

二维与三维氢原子的四类升、降算子^{*}

刘宇峰 曾谨言

(北京大学物理系, 北京 100871)

(1996 年 7 月 15 日收到)

用因式分解法求出了二维和三维氢原子的角动量升、降算子, 还利用合流超几何函数的递推关系求出了另外三类升、降算子. 讨论了四类升、降算子的选择定则和守恒量子数. 二维和三维氢原子有很大的相似性.

PACC: 0365

1 引 言

文献[1, 2]中用因式分解法^[3]分别给出了三维和二维各向同性谐振子的四类升、降算子. 文献[4]中讨论了中心力场中粒子的径向 **Schrödinger** 方程进行因式分解的可能性. 分析表明, 只有当中心力场为 **Coulomb** 场或各向同性谐振子时, 径向 **Schrödinger** 方程才可能进行因式分解. 本文将直接用因式分解法分别求出三维和二维氢原子的角动量升、降算子 $A_{\pm}$, 并利用合流超几何函数的递推关系求出其他三类升、降算子的表示式. 分析表明三维和二维氢原子之间有很大的相似性. 本文还将讨论四类升、降算子的相应的选择定则和守恒量子数.

2 三维氢原子的四类升、降算子

三维氢原子 ($V(r) = -e^2/r$) 的能量本征态可取为守恒量完全集 (H, l^2, l_z) 的共同本征态^[5]

$$\psi = \frac{\chi_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = l, l-1, \dots, -l. \quad (1)$$

径向波函数 $\chi_l(r)$ 满足 ($M = \hbar = e = 1$)

$$\begin{aligned} D(l) \chi_l(r) &= \lambda_l \chi_l(r) \quad \lambda_l = -2E, \\ D(l) &\equiv \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{r}. \end{aligned} \quad (2)$$

定义与 l 有关的升、降算子

$$A_{+}(l) = \frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} + \frac{1}{l+1},$$

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

$$A_-(l) = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l} \quad l > 0. \quad (3)$$

容易证明

$$\begin{aligned} A_-(l+1)A_+(l) &= D(l) - 1/(l+1)^2, \\ A_+(l-1)A_-(l) &= D(l) - 1/l^2 \quad l > 0, \end{aligned} \quad (4)$$

以及

$$\begin{aligned} D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}] &= \lambda_{l-1}A_+(l-1)\chi_{l-1}, \\ D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}] &= \lambda_{l+1}A_-(l+1)\chi_{l+1}. \end{aligned} \quad (5)$$

由(5)式可看出,如 χ_{l-1} 是 $D(l-1)$ 的本征态,本征值为 λ_{l-1} ,则 $A_+(l-1)\chi_{l-1}$ 为 $D(l)$ 的本征态,本征值仍为 λ_{l-1} .因此,算子 A_+ 的作用是使角动量增加 1,但保持能量不变.类似地,算子 A_- 的作用是使角动量减小 1,也保持能量不变.所以 $A_{\pm}$ 分别为角动量的升、降算子.

求解径向方程,在束缚态边界条件下,可求出氢原子的能量本征值为^[5]

$$E = E_n = -1/(2n^2) \quad n = l + n_r + 1, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

径向波函数为

$$\chi_{ln_r} \sim r^{l+1} e^{-r/(l+n_r+1)} F\left(-n_r, 2l+2, \frac{2r}{l+n_r+1}\right), \quad (7)$$

或

$$\chi_{ln} \sim \xi_n^{l+1} e^{-\xi_n/2} F(-(n-l-1), 2l+2, \xi_n) \quad \xi_n = \frac{2r}{n}, \quad (7')$$

n_r 为径向波函数节点数($r=0, \infty$ 点除外), n 为主量子数.能级 E_n 具有 l 简并性($l=0, 1, \dots, n-1$),简并度为 n^2 .

由于算子 $A_{\pm}$ 的作用不改变能量,所以可改记为

$$\begin{aligned} A_+(l) &\rightarrow A(l\uparrow, n) = \frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} + \frac{1}{l+1}, \\ A_-(l) &\rightarrow A(l\downarrow, n) = \frac{d}{dr} + \frac{l}{r} - \frac{1}{l} \quad l > 0. \end{aligned} \quad (8)$$

根据径向波函数表示式(7')及合流超几何函数的递推关系(见附录)可以找出另外三类算子的表示式如下:

$$\begin{aligned} B(l, n\uparrow) &= \left[r \frac{d}{dr} - \frac{r}{n+1} + n\right] M\left(\frac{n}{n+1}\right), \\ B(l, n\downarrow) &= \left[r \frac{d}{dr} + \frac{r}{n-1} - n\right] M\left(\frac{n}{n-1}\right), \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} C(l\uparrow, n\uparrow) &= \left\{[(l+1)(n+1)+r] \frac{d}{dr} - \frac{r}{n+1} - \frac{(l+1)^2(n+1)}{r} + (n-l-1)\right\} M\left(\frac{n}{n+1}\right), \\ C(l\downarrow, n\downarrow) &= \left\{[l(n-1)+r] \frac{d}{dr} + \frac{r}{n-1} + \frac{l^2(n-1)}{r} - (n-l)\right\} M\left(\frac{n}{n-1}\right), \end{aligned} \quad (10)$$

$$D(l\downarrow, n\uparrow) = \left\{[l(n+1)-r] \frac{d}{dr} + \frac{r}{n+1} + \frac{l^2(n+1)}{r} - (n+l)\right\} M\left(\frac{n}{n+1}\right),$$

$$D(l\uparrow, n\downarrow) = \left\{ [(l+1)(n-1) - r] \frac{d}{dr} - \frac{r}{n-1} - \frac{(l+1)^2(n-1)}{r} + (n+l+1) \right\} M\left(\frac{n}{n-1}\right), \quad (11)$$

式中算子 M 定义为

$$M(k)f(x) = f(kx). \quad (12)$$

与算子 A, B, C, D 相应的选择定则和守恒量子数列于表 1. 三维氢原子的能级及算子 A, B, C, D 的作用如图 1 所示.

表 1

升、降算子	l	n_r	$n = l + n_r + 1$	守恒量子数
$A(l\uparrow, n)$	$l \rightarrow l+1$	$n_r \rightarrow n_r - 1$	$n \rightarrow n$	$n, l + n_r$
$A(l\downarrow, n)$	$l \rightarrow l-1$	$n_r \rightarrow n_r + 1$	$n \rightarrow n$	
$B(l, n\uparrow)$	$l \rightarrow l$	$n_r \rightarrow n_r + 1$	$n \rightarrow n+1$	l
$B(l, n\downarrow)$	$l \rightarrow l$	$n_r \rightarrow n_r - 1$	$n \rightarrow n-1$	
$C(l\uparrow, n\uparrow)$	$l \rightarrow l+1$	$n_r \rightarrow n_r$	$n \rightarrow n+1$	n_r
$C(l\downarrow, n\downarrow)$	$l \rightarrow l-1$	$n_r \rightarrow n_r$	$n \rightarrow n-1$	
$D(l\downarrow, n\uparrow)$	$l \rightarrow l-1$	$n_r \rightarrow n_r + 2$	$n \rightarrow n+1$	$n + l, 2l + n_r$
$D(l\uparrow, n\downarrow)$	$l \rightarrow l+1$	$n_r \rightarrow n_r - 2$	$n \rightarrow n-1$	

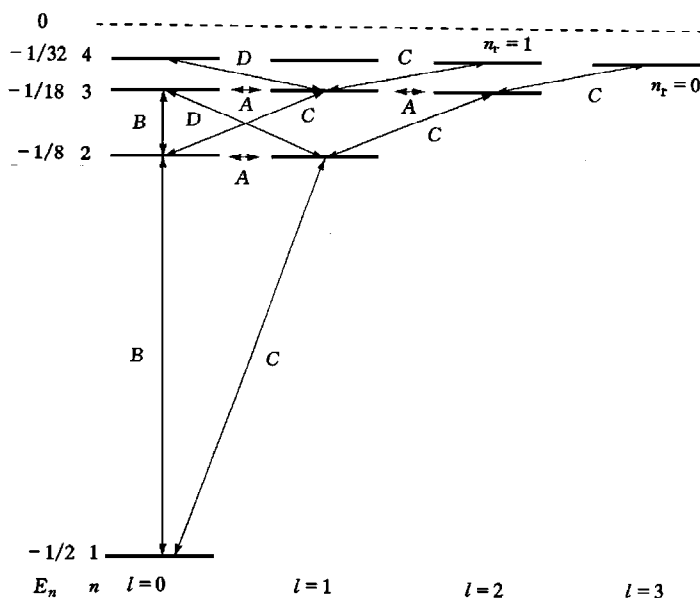


图 1 三维氢原子的能级和四类升、降算子

应指出,只要知道了四类算子中任何两类的表示式,即可利用它们构造出另外两类升、降算子的表示式.例如可证明 $B(l, n\downarrow)A(l\downarrow, n)$, 除了一常数因子外,即 $C(l\downarrow, n\downarrow)$.

根据算子 A 的物理意义(表 1)以及 n_r 的极小值为零,可知 $A(l\uparrow, n)\chi_{l, n_r=0} = 0$, 即

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} + \frac{1}{l+1} \right) \chi_{l,0}(r) = 0.$$

解之,得

$$\chi_{l,n_r=0}(r) \sim r^{l+1} e^{-r/(l+1)}, \quad (13)$$

这是(7)式的特例($n_r=0$),是给定 n 下角动量最大($l=n-1$),无节点($n_r=0$)的径向波函数.对(13)式依次用 $A(l \downarrow, n)$, $A((l-1) \downarrow, n)$, $\cdots$ 作用,即可得出属于能级 E_n ($n=l+1$)的所有径向波函数 $\chi_{l-1,1}$, $\chi_{l-2,2}$, $\cdots$, $\chi_{0,l}$.变动 l ($l=1,2,\cdots$),即求出全部径向波函数.从图1及算子 A 的物理意义,可以更形象地看出这一点.

3 二维氢原子的四类升、降算子

二维氢原子 ($V(\rho) = -e^2/\rho$) 的能量本征态可取为守恒量完全集 $(H, \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi})$ 的共同本征态

$$\psi = \frac{\chi_m(\rho)}{\sqrt{\rho}} e^{im\varphi} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \quad (14)$$

$\chi_m(\rho)$ 满足径向方程

$$\begin{aligned} D(m) \chi_m(\rho) &= \lambda_m \chi_m(\rho) \quad \lambda_m = -2E, \\ D(m) &= \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{4\rho^2} - \frac{m^2}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \\ &= \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{(|m|-1/2)(|m|+1/2)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho}. \end{aligned} \quad (15)$$

它与三维氢原子的径向方程(2)有很大的相似性,利用三维氢原子的计算结果(形式上把 $l(l+1) \rightarrow (|m|-1/2)(|m|+1/2)$),容易得出二维氢原子的有关公式(直接从径向方程(15)出发,也可得同样的公式).四类升、降算子的表示式如下($m \geq 0$ 情况):

$$A(m \uparrow, n) = \frac{d}{d\rho} - \frac{m+1/2}{\rho} + \frac{1}{m+1/2}, \quad (16)$$

$$A(m \downarrow, n) = \frac{d}{d\rho} + \frac{m-1/2}{\rho} - \frac{1}{m-1/2},$$

$$B(m, n \uparrow) = \left[\rho \frac{d}{d\rho} - \frac{\rho}{n+1} + n \right] M\left(\frac{n}{n+1}\right), \quad (17)$$

$$B(m, n \downarrow) = \left[\rho \frac{d}{d\rho} + \frac{\rho}{n-1} - n \right] M\left(\frac{n}{n-1}\right),$$

$$C(m \uparrow, n \uparrow) = \left\{ [(m+1/2)(n+1) + \rho] \frac{d}{d\rho} - \frac{\rho}{n+1} - \frac{(m+1/2)^2(n+1)}{\rho} + n - m - 1/2 \right\} M\left(\frac{n}{n+1}\right),$$

$$C(m \downarrow, n \downarrow) = \left\{ [(m-1/2)(n-1) + \rho] \frac{d}{d\rho} + \frac{\rho}{n-1} + \frac{(m-1/2)^2(n-1)}{\rho} - n + m - 1/2 \right\} M\left(\frac{n}{n-1}\right),$$

(18)

$$D(m \downarrow, n \uparrow) = \left\{ [(m-1/2)(n+1) - \rho] \frac{d}{d\rho} + \frac{\rho}{n+1} + \frac{(m-1/2)^2(n+1)}{\rho} - n - m + 1/2 \right\} M\left(\frac{n}{n+1}\right),$$

$$D(m \uparrow, n \downarrow) = \left\{ [(m+1/2)(n-1) - \rho] \frac{d}{d\rho} - \frac{\rho}{n-1} - \frac{(m+1/2)^2(n-1)}{\rho} + n + m + 1/2 \right\} M\left(\frac{n}{n-1}\right). \quad (19)$$

考虑到(15)式只含 m 的绝对值, 所以 $\chi_{-m, n} = \chi_{m, n}$, 上列公式容易推广到 $m \leq 0$ 情况. 此时, 算子 A 满足下列关系式:

$$A((-m) \uparrow, n) = A(m \downarrow, n), A((-m) \downarrow, n) = A(m \uparrow, n). \quad (20)$$

算子 B 的表示式不变. 算子 C 和 D 变化如下:

$$C((-m) \uparrow, n \uparrow) = -D(m \downarrow, n \uparrow), \quad C((-m) \downarrow, n \downarrow) = -D(m \uparrow, n \downarrow), \quad (21)$$

$$D((-m) \downarrow, n \uparrow) = -C(m \uparrow, n \uparrow), \quad D((-m) \uparrow, n \downarrow) = -C(m \downarrow, n \downarrow). \quad (22)$$

与算子 A, B, C, D 相应的选择定则和守恒量子数列于表 2. 二维氢原子的能级及算子 A, B, C, D 的作用如图 2 所示.

表 2

升、降算子	m	n_ρ	$n = m + n_\rho + 1/2$	守恒量子数
$A(m \uparrow, n)$	$m \rightarrow m+1$	$n_\rho \rightarrow n_\rho - 1$	$n \rightarrow n$	$n, m + n_\rho$
$A(m \downarrow, n)$	$m \rightarrow m-1$	$n_\rho \rightarrow n_\rho + 1$	$n \rightarrow n$	
$B(m, n \uparrow)$	$m \rightarrow m$	$n_\rho \rightarrow n_\rho + 1$	$n \rightarrow n+1$	m
$B(m, n \downarrow)$	$m \rightarrow m$	$n_\rho \rightarrow n_\rho - 1$	$n \rightarrow n-1$	
$C(m \uparrow, n \uparrow)$	$m \rightarrow m+1$	$n_\rho \rightarrow n_\rho$	$n \rightarrow n+1$	n_ρ
$C(m \downarrow, n \downarrow)$	$m \rightarrow m-1$	$n_\rho \rightarrow n_\rho$	$n \rightarrow n-1$	
$D(m \downarrow, n \uparrow)$	$m \rightarrow m-1$	$n_\rho \rightarrow n_\rho + 2$	$n \rightarrow n+1$	$n + m , 2 m + n_\rho$
$D(m \uparrow, n \downarrow)$	$m \rightarrow m+1$	$n_\rho \rightarrow n_\rho - 2$	$n \rightarrow n-1$	

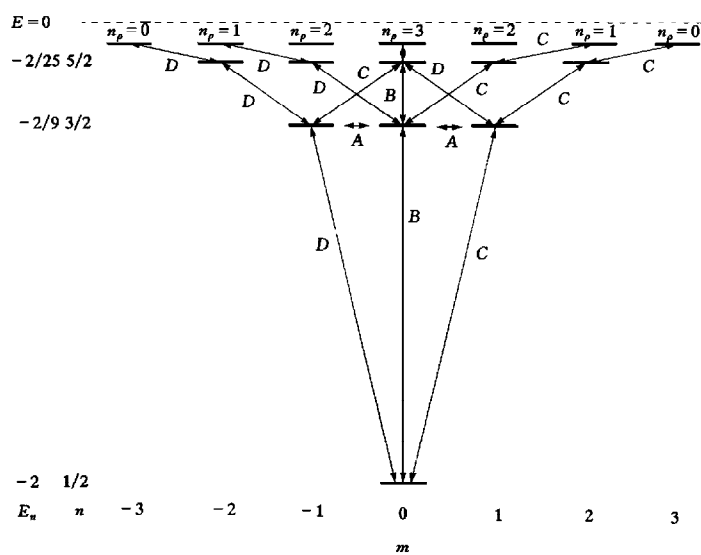


图 2 二维氢原子的能级和四类升、降算子

附 录

利用合流超几何函数的递推关系式(见文献[6]及文献[1]的附录),可以证明

$$\left(\alpha + x \frac{d}{dx}\right) F(\alpha, \gamma; x) = \alpha F(\alpha + 1, \gamma; x), \quad (\text{A1})$$

$$\left[(\gamma - \alpha - x) + x \frac{d}{dx}\right] F(\alpha, \gamma; x) = (\gamma - \alpha) F(\alpha - 1, \gamma; x), \quad (\text{A2})$$

$$\left[(\alpha + x) - (\gamma + x) \frac{d}{dx}\right] F(\alpha, \gamma; x) = \frac{(\gamma - \alpha)(\gamma + 1 - \alpha)}{\gamma(\gamma + 1)} F(\alpha, \gamma + 2; x), \quad (\text{A3})$$

$$\left\{[(\gamma - 1)(\gamma - 2) + \alpha x] + x(\gamma + 2 - x) \frac{d}{dx}\right\} F(\alpha, \gamma; x) = (\gamma - 1)(\gamma - 2) F(\alpha, \gamma - 2; x), \quad (\text{A4})$$

$$\left[-\alpha + (\gamma - x) \frac{d}{dx}\right] F(\alpha, \gamma; x) = \frac{\alpha(\alpha + 1)}{\gamma(\gamma + 1)} x F(\alpha + 2, \gamma + 2; x), \quad (\text{A5})$$

$$\left[(\alpha - 1)x + (\gamma - 1 - x)(\gamma - 2 - x) + (\gamma - 2 - x)x \frac{d}{dx}\right] F(\alpha, \gamma; x) = (\gamma - 1)(\gamma - 2) F(\alpha - 2, \gamma - 2; x). \quad (\text{A6})$$

利用上述公式及径向波函数表示式(7'),可求出算子 B, C, D 的表示式(9)–(11).

感谢喀兴林教授的有益讨论,并使作者了解他们在氢原子径向波函数的阶梯算符方面的工作^[7].

- [1] 刘宇峰、曾谨言, 物理学报, **46**(1997), 417.
- [2] 刘宇峰、曾谨言, 物理学报, **46**(1997), 423.
- [3] E. Schrödinger, *Proc. Roy. Irish Acad.*, **A46**(1940), 9; **A46**(1941), 183; **A47**(1942), 53; L. Infeld and T. E. Hull, *Rev. Mod. Phys.*, **23**(1951), 21.
- [4] Y. F. Liu, Y. A. Lei and J. Y. Zeng, *Phys. Lett. A*, accepted.
- [5] 曾谨言, 量子力学, 卷 I(科学出版社, 北京, 1990), 第 6 章.
- [6] 王竹溪、郭敦仁, 特殊函数概论(科学出版社, 北京, 1979), 第 330, 370 页.
- [7] 喀兴林、王 敏, 大学物理, (12)(1989), 1.

FOUR KINDS OF RAISING AND LOWERING OPERATORS OF TWO-AND THREE-DIMENSIONAL HYDROGEN ATOMS

LIU YU-FENG ZENG JIN-YAN

(*Department of Physics, Peking University, Beijing 100871*)

(Received 15 July 1996)

ABSTRACT

Using the factorization method, the angular momentum raising and lowering operators of two-and three-dimensional hydrogen atoms were derived. The other three kinds of raising and lowering operators were also obtained by using the recurrence relations of hypergeometric function. The corresponding selection rules and conserved quantum numbers were discussed. The similarity between two-and three-dimensional hydrogen atoms was found.

PACC: 0365