6)$$

这里 $V_\pm(x, m)$ 也称为伙伴哈密顿量。这种伴随势 $V_\pm(r, m)$ 与 $V(r, m)$ 的关系为:

$$\begin{cases} V_-(r, m) = W^2(r, m) + \frac{dW(r, m)}{dr} = -V(r, m-1) - L(m) \\ V_+(r, m) = W^2(r, m) - \frac{dW(r, m)}{dr} = -V(r, m) - L(m) \end{cases}。 \quad (7)$$

其中: $L(m)$ 为关于 m 的函数,与 r 无关。进而可得:

$$W^2(r, m+1) - W^2(r, m) + \frac{dW(r, m+1)}{dr} + \frac{dW(r, m)}{dr} = L(m) - L(m+1)。$$

易得出伴随势遵循的形状不变性: $V_+(r, m) - V_-(r, m+1) = L(m+1) - L(m)$ 。

结合(4),(6)和(7)式,超势 $W(r, m)$ 的试探解的形式为^[12]: $W(r, m) = \frac{w_{-1}(r)}{m} + w_0(r) + m w_1(r)$ 。代入(6),(7)两式中,可得:

$$\begin{cases} w_{-1}(r) = q, q \text{ 为常数} \\ w_0(r) = 0 \\ w_1^2(r) + \frac{dw_1(r)}{dr} = 0 \end{cases},$$

且 $L(m) = \frac{-q^2}{m^2}$,进而可求出 $w_1(r)$ 的解为 $w_1(r) = \frac{1}{r}$, $V_\pm(r, m)$ 的形式为:

$$V_\pm(r, m) = W(r, m)^2 \mp \frac{dW(r, m)}{dr} = \frac{q^2}{m^2} + \frac{2q}{r} + \frac{m(m \pm 1)}{r^2},$$

且 $V(r, m) = -\left[\frac{q^2}{m^2} + \frac{2q}{r} + \frac{m(m+1)}{r^2} + L(m)\right] = -\frac{2q}{r} - \frac{m(m+1)}{r^2}$ 。

对比(4)式可知,在引入参数 m 以后, m 充当了 L_D 的角色。因此 m 的取值为:

$$m = L_D + 1, L_D + 2, \dots, \quad (8)$$

以及 $q = -D_e r_e$, 因此最终可确定 $W(r, m)$ 和 $L(m)$ 的形式分别为 $W(r, m) = -\frac{D_e r_e}{m} + \frac{m}{r}$, $L(m) = -\frac{(D_e r_e)^2}{m^2}$ 。

并且还可以选择径向量子数 $n_r = m - L_D (n_r = 1, 2, 3, \dots)$, 此时有:

$$V_+(r, m) - V_-(r, m+1) = L(m+1) - L(m) = (D_e r_e)^2 \left[\frac{1}{(n_r + L_D)^2} - \frac{1}{(n_r + L_D + 1)^2} \right],$$

即为伴随势遵循的形状不变性。

1.2 D 维修正 Kratzer 势的能量本征值

D 维修正 Kratzer 势的径向薛定谔方程的 H^- 能级为:

$$\epsilon_n^- = \sum_{i=1}^{n_r} (D_e r_e)^2 \left[\frac{1}{(L_D + i)^2} - \frac{1}{(i + L_D + 1)^2} \right] = (D_e r_e)^2 \left[\frac{1}{(L_D + 1)^2} - \frac{1}{(n_r + L_D + 1)^2} \right]。$$

式中: $n = n_r + L_D + 1$, 当 m 的取值最小时, 即 $m = L_D + 1$, 此时能量最小, 且基态能量为:

$$\epsilon_0 = L(m) = -\frac{(D_e r_e)^2}{m^2} = -\frac{(D_e r_e)^2}{1+L_D}.$$

最终径向薛定谔方程的能级为:

$$\epsilon_n = \epsilon_n^- + \epsilon_0 = (D_e r_e)^2 \left[\frac{1}{(L_D+1)^2} - \frac{1}{(n_r+L_D+1)^2} \right] - \frac{(D_e r_e)^2}{(L_D+1)^2} = -\frac{(D_e r_e)^2}{(n_r+L_D+1)^2}.$$

至此,恢复用 $2\mu, \hbar^2, E-D_e$ 的参数描述,由 $\epsilon = E-D_e$ 可得 D 维修正 Kratzer 势的能级:

$$E_{n_r, l} = D_e - \frac{2\mu (D_e r_e)^2}{\hbar^2 \left[n_r + \sqrt{\left(l + \frac{D-2}{2} \right)^2 + \frac{2\mu D_e r_e^2}{\hbar^2} + \frac{1}{2}} \right]^2}.$$

取 $D=3$,即为三维 Kratzer 振子的能量本征值为: $E_{n_r, l} = D_e - \frac{2\mu (D_e r_e)^2}{\hbar^2 \left[n_r + \sqrt{(l+1)^2 + \frac{2\mu D_e r_e^2}{\hbar^2} + \frac{1}{2}} \right]^2}$,与文献[7]用

N-U 方法给出的表达式一致。

1.3 D 维修正 Kratzer 势的本征波函数

由(8)式知, $m=L_D+1$ 对应的是基态,又由(5)式以及 $A_{L_D+1}^+ u_0 = 0$,可解得 $u_0 = N_0 e^{-\frac{D_e r_e}{(L_D+1)r} r^{L_D+1}}$,其中: N_0 为归一化系数。(2)式中的基态波函数为:

$$R(r) = \frac{u(r)}{r^{\frac{D-1}{2}}} = N_0 e^{-\frac{D_e r_e}{(L_D+1)r} r^{L_D+\frac{3-D}{2}}}.$$

激发态波函数可由升算符 $A_m^- = -\frac{D_e r_e}{m} + \frac{m}{r} + \frac{d}{dr}$ 作用得:

$$R_{n_r, L_D}(r) \propto A_m^- A_{m+1}^- \cdots A_{m+n_r}^- \left[e^{-\frac{D_e r_e}{(L_D+1+n_r)r} r^{L_D+\frac{3-D}{2}+n_r}} \right].$$

若 $D=3$,即为三维 Kratzer 振子的本征波函数:

$$R_{n_r, L_D}(r) \propto A_m^- A_{m+1}^- \cdots A_{m+n_r}^- \left\{ \exp \left[-\frac{D_e r_e}{\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + D_e r_e^2 + \frac{1}{2} + n_r}} \cdot r \right] r^{\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + D_e r_e^2 - \frac{1}{2} + n_r}} \right\},$$

与文献[7]用 N-U 方法给出的表达式完全相同。

2 广义 Kratzer 势的 D 维球对称径向薛定谔方程

因为修正后的 Kratzer 势在预测红外波段吸收光谱时仍有较大误差^[13],有研究者提出广义 Kratzer 势^[2],这种势被定义为:

$$V(r) = \frac{a}{r^2} - \frac{b}{r} + c. \quad (9)$$

当 $a=D_e r_e^2, b=2D_e r_e, c=D_e$ 时,(9)式变为修正 Kratzer 势。 D 维球对称的径向薛定谔方程为:

$$-\left[\frac{1}{r^{D-1}} \frac{d}{dr} \left(r^{D-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{L_{D-1}^2}{r^2} \right] R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[\left(\frac{a}{r^2} - \frac{b}{r} + c \right) - E \right] R(r) = 0. \quad (10)$$

式中: $L_{D-1}^2 = l(l+D-2)$,为简便计,令 $u(r) = r^{\frac{D-1}{2}} R(r)$ 以及 $2\mu = \hbar^2 = 1, \epsilon = E - c$ 和 $\left(l + \frac{D-1}{2} \right) \left(l + \frac{D-3}{2} \right) + a =$

$L_D(L_D+1)$,即: $L_D = \sqrt{\left(l + \frac{D-2}{2} \right)^2 + a} - \frac{1}{2}$,代入(10)式,化简可得:

$$-\frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left[\frac{L_D(L_D+1)}{r^2} - \frac{b}{r} - \epsilon \right] u(r) = 0,$$

这仍然属于 Kepler 问题,可以用超对称办法讨论。

2.1 D 维广义 Kratzer 势超势的确定

与 1.1 节中情况一致,这里 $V(r, m) = \frac{L_D(L_D+1)}{r^2} - \frac{b}{r}$,只是用 b 替换了 $2D_e r_e$,因此 $W(r, m)$ 和 $L(m)$ 的解

的形式分别为 $W(r, m) = -\frac{b}{2m} + \frac{m}{r}$ 和 $L(m) = -\frac{b^2}{4m^2}$,进而有 $V_{\pm}(r, m)$ 的形式:

$$V_{\pm}(r, m) = W(r, m)^2 + \frac{dW(r, m)}{dr} = \frac{b^2}{4m^2} + \frac{b}{r} + \frac{m(m \pm 1)}{r^2},$$

且 $V(r, m) = -\frac{b}{r} - \frac{m(m+1)}{r^2}$, 这里 m 依然充当了 L_D 的角色。因此 m 的取值应该为 $m = L_D + 1, L_D + 2, \dots$, 选择参数 $n_r = m - L_D$ ($n_r = 1, 2, 3, \dots$) 为径向量子数, 此时有:

$$V_+(r, m) - V_-(r, m+1) = L(m+1) - L(m) = \frac{b^2}{4} \left[\frac{1}{(n_r + L_D)^2} - \frac{1}{(n_r + L_D + 1)^2} \right],$$

即为伴随势遵循的形状不变性。

2.2 D 维广义 Kratzer 势的能量本征值

由上述讨论可得径向薛定谔方程的 H^- 能级:

$$\epsilon_n^- = \sum_{i=1}^{n_r} \frac{b^2}{4} \left[\frac{1}{i + L_D + 1} - \frac{1}{i + L_D} \right] = \frac{b^2}{4} \left[\frac{1}{(L_D + 1)^2} - \frac{1}{(n_r + L_D + 1)^2} \right].$$

式中: $n = n_r + L_D + 1$, 当 m 的取值最小时, 即 $m = L_D + 1$, 此时能量最小, 且基态能量为:

$$\epsilon_0 = L(m) = -\frac{b^2}{4m^2} = -\frac{b^2}{4(L_D + 1)^2}.$$

最终径向薛定谔方程的能级为:

$$\epsilon_n = \epsilon_n^- + \epsilon_0 = \frac{b^2}{4} \left[\frac{1}{(L_D + 1)^2} - \frac{1}{(n_r + L_D + 1)^2} \right] - \frac{b^2}{4(L_D + 1)^2} = -\frac{b^2}{4(n_r + L_D + 1)^2}.$$

至此, 恢复用 $2\mu, \hbar^2, E - D_e$ 的参数描述, 由 $\epsilon = E - c$ 式可得 D 维广义 Kratzer 势的能级:

$$E_{n_r, l} = c - \frac{2\mu b^2}{2\hbar^2 \left[n_r + \sqrt{\left(l + \frac{D-2}{2} \right)^2 + \frac{2\mu a}{\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right]^2}.$$

当 $D=3$ 时, 上式即为三维广义 Kratzer 势的能量本征值: $E_{n_r, l} = c - \frac{\mu b^2}{2\hbar^2 \left[n_r + \sqrt{(l+1)^2 + \frac{2\mu a}{\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right]^2}$, 与文献[2]

给出的表达式完全一致。

2.3 D 维广义 Kratzer 势的本征波函数

根据(8)式, $m = L_D + 1$ 对应的是基态, 又由(5)式以及 $A_{L_D+1}^+ u_0 = 0$ (用 b 替换 $2D_e r_e$), 可解得 $u_0 = N_0 e^{-\frac{b}{2(L_D+1)r}} r^{L_D+1}$, 其中: N_0 为对应的归一化系数。(10)式中的基态波函数为: $R(r) = \frac{u(r)}{r^{\frac{D-1}{2}}} = N_0 e^{-\frac{b}{2(L_D+1)r}} \cdot$

$r^{L_D + \frac{3-D}{2}}$ 。激发态波函数可由升算符 $A_m^- = -\frac{b}{2m} + \frac{m}{r} + \frac{d}{dr}$ 作用可得:

$$R_{n_r, L_D}(r) \propto A_m^- A_{m+1}^- \cdots A_{m+n_r}^- \left[e^{-\frac{b}{2(L_D+1+n_r)r}} r^{L_D + \frac{3-D}{2} + n_r} \right].$$

当 $D=3$ 时, 即为三维 Kratzer 振子的本征波函数:

$$R_{n_r, L_D}(r) \propto A_m^- A_{m+1}^- \cdots A_{m+n_r}^- \left\{ \exp \left[-\frac{b}{2 \left[\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + a + \frac{1}{2} + n_r} \right]} \cdot r \right] r^{\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + a - \frac{1}{2} + n_r}} \right\},$$

与文献[2]用因子化方法给出的表达式完全相同。

3 总结

关于修正 Kratzer 势和广义 Kratzer 势作用下的薛定谔方程求解, 根据超对称量子力学的思想, 主要有以下 3 个方面的结论:

1) 对于修正 Kratzer 势和广义 Kratzer 势作用下的 D 维球对称条件下的薛定谔方程的超对称量子力学方法中, 与常规的拼凑超势方法不同, 引入了参变量 m 的相关讨论, 进而确定了超势 $W(r, m)$ 。

2) 由于 m 的引入, 对于伴随势的形状不变性的导出也显得非常直接, 与常规的形状不变性讨论仅限于 $V_+(r, \alpha) - V_-(r, \alpha+1)$ 的形式不同, 给出了通项形式的描述形状不变性的表达式。

3) 利用升、降算符的作用分别得到了修正 Kratzer 势和广义 Kratzer 势作用下的 D 维球对称条件下的薛定

谓方程的基态时的能量本征值和本征函数,进而得到激发态的能量本征值和本征函数。特别讨论了当 $D=3$ 时的能量本征值和本征函数,并与文献中的方法得到的结果一致。

参考文献:

- [1] PLÍVA J. A closed rovibrational energy formula based on a modified Kratzer potential[J]. Journal of Molecular Spectroscopy, 1999,193:7-14.
- [2] OYEWUMI K J. Realization of the spectrum generating algebra for the generalized Kratzer potentials[J]. International Journal of Theoretical Physics,2010,49(6):1302-1316.
- [3] 何祚庥. 基本物质科学与辐射技术[M]. 济南:山东教育出版社,2000.
HE Z X. Basic material science and radiation technology[M]. Jinan:Shandong Education Press,2000.
- [4] 朱正和,俞华根. 分子结构与分子势能函数[M]. 北京:科学出版社,1997.
ZHU Z H, YU H G. Molecular structure and molecular potential energy function[M]. Beijing:Science Press,1997.
- [5] 刘若庄. 量子化学引论[M]. 北京:人民教育出版社,1984.
LIU R Z. Introduction to quantum chemistry[M]. Beijing:People's Education Press,1984.
- [6] 福里格. 实用量子力学[M]. 宋孝同,高琴,梁仙翠,译. 北京:人民教育出版社,1981.
FLÜGGE S. Practical quantum mechanics[M]. SONG X T, GAO Q, LIANG X C, translation. Beijing:People's Education Press, 1981.
- [7] BERKDEMIR C, BERKDEMIR A, HAN J G. Bound state solutions of the Schrödinger equation for modified Kratzer's molecular potential[J]. Chemical Physics Letters,2006,417(4/5/6):326-329.
- [8] DURMUS A. Non-relativistic treatment of diatomic molecules interacting with a generalized Kratzer potential in hyperspherical coordinates[J]. Journal of Physics A:Mathematical and Theoretical,2011,44(15):155205.
- [9] SOCORRO J, REYESM A, MORA C V, et al. Supersymmetric quantum mechanics; two factorization schemes and quasi-exactly solvable potentials[EB/OL]. (2019-02-05)[2021-03-25]. <https://arxiv.org/pdf/1902.01782.pdf>.
- [10] 傅美欢. 具有广义 Kratzer 势的三维薛定谔方程的精确解[J]. 大学物理,2018,37(4):3-5.
FU M H. Exact solutions of three-dimensional Schrödinger equation with generalized Kratzer potential[J]. College Physics, 2018,37(4):3-5.
- [11] INFELD L. The factorization method[J]. Reviews of Modern Physics,1951,1(23):21-68.
- [12] CARINENA J F, RAMO A. Riccati equation, factorization method and shape invariance[J]. Reviews in Mathematical Physics, 2000,12(10):1279-1304.
- [13] FERNÁNDEZ M F. Comment on 'Non-relativistic treatment of diatomic molecules interacting with generalized Kratzer potential in hyperspherical coordinates'[J]. Journal of Physics A:Mathematical and Theoretical,2011,44(34):348001.

Supersymmetric Solution of D -Dimensional Schrödinger Equation Based on Kratzer Potential

TAN Xin, LUO Guang, XIONG Lulin

(School of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China)

Abstract: [Purposes]Based on the supersymmetric quantum mechanics method, the D -dimensional Schrödinger equation under the modified Kratzer potential and the generalized Kratzer potential is solved. [Methods] The partner potentials are given by the superpotential which obtained by giving trial solution. Further, from the partner potentials, additive constant is obtained. [Findings]The energy eigenvalue and eigenfunction of the ground state for the modified Kratzer potential and the generalized Kratzer potential are derived by using the additive constant and the lowering and raising operators, then the energy eigenvalues and eigenfunctions of the excited state are obtained respectively. [Conclusions]The calculations show that the D -dimensional Schrödinger equation under the modified Kratzer potential and the generalized Kratzer potential can be solved by the supersymmetric quantum mechanics method. The energy eigenvalues and eigenfunctions of 3-dimensional modified Kratzer potential and generalized Kratzer potential will be explicit when $D=3$.

Keywords: supersymmetric quantum mechanics; superpotential; generalized Kratzer potential; modified Kratzer potential

(责任编辑 许 甲)