第 52 卷 第 4 期 2003 年 4 月
1000-3290/2003/52(04)/0786-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 52, No. 4, April, 2003

关于三维各向同性谐振子径向矩阵元计算的讨论*

狄尧民

(徐州师范大学物理系,徐州 221009)

(2002 年 7 月 19 日收到;2002 年 9 月 28 日收到修改稿)

根据广义 Laguerre 多项式的数学性质,导出了较为简单的三维各向同性谐振子径向矩阵元的普遍公式,并在这基础上计算了一些重要特殊情形的径向矩阵元:矢径 r 整数次幂的平均值,电偶极跃迁矩阵元和电四极跃迁矩阵元.

关键词:三维各向同性谐振子,径向矩阵元,广义 Laguerre 多项式,偶极跃迁,四极跃迁

PACC:0365,0230

1. 引 言

三维各向同性谐振子是量子力学中最重要的可解势之一,对它的研究不仅具有重要的理论意义,同时也在核结构理论等的研究中有实际意义[1,2].对于径向矩阵元的计算已经有过讨论[3,4].文献[3]给出了矢径 r 整数次幂径向矩阵元的一般表达式,文献[4]给出了径向矩阵元的递推公式.但矩阵元的一般表达式较为复杂,难以直接应用,而递推公式因缺少一些特殊值而难以实施.本文根据广义 Laguerre 多项式的数学性质,导出了较为简单的径向矩阵元的普遍公式,并在这基础上计算了一些重要特殊情形的径向矩阵元:矢径 r 整数次幂的平均值,电偶极跃迁矩阵元和电四极跃迁矩阵元.这些结果为实际应用提供了方便.

2. 矩阵元的一般表达式

采用自然单位($\hbar=\mu=\omega=1$),三维各向同性谐振子的径向方程为[2]

$$R''+\frac{1}{2}R'+\left[2E-r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0. \tag{1}$$

令

$$R(r)=r^l\exp(-r^2/2)u(r), \tag{2}$$

再令

$$\xi=r^2,$$

可得

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+\left[\left(l+\frac{3}{2}\right)-\xi\right]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}+\left[\frac{1}{2}E-\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}\right)\right]u=0. \tag{3}$$

而物理上允许的解要求 u 前面的系数为 0 或者负整数,即

$$\frac{1}{2}E-\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}\right)=-n_r\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{4}$$

方程(4)即化为 Laguerre 方程[5],其解为广义 Laguerre 多项式 $\mathrm{L}_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\xi)$.所以径向波函数具有如下形式:

$$R_{n_rl}(r)=\widetilde{N}_{n_rl}r^l\exp(-r^2/2)\mathrm{L}_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(r^2), \tag{5}$$

式中 n_r 和 l 分别为径向量子数和角量子数.利用广义 Laguerre 多项式的正交归一关系[5]

$$\int_0^\infty z^\mu\mathrm{e}^{-\mu}\mathrm{L}_n^u(z)\mathrm{L}_{n'}^\mu(z)\mathrm{d}z=\frac{\Gamma(\mu+n+1)}{n!}\delta_{nn'}, \tag{6}$$

可以得径向波函数的归一化系数

$$\widetilde{N}_{n_rl}=\left[\frac{2\cdot n_r!}{\Gamma\left(n_r+l+\frac{3}{2}\right)}\right]^{1/2}. \tag{7}$$

本文给出的径向波函数形式具有归一化常数较为简单和便于使用广义 Laguerre 多项式的数学性质等优点.

用(5)式及广义 Laguerre 多项式的一个重要积分公式[5]

* 江苏省教育厅自然科学基金资助的课题.

$$\int_0^\infty z^\lambda e^{-z} L_n^\mu(z) L_{n'}^{\mu'}(z) dz$$

$$= (-1)^{n+n'}\Gamma(\lambda+1)\sum_k \binom{\lambda-\mu}{n-k}$$

$$\times \binom{\lambda-\mu'}{n'-k}\binom{\lambda+k}{k}, \tag{8}$$

即可以方便地导出矢径整数次幂径向矩阵元的普遍公式

$$\langle n_r l \mid r^k \mid n'_r l'\rangle$$

$$= \widetilde{N}_{n_r l}\widetilde{N}_{n'_r l'}\int_0^\infty r^{(l+l'+k+2)} e^{-r^2} L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(r^2) L_{n'_r}^{l'+\frac{1}{2}}(r^2) dr$$

$$= \frac{1}{2}\widetilde{N}_{n_r l}\widetilde{N}_{n'_r l'}\int_0^\infty \xi^{(l+l'+k+1)/2}$$

$$\times e^{-\xi} L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\xi) L_{n'_r}^{l'+\frac{1}{2}}(\xi) d\xi$$

$$= (-1)^{n_r+n'_r}\frac{1}{2}\widetilde{N}_{n_r l}\widetilde{N}_{n'_r l'}\Gamma((l+l'+k+3)/2)$$

$$\times \sum_m \binom{(l'-l+k)/2}{n_r-m}\binom{(l-l'+k)/2}{n'_r-m}$$

$$\times \binom{(l+l'+k+1)/2+m}{m}. \tag{9}$$

这一表达式较文献[3]给出的简单.

3. 矢径 r 整数次的幂平均值

令(9)式中 $n'_r = n_r$, $l' = l$, 即可得到平均值的计算公式

$$\langle n_r l \mid r^k \mid n_r l\rangle$$

$$= \frac{n_r! \cdot \Gamma(l+(k+3)/2)}{\Gamma\left(n_r+l+\frac{3}{2}\right)}$$

$$\times \sum_m \binom{k/2}{n_r-m}^2 \binom{l+(k+1)/2+m}{m}$$

$$= \frac{n_r! \cdot \Gamma(l+(k+3)/2)}{\Gamma\left(n_r+l+\frac{3}{2}\right)}$$

$$\times \sum_i \binom{k/2}{i}^2 \binom{l+(k+1)/2+n_r-i}{n_r-i}. \tag{10}$$

当 k 为奇数时,求和号中 i 取 0 到 n_r 之间的整数;k 为偶数时,i 取 0 到 $\min(n_r, |k/2|)$ 之间的整数.

当 $k=2$ 时,经计算可得

$$\langle n_r l \mid r^2 \mid n_r l\rangle = 2n_r + l + \frac{3}{2} = n + \frac{3}{2}, \tag{11}$$

式中 $n = 2n_r + l$ 为主量子数. 添上自然单位得

$$\langle n_r l \mid r^2 \mid n_r l\rangle = \left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}$$

$$= \left(n + \frac{3}{2}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}. \tag{12}$$

对于 $k=4$ 时,经计算得

$$\langle n_r l \mid r^4 \mid n_r l\rangle = \left[\left(n_r + l + \frac{5}{2}\right)\left(n_r + l + \frac{3}{2}\right)\right.$$

$$+ 4n_r\left(n_r + l + \frac{3}{2}\right)$$

$$\left. + n_r(n_r - 1)\right]\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^2$$

$$= \frac{1}{8}[3(2n+3)^2 - (2l+3)(2l-1)]$$

$$\times \left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^2. \tag{13}$$

(12)和(13)式给出的结果与文献[6,7]所给出的结果相同,该两式的正确性说明我们给出的表达式(9)和(10)是正确的.

对于 r 奇次幂的计算较为复杂,求和的项数与 n_r 有关. 下面我们给出了一、三次幂的一些计算结果(用自然单位). 对于一次幂,有

$$\langle n_r l \mid r \mid n_r l\rangle = \frac{n_r! \cdot (l+1)!}{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})}$$

$$\times \sum_i \binom{1/2}{i}^2 \binom{l+1+n_r-i}{n_r-i}. \tag{14}$$

具体地有

$$\langle 0l \mid r \mid 0l\rangle = \frac{(l+1)!}{\Gamma\left(l+\frac{3}{2}\right)}, \tag{15}$$

$$\langle 1l \mid r \mid 1l\rangle = \frac{(l+1)!}{\Gamma\left(l+\frac{5}{2}\right)}\left(l+\frac{9}{4}\right), \tag{16}$$

$$\langle 2l \mid r \mid 2l\rangle = \frac{(l+1)!}{\Gamma\left(l+\frac{7}{2}\right)}\left(l^2+\frac{11}{2}l+\frac{225}{32}\right). \tag{17}$$

对于三次幂,有

$$\langle n_r l \mid r^3 \mid n_r l\rangle = \frac{n_r! \cdot (l+2)!}{\Gamma\left(n_r+l+\frac{3}{2}\right)}$$

$$\times \sum_i \binom{3/2}{i}^2 \binom{l+2+n_r-i}{n_r-i}. \tag{18}$$

具体地有

$$\langle 0l\,|\,r^3\,|\,0l\rangle=\frac{(l+2)!}{\Gamma\left(l+\frac{3}{2}\right)},\tag{19}$$

$$\langle 1l\,|\,r^3\,|\,1l\rangle=\frac{(l+2)!}{\Gamma\left(l+\frac{5}{2}\right)}\left(l+\frac{21}{4}\right),\tag{20}$$

$$\langle 2l\,|\,r^3\,|\,2l\rangle=\frac{(l+2)!}{\Gamma\left(l+\frac{7}{2}\right)}\left(l^2+\frac{23}{2}l+\frac{825}{32}\right).\tag{21}$$

有了这些具体表达式，奇数次幂也可以用文献[6]给出的平均值的递推公式了.

4. 电偶极跃迁径向矩阵元的计算

对于电偶极跃迁，角量子数的选择定则为 $\Delta l=\pm 1$，因此对于电偶极跃迁，只要计算径向矩阵元 $\langle n_r l|r|n'_r l\pm 1\rangle$. 当 $l'=l-1$ 时，(9)式中求和号中只有 $m=n_r$ 一项，而 n'_r 只可能等于 n_r 和等于 n_r+1 两种情形；当 $l'=l+1$ 时，(9)式中求和号中只有 $m=n'_r$ 一项，而 n'_r 只可能等于 n_r 和等于 n_r-1 两种情形. 经计算后可得

$$\langle n_r l\,|\,r\,|\,n_r l-1\rangle=\sqrt{\left(n_r+l+\frac{1}{2}\right)},\tag{22}$$

$$\langle n_r l\,|\,r\,|\,n_r+1 l-1\rangle=-\sqrt{(n_r+1)},\tag{23}$$

$$\langle n_r l\,|\,r\,|\,n_r l+1\rangle=\sqrt{\left(n_r+l+\frac{3}{2}\right)},\tag{24}$$

$$\langle n_r l\,|\,r\,|\,n_r-1 l+1\rangle=-\sqrt{n_r}.\tag{25}$$

(24)和(25)式也可以根据 r 的厄米性由(22)和(23)式推出.

5. 电四极跃迁径向矩阵元

电四极跃迁的角量子数的选择定则为 $\Delta L=0,\pm 2$. 用上节中类似的讨论和计算，对于 $\Delta l=\pm 2$，可以得到

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r l-2\rangle=[(n_r+l+1/2)(n_r+l-1/2)]^{1/2},\tag{26}$$

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r+1 l-2\rangle=-2[(n_r+1)(n_r+l+1/2)]^{1/2},\tag{27}$$

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r+2 l-2\rangle=[(n_r+1)(n_r+2)]^{1/2},\tag{28}$$

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r l+2\rangle=[(n_r+l+5/2)(n_r+l+3/2)]^{1/2},\tag{29}$$

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r-1 l+2\rangle=-2[n_r(n_r+l+3/2)]^{1/2},\tag{30}$$

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r-2 l+2\rangle=[(n_r-1)n_r]^{1/2}.\tag{31}$$

对于 $\Delta l=0$ 情形，当 $n_r=n'_r$ 时，已经由(12)式给出；$n_r\neq n'_r$ 时，经计算有

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r+1 l\rangle=-[(n_r+1)(n_r+l+3/2)]^{1/2},\tag{32}$$

$$\langle n_r l\,|\,r^2\,|\,n_r-1 l\rangle=-[(n_r)(n_r+l+1/2)]^{1/2}.\tag{33}$$

同样根据算符的厄米性，(29)—(31)式也可以由(26)—(28)式导出，(33)式由(32)式导出.

[1] Goldhammer P 1963 *Rev. Mod. Phys.* **35** 40

[2] Zeng J Y 1997 *Quantum Mechanics* Vol.I (2nd ed) (Beijing: Science Press) chap 6 (in Chinese) [曾谨言 1997 量子力学(卷 I)第二版(北京 科学出版社)第六章]

[3] Hou C F, Sun X D, Zhou Z X and Li Y 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 385 (in Chinese) [侯春风、孙秀冬、周忠祥、李 焱 1999 物理学报 **48** 385]

[4] Chen C Y 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 607 (in Chinese) [陈昌远 2000 物理学报 **49** 607]

[5] Wang Z X and Guo D R 2000 *Introduction to Special Function* (Beijing: Peking University Press) pp318—323 (in Chinese) [王竹溪、郭敦仁 2000 特殊函数概论(北京 北京大学出版社)第 318—323 页]

[6] Qian B C and Zeng J Y 1999 *Analysis of Exercise in Quantum Mechanics* Vol.I (2nd ed) (Beijing: Science Press) pp134 – 135 (in Chinese) [钱伯初、曾谨言 1999 量子力学习题精选和剖析(上册)(北京 科学出版社)第 134—135 页]

[7] Cha X W 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 723 (in Chinese) [查新未 2002 物理学报 **51** 723]

Discussion on the calculation of radial matrix elements of three-dimensional isotropic oscillator*

Di Yao-Min

(*Department of Physics*, *Xuzhou Normal University*, *Xuzhou* 221009, *China*)

(Received 19 July 2002; revised manuscript received 28 September 2002)

Abstract

A concise general formula of the radial matrix element of the three-dimensional isotropic oscillator is derived using the properties of the general Laguerre polynomials. Some important special cases, such as the average value of the integer power of radial vector, the matrix element of the electric dipole transition and the element of the electric quadrupole transition, are obtained from the general formula.

Keywords: three-dimensional isotropic oscillator, radial matrix element, general Laguerre polynomials, dipole transition, quadrupole transition

PACC: 0365, 0230

* Project supported by the Natural Science Foundation of the Education Bureau of Jiangsu Province, China.