第 46 卷 第 7 期 1997 年 7 月
1000-3290/97/46(7)/1267-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 46, No. 7, July, 1997
©1997 Chin. Phys. Soc.

Runge-Lenz 矢量与升降算子

刘宇峰 曾谨言

(北京大学物理系,北京 100871)

(1996 年 12 月 5 日收到)

分析表明,对于二维氢原子和各向同性谐振子,从径向 Schrödinger 方程的因式分解导出的升降算子与 Runge-Lenz 矢量等价.这表明径向方程能够因式分解,与经典粒子轨道的闭合性及体系的动力学对称性密切相关.

PACC: 0365

1 引 言

文献[1]分析表明,只有当中心势为 Coulomb 势或各向同性谐振子势时,径向 Schrödinger 方程才能因式分解.这使人回想起经典力学中著名的 Bertrand 定理[2],即只有当中心力为平方反比力或 Hooke 力时,粒子束缚运动的轨道才是闭合的.闭合轨道意味着除角动量之外,还存在另外的守恒量[3],也反映体系具有比其几何对称性(空间各向同性)更高的动力学对称性[4].例如,平方反比力场中束缚粒子的轨道为椭圆,而刻画椭圆长轴方向和偏心率的 Runge-Lenz 矢量[3]就是这个守恒量.文献[1]分析还表明,直接从径向 Schrödinger 方程的因式分解,对于各向同性谐振子,可以导出两类升降算子,而对于氢原子,则只能导出一类升降算子.这是体系的动力学对称性决定的.本文将以二维氢原子和各向同性谐振子为例来讨论上述问题.分析表明,因式分解导出的升降算子与 Runge-Lenz 矢量等价.这表明径向方程之所以能够因式分解,与经典粒子轨道的闭合性(经典频率的完全简并[5])及体系的动力学对称性密切相关.

2 二维氢原子的升降算子与能量本征值

二维氢原子的能量本征态可取为(H, l_z)的共同本征态,即 $\psi = e^{im\varphi}R_m(\rho) = e^{im\varphi}\cdot\chi_m(\rho)/\sqrt{\rho}$, $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$, $\chi_m(\rho)$满足径向方程 $H(m)\chi_m(\rho) = E\chi_m(\rho)$,或表示成(取 $\mu=\hbar=e=1$)

$$D(m)\chi_m(\rho) = \lambda_m\chi_m(\rho), \quad \lambda_m = -2E,$$

$$D(m) = -2H(m) = \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{m^2-1/4}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}$$

$$= \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{(m-1/2)(m+1/2)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}. \tag{1}$$

直接通过因式分解[1,6],可求出升降算子,$A_{\pm}(m)$,

$$A_{+}(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}+\frac{1}{m+1/2},$$
$$A_{-}(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-\frac{1}{m-1/2}, \tag{2}$$

$A_{\pm}(m)$为角动量 m 的升降算子,选择定则为 $\Delta m=\pm 1,\Delta E=0$.

利用 $A_{\pm}(m)$不难用代数方法求出能谱.首先,按(1)式,能量本征值 E 只依赖于 $|m|$.按照 Hellmann-Feynman 定理[7],

$$\frac{\partial E}{\partial|m|}=<\frac{\partial H}{\partial|m|}>=<\frac{|m|}{\rho^2}>\ >0, \tag{3}$$

即 E 随 $|m|$ 单调增大,因此,基态 $m=0$.由(1)式还可看出,对给定能级 E,$|m|$ 必有上限,记为 $m_0(|m|\leqslant m_0\geqslant 0)$.按升算子的作用,有 $A_{+}(m_0)\chi_{m_0}(\rho)=0$,即

$$A_{+}(m_0)\chi_{m_0}(\rho)=\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m_0+1/2}{\rho}+\frac{1}{m_0+1/2}\right)\chi_{m_0}(\rho)=0, \tag{4}$$

可求出 $\chi_{m_0}(\rho)\sim\rho^{m_0+1/2}\mathrm{e}^{-\rho/(m_0+1/2)}$.按(4)式,还有 $A_{-}(m_0+1)A_{+}(m_0)\chi_{m_0}(\rho)=0$,利用(2)和(1)式,可得

$$[D(m_0)-1/(m_0+1/2)^2]\chi_{m_0}(\rho)$$
$$=[-2E_{m_0}-1/(m_0+1/2)^2]\chi_{m_0}(\rho)=0,$$

即能量本征值为

$$E_{m_0}=-1/2(m_0+1/2)^2\qquad m_0=0,1,2,\cdots. \tag{5}$$

还应注意,对于不同能级,$|m|$ 极大值 m_0 必定也不同.因为如假定 $E_{m_0}\neq E'_{m_0}$,对应 m_0 相同,径向波函数记为 χ_{m_0}和 χ'_{m_0},它们彼此正交.但 $A_{+}(m_0)\chi_{m_0}=0$,$A_{+}(m_0)\chi'_{m_0}=0$,这与 χ_{m_0}和 χ'_{m_0}线性无关是矛盾的.

利用降算子 $A_{-}(m_0)$,$A_{-}(m_0-1)$,…,依次对 $\chi_{m_0}(\rho)$运算,可求出属于 E_{m_0}能级的一系列简并态,记为 $\chi_{m_0,m}(\rho)$,$m=m_0,m_0-1,\cdots,-m_0$.简并度为$(2m_0+1)$.这样还可把能级公式改写成

$$E=E_n=-1/2n^2\qquad n=1/2,3/2,5/2,\cdots. \tag{6}$$

所属简并态的磁量子数 m 极大值 $m_0=n-1/2$,简并度为 $2n$.各简并态可改记为 $\chi_{n,m}(\rho)$,$m=\pm(n-1/2),\cdots,\pm 1,0$.如令 $n=1/2+|m|+n_\rho$,则相应 $n_\rho=0,1,\cdots,(n-1/2)$.计算可证明 $\chi_{n,m}(\rho)\sim\rho^{|m|+1/2}\mathrm{e}^{-\rho/n}\mathrm{F}(-n_\rho,2|m|+1,\frac{2\rho}{n})$,F 为合流超几何函数,$n_\rho$ 为径向波函数的节点数.在文献[6]中,利用合流超几何函数的递推关系,求出了二维氢原子的其他三类升降算子 B,C 和 D.

3 二维氢原子的 Runge-Lenz 矢量

对于二维氢原子,除了角动量 $\boldsymbol{l}=(xp_y-yp_x)\boldsymbol{k}$ 之外,还存在另一守恒量,即 Runge-

Lenz 矢量[3]($\hbar = \mu = e = 1$)

$$\boldsymbol{a} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l} - \boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) - \boldsymbol{e}_\rho, \tag{7}$$

式中 $\boldsymbol{p} = p_x\boldsymbol{i} + p_y\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{e}_\rho = (x\boldsymbol{i} + y\boldsymbol{j})/\rho$, $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$. 容易得出

$$\begin{aligned} a_x &= p_y l_z - \frac{\mathrm{i}}{2} p_x - x/\rho, \\ a_y &= -p_x l_z - \frac{\mathrm{i}}{2} p_y - y/\rho. \end{aligned} \tag{8}$$

可以证明[7]

$$\begin{aligned} &[l_z, a_x] = \mathrm{i}a_y, \quad [l_z, a_y] = -\mathrm{i}a_x, \\ &[a_x, a_y] = -\mathrm{i}2Hl_z. \end{aligned} \tag{9}$$

在属于能级 $E(E<0)$的各简并态张开的空间中, a_x 和 a_y 可代之为 $A_x = \sqrt{-1/(2E)}\, a_x$, $A_y = \sqrt{-1/(2E)}\, a_y$, 并令 $A_z = l_z$, 则

$$[A_\alpha, A_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma, \tag{10}$$

$$A^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2 = -\frac{1}{4} - \frac{1}{2E}, \tag{11}$$

即(A_x, A_y, A_z)构成 SO_3 Lie 代数,所以 A^2 本征值为 $m_0(m_0+1)$, $m_0 = 0, 1, 2, \cdots$. 因此,可得出能级

$$E = E_n = -1/(2n^2) \qquad n = (m_0 + 1/2) = 1/2, 3/2, 5/2, \cdots. \tag{12}$$

定义 $a_\pm = a_x \pm \mathrm{i}a_y$, 则

$$[l_z, a_\pm] = \pm a_\pm, \tag{13}$$

$$a_- a_+ = \frac{H}{2}(2l_z + 1)^2 + 1. \tag{14}$$

(13)式表明守恒量 $a_\pm$ 为 m 的升降算子. 设(H, l_z)的本征态记为$|Em\rangle$, 则 $a_\pm|Em\rangle$仍为(H, l_z)本征态,能量本征值仍为 E,但 l_z 本征值为$(m \pm 1)$. 考虑到给定 E 之下,$|m|$必有上限,记为 m_0, 则 $a_+|Em_0\rangle = 0$, 从而 $a_- a_+|Em_0\rangle = 0$. 再利用(14)式,可得$\frac{E}{2}(2m_0 + 1)^2 + 1 = 0$, 所以 $E = -1/(2n^2)$, $n = (m_0 + 1/2) = 1/2, 3/2, 5/2, \cdots$, 此即(6)式. 属于 E_n 的诸简并态可表示成(未归一化)$|E_n m\rangle \sim a_-^k|E_n m_0\rangle$, $k = 0, 1, 2, \cdots, 2m_0$, 相应 $m = m_0, m_0 - 1, \cdots, -m_0$.

4　Runge-Lenz 矢量与升降算子等价

通过坐标变换可以证明,在极坐标中 Runge-Lenz 矢量 $a_\pm = a_x \pm \mathrm{i}a_y$ 表示成

$$a_\pm = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}\left[\left(\mp\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho}l_z\right)l_z - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\rho} \mp \frac{1}{\rho}l_z\right) - 1\right]. \tag{15}$$

它们作用于(H, l_z)共同本征态上时, l_z 代之为 m. 角度部分波函数中 m 的升降已由 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}$ 完成. 这样,可求出作用于径向波函数 $R_m(\rho)$上的算子

$$a_{\pm}(m)=\left[\left(\left(\mp m\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m^2}{\rho}\right)-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\rho}\pm\frac{m}{2\rho}-1\right]\right.$$

$$=-\left(\frac{1}{2}\pm m\right)\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m(m\pm1/2)}{\rho}-1. \tag{16}$$

因此,除去一个无关紧要的常数因子外,$a_{\pm}(m)$可改记为

$$\begin{aligned}a_{+}(m)&=\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m}{\rho}+1/(m+1/2),\\ a_{-}(m)&=\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m}{\rho}-1/(m-1/2).\end{aligned} \tag{17}$$

当作用于波函数 $\chi_m(\rho)=\sqrt{\rho}R_m(\rho)$上时,$a_{\pm}(m)$应换为

$$\begin{aligned}A_{+}(m)&=\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}+1/(m+1/2),\\ A_{-}(m)&=\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-1/(m-1/2).\end{aligned} \tag{18}$$

这正是对 $\chi_m(\rho)$满足的径向方程(1)进行因式分解时所得出的升、降算子(2)式.这样就证明了二维氢原子的守恒量 Runge-Lenz 矢量与因式分解得出的角动量升降算子等价.

以上分析表明,二维氢原子的径向 Schrödinger 方程之所以能因式分解,与其经典轨道的闭合性和体系的动力学对称性密切相关.

5 二维各向同性谐振子的两类升降算子与守恒张量

在文献[8]中,通过 $\chi_m(\rho)$满足的径向方程的因式分解,已找出二维各向同性谐振子的两类升降算子(作用于 $\chi_m(\rho)$上)

$$\begin{aligned}A_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m\pm1/2}{\rho}\pm\rho,\\ B_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m\pm1/2}{\rho}\mp\rho.\end{aligned} \tag{19}$$

当作用到 $R_m(\rho)=\chi_m(\rho)/\sqrt{\rho}$上时,$A_{\pm}(m)$,$B_{\pm}(m)$应代之为

$$\begin{aligned}a_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m}{\rho}\pm\rho,\\ b_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m}{\rho}\mp\rho.\end{aligned} \tag{20}$$

当作用到全部波函数上时,并采用直角坐标系,则算子代之为 $a_{\pm}$,$b_{\pm}$.例如 $a_{+}(m)$代之为

$$a_{+}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{1}{\rho}l_z+\rho\right)=\left(\frac{\partial}{\partial x}+x\right)+\mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y}+y\right), \tag{21}$$

类似有

$$a_- = \left(\frac{\partial}{\partial x} - x\right) - \mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y} - y\right),$$
$$b_+ = \left(\frac{\partial}{\partial x} - x\right) + \mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y} - y\right), \tag{22}$$
$$b_- = \left(\frac{\partial}{\partial x} + x\right) - \mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y} + y\right).$$

不难证明

$$[l_z, a_\pm] = \pm a_\pm, \quad [l_z, b_\pm] = \pm b_\pm, \tag{23}$$
$$[H, a_\pm] = \mp a_\pm, \quad [H, b_\pm] = \pm b_\pm. \tag{24}$$

这正是在文献[8]中把 $A_\pm(m)$改记为 $A(m\uparrow, E\downarrow)$和 $A(m\downarrow, E\uparrow)$,把 $B_\pm(m)$改记为 $B(m\uparrow, E\uparrow)$和 $B(m\downarrow, E\downarrow)$的理由.对于二维氢原子,其升降算子 $a_\pm$ 本身,即 Runge-Lenz 矢量,也是守恒量.对于二维各向同性谐振子,$a_\pm$ 和 $b_\pm$ 本身并不是守恒量,也并非 Runge-Lenz 矢量.但按照 $a_\pm$ 和 $b_\pm$ 的作用,不难用它们来构成所有的守恒量.首先,可以证明,守恒量 H 和 l_z 可如下构成:

$$-\frac{1}{4}(a_- a_+ + b_+ b_-) = H - 1, \tag{25}$$

$$\frac{1}{4}(a_- a_+ - b_+ b_-) = l_z. \tag{26}$$

其次,可以证明

$$-\frac{1}{4}(a_- b_- + b_+ a_+) = \frac{1}{2}(x^2 - y^2 + p_x^2 - p_y^2) \equiv Q_1, \tag{27}$$

$$-\frac{\mathrm{i}}{4}(a_- b_- - b_+ a_+) = xy + p_x p_y \equiv Q_{xy} \tag{28}$$

也是守恒量.利用它们即可确定椭圆轨道的长轴方向和偏心率.事实上,在经典力学中[例如参阅文献[7],p.313],令 $\tan 2\gamma = Q_{xy}/Q_1$,则 γ 表示椭圆长轴与 x 轴的夹角,而椭圆的偏心率$\propto\sqrt{Q_{xy}^2 + Q_1^2}$.

[1] Y.F.Liu, Y.A.Lei and J.Y.Zeng, *Phys. Lett.* A,即将发表.

[2] J.Bertrand, *Comptes Rendus*, **71**(1873), 849;或参见 H. Goldstein, Classical Mechanics, 2nd. ed. (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1980), p.93 及附录 A.

[3] C.Runge, *Vektoranalysis*, **1**(1919, Hirzel, Leipzig), 70; W.Lenz, *Z. Phys.*, **24**(1924), 197.

[4] W.Pauli, *Z. Phys.*, **26**(1926), 336.

[5] S.Weigert and H.Thomas, *Am. J. Phys.*, **61**(1993), 272.

[6] 刘宇峰、曾谨言,物理学报,**46**(1997),423.

[7] 曾谨言,量子力学,卷Ⅱ(科学出版社,北京,1993),第 290 页.

[8] 刘宇峰、曾谨言,物理学报,**46**(1997),428.

RUNGE-LENZ VECTOR AND RAISING AND LOWERING OPERATORS

LIU YU-FENG ZENG JIN-YAN
(*Department of Physics, Peking University, Beijing* 100871)
(Received 5 December 1996)

ABSTRACT

It is shown that the raising and lowering operators derived from the factorization of the radial Schrödinger equation for the two-dimensional hydrogen atom and the isotropic oscillator are equivalent to the Runge-Lenz vector. This implies that the factorizability of the radial Schrödinger equation is intimately connected with the closeness of classical orbits and the dynamical symmetry.

PACC: 0365