第27卷 第9期 高能物理与核物理 Vol.27, No.9
2003年9月 HIGH ENERGY PHYSICS AND NUCLEAR PHYSICS Sep., 2003

含时库仑势和线性势的薛定谔方程的求解*

宋小会[1] 杨新娥[1,2;1)] 王平[1]
1(天津大学理学院应用物理系 天津 300072)
2(南开大学天津大学刘徽应用数学中心 天津 300072)

摘要 利用Burgan等人的时空变换方法对一类特殊形式的具有含时库仑势加线性项的薛定谔方程进行了分析和计算，并进一步讨论了更普遍形式的含时势 $V(r,t)=-\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}}r}+\sum_{k=1}^{n}\frac{a_k r^k}{\xi^{\frac{k}{2}+1}}$（其中 $\xi=at^2+bt+c$，$a_0,a_1,a_2,\cdots,a_n,a,b,c$ 是满足一定关系的常数）的波函数.

关键词 薛定谔方程 时空变换方法 波函数

1 引言

含时薛定谔方程的精确求解长期以来一直是量子力学的一个重要任务，前人用了许多方法来讨论这一问题[1—5]. 例如Burgan[1]等人用时空变换方法把含时谐振子变换为自由粒子形式求得了波函数，Gueedes[2]应用Lewis-Riesenfeld[3]的量子不变量理论讨论了含时线性势的薛定谔方程的精确解，Song[4]则利用幺正变换方法计算了含时谐振子加或不加平方反比项时的波函数，Ray[5]推广Burgan等人[1]的方法对含时势 $V(r,t)=g_2(t)x^2+g_1(t)x+g_0(t)$（其中 $g_2(t)$, $g_1(t)$, $g_0(t)$ 是任意含时函数）的精确解进行了讨论. 本文应用Burgan[1]等人的方法对形如 $V(r,t)=-\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}}r}+\frac{a_1 r}{\xi^{\frac{3}{2}}}$（其中 $\xi=at^2+bt+c$，a_0, a_1,a,b,c 是满足一定关系的常数）含时库仑势和含时线性项的薛定谔方程进行了分析和计算，并进一步讨论了更普遍形式的含时势 $V(r,t)=-\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}}r}+\sum_{k=1}^{n}\frac{a_k r^k}{\xi^{\frac{k}{2}+1}}$（$a_0,a_1,\cdots a_n$ 是满足一定关系的常数）的求解问题.

2 薛定谔方程的求解

考虑如下含时薛定谔方程

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\Psi+\left(-\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}}r}+\frac{a_1 r}{\xi^{\frac{3}{2}}}\right)\Psi=\mathrm{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t},\quad(1)$$

其中

$$\xi=at^2+bt+c,\quad(2)$$

a_0,a_1,a,b,c 是常数. 用分离变量方法求解上述方程，取球坐标系，令方程(1)的解为如下形式：

$$\psi(r,\theta,\varphi,t)=\frac{1}{r}R(r,t)Y_{lm}(\theta,\varphi),\quad(3)$$

其中 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是球谐函数，而 $R(r,t)$ 满足方程

$$-\frac{\partial^2 R}{2\partial r^2}+\left(V(r,t)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R=\mathrm{i}\frac{\partial R}{\partial t},\quad(4)$$

其中

$$V(r,t)=-\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}}r}+\frac{a_1 r}{\xi^{\frac{3}{2}}}.$$

下面用Burgan等人的时空变换方法来求解方程(4)，为此作如下变换：

$$r'=\frac{r}{C(t)},\ t'=D(t),\quad(5)$$

$$R(r,t)=B(t)\exp(\mathrm{i}r^2K(t))R_1(r',t').\quad(6)$$

2003-01-20收稿，2003-04-08收修改稿
* 南开大学天津大学刘徽应用数学中心资助
1) E-mail: yangxine@eyou.com

这里 $C(t), D(t), B(t), K(t)$ 是待定函数. 将表达式(5)和(6)代入方程(4),则方程(4)变为

$$-\frac{1}{2}\left[2\mathrm{i}BKR_1 + B(2\mathrm{i}rK)^2 R_1 + \frac{4\mathrm{i}B}{C}rKR_{1r'} + \frac{B}{C^2}R_{1r'r'}\right] + \left(V(r,t) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)BR_1 = \mathrm{i}\dot{B}R_1 - Br^2\dot{K}R_1 - \mathrm{i}B\frac{r\dot{C}}{C^2}R_{1r'} + \mathrm{i}B\dot{D}R_{1t'}. \quad (7)$$

这里"·"表示对时间 t 的求导,由于 $K(t)$, $D(t)$, $B(t)$是待定含时函数,可以适当选取以使方程(7)的形式变得简单,这里取

$$K(t) = \frac{\dot{C}}{2C},\quad D(t) = \int \frac{1}{C^2}\mathrm{d}t,\quad B(t) = \frac{1}{\sqrt{C}}, \quad (8)$$

代入方程(7)得

$$-\frac{1}{2}R_{1r'r'} + \left[VC^2 + \frac{1}{2}C\ddot{C}r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2}C^2\right]R_1 = \mathrm{i}R_{1t'}. \quad (9)$$

令 $C(t) = \xi^{1/2}$,并由式(5),(6),方程(9)变为

$$-\frac{1}{2}R_{1r'r'} + \left[\frac{4ac-b^2}{8}r'^2 + a_1 r' + \frac{a_0}{r'} + \frac{l(l+1)}{r'^2}\right]R_1 = \mathrm{i}\frac{\partial R_1}{\partial t'}. \quad (10)$$

可以看到,式(10)是以 r', t' 为变量的方程,可将其分离变量为

$$R_1(r',t') = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et'}R_2(r'), \quad (11)$$

其中 $R_2(r')$满足方程

$$-\frac{1}{2}R_{2r'r'} + \left[\frac{4ac-b^2}{8}r'^2 + a_1 r' + \frac{a_0}{r'} + \frac{l(l+1)}{r'^2}\right]R_2 = ER_2(r'). \quad (12)$$

至此,我们用 Borgan 等人的方法将含时势 $V(r,t)$变为了关于新变量 r'的不含时形式,把对含时方程(1)的求解转化为求定态方程(12)的解. 本文将用文献[6]中的变量变换方法对方程(12)的解进行讨论. 作如下变换:

$$r' = u^2,\ R_2(u) = \sqrt{u}\sigma(u), \quad (13)$$

将(13)式所表示的变换代入方程(12),得到 $\sigma(u)$所满足的方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma(u)}{\mathrm{d}u^2} - \left[\frac{8l(l+1)+\frac{3}{4}}{u^2} - 8a_0 - 8Eu^2 + 8a_1u^4 + (4ac-b^2)u^6\right]\sigma(u) = 0. \quad (14)$$

可设方程(14)的形式解为[7]

$$\sigma(u) = u^p\exp(-b_1u^2 - b_2u^4), \quad (15)$$

其中 p, b_1, b_2 是待定系数,把(15)式代入方程(14)中比较同次幂系数可以求得

$$p = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1+8l(l+1)}, \quad (16a)$$

$$b_1 = \frac{2a_1}{\sqrt{4ac-b^2}}, \quad (16b)$$

$$b_2 = \frac{\sqrt{4ac-b^2}}{4}, \quad (16c)$$

$$E_p = -\frac{1}{2}[b_1^2 - b_2(2p+3)]. \quad (16d)$$

这里要求 $4ac-b^2>0$,并且 a_0, a_1 需满足关系式

$$a_0 = \frac{a_1(2p+1)}{2\sqrt{4ac-b^2}}. \quad (16e)$$

由以上计算,得到方程(12)的解如下:

$$R_2(r') = r'^{\frac{p}{2}+\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{2a_1}{\sqrt{4ac-b^2}}r' - \frac{\sqrt{4ac-b^2}}{4}r'^2\right]. \quad (17)$$

最后,得到满足含时薛定谔方程(1)的波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi,t) = \frac{Y(\theta,\varphi)}{r\xi^{\frac{1}{4}}}\exp\left[\mathrm{i}\frac{r^2}{4\xi}(2at+b)\right]\times \left(\frac{r}{\xi^{\frac{1}{2}}}\right)^{\frac{p}{2}+\frac{1}{4}}\exp\left[-\left(b_1\frac{r}{\xi^{\frac{1}{2}}} + b_2\frac{r^2}{\xi} + \mathrm{i}E_pD(t)\right)\right]. \quad (18)$$

其中 b_1, b_2, p, E_p, $D(t)$满足式(16),(8),为了保证当 $r\to 0$ 时,$\psi\to 0$,(17)式中的 p 应取正值,而由式(18)可知当 $r\to\infty$时,波函数 ψ 为有限值. 这一含时系统更多的性质如几何相位等都可由波函数(18)式求得.

3 结论和讨论

含时薛定谔方程能够精确求解的不多,人们在讨论含时库仑势加线性项的薛定谔方程时,往往将线性项部分当作微扰来计算,求得的波函数和能谱都是近似的,本文用 Burgan 等人的方法,通过选择适当的变换把含时库仑势和含时线性项转化为关于新变量的不含时势,将复杂的含时薛定谔方程转化为相对简单的定态薛定谔方程来求解,求出了方程(1)的波函数(18)式. 在对定态薛定谔方程(12)进行求解时,可以看到只有当系数满足一定的关系时方程才有解.

在这里所讨论的哈密顿量 $H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + \left(-\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}} r} + \frac{a_1 r}{\xi^{\frac{3}{2}}}\right)$ 可以化为

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{C^2(t)} V\left(\frac{r}{C(t)}\right) \tag{19}$$

的形式. 其中 $V\left(\frac{r}{C(t)}\right) = -\frac{a_0 C(t)}{r} + \frac{a_1 r}{C(t)}$, 即 $V(r') = -\frac{a_0}{r'} + a_1 r'$, 这一形式的势被称为 Cornell 势[8], Cornell 势是一种很有用的夸克势模型, 由线性的禁闭位和来自于单胶子交换的库仑形式的位组成, 能很好的再现重介子的自旋平均能谱, 在解释强子谱上获得了很大成功[9].

可以看到(19)式与文献[10]中式(1.1)的形式相同, 由文献[10]的讨论可知, 其对应的牛顿运动方程可化为

$$\frac{d^2 r'}{dt'^2} = -\frac{\partial\left[V(r') + \frac{1}{8}(4ac - b^2) r'^2\right]}{\partial r'}, \tag{20}$$

其物理意义为: 如果以新的坐标变量 r' 代替 r, 以新的时间变量 t' 代替 t, 则在这一新的参考系中, 可以认为粒子是在一个具有势 $V(r')$ 和一个中心力 $-\frac{4ac - b^2}{4} r'$ 的系统中运动. 由条件 $4ac - b^2 > 0$ 可知这一中心力吸引粒子向中心运动. 在研究一个粒子在一个不断膨胀的球腔中受到反复弹性碰撞的物理系统时, 线性形参数 $C(t)$ 对应于系统的特殊膨胀率, 从而使得求该系统的特殊膨胀率的计算变得简单.

当 $t \to \infty$ 时, 如果 $a > 0$ 则 t' 是有限值, 这时在原坐标系中 dr/dt 有一个恒定的终极速度, 当球腔膨胀的速度大于这一终极速度时, 粒子的运动将落后于球腔的膨胀, 变得相对的自由. 当 $b^2 = 4ac$ 时, 中心力消失, 粒子可看作在一保守势场中运动(在新的坐标系下). 如果 $a = 0$, $b > 0$, 则当 $t \to \infty$ 时, $t' \to \infty$, 膨胀速度 $dC(t)/dt$ 将减小, 粒子将在这一系统中一直运动下去, 如果 $a < 0, c > 0$, $C(t)$ 将在某个时间 t_0 变为零, 当 $t \to t_0$ 时 $t' \to \infty$, 粒子的运动将被限制在一个封闭场中.

用 Borgan 等人的方法我们可以进一步讨论如下更普遍形式含时势的求解:

$$V(r,t) = -\frac{a_0}{r\xi^{\frac{1}{2}}} + \sum_{k=1}^{n} \frac{a_k r^k}{\xi^{\frac{k}{2}+1}}, \tag{21}$$

其中 $a_0, a_1, \cdots a_n$ 为常数, 把式(21)代入方程(9)中并由变换 $r' = r/\xi^{1/2}$ 可得

$$-\frac{1}{2} R_{1r'r'} + \left[\frac{4ac - b^2}{8} r'^2 + \frac{l(l+1)}{r'^2} + \frac{a_0}{r'} + a_1 r' + a_2 r'^2 + \cdots + a_n r'^n\right] R_1 \quad \mathrm{i}\frac{\partial R_1}{\partial t'},$$

对方程(22)分离变量并作代换

$$r' = u^2,\ R_2 = \sqrt{u} u^p \exp(-b_1 u^2 - b_2 u^4 - \cdots - b_{n+1} u^{2(n+1)}), \tag{23}$$

其中 $p, b_1, b_2, \cdots, b_n$ 是待定系数, 代入方程(22)中比较同次幂系数即可求得 $p, b_1, b_2, \cdots, b_n$ 的值, 从而可求得势 $V(r,t)$ 所描述系统的波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi,t) = \frac{Y(\theta,\varphi)}{r\xi^{\frac{1}{4}}} \exp\left[\mathrm{i}\frac{r^2}{4\xi}(2at + b)\right] \times \left(\frac{r}{\xi^{\frac{1}{2}}}\right)^{\frac{p}{2}+\frac{1}{4}} \exp\left[-\left(b_1 \frac{r}{\xi^{\frac{1}{2}}} + b_2 \frac{r^2}{\xi} + \cdots b_n \frac{r^n}{\xi^{\frac{n}{2}}} + \mathrm{i}E_p D(t)\right)\right].$$

其中系数 $a_0, a_1, \cdots a_n$ 也需满足形如式(16e)的一组方程.

当 $K = 4$ 时, 由前面的讨论可知, 在新的参考系下, 粒子可看作在一个电磁场[6] ($V_{\text{eff}}(r') = \frac{l(l+1)}{r'^2} - \frac{a_0}{r'} + a_1 r' + a_2 r'^2 + a_3 r'^3 + a_4 r'^4$) 和一个中心力场中运动.

参考文献(References)

1 Burgen J R, Fiex M R, Fijalkow E et al. Phys. Lett., 1979, **74A**(1, 2):11

2 Guedes I. Phys. Rev., 2001, **63A**(3):034102

3 Lewis Jr. H R, Riesenfeld W B. J. Math. Phys., 1969, **10**:1458

4 Song Dae-Yup. Phys. Rev., 2000, **62A**(1):014103

5 John R. Ray. Phys. Rev., 1982, **A28**(8):729

6 de Souza C Farina, de Souza Dutra A. Phys. Lett., 1987, **A123**(6):297

7 Flessas G P, Das K. Phys. Lett., 1980, **A78**(1):19

8 Eichten E et al. Phys. Rev., 1978, **D17**:3090; Phys. Rev., 1980, **D21**:203

9 LIU Bo, SHEN Peng-Nian, JIANG Huan-Qing. HEP & NP, 1998, **22**(6):556 (in Chinese)
(刘波,沈彭年,姜焕清. 高能物理与核物理,1998,**22**(6):556)

10 Berry M V, Klein G.J. Phys., 1984, **A17**:1805

Solution of Time-Dependent Coulomb Potential with Linear Potential*

SONG Xiao-Hui[1] YANG Xin-E[1,2;1)] WANG Ping[1]

1 (School of Science, Department of Applied Physics, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

2 (LiuHui Center for Applied Mathematics, Nankai University & Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract In this paper, we make use of the Burgan et al's method to derive the solution of the time dependent coulomb potential and linear potential with a special form, $V(r,t) = -\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}} r} + \frac{a_1 r}{\xi^{\frac{3}{2}}}$, (where $\xi = at^2 + bt + c$, a_0, a_1, a, b, c are parameters with certain relations) and furthermore we discussed the wave function for $V(r,t) = -\frac{a_0}{\xi^{\frac{1}{2}} r} + \sum_{k=1}^{n} \frac{a_k r^k}{\xi^{\frac{k}{2}+1}}$ (where a_0, a_1, $\cdots$, a_n are constants), Meanwhile we analyzed the physical meaning of this special potential and the importance of the linear scaling factors $C(t)$ in the study of repeated elastic reflections of a particle in an expanding spherical cavity.

Key words Schrödinger equation, space and time variables, wave function

Received 9 January 2003, Revised 8 April 2003

* Supported by LiuHui Center for Applied Mathematics, Nankai University and Tianjin University

1) E-mail: yangxine@eyou.com