DOI: 10.13656/j.cnki.gxkx.1998.04.007
广西科学 Guangxi Sciences 1998, 5 (4): 268~ 270

Kratzer振子的径向阶梯算符*

Radial Ladder Operators of the Kratzer 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 Phys., Guangxi Univ, 10 Xixiangtanglu, Nanning, Guangxi, 530004)

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

关键词 Kratzer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 Kratzer oscillator are found by factoring the radial Schrödinger eguation of the system. Eigenvalues of the energy and radial eigenfunctions of the eguation are calculated with the ladder operators. General formulas of the normalizing factors are given as well.

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

A° Kratzer曾用如下势函数

$$V\left(\frac{r}{a}\right) = -2D\left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2}\right) \tag{1}$$

研究双原子分子的振动—— 转动谱,取得相当好的结果[1].在式(1)中,r是原子核间距离,a是平衡距离,$D>0$是平衡距离处势阱的深度. Kratzer振子的径向 Schrödinger方程是

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{2\ E}{\hbar^2} - \frac{4\ D}{\hbar^2}\left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2}\frac{a^2}{r^2}\right) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0, \tag{2}$$

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(对于束缚态,$-D < E < 0$).方程(2)有精确解,其级数解法是人们熟悉的[1].

近年来,许多国内外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[2~6].可是,在现有文献中尚未见到 Kratzer振子的阶梯解法.本文讨论方程(2)的阶梯算符,用于计算能谱和径向本征函数,并给出归一化系数的一般公式.

为了方便,作如下变换,令

$$U^2 = \frac{-2\ a^2 E}{\hbar^2}, (-D < E < 0, 取\ U > 0); \tag{3}$$

$$V^2 = \frac{2\ a^2 D}{\hbar^2}, (D > 0, 取\ V > 0); \tag{4}$$

$$X = \frac{V^2}{U}; \tag{5}$$

$$\lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + V^2}; \tag{6}$$

$$x = \frac{2V^2}{Xa} r; \tag{7}$$

$$R(r) = \left(\frac{2V^2}{Xa}\right)^{3/2}\frac{u(x)}{x}. \tag{8}$$

利用式(3)~(8),可将方程(2)变为

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{X}{x} - \frac{(\lambda-1)\lambda}{x^2}\right]u_X(x) = -\frac{1}{4}u_X(x). \tag{9}$$

用 x^2 左乘方程(9),可得

$$\left[-x^2\frac{d^2}{dx^2} - Xx + \frac{1}{4}x^2\right]u_X(x) = -(\lambda-1)\lambda u_X(x). \tag{10}$$

因为 $D>0$, $-D<E<0$, $U>0$, $V>0$, $l=0,1,2,\cdots$,所以有 $0<U<V$, $X>0$是与能量有关的参数,$\lambda>1$是与角动量有关的参数.

1 λ的阶梯算符

将方程(9)左边的二阶微分算符进行因式分解,可得到两伙伴方程

$$\left[-\frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}\right]\left[\frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}\right]u_X(x) = \frac{1}{4}\left[\left(\frac{X}{\lambda-1}\right)^2 - 1\right]u_X(x), \tag{11}$$

$$\left[\frac{d}{dx} + \frac{\lambda}{x} - \frac{X}{2\lambda}\right]\left[-\frac{d}{dx} + \frac{\lambda}{x} - \frac{X}{2\lambda}\right]u_X(x) =$$

1998-02-18收稿。
* 广西区教委资助项目(桂教财[1995]324号)。

$\frac{1}{4}[(\frac{X}{\lambda})^2 - 1]u_X(x)$. (12)

定义算符

$$(B_X)_+ = -\frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}, \quad (13)$$

$$(B_X)_- = \frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}, \quad (14)$$

且令系数

$$b_X = \frac{1}{4}[(\frac{X}{\lambda-1})^2 - 1], \quad (15)$$

则伴随方程(11)和(12)变为

$$(B_X)_+ (B_X)_- u_X(x) = b_X u_X(x), \quad (16)$$

$$(B_{X\lambda+1})_- (B_{X\lambda+1})_+ u_X(x) = b_{X\lambda+1} u_X(x). \quad (17)$$

用 $(B_X)_-$ 和 $(B_{X\lambda+1})_+$ 分别左乘方程(16)和(17)两边,得到

$$(B_X)_- (B_X)_+ [(B_X)_- u_X(x)] = b_X[(B_X)_- u_X(x)], \quad (18)$$

$$(B_{X\lambda+1})_+ (B_{X\lambda+1})_- [(B_{X\lambda+1})_+ u_X(x)] = b_{X\lambda+1}[(B_{X\lambda+1})_+ u_X(x)]. \quad (19)$$

将方程(18)和(19)分别与方程(17)和(16)对比,容易看出

$$(B_X)_- u_X(x) = b^-_X u_{X\lambda-1}(x), \quad (20)$$

$$(B_{X\lambda+1})_+ u_X(x) = b^+_{X\lambda+1} u_{X\lambda+1}(x), \quad (21)$$

其中 b^-_X 和 $b^+_{X\lambda+1}$ 是与归一化有关的系数.所以,$(B_X)_+$ 是对 λ 的升算符,$(B_X)_-$ 是对 λ 的降算符.

2 能量本征值

由式(16)可知,λ越大,l 就越大,双原子分子转动能量也就越大.可是,对于束缚态,转动能量不能任意大,否则体系将解体,因此 λ 必有上限.设对于一定的 X 存在 λ 的最大值 λ′,即不存在 λ > λ′ 的态,则必有如下关系

$$(B_{X\lambda'+1})_+ u_{X\lambda'}(x) = [-\frac{d}{dx} + \frac{\lambda'}{x} - \frac{X}{2\lambda'}]u_{X\lambda'}(x) = 0. \quad (22)$$

用 $(B_{X\lambda'+1})_-$ 左乘方程(22),并利用方程(17)和式(15),有

$$(B_{X\lambda'+1})_- (B_{X\lambda'+1})_+ u_{X\lambda'}(x) = \frac{1}{4}[(\frac{X}{\lambda'})^2 - 1]u_{X\lambda'}(x) = 0. \quad (23)$$

因为 $u_{X\lambda'}(x) \neq 0$,所以根据方程(23),必须有

$$(\frac{X}{\lambda'})^2 - 1 = 0. \quad (24)$$

由方程(24)解得

λ′ = − X,(舍去,因不满足 λ′ > 1),

λ′ = X. (25)

根据式(25)和(20),当 X 一定时 λ 的可能取值为

$$\lambda = X - n, \quad n = 0, 1, 2, \cdots. \quad (26)$$

由式(26)、(6)、(5)和(3),可求出 Kratzer 振子的能量本征值

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\frac{V^4}{(\lambda+n)^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}V^4[n + \frac{1}{2} + \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 + V^2}]^{-2} \quad (n, l = 0, 1, 2, \cdots) \quad (27)$$

式(27)与级数解法的结果相同[1].

3 系数 $b^+_{X\lambda}$ 和 $b^-_{X\lambda}$

为了确定系数 $b^+_{X\lambda}$ 和 $b^-_{X\lambda}$,首先需明确波函数 $u_{X\lambda}(x)$ 的正交归一关系.根据波函数 $R_X(r)$ 的正交归一关系,利用式(7)和(8)可得

$$\int_0^\infty R^*_X(r) R_{X'\lambda'}(r) r^2 dr = (\frac{X}{X'})^{1/2}\int_0^\infty u^*_{X\lambda}(x) u_{X'\lambda'}(\frac{X}{X'}x)dx = W_{XX'}. \quad (28)$$

然后需计算升降算符 $(B_X)_+$ 和 $(B_X)_-$ 的厄密共轭.为此需计算 $(\frac{d}{dx})$ 的厄密共轭.设 $f(x)$ 和 $g(x)$ 是满足边界条件的任意波函数

$$\int_0^\infty f^*(x)[\frac{d}{dx}g(x)]dx = \int_0^\infty [-\frac{d}{dx}f(x)]^* g(x)dx,$$

可见,$(\frac{d}{dx})$ 的厄密共轭是

$$(\frac{d}{dx})^+ = -\frac{d}{dx}. \quad (29)$$

根据式(29),$(B_X)_+$ 和 $(B_X)_-$ 的厄密共轭是

$$(B_X)^+_+ = [-\frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}]^+ = [\frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}] = (B_X)_-, \quad (30)$$

$$(B_X)^+_- = [\frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}]^+ = [-\frac{d}{dx} + \frac{\lambda-1}{x} - \frac{X}{2(\lambda-1)}] = (B_X)_+. \quad (31)$$

分别求式(20)和(21)的模方,利用式(31)和(30)以及方程(16)和(17),有

$$|b^-_X|^2 = \langle X|(B_X)_+ (B_X)_-|X\rangle = b_X, \quad (32)$$

$$|b^+_{X\lambda+1}|^2 = \langle X|(B_{X\lambda+1})_- (B_{X\lambda+1})_+|X\rangle = b_{X\lambda+1}. \quad (33)$$

由式(32)、(33)和(15),可得到系数 $b^+_{X\lambda}$ 和 b^-_X 的一个关系

$$|b^-_X|^2 - |b^+_{X\lambda+1}|^2 = (\frac{X}{2})^2\frac{2\lambda-1}{(\lambda-1)^2\lambda^2}. \quad (34)$$

由方程(16),并利用式(20)和(21),可得到系数 $b^+_{X\lambda}$ 和 b^-_X 的另一个关系

$$b^+_{X\lambda} b^-_X = b_X. \quad (35)$$

根据方程(22)和式(21),当 X 一定、λ 取最大值 λ′ = X 时,有 $b^+_{XX+1} = 0$.根据式(15),有 $b_{XX+1} = 0$.将 b^+_{XX+1} 和 b_{XX+1} 的值代入式(35),看出 b^-_{XX+1} 可取任意值,为了方便取 $b^-_{XX+1} = 0$.这样,利用式(34)和(35),就可以求出 X 一定、λ 取其他值时系数 b^+_X 和 b^-_X 的值.例如:

$$b^{+}_{X,X} = \frac{\sqrt{2X-1}}{2X-2}, b^{+}_{X,X-1} = \frac{\sqrt{2(2X-2)}}{2X-4}, b^{+}_{X,X-2} = \frac{\sqrt{3(2X-3)}}{2X-6};$$

$$b^{-}_{X,X} = \frac{\sqrt{2X-1}}{2X-2}, b^{-}_{X,X-1} = \frac{\sqrt{2(2X-2)}}{2X-4}, b^{-}_{X,X-2} = \frac{\sqrt{3(2X-3)}}{2X-6}.$$

可见,系数 b^{+}_{X} 和 b^{-}_{X} 的一般公式是

$$b^{+}_{X} = b^{+}_{X,X-n} = \frac{\sqrt{(n+1)[2X-(n+1)]}}{2X-2(n+1)}, \quad (36)$$

$$b^{-}_{X} = b^{-}_{X,X-n} = \frac{\sqrt{(n+1)[2X-(n+1)]}}{2X-2(n+1)}. \quad (37)$$

4 径向本征函数

由一阶微分方程(22),可解出 X 一定,λ 取最大值 $\lambda' = X$ 时的径向本征函数

$$u_{X,X}(x) = \left[\frac{1}{0!(2X)\Gamma(2X)}\right]^{1/2} x^{X} e^{-x/2}. \quad (38)$$

式(38)中的波函数是用积分法归一化的. 用降算符作用于 $u_{X'}(x) = u_{X,X}(x)$ 若干次,可直接求出 λ 取其它值的归一化径向本征函数

$$u_{X}(x) = u_{X,X-n}(x) = \prod_{j=0}^{n-1} \frac{(B_{X,X-j})_{-}}{b^{-}_{X,X-j}} u_{X,X}(x), \quad (39)$$

$$(B_{X,X-j})_{-} = \frac{d}{dx} + \frac{X-j-1}{x} - \frac{X}{2(X-j-1)}. \quad (40)$$

利用式(39)和(40),计算了 $n=1,2,3$ 三个归一化的径向本征函数

$$u_{X,X-1}(x) = \left[\frac{1}{1!(2X)\Gamma(2X-1)}\right]^{1/2} x^{X-1} e^{-x/2}[(2X-2)-x], \quad (41)$$

$$u_{X,X-2}(x) = \left[\frac{1}{2!(2X)\Gamma(2X-2)}\right]^{1/2} x^{X-2} e^{-x/2}[(2X-4)(2X-3)-2(2X-3)x+x^{2}], \quad (42)$$

$$u_{X,X-3}(x) = \left[\frac{1}{3!(2X)\Gamma(2X-3)}\right]^{1/2} x^{X-3} e^{-x/2}[(2X-6)(2X-5)(2X-4)-3(2X-5)(2X-4)x+3(2X-4)x^{2}-x^{3}]. \quad (43)$$

由式(38)、(41)~(43)看出,并注意到关系 $X-n=\lambda$,归一化的径向本征函数可表示成

$$u_{X}(x) = u_{X,X-n}(x) = \left[\frac{1}{n!(2X)\Gamma(2X-n)}\right]^{1/2} x^{X-n} e^{-x/2}\left\{\sum_{i=0}^{n-1}(-1)^{i} C_{n}^{i}\left[\prod_{j=i}^{n-1}(2X-2n+j)\right]x^{i} + (-x)^{n}\right\} = \left\{\frac{\Gamma(X+\lambda)}{n!(2X)[\Gamma(2\lambda)]^{2}}\right\}^{1/2} x^{\lambda} e^{-x/2} F(-n, 2\lambda, x), \quad (44)$$

其中 C_{n}^{i} 是组合数, $F(-n,2\lambda,x)$ 是合流超几何级数[7]. 式(44)中的径向本征函数与级数解法的结果相同[1]. 由式(44),利用式(7)和(8)可得径向本征函数 $R_{X}(r)$.

5 ε 的阶梯算符

将方程(10)进行因式分解,可得另两伙伴方程

$$\left[-x\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}x - (X-1)\right]\left[x\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}x - X\right]u_{X}(x) = [(X-1)X-(\lambda-1)\lambda]u_{X}(x), \quad (45)$$

$$\left[x\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}x - (X+1)\right]\left[-x\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}x - X\right]u_{X}(x) = [X(X+1)-(\lambda-1)\lambda]u_{X}(x). \quad (46)$$

定义算符

$$(A_{X})_{+} = -x\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}x - (X-1), \quad (47)$$

$$(A_{X})_{-} = x\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}x - X, \quad (48)$$

且令系数

$$a_{X} = [(X-1)X-(\lambda-1)\lambda], \quad (49)$$

则伙伴方程(45)和(46)变为

$$(A_{X})_{+}(A_{X})_{-}u_{X}(x) = a_{X}u_{X}(x), \quad (50)$$

$$(A_{X+1,\lambda})_{-}(A_{X+1,\lambda})_{+}u_{X}(x) = a_{X+1,\lambda}u_{X}(x). \quad (51)$$

可以证明 $(A_{X})_{+}$ 和 $(A_{X})_{-}$ 分别是对 X 的升算符和降算符

$$(A_{X})_{-}u_{X}(x) = a^{-}_{X}u_{X-1,\lambda}(x), \quad (52)$$

$$(A_{X+1,\lambda})_{+}u_{X}(x) = a^{+}_{X+1,\lambda}u_{X+1,\lambda}(x), \quad (53)$$

其中 a^{-}_{X} 和 $a^{+}_{X+1,\lambda}$ 是与归一化有关的系数.

利用升降算符 $(A_{X})_{+}$ 和 $(A_{X})_{-}$,同样可求出能量本征值和径向本征函数. 系数 a^{+}_{X} 和 a^{-}_{X} 的一般公式是

$$a^{+}_{X} = a^{+}_{\lambda+n,\lambda} = -\frac{\sqrt{n(\lambda+n)(2\lambda+n-1)}}{(\lambda+n-1)}, \quad (54)$$

$$a^{-}_{X} = a^{-}_{\lambda+n,\lambda} = -\frac{\sqrt{n(\lambda+n-1)(2\lambda+n-1)}}{(\lambda+n)}. \quad (55)$$

参考文献

1 福里格 (Fligge S). 实用量子力学上册. 北京: 人民教育出版社, 1982. 183~187.

2 de la Pena L. Raising and lowering operators and spectral structure. Am J Phys, 1980, 48 (10): 855~860.

3 刘宇峰,曾谨言. Runge-Lenz矢量与升降算子. 物理学报, 1997, 46 (7): 1267~1271.

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. 大学物理研究. 南宁: 广西科学技术出版社, 1995. 114~121.

6 张文英. 用因式分解法求解高维空间各向同性谐振子. 广西科学, 1997, 4 (3): 174~178.

7 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 蒋汉明)