

# Approximate Analytical Solutions of Bound States for Schrödinger Equation with Modified Pöschl-Teller Potential\*

Changyuan Chen<sup>#</sup>, Yuan You, Falin Lu

School of Physics and Electronics, Yancheng Teachers University, Yancheng  
Email: <sup>#</sup>yctcccy@163.net

Received: May 9th, 2012; revised: May 17th, 2012; accepted: May 22nd, 2012

**Abstract:** We use a new approximation scheme for the centrifugal term, and present approximate analytical solutions of bound states for modified Pöschl-Teller potential with the arbitrary angular momentum states. The normalized wave functions and energy equation for bound states are given. The numerical results show that our results are in good agreement with those obtained by using the Mathematica package, and that the new approximation scheme is better than the old approximation scheme.

**Keywords:** Modified Pöschl-Teller Potential; Schrödinger Equation; Bound States; Approximate Analytical Solutions

## 修正 Pöschl-Teller 势 Schrödinger 方程束缚态的近似解析解\*

陈昌远<sup>#</sup>, 尤 源, 陆法林

盐城师范学院物电学院, 盐城  
Email: <sup>#</sup>yctcccy@163.net

收稿日期: 2012 年 5 月 9 日; 修回日期: 2012 年 5 月 17 日; 录用日期: 2012 年 5 月 22 日

**摘 要:** 利用我们最近提出的关于离心项的一个新的近似表达式, 获得了修正 Pöschl-Teller 势非  $S$  波束缚态的近似解析解, 给出了能谱方程和相应的归一化的径向波函数。数值计算结果表明, 由新的离心项的近似表达式获得的能量本征值和 Mathematica 程序包给出的计算结果很好的一致。

**关键词:** 修正 Pöschl-Teller 势; Schrödinger 方程; 束缚态; 近似解析解

### 1. 引言

修正 Pöschl-Teller 势是由 Flügge<sup>[1]</sup>最先引入的, 它的表达形式为

$$V(r) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2M} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha r)}, \quad (1)$$

式中  $\lambda$  是表示势阱深度的无量纲系数,  $\alpha$  是屏蔽参数。修正 Pöschl-Teller 势是一个短程势, 它可以用来描述分子的振动等问题<sup>[2,3]</sup>。对于 1 维情况, 修正 Pöschl-Teller 势的非相对论束缚态和散射态均可以精

确求解<sup>[1,4-7]</sup>, 文献[7-10]还给出了束缚态矩阵元的通项公式和递推关系。对于 3 维情况, 只有  $S$  波的束缚态和散射态可以精确求解, 非  $S$  波的束缚态和散射态由于离心项的存在均无法精确求解<sup>[1,4-6]</sup>。

最近, 众多作者研究了一些指数型势函数的非相对论情况下任意角动量的束缚态和散射态的近似解, 如 Hulthén 势<sup>[11,12]</sup>, Eckart 势<sup>[13-15]</sup>, Manning-Rosen 势<sup>[16,17]</sup>, 在这些研究中, 人们采用这一近似

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{\alpha^2 e^{-\alpha r}}{(1 - e^{-\alpha r})^2}$$

来代替离心项。对于修正 Pöschl-Teller 势, 文献[18]采用下列近似形来代替离心项

\*资助信息: 江苏省自然科学基金(批准号: BK2010291)资助的课题。  
<sup>#</sup>通讯作者。

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{\alpha^2}{\sinh^2(\alpha r)}, \quad (2)$$

研究了束缚态的近似解,但这种近似仅对较小的  $\alpha$  值适用,大的  $\alpha$  值所得结果与数值解有较大差异。所以

$$\alpha^2 \left[ \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)} + \frac{t}{\cosh^2(\alpha r)} \right] = \alpha^2 \left[ \frac{1}{\left[ \frac{e^{\alpha r} - e^{-\alpha r}}{2} \right]^2} + \frac{t}{\left[ \frac{e^{\alpha r} + e^{-\alpha r}}{2} \right]^2} \right] \approx \frac{1}{r^2} \quad (3)$$

获得了散射态的近似解析解,给出了相移表达式和按“ $k/2\pi$  标度”归一化的散射态径向波函数,式中  $t$  是无量纲的系数。数值计算结果表明,(3)式这种近似比(2)式给出的相移数值与振幅相位方法(amplitude—phase method, 简称为 APM)符合得更好。但(3)式是否适用于修正 Pöschl-Teller 势的束缚态,它能否给出与其它方法一致的能级值和相应的归一化波函数也是一个令人感兴趣的问题,本文将对这一问题进行研究。

本文的安排如下,第二部分中我们对修正 Pöschl-Teller 势的离心项采用(3)式近似形式,获得了修正 Pöschl-Teller 势的非  $S$  波束缚态的近似解析解,给出了束缚态的能谱方程和归一化的径向波函数,并

对于不同形式的势场,人们又提出了各种改进的离心项的近似表达式,以便求得到更为满意的结果。对于修正 Pöschl-Teller 势,我们<sup>[19]</sup>最近采用了下列改进的离心项的近似表达式

讨论近似解析解的二个特殊情况。为了检验(3)式的适用性,在第三部分中计算了  $\lambda = 5.5$  和  $\lambda = 8$  时的全部束缚态能级,发现它和 Mathematica 程序包<sup>[20]</sup>给出的结果符合程度比其它的近似要好。同时在第三部分中分别画出了 2 个不同  $t$  值情况下离心项的新的近似表达式(3)和老的表达式(2)与真实离心项的比较以及  $\lambda = 5.5$  和  $\lambda = 8$  时全部的束缚态的能级图。经过对比我们发现,无论是对于束缚态还是散射态,(3)式都是修正 Pöschl-Teller 势离心项的一个比(2)式更好的近似,详细讨论见本文的第三部分。

## 2. 束缚态的近似解析解

修正 Pöschl-Teller 势的 Schrödinger 方程为

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2M} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha r)} \right] \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi), \quad (4)$$

令

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y(\theta, \phi), \quad (5)$$

得  $u(r)$  满足的径向方程为

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[ \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{\alpha^2 \lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(\alpha r)} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) = 0, \quad (6)$$

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[ \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{\alpha^2 [\lambda(\lambda+1) - tl(l+1)]}{\cosh^2(\alpha r)} - \frac{\alpha^2 l(l+1)}{\sinh^2(\alpha r)} \right] u(r) = 0, \quad (7)$$

对于束缚态,  $E < 0$ , 所以对(6)式做如下变换

$$-\varepsilon^2 = \frac{2ME}{\hbar^2 \alpha^2}, \quad \alpha r = x, \quad (8)$$

式中  $\varepsilon > 0$ , 则(7)式可化下列的无量纲方程

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \left[ -\varepsilon^2 + \frac{\lambda'(\lambda'+1)}{\cosh^2 x} - \frac{l(l+1)}{\sinh^2 x} \right] u(x) = 0, \quad (9)$$

式中

对于  $S$  波 ( $l=0$ ), 离心项等于 0, 无论是束缚态还是散射态上式都可以精确求解<sup>[1,4-6]</sup>。但对于非  $S$  波 ( $l \neq 0$ ), 离心项不等于 0, 因而无法精确求解。文献<sup>[19]</sup>采用(3)式这种离心项的近似表达式获得了散射态的近似解析解。下面我们来研究束缚态的近似解析解。把(3)式代入(6)式得

$$\lambda' = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\lambda(\lambda+1) - 4tl(l+1)}}{2}, \quad (10)$$

当  $t=0$  时,  $\lambda' = \lambda$ , 这就退化为以前人们应用(2)式所表示的近似离心项的情况<sup>[18]</sup>。对于  $S$  波,  $l=0$ , 由(10)式得  $\lambda' = \lambda$ , 这对应于以前  $S$  波精确可解的情况<sup>[1,4-6]</sup>。

对(9)式的自变量做指数变换, 为此引入新变量

$z = \tanh^2 x$ , 则(9)式可化为

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u(z)}{dz^2} + \frac{1-3z}{2z(1-z)} \frac{du(z)}{dz} \\ + \frac{-\lambda'(\lambda'+1)z^2 - l(l+1)}{4z^2(1-z)^2} u(z) \\ + \frac{[\lambda'(\lambda'+1) + l(l+1) - \varepsilon^2]z}{4z^2(1-z)^2} u(z) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

考虑到  $r \rightarrow 0$  即  $z \rightarrow 0$  和  $r \rightarrow \infty$  即  $z \rightarrow 1$  的束缚态的边界条件, 做函数代换

$$u(z) = z^{(l+1)/2} (1-z)^{\varepsilon/2} f(z), \quad (12)$$

则(11)式可化为

$$\begin{aligned} z(1-z)f''(z) + [l+3/2 - (l+\varepsilon+5/2)z]f'(z) \\ + \frac{1}{4}[\lambda'(\lambda'+1) - (l+1)(2\varepsilon+l+2) - \varepsilon(\varepsilon+1)]f(z) = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

这是参数

$$a = \frac{l+\varepsilon+1-\lambda'}{2}, \quad b = \frac{l+\varepsilon+\lambda'+2}{2}, \quad c = l + \frac{3}{2}, \quad (14)$$

的超几何微分方程<sup>[21-23]</sup>, 因而解是超几何函数

$$f(z) = F(a, b; c; z), \quad (15)$$

当  $\text{Re}(c-a-b) = -\varepsilon < 0$  时, 超几何函数  $F(a, b; c; z)$  在  $z=1$  处是发散的<sup>[21-23]</sup>。为了满足束缚态的边界条件, 超几何函数必须中断为一个多项式, 这就要求  $a$  或者是  $b$  必须等于 0 或负整数, 由(14)式和(8)可知,  $b$  恒大于 0, 因此只能是  $a$  取 0 或负整数, 即

$$a = \frac{l+\varepsilon+1-\lambda'}{2} = -n_r, \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots), \quad (16)$$

或改写成如下形式

$$\varepsilon = \lambda' - l - 2n_r - 1, \quad (17)$$

由(8)式可知,  $\varepsilon$  的取值大于 0, 所以对于一定的  $\lambda$  值, 径向量子数  $n_r$  的取值范围是

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, ((\lambda' - l - 1)/2), \quad (18)$$

式中  $((\lambda' - l - 1)/2)$  表示取值小于  $(\lambda' - l - 1)/2$  值的最大正整数。

将(18)式代入(8)式, 得修正 Pöschl-Teller 势任意  $l$  波束缚态能谱方程的解析表达式为

$$\begin{aligned} E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2 \varepsilon^2}{2M} = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2M} (\lambda' - l - 2n_r - 1)^2 \\ (n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, ((\lambda' - l - 1)/2)), \end{aligned} \quad (19)$$

相应的束缚态径向波函数可以用超几何多项式表示为

$$\begin{aligned} u_{n_r, l}(r) = N_{n_r, l} (\tanh(\alpha r))^{l+1} [1 - \tanh^2(\alpha r)]^{(\lambda' - l - 2n_r - 1)/2} \\ \times F(-n_r, \lambda' - n_r + 1/2; l + 3/2; \tanh^2(\alpha r)) \end{aligned} \quad (20)$$

式中  $N_{n_r, l}$  是归一化常数, 满足归一化条件

$\int_0^\infty |u_{n_r, l}(r)|^2 dr = 1$ 。利用超几何多项式和雅可比多项式的关系<sup>[21-23]</sup>

$$\begin{aligned} P_n^{(\alpha, \beta)}(x) = (-1)^n \frac{\Gamma(\beta + n + 1)}{n! \Gamma(\beta + 1)} \\ \times F(n, \alpha + \beta + n + 1; \beta + 1; (1+x)/2) \end{aligned} \quad (21)$$

以及含有雅可比多项式的积分公式

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1-x)^{\alpha-1} (1+x)^\beta [P_n^{(\alpha, \beta)}(x)]^2 dx \\ = \frac{2^{\alpha+\beta} \Gamma(\alpha + n + 1) \Gamma(\beta + n + 1)}{n! \alpha \Gamma(\alpha + \beta + n + 1)} \end{aligned} \quad (22)$$

经过一系列运算得归一化常数

$$\begin{aligned} N_{n_r, l} = \frac{l!}{2^{\lambda' - l - 1} (2l + 1)!} \sqrt{\frac{2\alpha(\lambda' - l - 2n_r - 1)}{n_r! (l + n_r)!}} \\ \times \sqrt{\frac{(2l + 2n_r + 1)! \Gamma(2\lambda' - 2n_r)}{\Gamma(\lambda' - l - n_r) \Gamma(\lambda' - n_r)}} \end{aligned} \quad (23)$$

于是修正 Pöschl-Teller 势任意  $l$  波束缚态的归一化径向波函数为

$$\begin{aligned} u_{n_r}(r) = \frac{l!}{2^{\lambda' - l - 1} (2l + 1)!} \sqrt{\frac{2\alpha(\lambda' - l - 2n_r - 1)}{n_r! (l + n_r)!}} \\ \times \sqrt{\frac{(2l + 2n_r + 1)! \Gamma(2\lambda' - 2n_r)}{\Gamma(\lambda' - l - n_r) \Gamma(\lambda' - n_r)}} \\ \times (\tanh(\alpha r))^{l+1} [1 - \tanh^2(\alpha r)]^{(\lambda' - l - 2n_r - 1)/2} \\ \times F(-n_r, \lambda' - n_r + 1/2; l + 3/2; \tanh^2(\alpha r)) \end{aligned} \quad (24)$$

下面我们讨论两个特殊情况, 第 1 种情况是当  $t=0$  时,  $\lambda' = \lambda$ , 于是(19)式和(24)式分别退化为

$$\begin{aligned} E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2M} (\lambda - l - 2n_r - 1)^2 \\ (n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, ((\lambda - l - 1)/2)), \end{aligned} \quad (25)$$

$$u_{l n_r}(r) = \frac{l!}{2^{\lambda-l-1}(2l+1)!} \sqrt{\frac{2\alpha(\lambda-l-2n_r-1)}{n_r!(l+n_r)!}} \times \sqrt{\frac{(2l+2n_r+1)!\Gamma(2\lambda-2n_r)}{\Gamma(\lambda-l-n_r)\Gamma(\lambda-n_r)}} \times (\tanh(\alpha r))^{l+1} [1 - \tanh^2(\alpha r)]^{(\lambda-l-2n_r-1)/2} \times F(-n_r, \lambda-n_r+1/2; l+3/2; \tanh^2(\alpha r)) \quad (26)$$

(25)式和(26)式就是 Agboola<sup>[18]</sup>用(2)式这种离心项的近似表达式所得到的结果。注意到如果取势参数为  $V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2M} \lambda(\lambda+1)$ , 则  $\lambda = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{8MV_0}{\hbar^2 \alpha^2} \right]^{1/2}$ , 于是

(25)式可化为

$$E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8M} \left[ \sqrt{1 + \frac{8MV_0}{\hbar^2 \alpha^2}} - 2 \left( 2n_r + l + \frac{3}{2} \right) \right]^2 \quad (n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, ((\lambda-l-1)/2)). \quad (27)$$

上式同 Agboola<sup>[18]</sup>给出的3维能谱方程是完全相同的, 但归一化常数的表达式比文献[18]给出的形式要简洁。

第2种情况是S波,  $l=0$ ,  $\lambda'=\lambda$ , 于是(19)式和(24)式分别退化为

$$E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2M} (\lambda - 2n_r - 1)^2 \quad (n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, ((\lambda-1)/2)), \quad (28)$$

$$u_{l n_r}(r) = \frac{\sqrt{2\alpha(\lambda-2n_r-1)(2n_r+1)!\Gamma(2\lambda-2n_r)}}{2^{\lambda-1} n_r! \Gamma(\lambda-n_r)} \times \tanh(\alpha r) [1 - \tanh^2(\alpha r)]^{(\lambda-2n_r-1)/2} \times F(-n_r, \lambda-n_r+1/2; 3/2; \tanh^2(\alpha r)) \quad (29)$$

(28)式与文献[5]获得的S波精确的能谱方程(29)式是完全相同的, 把上式中超几何多项式展开然后同文献[5]给出的波函数表达式(32)相比可知, 除了相差一个无关紧要的因子  $(-1)^{n_r}$  外, 二者是完全相同的。

### 3. 数值结果与讨论

对于束缚态来说, 为了说明(3)式是比(2)式更好的离心项的近似表达式, 我们在表1和表2中列出了由(19)式给出的  $\lambda=5.5$  和  $\lambda=8$  的除S态外的全部束缚

**Table 1. Energy eigenvalues for bound states in atomic units ( $\hbar=M=1$ ) and for  $\lambda=5.5$   $t=0.751$**

**表 1. 束缚态的能级值(原子单位,  $\hbar=M=1$ ,  $\lambda=5.5$   $t=0.751$ )**

态	$\alpha$	本文结果	Agboola <sup>[18]</sup>	Schöberl <sup>[20]</sup>
2p	0.025	-0.0035564	-0.0038281	-0.0036447
	0.050	-0.0142256	-0.0153125	-0.0145789
	0.075	-0.0320077	-0.0344531	-0.0328024
3p	0.025	-0.0005895	-0.0007031	-0.0005664
	0.050	-0.0023581	-0.0028125	-0.0022654
	0.075	-0.0053058	-0.0063281	-0.0050972
3d	0.025	-0.0013939	-0.0019531	-0.0014519
	0.050	-0.0055754	-0.0078125	-0.0058075
	0.075	-0.0125447	-0.0175781	-0.0130668

**Table 2. Energy eigenvalues for bound states in atomic units ( $\hbar=M=1$ ) and for  $\lambda=8$   $t=0.809$**

**表 2. 束缚态的能级值(原子单位,  $\hbar=M=1$ ,  $\lambda=8$   $t=0.809$ )**

态	$\alpha$	本文结果	Agboola <sup>[18]</sup>	Schöberl <sup>[20]</sup>
2p	0.025	-0.0108939	-0.0112500	-0.0110572
	0.050	-0.0435757	-0.0450000	-0.0442289
	0.075	-0.0980454	-0.1012500	-0.0995150
3p	0.025	-0.0047636	-0.0050000	-0.0048280
	0.050	-0.0190543	-0.0200000	-0.0193122
	0.075	-0.0428722	-0.0450000	-0.0434524
3d	0.025	-0.0069311	-0.0078125	-0.0072590
	0.050	-0.0277243	-0.0312500	-0.0290361
	0.075	-0.0623797	-0.0703125	-0.0653312
4p	0.025	-0.0011332	-0.0012500	-0.0011160
	0.050	-0.0045329	-0.0050000	-0.0044640
	0.075	-0.0101990	-0.0112500	-0.0100440
4d	0.025	-0.0022942	-0.0028125	-0.0023415
	0.050	-0.0091768	-0.0112500	-0.0093658
	0.075	-0.0206478	-0.0253125	-0.0210732
4f	0.025	-0.0036303	-0.0050000	-0.0039552
	0.050	-0.0145211	-0.0200000	-0.0158208
	0.075	-0.0326724	-0.0450000	-0.0355967
5d	0.025	-0.0001573	-0.0003125	-0.0000280
	0.050	-0.0006292	-0.0012500	-0.0001120
	0.075	-0.0014158	-0.0028125	-0.0002520
5f	0.025	-0.0006198	-0.0012500	-0.0004430
	0.050	-0.0024793	-0.0050000	-0.0017719
	0.075	-0.0055785	-0.0112500	-0.0039868
5g	0.025	-0.0012350	-0.0028125	-0.0012118
	0.050	-0.0049401	-0.0112500	-0.0048471
	0.075	-0.0111153	-0.0253125	-0.0109061

态的能级值(对应于离心势近似表达式(3)), 作为对比, 表1和表2中还列出了 Agboola<sup>[18]</sup>给出的结果(对应于离心势近似表达式(2)), 以及由 Lucha 和 Schöberl<sup>[20]</sup>

用 Mathematica 软件编写的程序算出的结果, 由于这个程序包的计算精度很高, 所以有的文献将它给出的结果作为能谱的精确值对待<sup>1</sup>。对于不同的势场强度  $\lambda$  来说, 参数  $t$  的选值当然是不一样的。而  $S$  态的能谱是可以精确求解的, 由(28)式给出的值与数值解<sup>[20]</sup>完全一致, 表 3 中给出了  $\lambda = 5.5$  和  $\lambda = 8$  的全部  $S$  态能级的精确值。为了更直观的看出(3)式比(2)式更接近于真实的离心项, 我们在图 1 中分别画出了  $1/r^2$ 、(3)式和(2)式随  $r$  的变化情况。由图 1 可知, 无论  $\alpha$  的取值如何, (3)式比(2)式更接近于真实的离心项  $1/r^2$ 。此外我们在图 2 中还画出了  $\lambda = 5.5$  和  $\lambda = 8$  时全部的束缚态能级。从表 1 和表 2 中所列数据可以看出, 无论  $\alpha$  值是比较小还是比较大, 本文结果比 Agboola<sup>[18]</sup>给出的结果更接近于 Schöberl<sup>[20]</sup>的结果。另外从表 1、表 2、表 3 和图 2 还可以看出, 对于修正 Pöschl-Teller 势来说, 当  $\lambda$  取值一定时, 束缚态的总数是有限的, 而且对于一定的主量子数  $n = n_r + l + 1$  的能级来说, 角量子数越大对应的能级越低。综合本文和文献[19]对散射态的讨论, 我们可以得到如下结论, 对于修正 Pöschl-Teller 势来说, 无论是束缚态还是散射态, 由(3)式表示的离心项的近似表达式都是一个更好的近似, 至少说到目前为止, 它应该是最好的。因为由它我们不仅能给出与数值计算结果符合得很好的束缚态的

能级值和散射态的相移值, 而且还能分别给出束缚态的归一化波函数和散射态的归一化波函数, 这对于把修正 Pöschl-Teller 势应用于实际问题时计算振子强度、激发态寿命和光电离截面等就方便多了, 因此本文和文献[19]给出的结果一方面说明(3)式是离心项的一个很好的近似, 另一方面也说明在把修正 Pöschl-Teller 势应用于实际时这些结果将会有广泛的应用。

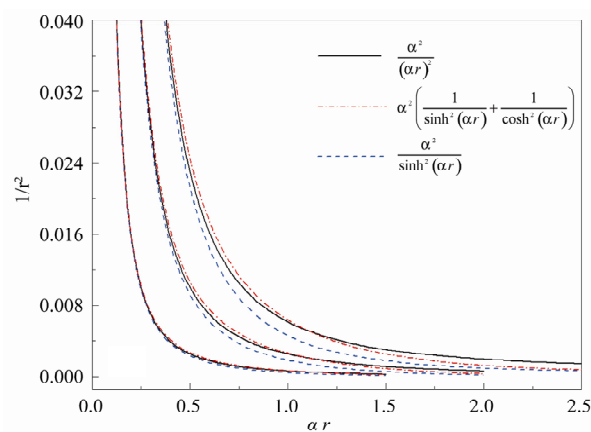
最后, 我们需要说明的是, 无论是修正 Pöschl-Teller 势、第二类 Pöschl-Teller 势还是其它类型的双曲函数型势场, 他们都是  $S$  波的束缚态和散射态能精确求解, 而非  $S$  波的则无法精确求解的。在以前的文献[18,24-26]中, 对于这类势场非  $S$  波总是取(2)式进

Table 3. Exact energy eigenvalues of  $S$  states in atomic units ( $\hbar = M = 1$ ) and for  $\lambda = 5.5, 8$

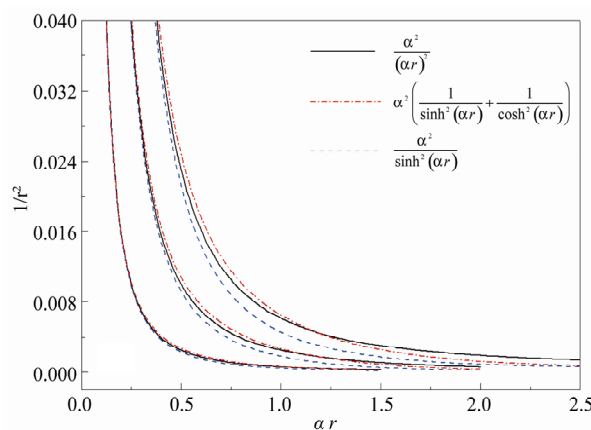
表 3.  $S$  态能级的精确值(原子单位,  $\hbar = M = 1, \lambda = 5.5, 8$ )

态	$\alpha$	$\lambda = 5.5$	$\lambda = 8$
1s	0.025	-0.0063281	-0.0153125
	0.050	-0.0253125	-0.0612500
	0.075	-0.0569531	-0.1378125
2s	0.025	-0.0019531	-0.0078125
	0.050	-0.0078125	-0.0312500
	0.075	-0.0175781	-0.0703125
3s	0.025	-0.0000781	-0.0028125
	0.050	-0.0003125	-0.0112500
	0.075	-0.0007031	-0.0253125
4s	0.025		-0.0003125
	0.050		-0.0012500
	0.075		-0.0028125

<sup>1</sup>这个用 Mathematica 软件编写的程序可以用求解 3 维中心势场的径向 Schrödinger 方程, 作者 Lucha 和 Schöberl 在文献[20]中并没有给出 3 维修正 Pöschl-Teller 势的计算结果, 作为对比, 我们在这里用这个程序算出了 3 维修正 Pöschl-Teller 势的束缚态能谱。



(a)



(b)

Figure 1. The variations of the  $1/r^2$  (solid line) and the new approximation scheme (6) (dot-dashed) and old approximation scheme (5) (dashed) with  $\alpha r$  for various values of the parameter. The  $\alpha$  changes from 0.025 to 0.075 in steps of 0.025. (a)  $t = 0.751$ ; (b)  $t = 0.809$

图 1. 离心项  $1/r^2$  (实线)新的离心项近似表达式(点划线)和老的离心项近似表达式(虚线)随  $\alpha r$  的变化情况。参数  $\alpha$  从 0.025 到 0.075, 步长 0.025。(a)  $t = 0.751$ ; (b)  $t = 0.809$

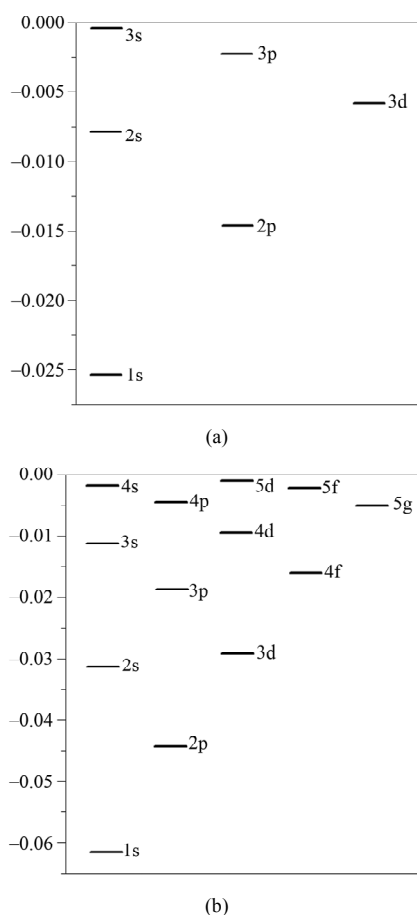


Figure 2. Energy levels of bound states in atomic units ( $\hbar = M = 1$ ) and  $\alpha = 0.05$ . (a)  $\lambda = 5.5$ ; (b)  $\lambda = 8$

图 2. 束缚态的能级图(原子单位,  $\hbar = M = 1$ ,  $\alpha = 0.05$ , (a)  $\lambda = 5.5$ ; (b)  $\lambda = 8$ )

行近似求解的, 当然对于束缚态也可以有其它的近似, 不过同时适用于束缚态和散射态的, 只有(2)式这种形式。而本文和文献[19]采用了新的离心项近似(3)式来研究修正 Pöschl-Teller 势的束缚态和散射态, 取得了更好的结果。因此我们猜想, 对于其它类型的双曲函数型势场的束缚态和散射态, (3)式也可能是一个更好的近似。

#### 4. 致谢

本文感谢江苏省自然科学基金项目(BK2010291)的支持。感谢 F. Schöberl 教授提供的用于 3 维中心势场束缚态能谱计算的 Mathematica 程序。

#### 参考文献 (References)

[1] S. Flügge. Practical quantum mechanics [M]. 北京: 科学出版

- 社, 2009: 问题 39, 问题 93.
- [2] F. Iachello, S. Oss. Algebraic model of bending vibrations of complex molecules. *Chemical Physics Letters*, 1993, 205(2-3): 285-289.
- [3] F. Iachello, S. Oss. Vibrational spectroscopy and intramolecular relaxation of benzene. *Journal of Chemical Physics*, 1993, 99(10): 7337-7349.
- [4] M. M. Nieto. Exact wave-function normalization constants for  $B0\tanh z-U0\cosh 2z$  and Pöschl-Teller potentials. *Physical Review A*, 1978, 17(4): 1273-1283.
- [5] 陈昌远, 胡嗣柱. 修正 Pöschl-Teller 势的 Schrödinger 方程束缚态的精确解[J]. *物理学报*, 1995, 44(1): 9-15.
- [6] 陈昌远, 孙东升, 孙国耀. 修正 Pöschl-Teller 势的 Schrödinger 方程散射态的精确解[J]. *中山大学学报(自然科学版)*, 1998, 37(6): 49-54.
- [7] S. H. Dong, R. Lemus. Ladder operators for the modified Pöschl-Teller potential. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2002, 86(3): 265-272.
- [8] J. Zúñiga, M. Alacid, A. Requena, et al. Matrix elements for the modified Pöschl-Teller potential. *International Journal of Quantum Chemistry*, 1996, 57(1): 43-51.
- [9] J. Gomez-Camacho, R. Lemus and J. M. Arias. Matrix elements of  $u$  and  $p$  for the modified Pöschl-Teller potential. *Journal of Physics A*, 2004, 37(19): 5237-5242.
- [10] M. Rey, F. Michelot. Matrix elements for powers of  $x$ -dependent operators for the hyperbolic Pöschl-Teller potentials. *Journal of Physics A*, 2009, 42: Article ID: 165209.
- [11] O. Bayrak, G. Kocak and I. Boztosun. Any  $l$ -state solutions of the Hulthén potential by the asymptotic iteration method. *Journal of Physics A*, 2006, 39: 11521-11529.
- [12] 陈昌远, 陆法林, 孙东升. Hulthén 势散射态的解析解[J]. *物理学报*, 2007, 56(11): 6204-6208.
- [13] S. H. Dong, W. C. Qiang, G. H. Sun, et al. Analytical approximations to the  $l$ -wave solutions of the Schrödinger equation with the Eckart potential. *Journal of Physics A*, 2007, 40: 10535-10540.
- [14] C. Y. Chen, D. S. Sun and F. L. Lu. Analytical approximations of scattering states to the  $l$ -wave solutions for the Schrödinger equation with the Eckart potential. *Journal of Physics A*, 2008, 41: Article ID: 035302.
- [15] G. F. Wei, C. Y. Long, X. Y. Duan, et al. Arbitrary  $l$ -wave scattering state solutions of the Schrödinger equation for the Eckart potential. *Physica Scripta*, 2008, 77(3): Article ID: 035001.
- [16] W. C. Qiang, S. H. Dong. Analytical approximations to the solutions of the Manning-Rosen potential with centrifugal term. *Physical Letters A*, 2007, 368(1-2): 13-17.
- [17] G. F. Wei, C. Y. Long and S. H. Dong. The scattering of the Manning-Rosen potential with centrifugal term. *Physics Letters A*, 2008, 372(15): 2592-2596.
- [18] D. Agboola. Solutions to the modified Pöschl-Teller potential in  $D$ -Dimensions. *Chinese Physics Letters*, 2010, 27(4): Article ID: 040301.
- [19] C. Y. Chen, F. L. Lu and Y. You. Scattering states of modified Pöschl-Teller potential in  $D$ -dimension. *Chinese Physics B*, 2012, 21(3): Article ID: 030302.
- [20] W. Lucha, F. F. Schöberl. Solving the Schrödinger equation for bound states with MATHEMATICA 3.0. *International Journal of Modern Physics C*, 1999, 10(4): 607-619.
- [21] 王竹溪, 郭敦仁. 特殊函数概论[M]. 北京: 北京大学出版社, 2000: 第 4 章.
- [22] 刘式适, 刘式达. 特殊函数(第 2 版)[M]. 北京: 气象出版社, 2002: 第 8 章.
- [23] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik. 2000 tables of integrals, series, and products (6th edition) [M]. 北京: 世界图书出版公司北京公司, 2000: 第 8 章, 第 9 章.
- [24] G. F. Wei, S. H. Dong. A novel algebraic approach to spin symmetry for Dirac equation with scalar and vector second Pöschl-Teller potentials. *The European Physical Journal A*, 2010, 43(2): 185-190.

- [25] Y. Xu, S. He and C. S. Jia. Approximate analytical solutions of the Dirac equation with the Pöschl-Teller potential including the spin-orbit coupling term. *Journal of Physics A*, 2008, 41: Article ID: 255302.
- [26] J. Lu, H. X. Qian, L. M. Li, et al. Rotation and vibration of diatomic molecule oscillator with hyperbolic potential function. *Chinese Physics B*, 2005, 14(12): 2042-2046.