

q 变形转动振子模型 (I)*

q 振子与双原子分子振动谱

阎 宏 常 哲 郭汉英¹⁾

中国科学院理论物理研究所, 北京, 100080

1990 年 10 月 31 日收到

我们提出具有量子群对称性的 q 变形转动振子模型, 并采用这一模型对一类微观系统的转动振动谱给出相当精确的描述。本文集中讨论 q 振子模型, 指出, q 振子代数的表示及相应的能级结构可以准确地描述双原子分子的红外振动谱、振动喇曼谱、电子跃迁振动谱及相应的选择定则。

PACC: 7125; 0210; 0365

一、引 言

量子群、量子杨-Baxter 方程的优美的数学结构、与一些物理学的前沿问题的联系, 引起了极大的关注^[1-6]。通常认为, 量子群中描述通常 Lie 代数畸变的参数 q , 与普朗克常数 $\hbar$ 是联系在一起的。在 q 不是单位根的情形, $q = \exp \hbar$ 。因此, 当 $\hbar \rightarrow 0$ 时, $q \rightarrow 1$, 量子包络代数回到 Lie 代数, 量子杨-Baxter 方程回到经典杨-Baxter 方程, 等等。但是, 正如我们所指出的, 这一点是不确切的。

在文献[7—12]中, 我们强调指出, q 变形与 $\hbar$ 量子化在原则上是两个独立的概念。一方面, 在经典系统中, 通过 q 变形, 可以在经典的意义下得到与量子包络代数同构的 q 变形代数, 可以建立具有这种对称性的 q 变形系统。另一方面, 在通常的量子系统中, 也可以通过 q 变形, 得到量子包络代数, 以及具有这种对称性的 q 变形量子系统。曾详细地分析了 q 振子系统, 并利用经典和量子的 q 振子, 实现了 $SU_{q, \hbar \rightarrow 0}(2)$ 与 $SU_{q, \hbar}(2)$, 即 $SU(2)$ 代数的经典与量子 q 变形代数。

我们知道, $SU(2)$ 代数可以精确地描述系统的转动。相应地, $SU_{q, \hbar \rightarrow 0}(2)$ 与 $SU_{q, \hbar}(2)$ 也可以分别精确地描述经典与量子 q 变形系统的转动。在振子表象中, 由于 $SU_q(2)$ 的 Casimir 算子与 q 振子的哈密顿量对易。因此, 可以建立一个严格可解的、具有“量子群”对称性的 q 变形转动振子模型。与通常的转动振子模型相比较, q 变形转动振子模型所描述的转动与振动是高度非线性的。变形参数 q 描写了偏离通常的转动、振动的程度。本文及相继的工作中详细分析这一 q 变形转动振子模型, 并用这一模型描述一

* 国家自然科学基金资助的课题。

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)。

大类非线性系统的转动与振动模式。将提出 q 转动振子模型的哈密顿量,然后指出,通常的转动振动模型只能在一级近似下描述的双原子分子的转动振动谱,可以由 q 变形转动振子模型给予更为精确的描述。

我们知道^[11],通常将描述双原子分子的转动振动模型的哈密顿量写为

$$H = H^e + H^v + H^r. \quad (1)$$

这里 H^e , H^v 和 H^r 分别对应于电子跃迁、系统的振动和转动的哈密顿量。在一级近似下, H^v 和 H^r 可分别取成谐振子和刚性转子 ($SU(2)$ 群的 Casimir 算符) 的哈密顿量。这样可给出双原子分子谱的大致结构。但更细致地光谱数据分析表明,必须对谐振子和刚性转子做非线性修正,才能准确地与实验拟合^[13]。 q 转动振子模型的要点是:把谐振子和刚性转子看作是 $q = 1$ 的 q 转动振子,那么就有一个更普遍的哈密顿量,即 q 转动振子模型的哈密顿量为

$$H_q = H^e + H_q^v + H_q^r. \quad (2)$$

这里 H_q^v 与 H_q^r 分别为 q 振子的哈密顿量与在振子表象中的量子代数 $SU_q(2)$ 的 Casimir 算符。用这样一个与 $SU_q(2)$ 对称性密切相关的 q 转动振子系统来描述双原子分子的转动振动谱。分析表明,适当选择 q 参数, q 转动振子模型可以准确地描述双原子分子的振动转动谱。

本文将给出一组 q 振子代数的表示及相应的能级结构和选择定则,集中探讨双原子分子的振动谱,关于转动光谱等的分析在文献[14]中给出。

二、双原子分子的谱结构

双原子分子的振动方式,最简单的假设是:分子中每个原子都以简谐方式朝向、背离另一原子而运动。两个原子的这种运动可以很容易化为单个质点围绕其平衡位置的谐振动,即化为谐振子模型。谐振子模型的哈密顿量为

$$H^v = \frac{P^2}{2m} + \frac{m}{2} (2\pi\nu_0)^2 x^2. \quad (3)$$

为方便起见,引进复坐标形式

$$\begin{aligned} z &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{P}{(m h \nu_0)^{1/2}} + i \left(\frac{m \nu_0 (2\pi)^2}{h} \right)^{1/2} x \right); \\ \bar{z} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{P}{(m h \nu_0)^{1/2}} - i \left(\frac{m \nu_0 (2\pi)^2}{h} \right)^{1/2} x \right). \end{aligned} \quad (4)$$

谐振子哈密顿量(3)式则可写为

$$H^v = \frac{1}{2} (z\bar{z} + \bar{z}z) h \nu_0. \quad (5)$$

哈密顿量 H^v 的本征值为

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) h \nu_0. \quad (6)$$

振子代数 $\mathcal{H}(1)$ 在 X 表象中的表示为熟知的厄密多项式形式,

$$\phi_v = (\sqrt{\pi} 2^v v!)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} X^2} H_v(X) = N_v H_v(X) e^{-\frac{1}{2} X^2} \quad (7)$$

这里 $X = \left(\frac{(2\pi)^2 m \nu_{\text{H}}}{h} \right)^2 x = \alpha x$, $N_{\nu} = (\sqrt{\pi} 2^{\nu} \nu!)^{-\frac{1}{2}}$, $H_{\nu}(X)$ 为厄密多项式.

如果分子在其平衡位置上有一偶极矩(由两个不同原子组成的分子总是这样的), 在核间距改变时, 这个偶极矩也在改变. 在一级近似下, 可以假设偶极矩随核间距的改变是线性的. 因此, 偶极矩改变的频率等于机械振动的频率. 从而偶极矩发射频率为 ν 的光子. 反之, 如果分子吸收一个能量为 ν 的光子, 就会产生振动.

振子从较高激发态到较低激发态跃迁则发射光子. 吸收一个光子则发生反过程. 发射或吸收的光子波数为

$$\nu = \frac{E_{\nu'}}{hc} - \frac{E_{\nu''}}{hc} = G(\nu') - G(\nu''). \quad (8)$$

这里 $G(\nu) = \frac{E(\nu)}{hc} = \frac{\nu_{\text{H}}}{c} \left(\nu + \frac{1}{2} \right) = \omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right)$, 是用波数表示的项频.

计算偶极矩的发射矩阵元, 可得振子的选择定则为

$$\Delta \nu = \nu' - \nu'' = \pm 1. \quad (9)$$

从而振子辐射频率为

$$\nu = G(\nu + 1) - G(\nu) = \omega, \quad (10)$$

即辐射光频率等于振子频率, 所有跃迁都产生相同频率的辐射.

当光子被气体(或液体、固体)散射时, 可观察到喇曼效应. 在谐振子理论中, 喇曼效应的选择定则与发射谱一致, 即

$$\Delta \nu = \pm 1. \quad (11)$$

跃迁只能在相邻的振动态中发生. 因此, 喇曼光谱包括一条斯托克斯线与一条反斯托克斯线. 这两条谱线从原来的人射线向两边移动

$$|\Delta \nu| = G(\nu + 1) - G(\nu) = \omega. \quad (12)$$

可见光与紫外光谱涉及电子跃迁,

$$\nu = T' - T'' = (T'_e - T''_e) + (G' - G''). \quad (13)$$

这里 T_e 为分子的电子能级波数, 从而 $T'_e - T''_e$ 为两个电子能级差的波数.

线性谐振子模型很好地再现了振动光谱的主要特征. 但光谱的较精细分析表明, 观测谱与振子谱有相当差别. 光谱间隔不是严格等距的, 而是向短波或长波方向带距变窄. 这就要引入非线性修正. 非线性修正振子的能级由下式给出:

$$\begin{aligned} E_{\nu} = & hc\omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - hc\omega_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 \\ & + hc\omega_e y_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^3 + \dots \end{aligned} \quad (14)$$

这里 ω_e 为振子的本征振动波数, x_e, y_e 分别为二次幂、三次幂修正系数($1 \gg x_e \gg y_e$). 实验表明, 适当选择各级修正系数, (14)式给定的能级准确地与观察值相符.

这种振子的非线性处理, 在很大程度上是经验性的. 准确求出非线性振子的波函数非常困难. 所以实际上也难以准确地给出选择定则. 因此, 发展一种振动谱与实验很好符合而又准确可解的非线性谐振子模型是有吸引力的.

三、 q 振子模型的能级与波函数

考虑一个 q 变形的谐振子^[12,16,17], 其哈密顿量为

$$H' = \frac{1}{2} (z' \bar{z}' + \bar{z}' z') h\nu_q. \quad (15)$$

这里

$$\begin{aligned} z' &= \sqrt{\frac{\sinh(\gamma z \bar{z})}{\sinh \gamma \cdot z \bar{z}}} z; \\ \bar{z}' &= \sqrt{\frac{\sinh(\gamma z \bar{z})}{\sinh \gamma \cdot z \bar{z}}} \bar{z}. \end{aligned} \quad (16)$$

$\gamma = \log q$, q 为变形参数. 哈密顿量(15)式对应的经典正则运动方程的解为^[17]

$$\begin{aligned} p &= A \cos \left\{ \frac{\gamma}{\sinh \gamma} \cosh \left(\gamma \frac{A^2}{2} \right) \cdot 2\pi \gamma_q t \right\}; \\ q &= A \sin \left\{ \frac{\gamma}{\sinh \gamma} \cosh \left(\gamma \frac{A^2}{2} \right) \cdot 2\pi \gamma_q t \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

(16)式为振子频率与振幅有关的非线性振动. 在量子化之后, 为了与一般量子理论中使用的符号统一, 记 $z \equiv a^+$, $\bar{z} \equiv a$; 相应地 $z' \equiv a_q^+$, $\bar{z}' \equiv a_q$. 由基本正则量子化关系

$$[x, p] = \frac{i\hbar}{2\pi}, \quad (18)$$

得到 q 振子代数 $\mathcal{H}_q(1)$ ^[16,17],

$$\begin{aligned} [a_q, a_q^+] &= \left[N' + \frac{1}{2} \right] - \left[N' - \frac{1}{2} \right], \\ [N', a_q] &= -a_q, \quad [N', a_q^+] = a_q^+ \end{aligned} \quad (19)$$

这里已经定义 $N' = \lim_{q \rightarrow 1} a_q^+ a_q + \frac{1}{2} = a^+ a + \frac{1}{2}$, $[m] = \frac{q^m - q^{-m}}{q - q^{-1}}$. q 振子代数 $\mathcal{H}_q(1)$.

除乘法 m 外, 还可以定义余乘法 Δ , antipode γ 及余单位 ϵ ^[16,17]. $\mathcal{H}_q(1)$ 构成量子群, 有对应的量子杨-Baxter 方程.

q 振子的哈密顿量 H' 可以写成

$$H' = \frac{1}{2} \left[[N] + \left[N + \frac{1}{2} \right] \right] h\nu_q, \quad (20)$$

其中 $N = a^+ a$.

现在构造 q 振子代数 $\mathcal{H}_q(1)$ 的表示

$$|\tilde{\nu}\rangle = ([\nu]!)^{-\frac{1}{2}} (a_q^+)^{\nu} |0\rangle. \quad (21)$$

在该表示中有

$$\begin{aligned} a_q^+ |\nu\rangle &= [\nu + 1]^{1/2} |\tilde{\nu} + 1\rangle; \\ a_q |\nu\rangle &= [\nu]^{1/2} |\tilde{\nu} - 1\rangle; \end{aligned}$$

$$a_q|0\rangle = 0; [N]|\tilde{\nu}\rangle = [\nu]|\tilde{\nu}\rangle, \quad (22)$$

在 q 振子代数 $\mathcal{H}_q(1)$ 表示中, H^ν 的本征值为

$$E_\nu = \frac{1}{2} ([\nu+1] + [\nu])h\nu_0. \quad (23)$$

不难证明, q 振子代数 $\mathcal{H}_q(1)$ 的表示(21)式与普通谐振子代数 $\mathcal{H}(1)$ 的表示一致,

$$\begin{aligned} |\tilde{\nu}\rangle &= ([\nu]!)^{-1/2} (a_q^+)^{\nu} |0\rangle \\ &= ([\nu]!)^{-1/2} \left(\left(\frac{\sinh(\gamma N)}{\sinh \gamma \cdot N} \right)^{1/2} \cdot a^+ \right)^{\nu} |0\rangle \\ &= ([\nu]!)^{-1/2} \left(\frac{\sinh(\gamma \nu) \cdot [\gamma(\nu-1)] \cdots \gamma}{(\sinh \gamma)^{\nu} \cdot \nu \cdot (\nu-1) \cdots 1} \right)^{1/2} (a^+)^{\nu} |0\rangle \\ &= (\nu!)^{-1/2} (a^+)^{\nu} |0\rangle \\ &= |\nu\rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

所以在 X 表象中, q 振子波函数可准确地由厄密多项式给出

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_\nu &= (\sqrt{\pi} 2^{\nu} \nu!)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2} X^2} H_\nu(X) \\ &= N_\nu H_\nu(X) e^{-\frac{1}{2} X^2}. \end{aligned} \quad (25)$$

四、 q 振子模型与双原子分子谱

在一级近似下, 偶极矩 M 随核间距的改变是线性的,

$$M = M_0 + M_1 \cdot x. \quad (26)$$

这里 M_0 为振子在平衡位置上的偶极矩, $x = r - r_0$ 为核间距改变量, M_1 为偶极矩随核间距的改变率. 从而电偶极矩对应的矩阵元 $R_q^{\nu'\nu''}$ 可表示为

$$\begin{aligned} R_q^{\nu'\nu''} &= \int \tilde{\psi}_{\nu'} M \tilde{\psi}_{\nu''} dx \\ &= M_0 \int \tilde{\psi}_{\nu'} \tilde{\psi}_{\nu''} dx + M_1 \int x \tilde{\psi}_{\nu'} \tilde{\psi}_{\nu''} dx \\ &= M_0 \delta_{\nu'\nu''} + \frac{N_{\nu'} N_{\nu''}}{\alpha} \int X H_{\nu'}(X) H_{\nu''}(X) e^{-X^2} dX. \end{aligned} \quad (27)$$

利用厄密多项式的递推关系

$$x H_n(x) = \frac{1}{2} H_{n+1}(x) + n H_{n-1}(x), \quad (28)$$

有

$$\begin{aligned} R_q^{\nu'\nu''} &= M_0 \delta_{\nu'\nu''} + \frac{N_{\nu'} N_{\nu''}}{\alpha} \left[\frac{1}{2} \int H_{\nu'}(X) H_{\nu''+1}(X) e^{-X^2} dX \right. \\ &\quad \left. + \nu'' \int H_{\nu'}(X) H_{\nu''-1}(X) e^{-X^2} dX \right]. \end{aligned} \quad (29)$$

(28)式表明, 除 $\nu' = \nu'' \pm 1$ 之外, 偶极矩矩阵元都为零, 即 q 振子的选择定则为

$$\Delta \nu = \pm 1. \quad (30)$$

从而得 q 振子的红外辐射谱:

$$\nu = \frac{E'(\nu+1) - E'(\nu)}{hc} = \frac{[\nu+2] - [\nu]}{2} \omega, \omega = \frac{\nu_{\text{基}}}{c} \quad (31)$$

当分子放进电场 F 中时,系统就会感应一个电偶极矩 P . 该偶极矩的量值与电场强度成正比,

$$|P| = \beta |F|. \quad (32)$$

这里 β 为极化率.

对应诱导偶极矩 P 的散射矩阵元

$$[P]^{v'v''} = \int \tilde{\psi}_{v'}^* P \tilde{\psi}_{v''} dx. \quad (33)$$

这里 $\tilde{\psi}_{v'}, \tilde{\psi}_{v''}$ 分别是 v', v'' 态的 q 振子含时定态波函数. 所以 $\tilde{\psi}_{v'}, \tilde{\psi}_{v''}$ 与 P 分别带有时间因数 $\exp[2\pi i(E'_{v'}/h)t]$, $\exp[2\pi i(E'_{v''}/h)t]$ 与 $\exp(2\pi i\nu' t)$. 所以 $[P]^{v'v''}$ 以 $[\nu' + (E'_{v'} + E'_{v''})/h]$ 的频率改变, 改变振幅

$$[P_0]^{v'v''} = |F| \int \tilde{\psi}_{v'}^* \beta \tilde{\psi}_{v''} dx. \quad (34)$$

在一级近似下,极化率 β 随 q 振子偏离平衡位置的移动 x 而线性变化,

$$\beta = \beta_{0v} + \beta'_v x, \quad (35)$$

从而

$$[P_0]^{v'v''} = |F| \beta_{0v} \int \tilde{\psi}_{v'}^* \tilde{\psi}_{v''} dx + |F| \beta'_v \int x \tilde{\psi}_{v'}^* \tilde{\psi}_{v''} dx. \quad (36)$$

由于 q 振子波函数的正交性,除非 $v' = v''$, 上式等号右端第一项为零,它给出未发生位移的频率(瑞利散射). 第二项积分,只有 $v' = v'' \pm 1$ 时才不为零. 所以振动喇曼谱的选择定则为

$$\Delta v = \pm 1. \quad (37)$$

由 q 振子能级(23)式,得双原子分子的振动喇曼谱为

$$\begin{aligned} \nu &= \nu'/c \pm (E'_{v+1} - E'_v) \\ &= \nu'/c \pm \frac{1}{2} ([\nu+2] - [\nu])\omega. \end{aligned} \quad (38)$$

可见光与紫外光谱涉及电子跃迁. 电子跃迁振动谱可表示为

$$\nu = T' - T'' = (T'_e - T''_e) + (G' - G'') = \nu_e + \nu_v, \quad (39)$$

其中 $\nu_e = T'_e - T''_e$ 是只与电子能级有关的辐射常数. 利用(23)式,上式可改写为

$$\nu = \nu_e + \frac{1}{2} ([\nu' + 1] + [\nu'] - [\nu'' + 1] - [\nu'']). \quad (40)$$

观察表明,在电子跃迁振动谱中,振动量子数 ν 没有严格的选择定则. 从原则上讲,较高电子态的每个振动态都能够与较低电子态的每个振动态合并,即(40)式中对 ν', ν'' 没有任何限制. 从而(40)式代表复杂得多的谱线.

在(40)式中取 ν' 为固定值,则形成 ν'' 前进带组. 即在 ν'' 前进带组中,对应于同一个较高振动态,而较低的振动态 ν'' 则是不同的. 从而(40)式在这种情况下可以写为

$$\nu = \nu_0'' - \frac{1}{2} ([\nu'' + 1] + [\nu'']), \quad (41)$$

其中 ν_0'' 为 ν_0 加上较高能级的固定振动谱, 所以 ν_0'' 为一常数。

在(40)式中取 ν'' 为固定值, 则形成 ν' 前进带组。即在 ν' 前进带组中, 对应于同一个较低能量的振动态, 而具有不同的较高能量的振动态。从而 ν' 前进带组可表示为

$$\nu = \nu_0' + \frac{1}{2} ([\nu' + 1] + [\nu'])\omega, \quad (42)$$

其中 ν_0' 为 ν_0 减去较低电子能级的固定振动谱。所以 ν_0' 为一常数。

(31)式给定的 q 振子红外辐射谱可以改写为下面的形式:

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{[\nu + 2] - [\nu]}{2} \omega = \omega \cosh \gamma (\nu + 1) \\ &= \omega \sinh \gamma \left(\nu + 1 + \frac{i\pi}{2\gamma} \right) \\ &= \omega \sinh \gamma \left((\nu + 1 + \delta_1) + \left(\frac{i\pi}{2\gamma} - \delta_1 \right) \right), \end{aligned} \quad (43)$$

$$\text{即} \quad \nu = \omega \sinh \gamma (m_1 + c_1). \quad (44)$$

这里已经令 $m_1 = \nu + 1 + \delta_1$, $c_1 = i\pi/2\gamma - \delta_1$ 。

同样双原子分子的振动喇曼谱可写成下面的形式:

$$\nu = \nu'/c + \omega \sinh \gamma (m_1 + c_1). \quad (45)$$

由(41)式给定的 ν'' 前进带组, 可以改写为

$$\begin{aligned} \nu &= \nu_0'' - \frac{\omega}{2 \sinh \gamma} \sinh \gamma \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \\ &= \nu_0'' - \frac{\omega}{2 \sinh \gamma} \sinh \gamma \left((\nu + \delta_2) + \left(\frac{1}{2} - \delta_2 \right) \right), \end{aligned} \quad (46)$$

即

$$\nu = \nu_0'' - \omega' \sinh \gamma (m_2 + c_2). \quad (47)$$

这里已定义 $m_2 = \nu + \delta_2$, $c_2 = 1/2 - \delta_2$, $\omega' = \omega/2 \sinh \gamma$ 。

同样可以把 ν' 前进带组写为

$$\nu = \nu_0' + \omega' \sinh \gamma (m_2 + c_2). \quad (48)$$

由(44), (45), (47)与(48)式, 可以看出 q 振子谱可以统一写为

$$\nu = A + B \sinh \gamma (m + c). \quad (49)$$

$A = 0$, $B > 0$ 对应于红外辐射谱; $A > 0$, $B > 0$ 对应振动喇曼谱或 ν' 前进带组; $A > 0$, $B < 0$ 对应 ν'' 前进带组。

上面由 q 振子模型给出了双原子分子的振动谱的一般形式(49)。为了检验模型的正确性, 我们对双原子分子的特定电子态上的振动能级与 q 振子模型的能级进行比较。双原子振动能级的实验数据的唯象拟合公式为

表 1 双原子分子振动谱的经验公式与 q 振子模型计算对照

分 子	态	E_0	E_1	r	d	T_0	ω_0	$\omega_0 x_0$	$\omega_0 y_0$
$\text{Ag}^{107}\text{Cl}^{35}$	$B^3\Pi_{0+}$	37522.71	8597.85 <i>i</i>	0.045 <i>i</i>	16.85	31606.92	281.1	5.98	-0.093
						31606.92	281.0	6.00	-0.095
$\text{Al}^{27}\text{Br}^{79}$	$A^1\Pi$	37082.59	3122.41 <i>i</i>	0.103 <i>i</i>	3.83	35879.50	297.2	6.39	-0.526
						35879.5	297.2	6.40	-0.527
$\text{Al}^{27}\text{Cl}^{35}$	$A^1\Pi$	41288.45	8916.37 <i>i</i>	0.054 <i>i</i>	6.47	38254.00	449.96	4.37	-0.216
						38254.0	449.96	4.37	-0.216
$\text{Al}^{27}\text{F}^{19}$	$A^1\Pi$	56403.18	25536.31 <i>i</i>	0.037 <i>i</i>	13.81	43935.00	822.92	8.50	-0.186
						43935	822.9	8.5	-0.187
$\text{Br}^{79}\text{Br}^{79}$	$A^1\Pi$	30538.47	-5266.95 <i>i</i>	0.10 <i>i</i>	5.966	33935.30	637.59	17.56	1.09
						33935.3	637.63	17.58	1.1
$(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$	$A^1\Sigma^+$	58808.95	41821.13	0.030	16.30	39416.20	1096.43	8.49	-0.16
						39416.2	1096.41	8.49	-0.16
Bi_2^{209}	B	45718.382	39940.405 <i>i</i>	0.00464 <i>i</i>	167.317	17742.30	132.27	0.2999	-0.000464
						17742.3	132.21	0.3009	-0.000474
$\text{Bi}^{209}\text{Br}^{79}$	A	20766.87	2029.14 <i>i</i>	0.0674 <i>i</i>	1.720	20532.00	135.91	0.534	-0.103
						20532.0	135.91	0.534	-0.1030
$\text{Bi}^{209}\text{Cl}^{35}$	B	19149.70	-8812.56	0.0397	10.58	22959.70	381.00	3.00	0.10
						22959.7	381.0	3.00	0.10
Cl_2^{35}	$c^1\Pi_g$	36633.53	15846.18 <i>i</i>	0.115 <i>i</i>	1.30	34261.90	1809.10	15.81	-4.02
						34261.9	1809.1	15.81	-4.02
Cl_2^{37}	$B^3\Pi_g$	38646.00	47485.83 <i>i</i>	0.041 <i>i</i>	10.17	19306.26	1788.23	16.44	-0.5060
						19306.26	1788.22	16.44	-0.5067
$\text{Ca}^{40}\text{F}^{19}$	$A^1\Pi$	5557.04	-20958.81	0.025	19.97	16482.10	591.99	3.425	0.0618
						16482.1	592.0	3.427	0.0619
$(\text{Cl}_2^{37})^+$	$A^1\Pi$	41058.51	34769.24 <i>i</i>	0.020 <i>i</i>	31.32	20596.90	564.86	4.12	-0.0377
						20596.9	564.8	4.13	-0.038
$\text{Cl}^{36}\text{F}^{19}$	$A^3\Pi_{0+}$	19535.15	3629.20 <i>i</i>	0.087 <i>i</i>	1.83	18956.00	313.48	2.217	-0.400
						18956	313.48	2.217	-0.400
$\text{C}^{12}\text{O}^{16}$	$c^3\Pi_i$	88001.655	53317.405 <i>i</i>	0.0244 <i>i</i>	20.652	62299.40	1137.82	7.620	-0.1122
						62299.4	1137.79	7.624	-0.1125
Cs_2^{133}	$B(^1\Pi_u)$	17774.683	7610.460 <i>i</i>	0.00574 <i>i</i>	116.826	13043.87	34.235	0.07785	-0.0001861
						13043.87	34.230	0.07799	-0.0001881

续表

分子	态	E_0	E_1	γ	d	T_e	ω_e	$\omega_e x_e$	$\omega_e y_e$
Cs^{133}I	$X^1\Sigma_g$	6819.435	11027.52i	0.00485i	137.598	0.00	41.996	0.07991	0.0001626
						0	41.990	0.08005	-0.0001643
Cs^{133}H	$A^1\Sigma^+$	17297.77	2295.45i	0.101i	-4.96	18405.20	204.01	-5.70	-0.349
						18405.2	204.0	-5.70	-0.350

表中对应分子态的第一行 $T_e, \omega_e, \omega_e x_e$ 与 $\omega_e y_e$ 为 q 振子模型计算结果; 第二行为实验数据给出的经验公式计算的值。

$$E = hcT_e + hc\omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - hc\omega_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 + hc\omega_e y_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^3 + \dots \quad (50)$$

q 振子模型给出的能级公式为

$$E = hcE_0 + hcE_1 \sinh \left[\gamma \left(\nu + \frac{1}{2} + d \right) \right] \quad (51)$$

这里 $E_1 = \frac{\nu_{\text{max}}}{\sinh \left(\frac{1}{2} \gamma \right) \cdot 2c}$ 且 hcE_0 为电子能级的贡献。在表 1 中列出了随机选出的

一些双原子分子某些电子态上的振动能级, 给出了 q 振子模型的参数 E_0, E_1, γ 和 d 。当对(51)式相对小参数 γ 做泰勒展开时, 展开式的零次、一次、二次及三次幂的系数就是对 $T_e, \omega_e, \omega_e x_e$ 及 $\omega_e y_e$ 的再拟合, 而由实验数据拟合出的 $T_e, \omega_e, \omega_e x_e$ 及 $\omega_e y_e$ 列在相应栏的第二行, 可以看出, 它们以很高的精度相符合。

五、讨 论

我们利用仅比普通谐振子模型多一个描述变形及相应量子群对称性的参数 q 的简单模型——一维 q 振子模型的解析表达式, 导出不同双原子分子振动谱的经验公式、选择定则等。与实验数据的符合相当令人满意。在即将发表的文献[15]中, 将看到 q 转动振子模型对分子转动谱的描写也是极其令人满意的。这表明, q 转动振子模型是一个成功的唯象模型。显然, 这种成功并不是偶然的, 很可能反映了自然界中的某种更基本的规律, 进一步深入的讨论显然是有意义的。比如, 如何由基本相互作用与运动模式导出 q 振子模型等等。

关于 q 振子模型本身对双原子分子光谱的唯象描述也有进一步讨论的必要。比如, 在(23)式中, γ 取虚数时, q 振子能级不象普通谐振子有无穷多个等距能级, 而是有有限个能级。实际上实验中观察到的光谱总是有限的, 与 q 振子模型的结果一致。对系统的高激发谱, 特别是近于离解的情形是否还能用 q 振子模型来描述不但是有兴趣的, 也是有挑战性的问题。

同时,本文处理的一维 q 振子模型以及将在文献[15]中处理的 q 转动振子模型都是极简单的、具有最简单量子群对称性的模型。因而 q 转动振子模型的基本思想很可能是具有普遍性的。即对于任意的哈密顿系统可以建立相应的具有 q 变形“量子”对称性的 q 变形哈密顿系统,来描述通常的哈密顿系统只能给出近似描述的非线性系统。并可以与其他模型进行比较。而这种具有“量子”对称性的 q 变形哈密顿系统,一般是严格可解的,这样就有一种新的处理非线性系统的非微扰方法。这是相当吸引人的。

最后,应强调指出,正如本文一开始提到的那样,所有这种具有“量子”对称性的 q 变形哈密顿系统,当然包括最简单的 q 转动振子模型,不仅在量子水平,而且首先可以在经典水平上实现。因此,如何利用这些经典的 q 变形哈密顿系统描述现实的经典非线性系统是极有意义的问题。

作者感谢宋行长、杜孟利、邹冰松、邱建伟、赵恩广和徐湛的讨论。

- [1] V. G. Drinfeld, Proc. I. C. M. Berkeley, (1986), 798.
- [2] M. Jimbo, *Lett. Math. Phys.*, 10(1985), 63;
M. Jimbo, *Commun. Math. Phys.*, 102(1986), 537.
- [3] Yu. I. Manin, Quantum Groups and Non-commutative Geometry, Preprint. University of Montreal, (1988).
- [4] L. D. Faddeev, N. Reshetikhin and L. A. Takhtajan, Preprint, LOMI, Leningrad, (1987).
- [5] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.*, 19(1967), 1312.
- [6] R. J. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press, New York, (1982).
- [7] Zhe Chang, Wei Chen and Han-ying Guo, *J. Phys. A*, 23(1990), 4185;
陈卫、常哲、郭汉英,物理学报,40(1991),337.
- [8] Zhe Chang, Wei Chen, Han-ying Guo and Hong Yan, *J. Phys. A*, 23 (1990), 5871.
- [9] 阎宏、陈卫、常哲、郭汉英,物理学报,40(1991),329.
- [10] Zhe Chang, Wei Chen, Han-ying Guo and Hong Yan, *J. Phys. A*, to be Published ASI/TP-90-22, CCAST-90-18, June, (1990).
- [11] Zhe Chang, Han-ying Guo and Hong Yan, *Commun. Theor. Phys.*, 14(1990), 475.
- [12] L. C. Biedenharn, *J. Phys. A*, 22(1989), L873;
A. J. Macfarlane, *J. Phys. A*, 22(1989), 4581;
Y. J. Ng, *J. Phys. A*, 23(1990), 1023;
X. C. Song, *J. Phys. A*, 23(1990), L821.
- [13] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure, 1: Spectra of Diatomic Molecules*, D. Van Nostrand, 3rd printing, (1953).
- [14] M. Born and R. Oppenheimer, *Ann. Physik*, (Leipzig) 84(1927), 457.
- [15] Zhe Chang and Hong Yan, *Phys. Lett. A*, to be published; Preprint, CCAST-90-52, *Phys. Rev. A*, to be published.
- [16] Hong Yan, *J. Phys. A*, 23(1990), L1155.
阎宏,科学通报,5(1991),337.
- [17] Hong Yan, *Commun. Theor. Phys.*, 15(1991), 377.

q -ROTATING OSCILLATOR MODEL (I)

q -Oscillator and Vibrational Spectra of Diatomic Molecules

YAN HONG CHANG ZHE GUO HAN-YING

Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080

(Received 31 October 1990)

ABSTRACT

We suggest a model of q -deformed rotating oscillator which possesses the symmetry of quantum group and point out that this model can be used to describe the vibrational and rotational structures of many microscopic systems. We construct the representation of q -oscillator algebra and give energy values of q -oscillator in this representation. It is shown that the q -oscillator spectra can be used to describe infrared spectra, Raman spectra and vibrational structure of electronic transitions of diatomic molecules.

PACC: 7125; 0210; 0365