氢原子径向矩阵元的简单计算

马 堃[1],黄时中[2]

(1. 黄山学院 信息工程学院, 安徽 黄山 245021; 2.安徽师范大学 物理与电子信息学院, 安徽 芜湖 241000)

摘 要:基于 Mathematica 软件,借助氢原子径向矩阵元的通项公式和递推关系,编写一套用于计算径向矩阵元的程序,给出了氢原子 $\overline{r^k}(|k|\leq10)$ 的具体表达式。

关键词:径向矩阵元;氢原子;Mathematica

中图分类号:O562.2 **文献标识码**:A **文章编号**:1672-447X(2009)05-0016-03

0 引 言

氢原子是量子力学中可以精确求解的问题之一,氢原子径向矩阵元在原子结构以及原子核壳层结构的具体计算中有着重要的意义,人们对其计算方法也十分关注。[1-6]文献[2]中,给出了计算径向矩阵元的通项公式,原则上,利用该通项公式可以求出任意幂次数的径向矩阵元,但是由于通项公式中含有大量的求和以及阶乘运算,随着幂次数的增加,计算量将急剧增加。虽然文献[1,3-5]中均给出了递推关系,但在实际计算中,随着幂次的增大,计算量也都是呈指数增加,不便计算。最近,WC Qiang 等[7]利用 Mathematica 软件来计算氢原子径向矩阵元,这样就避免了大量的人工计算。但在程序设计中,利用了两个合流超几何多项式积分来完成矩阵元计算,作者在重复 WC Qing 等人的工作时发现,随着幂次的增加,积分会出现收敛方面的困难。为了克服这些不足,本文将以文献[3]中给出的递推关系为基础,基于 Mathematica 软件,编写一套用于计算任意幂次径向矩阵元的程序。利用该程序得到氢原子 $\overline{r^k}(|k|\leq10)$ 的解析形式。这种方法的优点在于省去了繁杂的人工计算过程,同时,可以避免随幂次增加所出现的积分困难问题。

收稿日期:2009-08-06

基金项目:安徽省教育厅自然科学基金资助(KJ2007B029),黄山学院科研基金资助(2008xkjq013),黄山学院教研基金资助(2008hsujy010)

作者简介:马 堃(1983-),安徽六安人,黄山学院信息工程学院教师,硕士,主要从事原子与分子物理方面的教学和研究。

1 理论公式

1.1 通项公式

氢原子的径向波函数可表示为

$$R_{n\ell}(r)=\frac{2}{n^2(2\ell+1)!}\sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}}\left(\frac{2r}{n}\right)^{\ell}\times \exp\left(\frac{2r}{n}\right)F\left(-n+\ell+1,2\ell+2,\frac{2r}{n}\right) \qquad (1)$$

利用合流超几何多项式$F(-m.\mu+1.X)$与广义拉盖尔多项式$L^{\mu}_{m}(X)$之间关系

$$F(-m,\mu+1,X)=\frac{m!\mu!}{(m+\mu)!}L^{\mu}_{m}(X) \qquad (2)$$

其中,

$$L^{\mu}_{m}(X)=\sum_{\gamma=0}^{m}\binom{m+\mu}{m-\gamma}\frac{(-X)^{\gamma}}{\gamma!},\binom{n}{k}=\frac{n!}{k!(n-k)!} \qquad (3)$$

由此,(1)式可以写成

$$R_{n\ell}(r)=\left(\frac{2}{n}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!2n}}\left(\frac{2r}{n}\right)^{\ell}\exp\left(\frac{-r}{n}\right)L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}\left(\frac{2r}{n}\right) \qquad (4)$$

k次幂径向矩阵元定义为如下积分

$$\overline{r^k} \equiv \left\langle R_{n\ell}(r)\right| r^k \left| R_{n\ell}(r)\right\rangle = \int_0^\infty r^{k+2} R_{n\ell}^2(r)dr \tag{5}$$

将(4)式和(3)式代入(5)式,并利用积分公式

$$\int_0^\infty y^m \exp(-by)dy = \frac{m!}{b^{m+1}} \tag{6}$$

可得

$$\left\langle R_{n\ell}(r)\right| r^k \left| R_{n\ell}(r)\right\rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{n}{2}\right)^k (n-\ell-1)!(n+\ell)! \times$$

$$\sum_{i=0}^{n-\ell-1}\sum_{j=0}^{n-\ell-1} \frac{(-1)^{i+j}(2\ell+i+j+2)!}{i!\,j!(n-\ell-i-1)!(n-\ell-j-1)!(2\ell+i+1)!(2\ell+j+1)!} \tag{7}$$

利用(7)式,原则上可以求解出任意次幂的$\overline{r^k}$,但是对于高次幂来说,(7) 式中有大量的求和以及阶乘运算,计算过程是相当繁琐,而且容易出错。

1.2　递推公式

为了克服前面提到的困难,文献[3]给出了矩阵元之间的如下递推关系:

$$\frac{1}{n^2}(k+1)\overline{r^k} - (2k+1)\overline{r^{k-1}} + \frac{1}{4}k[(2\ell+1)^2 - k^2]\overline{r^{k-2}} = 0 \tag{8}$$

由上式可知,只需要几个较次幂的$\overline{r^k}$值,就可以得到任意次幂的矩阵元。下面,我们将以(8)式为基础,编写程序,计算任意次幂的$\overline{r^k}$,计算中需要几个较低次幂的$\overline{r^k}$作为启动值。可以看到,这些启动值是低次幂,我们可以利用通项公式(7)方便的得到。下面给出本文用于递推的三个启动值的计算结果:

$$\overline{r^0} = \left\langle R_{n\ell}(r)\right| r^0 \left| R_{n\ell}(r)\right\rangle = 1$$

$$\overline{r^1} = \left\langle R_{n\ell}(r)\right| r^1 \left| R_{n\ell}(r)\right\rangle = \frac{1}{2}(-\ell-\ell^2+3n^2)$$

$$\overline{r^{-2}} = \left\langle R_{n\ell}(r)\right| r^{-2} \left| R_{n\ell}(r)\right\rangle = \frac{2}{n^3(2\ell+1)}$$

2　程序及计算

2.1　当坐标幂指数k>0 时

对(8)式变形得

$$\overline{r^k} = \frac{n^2(2k+1)}{k+1}\overline{r^{k-1}} - \frac{n^2k[(2\ell+1)^2-k^2]}{4(k+1)}\overline{r^{k-2}} \tag{9a}$$

再利用(7)式,得到两个较低幂次$\overline{r^0}$和$\overline{r^1}$的前提下,结合(9a)式递推,便可以得到任意高幂次的$\overline{r^k}$。为了简化计算,我们编写如下程序:

```
r[0]=1;
r[1]=1/2(3n^2-ℓ(ℓ+1));
r[k_]:=((2k+1)r[k-1]-1/4k((2l+1)^2-k^2)
     r[k-2])/(1/n^2(k+1))
```

其中,第一行和第二行命令是定义递推公式的启动值,第三个命令是根据(9a)式定义了$\overline{r^k}$函数,运行该程序,可以方便的得到任意k>0时任意幂次$\overline{r^k}$的解析表达式,这里仅给出 0≤k≤10的结果。

$$\overline{r^0}=1,\overline{r^1}=\frac{1}{n^2}\frac{1}{n},\overline{r^2}=\frac{n^2}{2}(1-3\ell-3\ell^2+5n^2),$$

$$\overline{r^3}=\frac{n^2}{8}[6\ell^3+3\ell^4-6\ell(1+5n^2)+5n^2(1+7n^2)-3\ell^2(1+10n^2)],$$

$$\overline{r^4}=\frac{n^4}{8}[30\ell^3+15\ell^4-35\ell^2(1+2n^2)-10\ell(5+7n^2)$$
$$+3(4+35n^2+21n^4)],$$

$$\overline{r^5}=\frac{n^4}{16}[-15\ell^5-5\ell^6+15\ell^3(5+14n^2)+5\ell^4(5+21n^2)$$
$$+21n^2(14+35n^2+11n^4)-15\ell(4+35n^2+21n^4)$$
$$-5\ell^2(4+84n^2+63n^4)],$$

$$\overline{r^6}=\frac{n^6}{16}[-105\ell^5-35\ell^6+105\ell^3(7+6n^2)+35\ell^4(8+9n^2)$$
$$-63\ell(14+35n^2+11n^4)-7\ell^2(71+270n^2+99n^4)$$
$$+3(60+707n^2+770n^4+143n^6)],$$

$$\overline{r^7}=\frac{n^6}{128}[140\ell^7+35\ell^8-70\ell^6(7+18n^2)-140\ell^5(14+27n^2)$$
$$+140\ell^3(49+252n^2+99n^4)+35\ell^4(49+414n^2+198n^4)$$
$$-84\ell(60+707n^2+770n^4+143n^6)-42\ell^2(30+979n^2+1375n^4$$
$$+286n^6)+9n^2(3044+10395n^2+6006n^4+715n^6)],$$

$$\overline{r^8}=\frac{n^8}{128}[1260\ell^7+315\ell^8-1260\ell^5(18+11n^2)-210\ell^6(29+22n^2)$$
$$+252\ell^3(417+660n^2+143n^4)+21\ell^4(1567+3410n^2$$
$$+858n^4)-36\ell(3044+10395n^2+6006n^4+715n^6)$$
$$-6\ell^2(8842+48125n^2+33033n^4+4290n^6)+5(4032$$
$$+57860n^2+87087n^4+30030n^6+2431n^8)],$$

$$\overline{r^9}=\frac{n^8}{256}[-315\ell^9-63\ell^{10}+315\ell^8(6+11n^2)+630\ell^7(15+22n^2)$$
$$-315\ell^5(273+990n^2+286n^4)-21\ell^6(819+4180n^2+1430n^4)$$
$$+630\ell^3(410+2937n^2+2145n^4+286n^6)+105\ell^4(492$$
$$+6259n^2+5720n^4+858n^6)-45\ell(4032+57860n^2+87087n^4$$
$$+30030n^6+2431n^8)+11n^2(96624+406120n^2+327327n^4$$
$$+72930n^6+4199n^8)-3\ell^2(12096+541420n^2+1076075n^4$$
$$+420420n^6+36465n^8)],$$

$$\overline{r^{10}}=\frac{n^{10}}{256}[-3465\ell^9-693\ell^{10}+1155\ell^8(23+13n^2)$$
$$+2310\ell^7(55+26n^2)-1155\ell^5(1243+1430n^2+234n^4)$$
$$-231\ell^6(1409+2080n^2+390n^4)+165\ell^4(8999+28483n^2$$
$$+13650n^4+1326n^6)+330\ell^3(16720+37037n^2+15015n^4$$
$$+1326n^6)-55\ell(96624+406120n^2+327327n^4+72930n^6$$
$$+4199n^8)-11\ell^2(208548+1449110n^2+1407315n^4$$
$$+344760n^6+20995n^8)+3(302400+5015868n^2$$
$$+9374365n^4+4543539n^6+692835n^8+29393n^{10})]。$$

2.2 当坐标幂指数$k<0$时

令 $k'\equiv k-2$,并对(8)式变形得

$$\overline{r^{k'}}=\frac{4}{n^2}\frac{n^2 4(2k'+5)\overline{r^{k'+1}}-(k'+3)\overline{r^{k'+2}}}{(k'+2)[(2\ell+1)^2-(k'+2)^2]} \tag{9b}$$

观察可知，$k'=-2$是(9b)式的一个奇点,因此 $\overline{r^{k'}}|_{k'=-2}$ 的值需要事先给定,这样,在已知$\overline{r^{0}}$,$\overline{r^{1}}$和$\overline{r^{-2}}$的情况下,利用(9b)式递推,便可以得到任意低幂次的$\overline{r^{k'}}$。为了简化计算,我们编写如下程序：

$r[0]=1;$

$r[1]=1/2(3n^2-\ell(\ell+1));$

$r[-2]=2/((2l+1)n^3);$

$r[k\_]:=-(1/n^2(k+3)r[k+2]-(2k+5)r[k+1])$
$\quad /(1/4(k+2)((2\ell+1)^2-(k+2)^2))$

其中,第一行、第二行和第三行命令是定义递推公式的启动值,第四个命令是根据(9b)式定义了$\overline{r^{k}}$函数,运行该程序,可以方便的得到任意 $k<0$ 时任意幂次$\overline{r^{k}}$的解析表达式,结果略。

3 小 结

基于 Mathematica 软件，借助氢原子径向矩阵元的通项公式和递推关系,编写一套用于计算任意幂次径向矩阵元的程序。利用该程序得到氢原子$\overline{r^{k}}(|k|\le 10)$ 的解析形式。这种方法的优点在于省去了繁杂的人工计算过程,同时可以避免随幂次增加所出现的积分困难。

参考文献:

[1]黄时中，麻金继.氢原子径向矩阵元及其递推关系[J].大学物理,1996,15(4):25-27.

[2]Hou C F, Zhou Z X, Yuan B H. General formula for calculating the radial matrix element of n-dimensional hydrogen atom[J]. At. Mol. Phys, 2000, 17(1):129-132.

[3]黄时中.氢原子径向幂坐标矩阵元的一般递推关系[J].大学物理,2000,19(4):16-18.

[4]Chen C Y, Sun D S. Recurrence formula for radial matrix elements of n-dimensional Hydrogen atom [J]. At. Mol. Phys, 2001, 18(1):105-108.

[5]井孝功,张玉君,赵永芳. 氢原子基下径向矩阵元的递推关系[J]. At. Mol. Phys, 2001, 18(4):445-446

[6]陈昌远.三维各向同性谐振子径向矩阵元的递推关系[J].物理学报,2000,49(4):607-609.

[7]Qiang W C, Dong S H. An alternative approach to calculating the mean value for Hydrogen-like atoms[J]. Phys. Scr, 2004, 70:276-279.

责任编辑:胡德明

A Simple Method for Calculating Radial Matrix Elements in Hydrogen Atoms

Ma Kun[1], Huang Shizhong[2]

(1. School of Information Engineering, Huangshan University, Huangshan 245021, China;

2. College of Physics and Electrical Information, Anhui Normal University, Wuhu 241000, China)

Abstract: By virtue of the general term formula and recursion relation of radial matrix elements of hydrogen atoms, a program is developed to calculate the radial matrix elements of hydrogen atoms, and the specific expression of Hydrogen Atoms $\overline{r^{k}}(|k|\le 10)$ is given with the help of the software Mathematica.

Key Words: radial matrix elements; hydrogen atom; Mathematica

氢原子径向矩阵元的简单计算

作者：　马堃，　黄时中
作者单位：　马堃(黄山学院信息工程学院,安徽黄山,245021)，　黄时中(安徽师范大学物理与电子信息学院,安徽,芜湖241000)

刊名：　黄山学院学报
英文刊名：　JOURNAL OF HUANGSHAN UNIVERSITY
年，卷(期)：　2009，11(5)

参考文献(7条)

1. 黄时中,麻金继.氢原子径向矩阵元及其递推关系[J].大学物理,1996,15(4):25-27.

2. Hou C F.Zhou Z X,Yuan B H.General formula for calculating the radial matrix element of n-dimensional hydrogen atom[J].At.MoL Plays,2000,17(1):129-132.

3. 黄时中.氢原子径向幂坐标矩阵元的一般递推关系[J].大学物理,2000,19(4):16-18.

4. Chen C Y,Sun D S.Recurrence formula for radial matrix element8 of n-dimensional Hydrogen atom[J].At.Mol.Phys,2001,18(1):105-108.

5. 井孝功,张玉君,赵永芳.氢原子基下径向矩阵元的递推关系[J].AL MoL Pays,2001,18(4):445-446

6. 陈昌远.三维各向同性谐振子径向矩阵元的递推关系[J].物理学报2000,49(4):607-609.

7. Qiang W C,Dong S H.An alternative approach to calculating the mean value for Hydrogen-like atoms[J].Phys.Set,2004,70:276-279.

相似文献(9条)