

文章编号:1673-5005(2008)04-0161-04

强磁场中氢分子离子零点振动能的计算

焦志勇¹, 王英霞¹, 郭淑梅², 李 宁¹, 马军贤¹, 付 霞¹

(1. 中国石油大学 物理科学与技术学院, 山东 东营 257061; 2. 朝阳市财经学校, 辽宁 朝阳 122000)

摘要:采用绝热近似和绝热变分近似两种方法, 计算了强磁场($10 \leq \beta \leq 1000$)中 H_2^+ 的 $\sigma_g, \pi_u, \delta_g, \phi_u, \gamma_g, \eta_u$ 态的能量和平衡核间距, 并选取 $\sigma_g, \delta_g, \gamma_g$ 这 3 个态的能量和平衡核间距的数据进行曲线拟合, 得出了曲线方程。典型的双原子分子中两原子间相互作用势能曲线在平衡位置 R_0 附近时曲线形状与简谐振子的势能曲线十分接近, 据此计算得到了 H_2^+ 的零点振动能, 并对零点振动能做出了 $E-\beta$ 曲线, 最后分析给出了 H_2^+ 的零点振动能与磁感应强度 β 的关系, 并且将基态的零点振动能在强磁场和无外场的情况下进行了比较。结果表明, H_2^+ 的零点振动能受场强影响明显, 外加磁场越强, H_2^+ 的零点振动能越小。

关键词:零点振动能; 强磁场; 绝热近似; 绝热变分近似; 曲线拟合

中图分类号: O 562.1

文献标识码: A

Calculating zero vibrating energies of hydrogen molecule ion in strong magnetic field

JIAO Zhi-yong¹, WANG Ying-xia¹, GUO Shu-mei², LI Ning¹, MA Jun-mao¹, FU Xia¹

(1. College of Physics Science and Technology in China University of Petroleum, Dongying 257061, Shandong Province, China;

2. Chaoyang School of Finance and Economics, Chaoyang 122000, Liaoning Province, China)

Abstract: The energies and the equilibrium internuclear separations of H_2^+ in states of $\sigma_g, \pi_u, \delta_g, \phi_u, \gamma_g, \eta_u$ in strong magnetic fields ($10 \leq \beta \leq 1000$) were calculated by using the adiabatic approximation and adiabatic variational approximation methods, and the data of those in states of $\sigma_g, \delta_g, \gamma_g$ were selected to obtain the curve equations by curve-polyfitting method. The curve figures of interatomic interaction potential of biatomic molecule are similar to those of harmonic oscillator, based on which the zero vibrating energy of H_2^+ can be obtained. Furthermore, $E-\beta$ curves of zero vibrating energy were plotted. Finally, the relation between zero energy of H_2^+ and magnetic field strength β was analyzed. In addition, the case of zero vibrating energy of ground state in strong magnetic field was compared with that without magnetic field. The results show that the zero vibrating energy of H_2^+ is obviously affected by magnetic field intensity. The stronger the applied magnetic field intensity, the smaller the zero vibrating energy of H_2^+ .

Key words: zero vibrating energy; strong magnetic field; adiabatic approximation; adiabatic variational approximation; curve-polyfitting

自从 20 世纪 70 年代发现了白矮星和中子星上的强磁场($10^2 \sim 10^5$ T 和 $10^7 \sim 10^9$ T), 均匀强磁场中原子、分子性质的理论研究就引起了人们广泛的兴趣^[1-2]。目前在该领域对分子的研究仅限于氢分子离子、氢分子等简单体系, 多数工作是针对氢分子离子这一最简单的分子体系的研究^[3], 因为它提

供了研究强磁场条件下分子结合的一个相当不错的例子。对强磁场中原子与分子的研究采用的方法主要有绝热近似^[4]、变分近似^[5]、分子轨道方法^[6]、蒙特卡罗方法^[7]等。笔者采用绝热近似、绝热变分近似两种方法对强磁场中氢分子离子的几个典型能级和平衡核间距进行计算, 并对零点振动能随场强的

收稿日期: 2007-11-20

基金项目: 山东省自然科学基金项目(Y2003A02)

作者简介: 焦志勇(1967-), 男(汉族), 辽宁朝阳人, 副教授, 博士, 主要从事理论物理和激光技术方面的科研和教学工作。

变化规律进行分析,为研究强磁场中氢分子离子的性质提供参考。

1 理论推导

本文中采用原子单位,即长度、能量分别用玻尔(Bohr)半径、里德堡(Rydberg 简称为 Ry)为单位,磁场强弱用 $\beta = B/B_0$ 来量度,其中 B 为磁感应强度, $B_0 = 2.3505 \times 10^5$ T。假设 z 轴平行于磁场 B 的方向,两核的距离为 $2R$,分别位于 z 轴上的 R 点和 $-R$ 点,两核的中点为坐标原点。1982 年, Larser^[8] 从数量上证明当磁场存在时,分子轴将趋于平行于磁场方向。均匀强磁场 ($10 \leq \beta \leq 1000$) 中氢分子离子的 Hamilton 算符在柱坐标下可写成

$$\hat{H}(\rho, z, \phi) = -\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + \beta(\hat{l}_z + g_s \hat{s}_z) + \frac{\beta^2 \rho^2}{4} - \frac{2}{r_A} - \frac{2}{r_B} + \frac{1}{R}. \quad (1)$$

式中, r_A 和 r_B 分别为电子到两核的距离。相应的定态 Schrödinger 方程为

$$\hat{H}(\rho, z, \phi) \bar{\Psi}(\rho, z, \phi) = E \bar{\Psi}(\rho, z, \phi). \quad (2)$$

将总波函数写成 $\bar{\Psi}(\rho, z, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Psi(\rho, z)$, 可得

$$\hat{H}(\rho, z) \Psi(\rho, z) = E \Psi(\rho, z). \quad (3)$$

其中二维的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}(\rho, z) = -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\beta^2 \rho^2}{4} + \beta(m + 2m_s) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-R)^2}} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z+R)^2}} + \frac{1}{R}. \quad (4)$$

式中, m 为轨道角动量 z 分量量子数; m_s 为自旋 z 分量量子数。

采用绝热近似,忽略库仑作用项,解出 ρ 方向的解析本征函数 Landau 函数 Φ_{nm} , 可将波函数近似表示成如下的形式:

$$\Psi(\rho, z) = F(z)_{mv} \Phi(\rho)_{0m}. \quad (5)$$

绝热近似方法在磁场极强的时候可给出比较精确的结果。在磁场不是极强的情况下,为提高计算精度,采用绝热变分方法,即将二维试探波函数 $\Psi(\rho, z)$ 写成

$$\Psi(\rho, z) = \Phi(\rho) F(z). \quad (6)$$

引入泛函

$$\bar{H} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{H}_\rho | \Phi \rangle + \langle F | \hat{H}_z | F \rangle + \langle \Phi F | V_{\text{eff}} | \Phi F \rangle + \frac{1}{R}. \quad (7)$$

其中

$$\hat{H}_\rho = -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\beta^2 \rho^2}{4} + \beta(m + 2m_s),$$

$$\hat{H}_z = -\frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

$$V_{\text{eff}} = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z-R)^2}} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z+R)^2}}.$$

让 Φ 和 F 做无穷小改变,并保持其归一化不变,使该泛函 $\bar{H}$ 稳定,即

$$\delta \bar{H} - E_\rho \delta \langle \Phi | \Phi \rangle - E_z \delta \langle F | F \rangle = 0. \quad (8)$$

可建立如下绝热变分方程组:

$$\begin{cases} [\hat{H}_\rho + \langle F | \hat{V}_{\text{eff}}(\rho, z) | F \rangle] \Phi(\rho) = E_\rho \Phi(\rho), \\ [\hat{H}_z + \langle \Phi | \hat{V}_{\text{eff}}(\rho, z) | \Phi \rangle] F(z) = E_z F(z). \end{cases} \quad (9)$$

总能量

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = E_\rho + E_z - \langle \Psi | \hat{V}_{\text{eff}} | \Psi \rangle + \frac{1}{R}.$$

相应的边界条件为

$$\Phi(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \rho^{|m|}, \quad \Phi(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \rho^{|m|} \exp(-\rho^2 \beta/4),$$

$$F_{mv}(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} \begin{cases} \cos(\sqrt{E - V_{\text{eff}}(z)} z), & \nu \text{ 为偶数,} \\ \sin(\sqrt{E - V_{\text{eff}}(z)} z), & \nu \text{ 为奇数,} \end{cases}$$

$$F_{mv}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} (-1)^\nu \exp(-\sqrt{-2E}|z|).$$

一般描述分子的性质时,都假定分子是刚性的,但实际上分子中原子间的距离是围绕某一平衡距离不断振动的。在典型的双原子分子中两原子间相互作用势能曲线中, R_0 是平衡距离,当 $R < R_0$ 时两原子相互排斥,当 $R > R_0$ 时两原子相互吸引。在 R_0 附近曲线形状与简谐振子的势能曲线十分接近,可用函数 $\frac{1}{2}K(R - R_0)^2$ 近似地表示, K 称为倔强系数。

因此原子在其平衡位置附近近似于一种简谐振动。与这一振动相应的能量称为分子的振动能,其数值也是量子化的。振动频率与倔强系数的关系为

$$\omega_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{K/\mu}.$$

式中, μ 为分子的约化质量。谐振能量量子化条件为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0, n = 0, 1, 2, \dots$$

当 $n = 0$ 时仍然有振动能 $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$, E_0 称为零点能。零点能的存在表示在任何的情况下,分子中的原子是不会静止的,它总是在振动并且具有一定的能量^[9]。

2 数值计算及结果分析

方程组(9)描述的是 ρ 方向和 z 方向的运动,采

用龙格-库塔(Runge-Kutta)方法进行求解;等效势用熟知的 $n=5$ 的 Newton-Contes 积分公式进行计算;本征值采用节点法来确定。

计算出了强磁场($10 \leq \beta \leq 1000$)下的氢分子离子 H_2^+ 的基态($N=0, m=0, \nu=0$), 激发态($N=0, m=-1, \nu=0$), ($N=0, m=-2, \nu=0$), ($N=0, m=-3, \nu=0$), ($N=0, m=-4, \nu=0$), ($N=0, m=-5, \nu=0$) 6 组能级及原子核的平衡距离。

2.1 零点振动能的计算

用绝热近似的方法算出了氢分子离子的 $m=0, -1, -2, -3, -4, -5$ 的各态的能级以及原子核之间的平衡间距。从其中选取 $m=0, -2, -4$ 分别在 $\beta=10, 100, 500, 1000$ 时的数据, 将数据拟合合成 $E \sim R$ 二次曲线^[10], 见图 1~3。曲线的拟合方程形式应为

$$E = E_0 + \frac{1}{2} K (R - R_0)^2. \quad (10)$$

式中, E_0 为 E 的极小值; R_0 为出现极小值的位置。

$\hbar\omega_0$ 可由下式确定:

$$\frac{1}{2} \mu \omega_0 = \frac{1}{2} K, \quad \mu = \frac{1}{2} m_p.$$

式中, m_p 为质子的质量。由此可以求出零点振动能为

$$\frac{1}{2} \hbar \omega_0 = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{2K/m_p}.$$

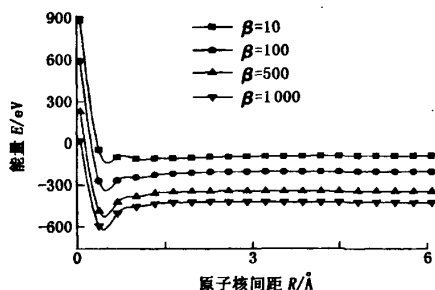


图1 $m=0$ 时的 $E \sim R$ 曲线

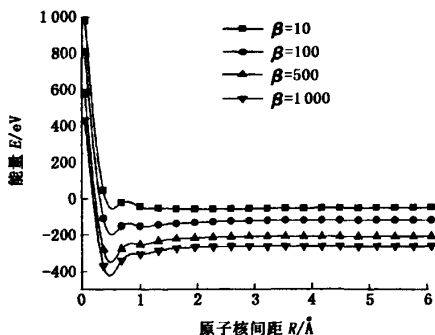


图2 $m=-2$ 时的 $E \sim R$ 曲线

从图 1~3 可以拟合出 12 个形如 $E = aR^2 + bR + c$ 的二次曲线方程, 如表 1 所示。

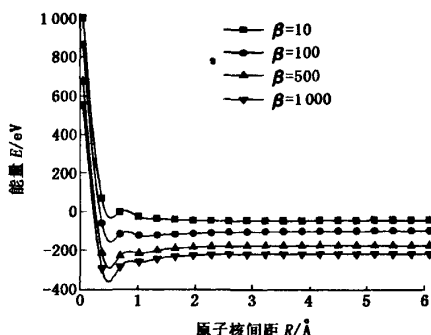


图3 $m=-4$ 时的 $E \sim R$ 曲线

将方程化成形式如式(10)的形式, 令 $a = \frac{1}{2} K = \frac{1}{2} \mu \omega_0^2$, 可以求得 ω_0 , 由此便可以求出零点振动能, 结果如表 1 所示。

表1 零点振动能的拟合曲线方程及计算结果

m	β	拟合的曲线方程	零点振动能 E_0/eV
0	10	$E = 0.3357R^2 - 4.7293R + 10.4246$	0.117181
0	100	$E = 0.2396R^2 - 3.3281R + 1.9024$	0.098998
0	500	$E = 0.1424R^2 - 1.9494R - 7.1943$	0.076320
0	1000	$E = 0.0913R^2 - 1.2378R - 12.1309$	0.061097
-2	10	$E = 0.3744R^2 - 5.3340R + 14.0456$	0.123752
-2	100	$E = 0.2396R^2 - 3.3281R + 1.9024$	0.112770
-2	500	$E = 0.1424R^2 - 1.9494R - 7.1943$	0.098418
-2	1000	$E = 0.0913R^2 - 1.2378R - 12.1309$	0.089881
-4	10	$E = 0.3744R^2 - 5.3340R + 14.0456$	0.125034
-4	100	$E = 0.3109R^2 - 4.3570R + 8.1741$	0.116639
-4	500	$E = 0.2668R^2 - 3.7150R + 4.2880$	0.104466
-4	500	$E = 0.2313R^2 - 3.2044R + 1.0832$	0.097268

2.2 结果分析与讨论

由表 1 中的计算结果可以得到: (1) 当 m 一定时, 随着 β 的增大, 零点振动能减小; (2) 当 β 一定时, 随着 m 的减小, 零点振动能增大。

氢分子离子在无外场情况下处于基态时的零点振动能为 0.124304 eV ^[11], 与强磁场中的情况相比, 可以明显看到, 受外加强磁场的影 响, 氢分子离子的零点振动能减小了, 并且随着场强的逐渐增大, 零点振动能在逐渐减小。这是由于外加强磁场的存在, 导致电子所受的洛伦兹力变大, 电子的回旋半径变小, 电子与核之间的库仑力增大也使得两原子核克服相互间的库仑斥力而相互靠近, 核间的平衡距离变小, 导致零点振动能变小, 并且外加磁场越强, 平衡核间距离越小, 零点振动能也越小。

3 结束语

计算了氢分子离子在强磁场中的零点振动能,

分析了零点振动能随着磁场强度的增强而发生的变化,并且对比了强磁场和无外场两种情况下的基态零点振动能。结果表明,外加磁场越强,零点振动能越小。这为研究强磁场中氢分子离子的性质提供了很好的参考。

参考文献:

- [1] GARSTANG R H. Atoms in high magnetic fields[J]. Rep Prog Phys, 1977,40:105-154.
- [2] RUDER, WUNNER H G, HEROLD H, et al. Atoms in strong magnetic fields [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1994.
- [3] 焦志勇,李毓成. 强磁场中氢分子离子 H_2^+ 能级的绝热及绝热变分计算[J]. 原子与分子物理学报,1999,16: 577-581.
JIAO Zhi-yong, LI Yu-cheng. The adiabatic approximation and adiabatic variational approximation calculation of H_2^+ in strong magnetic fields[J]. Journal of Atom and Molecular Physics, 1999,16:577-581.
- [4] OZAKI J. Adiabatic potential of H_2^+ ion in strong magnetic fields[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1993,62:1516-1526.
- [5] VINCKE M, BAYE D. Variational study of the hydrogen molecular ion in very strong magnetic fields[J]. J Phys B, 1985,18:167-176.
- [6] KAPPES U, SCHMELCHER P. Electronic bond structure of the H_2^+ ion in a strong magnetic field: a study of the parallel configuration[J]. Phys Rev A, 1995,51:4542-4557.
- [7] OZAKI J, TOMISHIMA Y. Monte Carlo solutions of Schrödinger's equation for H_2^+ ion in strong magnetic fields(II) [J]. J Phys Soc Jpn, 1983,52:1142-1147.
- [8] LARSEN D M. Hydrogen molecular ion in a magnetic field[J]. Phys Rev A, 1982,25:1295-1304.
- [9] 史斌星. 量子物理[M]. 北京:清华大学出版社,1982: 264-265.
- [10] LEWIN W H G, van PARADIJS J, van den HEUVEL E P J. X-Ray binaries [M]. Cambridge: Cambridge University, 1995.
- [11] 曾谨言. 量子力学(下册)[M]. 北京:科学出版社, 1982:450.

(编辑 修荣荣)

下 期 要 目

- | | | | |
|-------|----------------------------|-------|------------------------------|
| 李学惠,等 | 苏北盆地低电阻率油层的识别及其分布规律 | 丁康乐,等 | 值模拟 |
| 徐朝晖,等 | 前陆冲断带断裂断层特征及控藏作用 | | 含水条件下正己烷与硫酸镁 TSR 体系模拟实验 |
| 王海荣,等 | 挠曲作用的形变响应及其表现形式 | 于国光,等 | 北京市大气气溶胶中多环芳烃的源解析 |
| 蒋有录,等 | 东濮凹陷凝析气藏成因类型及其分布特征 | 李兆敏,等 | CO ₂ 在超稠油中的溶解特性试验 |
| 任怀强,等 | 吐哈盆地红台地区微观储层特征 | 曾正权,等 | 聚合物反相乳液调驱剂对孤岛油田的适应性 |
| 宋国奇,等 | 不整合结构层的矿物学与元素地球化学特征 | 刘会平,等 | 矿物低温催化脂肪酸在重水和水中的反应研究 |
| 罗银富,等 | 基于 TDS 技术的岩石平面渗透率各向异性的确定 | 梅 玲,等 | 渤海湾盆地南堡凹陷原油地球化学特征及油源对比 |
| 陈军海,等 | 泥页岩粘土矿物组分确定的新方法以及对钻井液性能的优化 | 张 建,等 | 固体颗粒对油田采出水性质的影响 |
| 徐 晖,等 | 裂缝性油藏水驱油渗吸理论及其数学模型 | 何 英,等 | 改性丁苯胶乳的研制及其对水泥浆性能的影响 |
| 赵秀才,等 | 合理分割岩心微观结构图像的新方法 | 王业飞,等 | 硫化氢对冻胶型堵剂的影响 |
| 林 红,等 | 含裂纹金属拉伸断裂过程的热像检测方法 | 刘素芹,等 | 复杂地表区波动方程基准校正 |
| 李 伟,等 | 热油管道防腐层大修期间热力参数的数值模拟 | 孙小冬,等 | CRS 叠加优化算法的改进 |
| | | 王海起,等 | GIS 区域数据时空线性建模方法 |
| | | 田学民,等 | 统计过程控制的研究现状及展望 |