应用数学和力学,第 21 卷 第 2 期(2000 年 2 月)
Applied Mathematics and Mechanics
应用数学和力学编委会编
重 庆 出 版 社 出 版

文章编号: 1000_0887(2000) 02_0215_06

量子力学中 TFD 方程边值问题的存在性*

王国灿[1], 㯳柱[2], 郑成德[1]

(1. 大连铁道学院 基础部 数学教研室,大连 116028; 2. 吉林大学 物理系,长春 130023)

(林宗池推荐)

摘要: 建立了量子力学中的 TFD 方程, 利用常微分方程奇性边值问题理论和上下解方法得到了解的存在性定理•

关 键 词: TFD 方程; 奇性边值问题; 存在性; 上下解
中图分类号: O175.8 文献标识码: A

引 言

为研究量子力学中原子的电荷密度, 最终归结到利用波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 来求解 Schrödinger 方程:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2+V(r)\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}), \tag{1}$$

$$|\psi(0)|<M,\quad |\psi(\boldsymbol{r})|_{|\boldsymbol{r}|\to\infty}=0 \tag{2}$$

问题的关键在于决定 $V(r)$• 1927 年 Thomas 和 Fermi 几乎同时得到了著名的 Thomas_Fermi 方程[1]~[2]• 由于 Schrödinger 方程对量子力学研究的重要性, 直到现在, 人们对与之有关的边值问题不失兴趣[3]~[5]• 根据现代量子力学的要求, 促使人们更精细地描述原子壳层结构, 从而对 Schrödinger 方程的 $V(r)$ 作出更精确的分析• 本文将致力于建立量子力学中的 Thomas_Fermi_Dirac 方程(简称 TFD 方程) 及研究其某些边值问题的存在性•

1 TFD 方 程

根据 Thomas_Fermi 统计模型, 原子核任意一点的电势 (即单位负电荷所做的功) 可表为 $-V(r)/e$, 且满足下述方程

$$\nabla^2\left(-\frac{V(r)}{e}\right)=4\pi n(r), \tag{3}$$

其中 $n(r)$ 为电子密度• 又从 Fermi_Dirac 统计方法可得

$$n(r)=\frac{8\sqrt{2}m_e^{3/2}}{3\pi^2\hbar^2}\left[\frac{1}{\pi}+\left(V_0-V(r)+\frac{1}{\pi^2}\right)^{1/2}\right]^3, \tag{4}$$

m_e 为电子质量, $\hbar=h/2\pi$, h 为 Plank 常数, V_0 为负电荷势最大值•

---

* 收稿日期: 1997_06_20; 修订日期: 1999_05_15
作者简介: 王国灿(1963~), 男, 浙江肖山人, 副教授, 硕士, 研究方向为常微分方程边值问题, 已发表论文 30 余篇.

利用原子单位: $m_e = \text{E} = e = 1$, 从(3)、(4) 两式我们有

$$\nabla^2 V(r) = -\frac{32\sqrt{2}}{3\pi}\left[\frac{1}{\pi}+\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right)^{1/2}\right]^3,$$

即

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)V(r) = -\frac{32\sqrt{2}}{3\pi}\left[\frac{1}{\pi}+\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right)^{1/2}\right]^3,$$

或

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right) = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi}\left[\frac{1}{\pi}+\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right)^{1/2}\right]^3,$$

于是

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right) = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi}\left[\frac{1}{\pi}+\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right)^{1/2}\right]^3,$$

或者

$$\frac{d^2}{dr^2}\left[r\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right)\right] = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi}r^{-1/2}\left[\frac{r^{1/2}}{\pi}+\left(r\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right)\right)^{1/2}\right]^3.$$

作变换

$$r = \pi^2 x,\quad y(x) = r\left(\frac{1}{\pi^2}+V_0-V(r)\right),$$

化简得到 TFD 方程为

$$y'' = \frac{32\sqrt{2}}{3\pi^2}x^{-1/2}\left(x^{1/2}+y^{1/2}\right)^3. \tag{5}$$

与 Thomas_Fermi 方程相同, 它有 3 个对应着不同物理意义的边界条件:

正离子型

$$y(0) = 1,\ y(b) = 0; \tag{6}$$

具有 Bohr 半径 b 的中性原子

$$y(0) = 1,\ -y(b) + by'(b) = 0; \tag{7}$$

孤立中性原子型

$$y(0) = 1,\ y(\infty) = 0, \tag{8}$$

其中 $b > 0$.

2　奇异边值问题

由于方程(5) 在 $x = 0$ 点奇异, 条件(7) 的第 2 式又与一般的边界条件不同($y(b)$ 与 $y'(b)$ 的系数反号), 故对其研究者甚少. 我们将利用常微分方程奇性边值问题理论及上下解方法讨论(5)、(6) 和(5)、(7) 的解的存在性.

考虑具有奇性的两种边值问题

$$\phi(t)y'' = f(t, y), \tag{9}$$

$$y(0) = A,\ y(1) = B, \tag{10}$$

$$y(0) = C,\ g(y(1), y'(1)) = 0. \tag{11}$$

定义　如果函数 $\alpha(t), \beta(t) \in C^2[0, 1]$, 使得当 $0 \leqslant t \leqslant 1$ 时成立 $\alpha(t) \leqslant \beta(t)$, $\phi(t)\alpha''(t) \geqslant f(t, \alpha(t))$, $\phi(t)\beta''(t) \leqslant f(t, \beta(t))$, 则分别称 $\beta(t)$ 和 $\alpha(t)$ 为方程(9) 的上解和下解.

引理 1[6]　假设

1) $\phi(t)\in C[0,1]$, $\phi(t)>0\ (0<t\leqslant 1)$, 且

$$\lim_{t\to 0^+}\frac{t^2}{\phi(t)}\text{ 存在}, \int_0^1\frac{t}{\phi(t)}\mathrm{d}t<\infty;$$

2) 当 $|y|>\max(|A|,|B|)$ 时, $yf(t,y)>0$, $0\leqslant t\leqslant 1$, 则边值问题(9)、(10)的解存在•

引理2 假设

1) 引理1的条件1)成立;

2) $g(u,v)\in C(R^2)$, 且 $g(u,v)$ 对固定的 u 关于 v 单调不减;

3) 方程(9)有上解 $\beta(t)$ 和下解 $\alpha(t)$, 满足

$$\alpha(0)\leqslant C\leqslant\beta(0),\ g(\alpha(1),\alpha'(1))\leqslant 0\leqslant g(\beta(1),\beta'(1));$$

则边值问题(9)、(11)有解 $y(t)\in C^2[0,1]\cap C[0,1]$ 使得

$$\alpha(t)\leqslant y(t)\leqslant\beta(t),\qquad 0\leqslant t\leqslant 1•$$

证明 首先当 $\alpha(1)=\beta(1)$ 时, 由 $\alpha(t)\leqslant\beta(t)$, $0\leqslant t\leqslant 1$ 可得 $\alpha'(1)\geqslant\beta'(1)$, 又据条件3)知 $\beta'(1)\geqslant\alpha'(1)$, 即有 $\alpha'(1)=\beta'(1)$, 则 $y(0)=C$, $y(1)=\alpha(1)$ 在 $[0,1]$ 满足 $\alpha(t)\leqslant y(t)\leqslant\beta(t)$ 的解 $y(t)$ 就是所要求的解•

其次考虑 $\alpha(1)<\beta(1)$ 的情形• 根据文[7]的推论3.3知边值问题

$$\phi(t)y''=f(t,y),$$
$$y(0)=C,\ y(1)=\alpha(1)$$

有解, 任取其一并记为 $\alpha_0(t)$, 显然 $\alpha(t)\leqslant\alpha_0(t)\leqslant\beta(t)$, $0\leqslant t\leqslant 1$, 于是 $\alpha'(1)\geqslant\alpha_0'(1)$• 由条件2)得

$$g(\alpha_0(1),\alpha_0'(1))\leqslant g(\alpha(1),\alpha'(1))\leqslant 0,\tag{12}$$

如果上式等号成立, 则 $\alpha_0(t)$ 便是(9)、(11)的解• 否则考虑边值问题

$$\phi(t)y''=f(t,y),$$
$$y(0)=C,\ y(1)=\beta(1)•$$

又由文[7]推论3.3知此问题有解, 并任取其一记为 $\beta_0(t)$, 亦有

$$\alpha_0(t)\leqslant\beta_0(t)\leqslant\beta(t),\qquad 0\leqslant t\leqslant 1,$$

显然 $\beta_0'(1)\geqslant\beta'(1)$• 再从 $g(u,v)$ 的单调性知

$$g(\beta_0(1),\beta_0'(1))\geqslant g(\beta(1),\beta'(1))\geqslant 0•\tag{13}$$

同理, 如果上式等号成立, 则定理得证• 否则取 $d_1=[\beta_0(1)+\alpha_0(1)]/2$, 并考虑边值问题

$$\phi(t)y''=f(t,y),$$
$$y(0)=C,\ y(1)=d_1,$$

从文[7]推论3.3可得其解存在, 任取其一记为 $y(t)$, 则 $\alpha_0(t)\leqslant y(t)\leqslant\beta_0(t)$, $0\leqslant t\leqslant 1$• 如果 $g(y(1),y'(1))=0$, 则定理为真; 如果 $g(y(1),y'(1))>0$, 则取 $\alpha_1(t)=\alpha_0(t)$, $\beta_1(t)=y(t)$; 如果 $g(y(1),y'(1))<0$, 则取 $\alpha_1(t)=y(t)$, $\beta_1(t)=\beta_0(t)$• 于是

$$\beta_1(1)-\alpha_1(1)=\frac{1}{2}[\beta_0(1)-\alpha_0(1)]•\tag{14}$$

再取 $d_2=\dfrac{1}{2}[\beta_1(1)-\alpha_1(1)]$, 并考虑边值问题

$$\phi(t)y''=f(t,y),$$
$$y(0)=C,\ y(1)=d_2•$$

显然该问题亦有解, 任取其一记为 $y(t)$, 与 $\alpha_1(t)$、$\beta_1(t)$ 的类似选取可得 $\alpha_2(t)$、$\beta_2(t)$ 满足

$$\alpha_1(t) \leqslant \alpha_2(t) \leqslant \beta_2(t) \leqslant \beta_1(t), \qquad 0 \leqslant t \leqslant 1,$$

$$\beta_2(1) - \alpha_2(1) = \frac{1}{2}[\beta_1(1) - \alpha_1(1)] = \frac{1}{2^2}[\beta_0(1) - \alpha_0(1)].$$

于是利用数学归纳法可得两串序列$\{\alpha_n(t)\}_1^\infty$,$\{\beta_n(t)\}_1^\infty$满足

$$\alpha_0(t) \leqslant \alpha_1(t) \leqslant \dots \leqslant \alpha_n(t) \leqslant \beta_n(t) \leqslant \dots \leqslant \beta_1(t) \leqslant \beta_0(t), \tag{15}$$

$$\beta_n(1) - \alpha_n(1) = \frac{1}{2^n}[\beta_0(1) - \alpha_0(1)]. \tag{16}$$

此外, 据奇性边值问题的 Nagumo 定理[8]知$\{\alpha_n(t)\}$、$\{\beta_n(t)\}$、$\{\alpha_n'(t)\}$、$\{\beta_n'(t)\}$还在$0 \leqslant t \leqslant 1$ 上一致有界同等连续. 又由$\{\alpha_n(t)\}$、$\{\beta_n(t)\}$的选取知

$$g(\alpha_n(1), \alpha_n'(1)) < 0, \quad g(\beta_n(1), \beta_n'(1)) > 0, \tag{17}$$

故存在一致收敛的子序列$\{\beta_{n_j}(t)\}$、$\{\alpha_{n_i}(t)\}$使得

$$\beta_{n_j}(t) \to y_0(t), \quad \beta_{n_j}'(t) \to y_0'(t), \qquad 0 \leqslant t \leqslant 1, j \to \infty,$$

$$\alpha_{n_i}(t) \to y_0(t), \quad \alpha_{n_i}'(t) \to y_0'(t), \qquad 0 \leqslant t \leqslant 1, i \to \infty,$$

即 $y_0(t)$、$y_0(t)$ 都是满足方程(9) 的, 且

$$y_0(0) = C = y_0(0), \quad g(y_0(1), y_0'(1)) \geqslant 0, \quad g(y_0(1), y_0'(1)) \leqslant 0. \tag{18}$$

由(15)、(16) 两式可知 $y_0(t) \leqslant y_0(t)$, $0 \leqslant t \leqslant 1$, $y_0(1) = y_0(1)$, 于是

$$y_0'(1) \geqslant y_0'(1). \tag{19}$$

这样从(18)、(19) 再得到

$$0 \leqslant g(y_0(1), y_0'(1)) \leqslant g(y_0(1), y_0'(1)) \leqslant 0, \tag{20}$$

即 $g(y_0(1), y_0'(1)) = g(y_0(1), y_0'(1)) = 0$, 从而定理得证.

3　TFD 方程的可解性

现在我们利用第二节的结论来讨论 TFD 方程边值问题(5)、(6) 及(5)、(7) 解的存在性.

为了方便起见, 作自变量变换 $x = bt$, 则(5)、(6)、(7) 可依次变为

$$t^{1/2}y'' = L(b^{1/2}t^{1/2} + y^{1/2})^3, \tag{21}$$

$$y(0) = 1, \quad y(1) = 0, \tag{22}$$

$$y(0) = 1, \quad -y(1) + y'(1) = 0, \tag{23}$$

其中　$L = \dfrac{32\sqrt{2}}{3}\pi^2 b^{3/2}$.

易知下面只须对边值问题(21)、(22) 及(21)、(23) 进行讨论.

定理 1　边值问题(21)、(22) 有解.

证明　记 $\phi(t) = t^{1/2}$, 则 $\phi(t) \in C[0,1]$, $\phi(t) > 0$, $(0 < t \leqslant 1)$, 且

$$\lim_{t \to 0^+} \frac{t^2}{\phi(t)} = 0, \quad \int_0^1 \frac{t}{\phi(t)} \mathrm{d}t < \infty;$$

又根据物理意义TFD 方程没有非负解, 且从 $y''(t) = Lt^{-1/2}(b^{1/2}t^{1/2} + y^{1/2})^3$ 知其解曲线是凹向下的, 更进一步有 $0 \leqslant y(t) \leqslant 1 - t$, $0 \leqslant t \leqslant 1$. 于是引理 1 的条件得以满足, 从而边值问题(21)、(22) 在 $0 \leqslant t \leqslant 1$ 上有解 $y(t)$, 使得 $0 \leqslant y(t) \leqslant 1 - t$.

定理 2　边值问题(21)、(23) 有解.

证明　记 $\phi(t) = t^{1/2}$, $g(u, v) = -u + v$, 则 $\phi(t) \in C[0,1]$, $g(u,v) \in C(R^2)$, 且 $\phi(t)$

$> 0, (0 < t \leqslant 1), \lim_{t \to 0^+} \frac{t^2}{\phi(t)} = 0, \int_0^1 \frac{t}{\phi(t)} dt < \infty, g_v(u, v) = 1 > 0$, 即引理 2 的条件 1)、2) 成立•

设 $y_{\varepsilon_k}(t)$ 是初值问题 $(t + \varepsilon_k)^{1/2} y'' = L(b^{1/2} t^{1/2} + y^{1/2})^3, y(1) = m, y'(1) = m$ 的解, 其中 m、ε_k 是正数, 而且 $\varepsilon_k \to 0^+ \ (k \to +\infty)$, 及这样的 m 是存在的, 则

$$y_{\varepsilon_k}(t) = y_{\varepsilon_k}(1) + y'_{\varepsilon_k}(1)(t - 1) + L\int_1^t (t - s)(s + \varepsilon_k)^{-1/2}(b^{1/2}s^{1/2} + y_{\varepsilon_k}^{1/2}(s))^3 ds•$$

显然 $$y_{\varepsilon_k}(0) = L\int_1^0 (-s)(s + \varepsilon_k)^{-1/2}(b^{1/2}s^{1/2} + y_{\varepsilon_k}^{1/2}(s))^3 ds > 0•$$

由 $y_{\varepsilon_k}(t)$ 所满足的方程及其表达式, 对固定的 m, 不难验证序列 $\left\{y_{\varepsilon_k}(t)\right\}$ 单调不增, 且于 $[0, 1]$ 上一致有界等度连续• 存在 $y_0(t) \in C[0, 1]$, 使得于 $[0, 1]$ 上

$$\lim_{k \to \infty} y_{\varepsilon_k}(t) = y_0(t),$$

而 $$y_0(t) = mt + L\int_1^t (t - s)s^{-1/2}(b^{1/2}t^{1/2} + y_0^{1/2}(s))^3 ds•$$

令 $M = \max\limits_{\substack{0 \leqslant t \leqslant 1 \\ 1 \leqslant k < +\infty}} y_{\varepsilon_k}(t), \quad N = \min\limits_{\substack{0 \leqslant t \leqslant 1 \\ 1 \leqslant k < +\infty}} y_{\varepsilon_k}(t),$

于是选取上下解分别为

$$\beta(t) = \frac{y_0(t)}{N}, \quad \alpha(t) = \frac{y_0(t)}{M}, \qquad 0 \leqslant t \leqslant 1,$$

这样我们就有

$$\alpha(t) \leqslant \beta(t), \quad \phi(t)\beta''(t) \leqslant L(b^{1/2}t^{1/2} + \beta^{1/2}(t))^3,$$
$$\phi(t)\alpha''(t) \geqslant L(b^{1/2}t^{1/2} + \alpha^{1/2}(t))^3 \qquad 0 \leqslant t \leqslant 1,$$

及 $$\beta(0) \geqslant 1 \geqslant \alpha(0), \ -\beta(1) + \beta'(1) = -\alpha(1) + \alpha'(1) = 0,$$

由引理 2 知边值问题 (21)、(23) 有解•

[参 考 文 献]

[1] Thomas L H. The calculation of atomic fields[J]. Proc Cambridge Philos Soc, 1927, **23**: 542~ 548.

[2] Fermi E. Un methodo satistico par la determinazione di alcune proprietû dell' atome[J]. Rend Accad Naz del Lincei cl Sci fis Mat e Nat, 1927, **23**(6): 602~ 607.

[3] Lieb E H. Thomas_Fermi theory revisited[J]. Phys Rev Lett, 1973, **31**(4): 681~ 689.

[4] Luning C D. An iterative technique for obtaining solution of a Thomas_Fermi equation[J]. SIAM J Math Anal, 1978, **9**(3): 515~ 525.

[5] Moony J W. A unified approach to the solution of certain classes of nonlinear boundary value problems using monotone iterations[J]. Nonlinear Anal, 1979, **3**(4): 449~ 465.

[6] Bobisud L E. Singular boundary value problems[J]. Appl Anal, 1986, **23**: 233~ 243.

[7] Zhang Xikang. On multi_point boundary value problems for higher order differential equations with singularities[J]. Ann Diff Eqs, 1992, **8**(4): 499~ 509.

[8] 李勇. 奇异边值问题的 Nagumo 定理[J]. 吉林大学自然科学学报, 1990, (3): 1~ 5.

[9] 刘文斌. 二阶常系数方程及 Thomas_Fermi 方程的边值问题[J]. 高校应用数学学报, 1994, (2): 136 ~ 145.

Existence of Boundary Value Problems for TFD Equation in Quantum Mechanics

Wang Guocan[1], Ding Peizhu[2], Zheng Chengde[1]

(1. Department of Art and Science, Dalian Railway Institute, Dalian 116028, P R China;

2. Department of Physics, Jilin University, Changchun 130023, P R China)

Abstract: TFD equation in quantum mechancis is established. The existence theorems of the solutions are obtained by singular boundary value problem theory of ordinary differential equation and upper and lower solution method.

Key words: TFD equation; singular boundary value problem; existence; upper and lower solution