DOI: 10.13656/j.cnki.gxkx.1999.02.009
广西科学 Guangxi Sciences 1999, 6 (2): 100~102

Morse振子的径向阶梯算符
Radial Ladder Operators of the Morse Oscillator

张文英
Zhang Wenying
(广西大学物理系　南宁市西乡塘路10号　530004)
(Dept. of Physics, Guangxi Univ., 10 Xixiangtanglu, Nanning, Guangxi, 530004)

摘要　用因式分解法找到 Morse振子的径向阶梯算符,用于计算能量本征值和径向本征函数,并给出归一化系数的一般公式.

关键词　Morse振子　径向 Schrödinger方程　径向阶梯算符
中图法分类号　O 413.1

Abstract　Radial ladder operators of the Morse oscillator are found by factoring the radial Schrödinger equation of the system. Eigen values of the energy and radial eigen functions are calculated with the ladder operators. The general formulas of the normaliging factors are given as well.

Key words　Morse oscillator, radial Schrödinger equation, radial ladder operator

Morse势

$$V(r) = D(e^{-2Tx} - 2e^{-Tx}), \quad x = \frac{r - r_0}{r_0}, \qquad (1)$$

极好地描述了双原子分子的振动[1].在式(1)中,r是核间距离,r_0是平衡距离,$D > O$是平衡距离处势阱深度,$T > 1$是无量纲参数.Morse振子的径向Schrödinger方程是

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{2}{\hbar^2}(E - V) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0, \qquad (2)$$

其中 $l = 0, 1, 2, \cdots$ 是角量子数,_ 是双原子折合质量,E是相对运动能量(束缚态,$-D < E < 0$).令 $R(r) = \frac{u(x)}{r_0(x+1)}$ 代入方程(2),经计算得到

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2r_0^2}{\hbar^2}(E - V) + \frac{l(l+1)}{(x+1)^2}\right]u(x) = 0. \qquad (3)$$

实际上,双原子分子的转动能比振动能小得多.若略去转动能(令 $l = 0$),方程(3)有精确解;计及转动能(即 $l \neq 0$),方程(3)需用微扰论或用近似势代替离心势处理.其级数解法是人们熟悉的[1].

近年来,有许多作者用阶梯算符法求解具有分立谱的Schrödinger方程,使量子体系的求解过程变得简洁优美[2~8].文献[3]曾用阶梯算符法处理过Morse振子,只得到能谱而未讨论波函数.在现有文献中,尚未见更进一步的工作.本文讨论方程(3)的阶梯算符,用于计算能量本征值和径向本征函数,并给出归一化系数的一般公式.

将方程(3)作适当变换和近似处理.首先用近似势代替离心势[1],即

$$\frac{1}{(x+1)^2} \approx C_0 + C_1 e^{-Tx} + C_2 e^{-2Tx}, \qquad (4)$$

其中的系数分别是

$$C_0 = 1 - \frac{3}{T} + \frac{3}{T^2}, C_1 = \frac{4}{T} - \frac{6}{T^2}, C_2 = -\frac{1}{T} + \frac{3}{T^2}. \qquad (5)$$

然后令

$$U^2 = -\frac{2r_0^2 E}{\hbar^2} + l(l+1)C_0, \text{(实数 } U > 0) \qquad (6)$$

$$X = \frac{U}{T}, \quad (X > 0,\text{待定}) \qquad (7)$$

$$V_1^2 = \frac{2r_0^2 D}{\hbar^2} - \frac{1}{2}l(l+1)C_1, \text{(实数 } V_1 > 0) \qquad (8)$$

$$V_2^2 = \frac{2r_0^2 D}{\hbar^2} + l(l+1)C_2, \text{(实数 } V_2 > 0) \qquad (9)$$

$$y = \frac{2V_2}{T}e^{-Tx}. \qquad (10)$$

利用式(4)和(6)~(10),可将方程(3)变为

$$\left[-\frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{y}\frac{d}{dy} - \frac{V_1^2}{TV_2}\frac{1}{y} + \frac{X^2}{y^2}\right]u_X(y) = -\frac{1}{4}u_X(y). \qquad (11)$$

1　εl 的阶梯算符

将方程(11)左边的二阶微分算符进行因式分解,可得到两伙伴方程

1998-06-24收稿.

$$[-\frac{d}{dy}+\frac{X-1}{y}-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}(2X-1)}][\frac{d}{dy}+\frac{X}{y}-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}(2X-1)}]u_X(y)=[\frac{V_{l1}^4}{T^2V_{l2}^2(2X-1)^2}-\frac{1}{4}]u_X(y), \tag{12}$$

$$[\frac{d}{dy}+\frac{X+1}{y}-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}(2X+1)}][-\frac{d}{dy}+\frac{X}{y}-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}(2X+1)}]u_X(y)=[\frac{V_{l1}^4}{T^2V_{l2}^2(2X+1)^2}-\frac{1}{4}]u_X(y). \tag{13}$$

定义算符

$$(B_X)_+=-\frac{d}{dy}+\frac{X-1}{y}-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}(2X-1)}, \tag{14}$$

$$(B_X)_-=\frac{d}{dy}+\frac{X}{y}-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}(2X-1)}, \tag{15}$$

且令系数

$$b_X=\frac{V_{l1}^4}{T^2V_{l2}^2(2X-1)^2}-\frac{1}{4}, \tag{16}$$

则伙伴方程(12)和(13)变为

$$(B_X)_+(B_X)_-u_X(y)=b_Xu_X(y), \tag{17}$$

$$(B_{X+1})_-(B_{X+1})_+u_X(y)=b_{X+1}u_X(y). \tag{18}$$

用 $(B_X)_-$ 和 $(B_{X+1})_+$ 分别左乘方程(17)和(18),得到

$$(B_X)_-(B_X)_+[(B_X)_-u_X(y)]=b_X[(B_X)_-u_X(y)], \tag{19}$$

$$(B_{X+1})_+(B_{X+1})_-[(B_{X+1})_+u_X(y)]=b_{X+1}[(B_{X+1})_+u_X(y)]. \tag{20}$$

将方程(19)和(20)分别与方程(18)和(17)对比,容易看出

$$(B_X)_-u_X(y)=b_X^-u_{X-1}(y), \tag{21}$$

$$(B_{X+1})_+u_X(y)=b_{X+1}^+u_{X+1}(y). \tag{22}$$

其中 b_X^- 和 b_{X+1}^+ 是与归一化有关的系数.所以,$(B_X)_-$ 和 $(B_X)_+$ 分别是对参数 X 的降算符和升算符.

2 能量本征值

根据式(6)和(7),对于能量 E 一定的束缚态,由于角动量不能任意大(否则离心势趋于∞,这与 E 一定矛盾),参数 X 应有上限.设当 E 一定时 X 的最大值为 X',即没有 $X>X'$ 的态,则根据式(22)必有如下关系

$$(B_{X'+1})_+u_{X'}(y)=[-\frac{d}{dy}+\frac{X'}{y}-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}(2X'+1)}]u_{X'}(y)=0. \tag{23}$$

用 $(B_{X'+1})_-$ 左乘方程(23),根据方程(18)和式(16),有

$$(B_{X'+1})_-(B_{X'+1})_+u_{X'}(y)=[\frac{V_{l1}^4}{T^2V_{l2}^2(2X'+1)^2}-\frac{1}{4}]u_{X'}(y)=0. \tag{24}$$

因为 $u_{X_l}(y)\neq 0$,所以根据方程(24),必须有

$$\frac{V_{l1}^4}{T^2V_{l2}^2(2X'+1)^2}-\frac{1}{4}=0. \tag{25}$$

由方程(25)可解得

$$X'=-\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}}-\frac{1}{2},\text{(舍去,因不满足 } X'>0)$$

$$X'=\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}}-\frac{1}{2}. \tag{26}$$

根据式(26)和(21),当 E 一定时 X 的可能取值应为

$$X=\frac{V_{l1}^2}{TV_{l2}}-(n+\frac{1}{2}),\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{27}$$

由式(27)和(6)~(9),可得 Morse振子的能量本征值

$$E_{n,l}=-\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}[\sqrt{\frac{2\mu r_0^2D}{\hbar^2}}\frac{1-\frac{C_1}{2}\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2D}}{\sqrt{1+C_2\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2D}}}-T(n+\frac{1}{2})]^2+C_0\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2D},\ n,l=0,1,2,\cdots. \tag{28}$$

式(28)与级数解法的结果相同[1].

3 系数 $b_{X_l}^+$ 和 $b_{X_l}^-$

首先需明确波函数 $u_X(y)$ 的归一化条件.根据波函数 $R_X(r)$ 的归一化条件,利用关系 $R(r)=\frac{u(x)}{r_0(x+1)}$,$x=\frac{r-r_0}{r_0}$ 以及式(10),可得

$$\int_0^\infty R_X^*(r)R_X(r)r^2dr=\frac{r_0}{T}\int_0^{y_{-1}}u_X^*(y)u_X(y)y^{-1}dy=1, \tag{29}$$

其中 $y_{-1}=\frac{2V_{l2}}{T}e^T$.因为在所有实际情形[1]中,$y_{-1}\gg 1$,所以为了计算方便,式(29)中右边的积分距间可近似取为 $y=(0,\infty)$.这样,波函数 $u_X(y)$ 的归一化条件变为

$$\frac{r_0}{T}\int_0^\infty u_X^*(y)u_X(y)y^{-1}dy=1. \tag{30}$$

用 $(B_X)_+$ 左乘式(21),并利用方程(17)以及式(22)和(30),可得到系数 b_X^+ 和 b_X^- 的一个关系

$$b_X^+b_X^-=b_X. \tag{31}$$

由一阶微分方程(23),可解出 E 一定、X 取最大值 X' 的径向本征函数

$$u_{X'}(y)=[\frac{T(2X')}{r_0 0\,\Gamma(2X'+1)}]^{1/2}y^{X'}e^{-y/2}, \tag{32}$$

式(32)中的波函数是用积分法归一化的.根据式(21),用 $(B_{X'})_-$ 作用于 $u_{X'}(y)$ 得到

$$u_{X'-1}(y)=\frac{1}{b_{X'}^-}[\frac{T(2X')}{r_0 0\,\Gamma(2X'+1)}]^{1/2}$$

$$\frac{(2\lambda_l')}{(2\lambda_l'-1)} y^{\lambda_l'-1} e^{-y/2} \cdot [(2\lambda_l'-1)-y]. \quad (33)$$

将式(33)代入式(30)，经计算得到

$$b^{-}_{\lambda_l'} = \frac{2\lambda_l'}{(2\lambda_l'-1)\sqrt{2\lambda_l'-2}}. \quad (34)$$

将式(34)代入式(33)得到归一化的径向本征函数

$$u_{\lambda_l'-1}(y) = \left[\frac{\Gamma(2\lambda_l'-2)}{r_0 1!\,\Gamma(2\lambda_l')}\right]^{1/2} y^{\lambda_l'-1} e^{-y/2}\cdot [(2\lambda_l'-1)-y]. \quad (35)$$

同样，用 $(B_{\lambda_l'-1})_-$ 作用于 $u_{\lambda_l'-1}(y)$ 得到

$$u_{\lambda_l'-2}(y) = \frac{-1}{b^{-}_{\lambda_l'-1}}\left[\frac{\Gamma(2\lambda_l'-2)}{r_0 1!\,\Gamma(2\lambda_l')}\right]^{1/2}\frac{(2\lambda_l'-1)}{(2\lambda_l'-3)} y^{\lambda_l'-2} e^{-y/2}\cdot [(2\lambda_l'-3)(2\lambda_l'-2)-2(2\lambda_l'-2)y+y^2]. \quad (36)$$

将式(36)代入式(30)，经计算得到

$$b^{-}_{\lambda_l'-1} = \frac{\sqrt{2(2\lambda_l'-1)(2\lambda_l'-2)}}{(2\lambda_l'-3)\sqrt{(2\lambda_l'-4)}}. \quad (37)$$

将式(37)代入式(36)得到归一化的径向本征函数

$$u_{\lambda_l'-2}(y) = \left[\frac{\Gamma(2\lambda_l'-4)}{r_0 2!\,\Gamma(2\lambda_l'-1)}\right]^{1/2} y^{\lambda_l'-2} e^{-y/2}\cdot [(2\lambda_l'-3)(2\lambda_l'-2)-2(2\lambda_l'-2)y+y^2]. \quad (38)$$

从式(34)和(37)看出，系数 $b^{-}_{\lambda_l}$ 的一般公式是

$$b^{-}_{\lambda_l} = b^{-}_{\lambda_l'-n} = \frac{\sqrt{(n+1)(2\lambda_l'-n)(2\lambda_l'-2n)}}{[2\lambda_l'-(2n+1)]\sqrt{[2\lambda_l'-2(n+1)]}}, \quad (39)$$

由式(31)、(39)和(16)可得系数 $b^{+}_{\lambda_l}$ 的一般公式

$$b^{+}_{\lambda_l} = b^{+}_{\lambda_l'-n} = \frac{\sqrt{(n+1)(2\lambda_l'-n)[2\lambda_l'-2(n+1)]}}{[2\lambda_l'-(2n+1)]\sqrt{2\lambda_l'-2n}}. \quad (40)$$

4 径向本征函数

根据式(21)和(39)，用降算符作用于 $u_{\lambda_l'}(y)$ 若干次，不需用式(30)可直接得到参数 λ_l 取其它值的归一化径向本征函数

$$u_{\lambda_l}(y) = u_{\lambda_l'-n}(y) = \prod_{j=0}^{n-1}\frac{(B_{\lambda_l'-j})_-}{b^{-}_{i-j}} u_{\lambda_l'}(y), \quad (41)$$

$$(B_{\lambda_l'-j})_- = \frac{d}{dy} + \frac{\lambda_l'-j}{y} - \frac{(2\lambda_l'+1)}{2[2(\lambda_l'-j)-1]}. \quad (42)$$

利用式(41)和(42)，计算了 $n=3,4,5$ 三个归一化径向本征函数

$$u_{\lambda_l'-3}(y) = \left[\frac{\Gamma(2\lambda_l'-6)}{r_0 3!\,\Gamma(2\lambda_l'-2)}\right]^{1/2} y^{\lambda_l'-3} e^{-y/2}\cdot [(2\lambda_l'-5)(2\lambda_l'-4)(2\lambda_l'-3)-3(2\lambda_l'-4)(2\lambda_l'-3)y+3(2\lambda_l'-3)y^2-y^3], \quad (43)$$

$$u_{\lambda_l'-4}(y) = \left[\frac{\Gamma(2\lambda_l'-8)}{r_0 4!\,\Gamma(2\lambda_l'-3)}\right]^{1/2} y^{\lambda_l'-4} e^{-y/2}\cdot [(2\lambda_l'-7)(2\lambda_l'-6)(2\lambda_l'-5)(2\lambda_l'-4)-4(2\lambda_l'-6)(2\lambda_l'-5)(2\lambda_l'-4)y+6(2\lambda_l'-5)(2\lambda_l'-4)y^2-4(2\lambda_l'-4)y^3+y^4], \quad (44)$$

$$u_{\lambda_l'-5}(y) = \left[\frac{\Gamma(2\lambda_l'-10)}{r_0 5!\,\Gamma(2\lambda_l'-4)}\right]^{1/2} y^{\lambda_l'-5} e^{-y/2}\cdot [(2\lambda_l'-9)(2\lambda_l'-8)(2\lambda_l'-7)(2\lambda_l'-6)(2\lambda_l'-5)-5(2\lambda_l'-8)(2\lambda_l'-7)(2\lambda_l'-6)(2\lambda_l'-5)y+10(2\lambda_l'-7)(2\lambda_l'-6)(2\lambda_l'-5)y^2-10(2\lambda_l'-6)(2\lambda_l'-5)y^3+5(2\lambda_l'-5)y^4-y^5]. \quad (45)$$

从式(32)、(35)、(38)和(43)～(45)看出，归一化径向本征函数可表示为

$$u_{\lambda_l}(y) = u_{\lambda_l'-n}(y) = \left[\frac{\Gamma(2\lambda_l'-2n)}{r_0 n!\,\Gamma(2\lambda_l'-n+1)}\right]^{1/2} y^{\lambda_l'-n} e^{-y/2}\cdot\left\{\sum_{i=0}^{n-1}(-1)^i C_n^i\left[\prod_{j=i}^{n-1}(2\lambda_l'-2n+j+1)\right]y^i+(-y)^n\right\} = \left\{\frac{\Gamma(2\lambda_l'-2n)\Gamma(2\lambda_l'-n+1)}{r_0 n!\,[\Gamma(2\lambda_l'-2n+1]^2}\right\}^{1/2} y^{\lambda_l'-n} e^{-y/2}\cdot F(-n, 2\lambda_l'-2n+1, y), \quad (46)$$

其中 C_n^i 是组合数，$F(-n, 2\lambda_l'-2n+1, y)$ 是合流超几何级数[9]。利用式(10)和关系 $R(r)=\frac{u(x+1)}{r_0(x+1)}$ 及 $x=\frac{r-r_0}{r_0}$，由式(46)可得到径向本征函数 $R_{\lambda_l}(r)$。式(46)与级数解法的结果相同[1]。

参考文献

1 福里格 S. 实用量子力学(上册). 北京: 人民教育出版社, 1982. 187～194.

2 dela peña L, Montemayor R. Raising and lowering operators and spectral Structure: A concise algebraic technique. American Journal of Physics, 1980, 48(10): 855～860.

3 Ferandez F M, Castro E A. Resolution of the Schrödinger eguation through a simple algebraic technigue. American Journal of Physics, 1984, 52(4): 344～346.

4 喀兴林, 王 敏. 氢原子径向函数的阶梯算符. 大学物理, 1989, 8(12): 1～6.

5 张文英. 用因式分解法求解三维各向同性谐振子, 见: 王殖东, 丁慎训主编. 大学物理研究. 南宁: 广西科学技术出版社, 1995. 114～121.

6 张文英. 高维空间各向同性谐振子的超径向阶梯算符. 大学物理, 1997, 16(1): 21～25.

7 刘宇峰, 曾谨言. 二维与三维氢原子的四类升、降算子, 物理学报, 1997, 46(3): 428～433.

8 刘宇峰, 曾谨言. 三维各向同性谐振子的四类升、降算子. 物理学报, 1997, 46(3): 417～422.

9 王竹溪. 特殊函数概论. 北京: 科学出版社, 1979. 328.

(责任编辑: 黎贞崇)