

具有非局域势的量子力学模型*

张德兴 蔡绍洪

(贵州大学物理系 贵阳 550025)

摘要 利用超对称性(SUSY)量子力学讨论能够精确求解的具有非局域势的量子力学模型,并表示出能够精确求解的局域势模型的一个简单非局域势的表示形式,精确地得到能量本征函数和本征值.

关键词 非局域势 超对称性 量子力学模型

1 非局域势和超对称性

在原子和分子物理^[1], 固态物理^[2]以及核物理中,非局域势模型有着重要的应用. 在研究延展性物体,如聚合物和蛋白质的统计性质中,也常应用到非局域势.

本文利用超对称性(SUSY)的量子力学讨论能够精确求解的具有非局域势的量子力学模型. SUSY的研究是近年来广泛发展起来的,它已被应用到有关形状不变性,逆向散射,由超对称性产生的WKB方法,以及非均匀伊辛模型的表面结晶现象的精确求解.

在SUSY量子力学中,一个给定的哈密顿函数和它的超对称性对子有相同的光谱,除了零能量基态以外,在通常的情形中,成对的哈密顿函数中任一个有一个零能量基态或者都没有零能量基态. 在此基态中,超对称性分别对应地为未被破缺或被破缺. Dunne等结合周期性势考虑了超对称性量子力学模型,发现对于超对称性的对子有零能量基态是可能的. 然而,它们的基态是不能正常化的,因为是Bloch态. 本文考虑了具有局域和非局域势的超对称性量子力学模型,并表示出能够精确求解的局域模型的一个简单的非局域势的表示形式,精确得到能量本征函数和本征值. 此外,超对称性的对子在某一参数区域内可能有能够正常化的零能量基态,此基态与具有非周期性的或周期性的势的局域模型形成对比.

2 具有非局域势的量子力学模型

一维的具有局域势和非局域势不依赖于时间的薛定谔方程在坐标表象中为

2001-10-30 收稿

* 贵州省科学基金(003066)资助

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_-(x) \psi(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} dy v_-(x, y) \psi(y) = E_- \psi(x), \quad (1)$$

在时间反转下的不变性和几率守恒要求, $V_-(x)$ 和 $v_-(x, y)$ 是实数的, 并且 $v_-(x, y)$ 对于 x 和 y 是对称的. 在 Hartree-Fock 近似中, 非局域势(或固有自能)自然地由给定的外部局域势和两体相互作用来确定^[3]. 本文假定, 势在开始时被给定.

假定 $\psi_n(x)$ 是一个局域势问题和实的正常化的本征态, 而此问题可用下列方程表示:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + V_-(x) \psi_n(x) = E_n^{(0)} \psi_n(x), \quad (2)$$

$\psi_n(x)$ 的节点数为 n . 于是, 非局域势 $v_-(x, y)$ 的一个平凡选择具有形式

$$v_-(x, y) = \sum_n \epsilon_n \psi_n(x) \psi_n(y), \quad (3)$$

式中 ϵ_n 为实数. 于是, $\psi_n(x)$ 是具有本征值 $E_n = E_n^{(0)} + \epsilon_n$ 的(1)式的本征函数. 因此, 我们看到, 即使在局域模型中 $E_n^{(0)} < E_{n+1}^{(0)}$, 而 E_{n+1} 在非局域势的模型中可能不成立, 也可以考虑依赖于势 $v(\hat{p})$ 的一个动量. 在坐标表象中, 它可以替换为以一个非局域势

$$v_-(x, y) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-y)/\hbar} v(p) \quad (4)$$

来表示. 上式依赖于差 $x - y$. 进一步限制局域势 $V_-(x)$ 是谐和的, 那么在动量表象中有

$$-\frac{1}{2} m \omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dP^2} \psi(p) + \left(\frac{P^2}{2m} + v(p) \right) \psi(p) = E \psi(p), \quad (5)$$

此式具有与在坐标表象中的局域势问题(2)式相同的形式, 因而可以深入研究局域势的可求解模型. 此外, 非局域的能够分离的势也导致可求解模型^[4]. 可以把势以算子形式写为

$$\hat{V}_- = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle V_-(x) \langle x|, \quad \hat{v}_- = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy |x\rangle \hat{v}_-(x, y) \langle y|. \quad (6)$$

于是, 哈密顿函数为

$$\hat{H}_- = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_- + \hat{v}_-. \quad (7)$$

如在具有局域势的对称性的量子力学中那样, 假定哈密顿函数 \hat{H}_- 能够被以形式 $\hat{H}_- = \hat{A}^\dagger \hat{A}$ 因式分解, 它的超对称性的配对的哈密顿函数 \hat{H}_+ 由下式给出:

$$\hat{H}_+ = \hat{A} \hat{A}^\dagger = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}_+ + \hat{v}_+. \quad (8)$$

一阶微分算子 \hat{A}^\dagger 和 \hat{A} 有如下定义:

$$\hat{A}^\dagger = -\frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m}} + \hat{W} + \hat{w}, \quad \hat{A} = \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m}} + \hat{W} + \hat{w}, \quad (9)$$

式中 \hat{W} 和 \hat{w} 被其中 V_- 和 v_- 分别由局域的超势 W 和非局域的超势 w 所替代的(6)式所定义. 于是, 藉助于超 $W(x)$ 和 $w(x, y)$, 势 $V_\pm(x)$ 和 $v_\pm(x, y)$ 被写为如下形式:

$$V_\pm(x) = [W(x)]^2 \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{dW(x)}{dx},$$

$$v_\pm(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} du w(x, u) w(u, y) + \{W(x) + W(y)\} w(x, y) \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\partial w(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial w(x, y)}{\partial y} \right]. \quad (10)$$

如果 $w(x, y)$ 是对称的, 那么 $v(x, y)$ 也是对称的. $W(x)$ 和 $w(x, y)$ 是实的, 则 $V_{\pm}(x)$ 和 $v_{\pm}(x, y)$ 也是实的^[5,6].

在局域模型中基态和超势 $W(x)$ 之间关系是一一对应的地方, 在非局域模型中这点不成立. 给定超势 $W(x)$ 和 $w(x, y)$, \hat{H}_- 零能量基态 $\psi_0(x)$ 从下列积分-微分方程得到

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d\psi_0(x)}{dx} + W(x)\psi_0(x) + \int_{-\infty}^{\infty} dy w(x, y)\psi_0(y) = 0. \quad (11)$$

结果, 对于任一个正常化的函数 $\psi_0(x)$, 能够选择

$$w(x, y) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} [\psi_0'(x)\psi_0(y) + \psi_0(x)\psi_0'(y)] - \psi_0(x) \{W(x) + W(y)\} \psi_0(y) + C(x, y). \quad (12)$$

于是, 只要任意的实函数 $W(x)$ 和 $C(x, y) [= C(y, x)]$ 满足以下要求:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy W(y) [\psi_0(y)]^2 = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dy C(x, y)\psi_0(y) = 0, \quad (13)$$

$\psi_0(x)$ 是零能量基态. 为了精确地确定较高的能量本征值, 需要规定超势^[7-10].

3 局域模型的一个非局域表示

作为以上表示的一个特例, 从任意精确可解的局域模型出发构成一类具有局域和非局域势的可精确求解的模型. 此局域模型具有作为 x 的一个奇函数的一个超势 $W_0(x)$. 其例子是具有 $W_0(x) = \sqrt{m/2}wx$ 的谐振子和具有 $W_0(x) = a \tanh ax$ 的 Rosen-Morse II 或者 Scarf II 势. 我们选择

$$W(x) = (1-c)W_0(x), \quad w(x, y) = -c \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \delta'(x+y), \quad (14)$$

式中 c 是一个非局域的实的参数. 应用(10)式得到

$$V_{\pm}(x) = (1-c)^2 [W_0(x)]^2 \pm (1-c) \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_0'(x), \quad (15)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy v_{\pm}(x, y)\psi_{\pm}(y) = -c^2 \frac{\hbar^2}{2m} \psi_{\pm}''(x) \mp 2c \frac{\hbar^2}{2m} \psi_{\pm}''(-x) + c(1-c) \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_0'(x)\psi_{\pm}(-x).$$

非局域势为

$$\hat{v}_{\pm} = c^2 \frac{\hat{p}^2}{2m} \pm 2c \frac{\hat{p}^2}{2m} \hat{p} + c(1-c) \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_0'(x) \hat{P}, \quad (16)$$

式中 \hat{P} 是宇称算子. 具有 $s = \pm$ 的哈密顿函数 H_s 为

$$\hat{H}_s = (1+s\hat{P}c)^2 \frac{\hat{p}^2}{2m} + (1-c)^2 [W_0(\hat{x})]^2 + s(1-c) \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_0'(\hat{x})(1+s\hat{P}c). \quad (17)$$

因为 $[\hat{H}_{\pm}, \hat{P}] = 0$, 我们找到 \hat{H}_{\pm} 和 \hat{P} 的同时本征态 $\psi_{\pm}(x)$. 如果 $\hat{P}\psi_{\pm}(x) = \psi_{\pm}(-x) = P\psi_{\pm}(x)$, $P = \pm 1$, 那么 \hat{H}_s 的本征值方程成为

$$- (1 + sPc)^2 \frac{\hbar^2}{2m} \psi_s''(x) + \left[(1 - c)^2 [W_0(x)] + s(1 + sPc)(1 - c) \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W_0'(x) \right].$$

$$\psi_s(x) = E_s \psi_s(x). \quad (18)$$

藉助与局域的哈密顿函数 $\hat{H}_s^{(0)}$ (等于具有 $c=0$ 的 \hat{H}_s) 表示 \hat{H}_s 为

$$\hat{H}_s = \begin{cases} (1 - c)^2 \hat{H}_s^{(0)} & (P = -1) \\ (1 - c)^2 H_{ss}^{(0)} \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (P = +s), \end{cases} \quad (19)$$

式中符号 $\alpha = \text{sgn}[(1+c)/(1-c)]$, 且 $\hbar(c) = \hbar |(1+c)/(1-c)|$ 被引入. 对于 $|c| < 1$, 有 $\alpha = +1$, 并且对于 $|c| > 1$, $\alpha = -1$. 局域哈密顿函数 $\hat{H}_s^{(0)}$ 在宇称中是偶的. 从(19)式中可以看到, 对于任意 $|c| > 1$, $\alpha = -1$, \hat{H}_+ 和 \hat{H}_- 在给定的宇称局域 P 与 $\hat{H}_{-P}^{(0)}$ 成正比, 并且两个算子有可正常化的零能量基态^[4,8].

假定 $\text{sgn} W_0(\pm\infty) = \pm 1$, 此假定对于其中 $\hat{H}^{(0)}$ 有一个零能量基态的局域模型 ($c=0$). 保证未被破坏的超对称性的存在. 于是, $\hat{H}_s^{(0)}$ 的正常化本征态 $\psi_{s,n}^{(0)}(x)$ 有能量 $E_{s,n}^{(0)}$, 其中非负的整数 n 标示节点数: $E_{-,0}^{(0)} = 0$, $E_{-,n}^{(0)} = E_{+,n+1}^{(0)}$ 和 $P = (-1)^n$. $\hat{H}_-^{(0)}$ 和 $\hat{H}_+^{(0)}$ 的本征态由下式相联系:

$$\hat{A}^{(0)} \psi_{-,n}^{(0)} = \sqrt{E_{-,n}^{(0)}} \psi_{+,n-1}^{(0)}, \quad \hat{A}^{(0)+} \psi_{+,n}^{(0)} = \sqrt{E_{+,n}^{(0)}} \psi_{-,n+1}^{(0)}, \quad (20)$$

式中 $\hat{A}^{(0)}$ 和 $\hat{A}^{(0)+}$ 由(9)式以 $\hat{W} = \hat{W}_0$ 和 $\hat{w} = 0$ 给出. \hat{H}_{\pm} 的正常化的本征值函数为

$$\psi_{-,n}(x) = \begin{cases} \psi_{-,n}^{(0)}(x) & (n \text{ 为偶数}, c \neq 1) \\ \psi_{-,n}^{(0)}(x) \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为奇数}, |c| < 1) \\ \psi_{+,n}^{(0)}(x) \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为奇数}, |c| > 1), \end{cases} \quad (21)$$

$$\psi_{+,n}(x) = \begin{cases} \psi_{+,n}^{(0)}(x) & (n \text{ 为奇数}, c \neq 1) \\ \psi_{+,n}^{(0)}(x) \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为奇数}, |c| < 1) \\ \psi_{-,n}^{(0)}(x) \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为偶数}, |c| > 1). \end{cases}$$

相应的能量本征值为

$$E_{-,n} = \begin{cases} (1 - c)^2 E_{-,n}^{(0)} & (n \text{ 为偶数}, c \neq 1) \\ (1 - c)^2 E_{-,n}^{(0)} \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为奇数}, |c| < 1) \\ (1 - c)^2 E_{+,n}^{(0)} \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为奇数}, |c| > 1), \end{cases}$$

$$E_{+,n} = \begin{cases} (1 - c)^2 E_{+,n}^{(0)} & (n \text{ 为奇数}, c \neq 1) \\ (1 - c)^2 E_{+,n}^{(0)} \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为偶数}, |c| < 1) \\ (1 - c)^2 E_{-,n}^{(0)} \Big|_{\hbar \rightarrow \hbar(c)} & (n \text{ 为偶数}, |c| > 1). \end{cases} \quad (22)$$

如同在局域模型中那样, 已经由它们的节点数标示了本征函数. 但是在非局域模型

中,能量本征值不是由节点数排列的.算子 \hat{A} (\hat{A}^\dagger) 把 \hat{H}_- (\hat{H}_+) 的一个本征函数转变为具有同一能量的 \hat{H}_+ (\hat{H}_-) 一个本征函数.显然,

$$\hat{A}\psi_{-,n}(x) = \begin{cases} A_{-,n}\psi_{+,n-1}(x) & (n \text{ 为偶数}, c \neq 1) \\ A_{-,n}\psi_{+,n-1}(x) & (n \text{ 为奇数}, |c| < 1) \\ A_{-,n}\psi_{+,n+1}(x) & (n \text{ 为奇数}, |c| > 1), \end{cases} \quad (23)$$

$$\hat{A}^\dagger\psi_{+,n}(x) = \begin{cases} A_{+,n}\psi_{-,n+1}(x) & (n \text{ 为奇数}, c \neq 1) \\ A_{+,n}\psi_{-,n+1}(x) & (n \text{ 为偶数}, |c| < 1) \\ A_{+,n}\psi_{-,n-1}(x) & (n \text{ 为偶数}, |c| > 1), \end{cases}$$

式中 $A_{s,n} = \text{sgn}(1-c)\sqrt{E_{s,n}}$. 我们看到,当应用到 \hat{H}_- 的本征函数上时,在 $c \neq 1$ 的偶的本征函数中或在 $|c| < 1$ 的奇的本征函数中消除一个节点,但是,在 $|c| > 1$ 的奇的本征函数中产生一个额外的节点.类似的行为对于算子 \hat{A}^\dagger 也成立.

参考文献 (References)

- 1 Bethe H A, Jackiw R. Intermediate Quantum Mechanics. New York: Benjamin/Cummings, 1986
- 2 Ziman J M. Principles of the Theory of Solids. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1964
- 3 Fetter A L, Walecka J D. Quantum Theory of Many-Particle System. New York: McGraw-Hill, 1971
- 4 Choi Je-Young, Hong Seok-In. Phys. Rev., 1999, **A60**:796
- 5 Climm J, Jaffe A. Quantum Physics. New York: Springer-Verlag, 1987
- 6 Samuel J. Phys. Rev., 1982, **D26**:3482
- 7 Horwiz L P, Rohrlich F. Phys. Rev., 1982, **D26**:3452
- 8 Balachandran A P et al. Phys. Rev., 1982, **D26**:3492
- 9 Joachim Herb et al. Phys. Rev., 1999, **A60**:835
- 10 Peres A. Quantum Theory: Concepts and Methods. Dordrecht: Kluwer Academic, 1993

Quantum Mechanical Model with Nonlocal Potential *

ZHANG De-Xing CAI Shao-Hong

(Department of Physics, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

Abstract In this paper, using supersymmetric (SUSY) quantum mechanics, we discuss exactly solvable Quantum mechanical model with nonlocal potential. And we present a simple nonlocal presentation of exactly solvable local model, so exactly to obtain energy eigenfunctions and eignvalues.

Key words nonlocal potential, supersymmetric nature, quantum mechanical model