

· 基础理论研究 ·

量子力学中的升降算符

戴启润¹, 魏书民²

(1. 信阳师范学院 物理系, 河南 信阳 464000; 2. 信阳林业学校, 河南 信阳 464000)

摘要: 集中研究了量子力学中的升降算符. 对坐标、动量、角动量等力学量, 运用升降算符求解其本征问题. 对谐振子、氢原子体系, 运用升降算符求解其能量本征值和本征函数.

关键词: 上升算符; 下降算符; 本征值; 本征矢量

中图分类号: O413.1 文献标识码: A 文章编号: 1003-0972(2002)02-0166-04

量子力学中, 运用升降算符可以很方便地研究算符的本征问题, 简化数学计算, 突出物理图象.

1 坐标与动量的升降算符

为简单起见, 讨论一维情况. 坐标和动量算符满足对易关系

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1)$$

设坐标算符的本征值为 x , 对应的本征矢量为 $|x\rangle$, 有

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (2)$$

用动量算符 \hat{p} 构造一个么正算符 $\hat{Q}^+(\xi)$

$$\hat{Q}^+(\xi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hat{p}} \quad (3)$$

(3) 式中 ξ 是一个实数. $\hat{Q}^+(\xi)$ 是么正的, 其伴算符为

$$\hat{Q}(\xi) = e^{\frac{i}{\hbar}\xi\hat{p}} \quad (4)$$

$\hat{Q}^+(\xi)$ 与 \hat{x} 对易关系是

$$[\hat{x}, \hat{Q}^+(\xi)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial \xi} \hat{Q}^+(\xi) = \xi \hat{Q}^+(\xi) \quad (5)$$

即

$$\hat{x} \hat{Q}^+(\xi) = \hat{Q}^+(\xi) \hat{x} + \xi \hat{Q}^+(\xi) \quad (5')$$

将(5)式作用到 $|x\rangle$ 上, 得

$$\hat{x} \hat{Q}^+(\xi)|x\rangle = (x + \xi) \hat{Q}^+(\xi)|x\rangle \quad (6)$$

(6) 式表明, 若 $|x\rangle$ 是算符 \hat{x} 的本征矢量, 则 $\hat{Q}^+(\xi)|x\rangle$ 也是其本征矢, 对应的本征值为 $x + \xi$. 由于 ξ 是任意实数, 就可以得出结论: 坐标算符 \hat{x} 的本征值可取一切实数, 组成连续谱. $\hat{Q}^+(\xi)$ 为作用于坐标本征矢量上的上升算符, 即

$$\hat{Q}^+(\xi)|x\rangle = |x + \xi\rangle \quad (7)$$

将 $\hat{Q}(\xi)$ 作用于 $|x\rangle$, 由于 $\hat{Q}(\xi) = \hat{Q}^+(-\xi)$, 可得

$$\hat{Q}(\xi)|x\rangle = |x - \xi\rangle \quad (8)$$

显然, 算符 $\hat{Q}(\xi)$ 是右矢 $|x\rangle$ 的下降算符. 有了 $\hat{Q}^+(\xi)$ 和 $\hat{Q}(\xi)$, 就可以从任何一个本征矢出发, 求出 \hat{x} 的全部本征矢量 $\{|x\rangle\}$.

对于动量算符 \hat{p} 也可以作类似的讨论. 设 \hat{p} 的本征值为 p , 对应的本征矢为 $|p\rangle$, 其本征方程为

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (9)$$

令 π 为任意实数, 引入升算符

$$\hat{T}^+(\pi) = e^{\frac{i}{\hbar}\pi\hat{p}} \quad (10)$$

其伴算符为

$$\hat{T}(\pi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{p}} \quad (11)$$

\hat{p} 与 $\hat{T}^+(\pi)$ 的对易关系为

$$[\hat{p}, \hat{T}^+(\pi)] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \pi} \hat{T}^+(\pi) = \pi \hat{T}^+(\pi) \quad (12)$$

将(12)式作用于 $|p\rangle$, 得

$$\hat{p} \hat{T}^+(\pi)|p\rangle = (p + \pi) \hat{T}^+(\pi)|p\rangle \quad (13)$$

(13) 式表明, $\hat{T}^+(\pi)|p\rangle$ 也是 \hat{p} 的本征矢, 本征值为 $p + \pi$. 由于 π 为任意实数, 说明 \hat{p} 的本征值可取任何实数, 构成连续谱.

$$\hat{T}^+(\pi)|p\rangle = |p + \pi\rangle \quad (14)$$

利用 $\hat{T}(\pi) = \hat{T}^+(-\pi)$, 可得

$$\hat{T}(\pi)|p\rangle = |p - \pi\rangle \quad (15)$$

$\hat{T}(\pi)$ 是动量 \hat{p} 的下降算符. 有了 $\hat{T}^+(\pi)$ 和 $\hat{T}(\pi)$, 就可以从任何一个本征矢 $|p\rangle$ 出发, 求出 \hat{p} 的全部

收稿日期: 2001-12-28

作者简介: 戴启润(1949-), 男, 河南新县人, 信阳师范学院物理系教授.

本征矢量 $\{|p\rangle\}$.

2 角动量的升降算符

一般角动量算符 \hat{J} 是矢量. 它的 3 个分量为 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$; 其平方算符为 $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$, 显然有

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0 \quad (i = x, y, z \text{ 或 } 1, 2, 3) \quad (16)$$

由于角动量的 3 个分量不对易, 所以一般研究 \hat{J}^2 和任何一个分量 (如 $\hat{J}_3 = \hat{J}_z$) 的本征问题. \hat{J}^2, \hat{J}_z 有共同本征矢量组, 记为 $|\lambda m\rangle$, 设 \hat{J}^2 的本征值为 $\lambda \hbar^2$, \hat{J}_z 的本征值为 $m \hbar$, 有

$$\hat{J}^2 |\lambda m\rangle = \lambda \hbar^2 |\lambda m\rangle \quad (17)$$

$$\hat{J}_z |\lambda m\rangle = m \hbar |\lambda m\rangle \quad (18)$$

为了求 λ 和 m 的取值范围. 引入两个算符 \hat{J}_+ 和 \hat{J}_- ,

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y \quad (19)$$

这两个算符不是厄米算符, 因而它们不表示物理量, 但由 \hat{J}_i 的厄米性, 得

$$\hat{J}_\pm^\dagger = \hat{J}_\mp \quad (20)$$

即二者互为伴算符. 它们与 \hat{J}^2 和 \hat{J}_z 的对易关系是

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0 \quad (21)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm \hbar \hat{J}_\pm \quad (22)$$

用 (21)、(22) 式作用于 $|\lambda m\rangle$ 得

$$\hat{J}^2 \hat{J}_\pm |\lambda m\rangle = \lambda \hbar^2 \hat{J}_\pm |\lambda m\rangle \quad (23)$$

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm |\lambda m\rangle = (m \pm 1) \hbar \hat{J}_\pm |\lambda m\rangle \quad (24)$$

由此知 $\hat{J}_\pm |\lambda m\rangle$ 也是 \hat{J}^2 和 \hat{J}_z 的共同本征矢量, \hat{J}^2 的本征值不变而 m 则增加或减少 1, 即

$$\hat{J}_\pm |\lambda m\rangle = C_\pm |\lambda m \pm 1\rangle \quad (25)$$

(25) 式中 C_\pm 是归一化常数. \hat{J}_+ 是量子数 m 的上升算符而 \hat{J}_- 是 m 的下降算符. 进一步可求出 $\lambda = j(j+1)$. 将 λ 改为 $j(j+1)$, 并将本征矢量量子数 λ 改为 j , 则 \hat{J}^2, \hat{J}_z 的本征方程成为

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = j(j+1) \hbar^2 |jm\rangle \quad (26a)$$

$$\hat{J}_z |jm\rangle = m \hbar |jm\rangle \quad (26b)$$

量子数 j, m 的可取值为

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots \quad (27)$$

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

求出 C_\pm , 升降算符对 $|jm\rangle$ 的作用为

$$\hat{J}_\pm |jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle \quad (28)$$

上述结论对所有角动量如轨道角动量、自旋角动量等均成立. 下面研究轨道角动量 $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$, \hat{L}^2 和 \hat{L}_z 的共同本征矢为 $|\lambda m\rangle$, 量子数 m 的升降算符是 $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$. 现在利用方向算符 \hat{N} 来研究量子数 l 的升降算符.

设 \hat{F} 是使 m 不变而 l 增加 1 的上升算符, \hat{G} 是量子数 l 的下降算符. 于是 \hat{F}, \hat{G} 应满足

$$[\hat{L}_z, \hat{F}] = 0, [\hat{L}^2, \hat{F}] = 2(l+1) \hbar^2 \hat{F} \quad (29)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{G}] = 0, [\hat{L}^2, \hat{G}] = -2 \hbar^2 \hat{G} \quad (30)$$

为了寻找满足 (29)、(30) 式的 \hat{F}, \hat{G} , 引入方向算符 \hat{N} , 它是一个矢量算符, 3 个分量为 $\hat{N}_x, \hat{N}_y, \hat{N}_z$,

$$\hat{N} = \hat{r}/r \quad (31)$$

\hat{N} 与 \hat{L}^2, \hat{L}_i 的对易关系为

$$[\hat{L}_i, \hat{N}_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{N}_k \quad (32)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{N}] = 2i \hbar \hat{N} \times \hat{L} + 2 \hbar^2 \hat{N} \quad (33)$$

此外还有

$$[\hat{L}^2, \hat{N} \times \hat{L}] = -2i \hbar \hat{N} \hat{L}^2 \quad (34)$$

若选

$$\hat{F} = \frac{i}{\hbar} \hat{N} \times \hat{L} + (l+1) \hat{N} \quad (35)$$

$$\hat{G} = \frac{i}{\hbar} \hat{N} \times \hat{L} - l \hat{N} \quad (36)$$

则 \hat{F}, \hat{G} 正好满足 (29)、(30) 两式的第二式, \hat{F}_z, \hat{G}_z 正好满足 (29)、(30) 两式的第一式. \hat{F}_z, \hat{G}_z 正是量子数 l 的升、降算符.

$$\begin{aligned} \hat{F}_z(l) |lm\rangle &= \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m+1)(l-m+1)}{2l+3}} |l+1, m\rangle \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)(l-m)}{2l-1}} |l-1, m\rangle \end{aligned} \quad (37)$$

$$\hat{G}_z(l) |lm\rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)(l-m)}{2l-1}} |l-1, m\rangle \quad (38)$$

有了 $\hat{L}_+, \hat{L}_-, \hat{F}_z, \hat{G}_z$, 就可以从 \hat{L}^2 和 \hat{L}_z 的任何一个本征矢出发, 得出全部的本征矢量 $\{|m\rangle\}$.

3 谐振子哈密顿的升降算符

一维谐振子的哈密顿是

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (39)$$

定义两个新算符

$$\hat{a} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p}\right) \quad (40)$$

$$\hat{a}^+ = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p}\right) \quad (41)$$

\hat{a}, \hat{a}^+ 互为伴算符. 它们的对易关系为

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (42)$$

体系的哈密顿用 \hat{a}, \hat{a}^+ 表示为

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (43)$$

\hat{H} 与 \hat{a}, \hat{a}^+ 的对易关系为

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a}, [\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\omega\hat{a}^+ \quad (44)$$

要求解 \hat{H} 的本征问题, 可先求 $\hat{a}^+ \hat{a}$ 的本征值和本征矢量. $\hat{a}^+ \hat{a}$ 为厄米算符, 设它的本征值为 λ , 即

$$\hat{a}^+ \hat{a} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad (45)$$

用 λ 左乘上式, 得

$$\lambda \hat{a}^+ \hat{a} |\lambda\rangle = \hat{a}^+ |\lambda\rangle^2 = \lambda$$

可见 $\lambda \geq 0$.

用 \hat{a} 作用于 (45) 式并利用 (42) 式

$$\hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} |\lambda\rangle = (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) \hat{a} |\lambda\rangle = \lambda \hat{a} |\lambda\rangle,$$

即

$$\hat{a}^+ \hat{a} (\hat{a} |\lambda\rangle) = (\lambda - 1) (\hat{a} |\lambda\rangle),$$

由此可知, $\hat{a} |\lambda\rangle$ 也是 $\hat{a}^+ \hat{a}$ 的一个本征矢量, 本征值为 $\lambda - 1$, 即

$$\hat{a} |\lambda\rangle = \sqrt{\lambda} |\lambda - 1\rangle \quad (46)$$

(46) 式表明, \hat{a} 是本征矢量的下降算符. 由于 $\lambda, \lambda - 1, \lambda - 2, \dots$ 是本征值, 为了不与 $\lambda = 0$ 相矛盾, λ 只能是非负的整数 n . 求出 $\hat{a}^+ \hat{a}$ 的本征值就得到谐振子的能量本征值谱

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega, n = 0, 1, 2, \dots \quad (47)$$

用类似方法得到 \hat{a}^+ 对 $|n\rangle$ 的作用为

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (48)$$

\hat{a}^+ 是本征矢量的上升算符.

哈密顿 \hat{H} 的本征矢量就是 $\hat{a}^+ \hat{a}$ 的本征矢量, 它可由基态 $|0\rangle$ 用上升算符 \hat{a}^+ 表出

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \quad (49)$$

由上分析可知, 用升降算符研究能量本征问题, 比直接求解 Schrodinger 方程要简单得多.

4 氢原子哈密顿的升降算符

类氢原子的定态 Schrodinger 方程为

$$(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{ze_s^2}{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (50)$$

其中, z 为核电荷数, $e_s = e/(4\pi\epsilon_0)^{\frac{1}{2}}$. 用球坐标表示, 即为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}) \Psi(\vec{r}) = (E + \frac{ze_s^2}{r}) \Psi(\vec{r}) \quad (51)$$

分离变量, 令

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (52)$$

式中 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 称球函数, 它是 L^2 的本征函数. 将 (52) 式代入 (51) 式得径向方程

$$[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2mze_s^2}{\hbar^2 r} + \frac{l(l+1)}{r^2}] R(r) = 0 \quad (53)$$

为了化简方程, 令

$$n = \frac{ze_s^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2(-E)}}, \text{ 因而} \quad E = -\frac{z^2 m e_s^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (54)$$

$$\rho = \frac{2z}{na_0} r, \text{ 其中 } a_0 = \frac{\hbar^2}{m e_s^2} \text{ (玻尔半径)} \quad (55)$$

$$R(r) = (\frac{2z}{na_0})^{3/2} R_{nl}(\rho) \quad (56)$$

径向方程变为

$$(\frac{d}{d\rho} \rho^2 \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{4} \rho^2 + n\rho) R_{nl}(\rho) = l(l+1) R_{nl}(\rho) \quad (57)$$

将 (57) 式分别改写成以下两种形式

$$[\frac{d}{d\rho} \rho^2 \frac{d}{d\rho} - (\frac{1}{2} \rho - n)^2 - n] R_{nl}(\rho) = [l(l+1) - n(n+1)] R_{nl}(\rho),$$

$$[\frac{d}{d\rho} \rho^2 \frac{d}{d\rho} - (\frac{1}{2} \rho - n)^2 + n] R_{nl}(\rho) = [l(l+1) - n(n-1)] R_{nl}(\rho),$$

再进一步写成

$$[-\frac{d}{d\rho} \rho - \frac{\rho}{2} + (n+1)] [\frac{d}{d\rho} \rho - \frac{\rho}{2} + n] R_{nl}(\rho) = (n-1)(n+l+1) R_{nl}(\rho),$$

$$[\frac{d}{d\rho} \rho - \frac{\rho}{2} + (n-1)] [-\frac{d}{d\rho} \rho - \frac{\rho}{2} + n] R_{nl}(\rho) = (n+1)(n-l-1) R_{nl}(\rho)$$

定义两个算符

$$\hat{A}_n^+ = \frac{d}{d\rho} \rho - \frac{\rho}{2} + n \quad (58)$$

$$\hat{A}_n^- = -\frac{d}{d\rho} \rho - \frac{\rho}{2} + n \quad (59)$$

则 (58)、(59) 式可以写成

$$\hat{A}_n^- \hat{A}_n^+ R_{nl}(\rho) = (n-1)(n+l+1) R_{nl}(\rho) \quad (60)$$

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n^- R_{nl}(\rho) = (n+1)(n-l-1) R_{nl}(\rho) \quad (61)$$

(60)、(61) 式是等价的, 并同径向方程 (57) 等价.

用 \hat{A}_n^+ 作用于 (60) 式两边, 得

$$\hat{A}_n^+ \hat{A}_n^+ \hat{A}_n^- R_{nl}(\rho) = (n-1)(n+l+1) \hat{A}_n^+ R_{nl}(\rho) \quad (62)$$

比较 (61)、(62) 两式知, $\hat{A}_n^+ R_{nl}(\rho)$ 满足 (61) 式中将 n 改为 $n+1$ 的方程, 由此得

$$\hat{A}_n^+ R_{nl}(\rho) = \hat{A}_{n+1}^+ R_{n+1, l}(\rho) \quad (63)$$

a_{nl}^+ 为归一化常数. 同样, 用 \hat{A}_n^- 作用于 (61) 式两边

$$\hat{A}_n^- \hat{A}_{n-1}^+ [\hat{A}_n^- R_{nl}(\rho)]$$

$$= (n+1)(n-l-1) [\hat{A}_n^- R_{nl}(\rho)] \quad (64)$$

(64) 式与 (60) 式比较, 得

$$\hat{A}_n^- R_{nl}(\rho) = a_{nl}^- R_{n-1, l}(\rho) \quad (65)$$

a_{nl}^- 为归一化常数.

从上面的讨论可知, \hat{A}_n^+ 和 \hat{A}_n^- 是量子数 n 的升降算符, 将 \hat{A}_n^+ 作用在 $R_{nl}(\rho)$ 上, 可以得出 $R_{n\pm 1, l}(\rho)$. 注意, \hat{A}_n^+ 和 \hat{A}_n^- 并无厄米共轭关系.

经过计算, 可得两个归一化常数为

$$a_{nl}^+ = \sqrt{\frac{n+1}{n}} \sqrt{n(n+1) - l(l+1)} \quad (66)$$

$$a_{nl}^- = \sqrt{\frac{n-1}{n}} \sqrt{n(n-1) - l(l+1)} \quad (67)$$

利用下降算符 \hat{A}_n^- 可以确定 n 的取值. 首先, 从上面的讨论知, n 是相差为 1 的一些数, 暂不知是否为整数. 其次, 由于束缚态的能量肯定有一个下限, 即基态能量. 如已知有一个 $R_{nl}(\rho)$ 存在, 则用

$\hat{A}_n^-, \hat{A}_{n-1}^-, \hat{A}_{n-2}^-, \dots$, 继续作用下去, n 值将不断减小, 为了不使 n 值一直减小下去, 一定要存在中断现象, 即存在一个最小的 u , 使得

$$\hat{A}_u^- R_{ul}(\rho) = 0 \quad (68)$$

为求 u , 用 \hat{A}_{u-1}^+ 作用于 (68) 式, 并利用 (61) 式, 得

$$\hat{A}_{u-1}^+ \hat{A}_u^- R_{ul}(\rho) = (u+1)(u-l-1) R_{ul}(\rho) = 0 \quad (69)$$

由此可知最小的 n 是

$$u = l+1 \quad (70)$$

即 n 是大于 l 的一切整数. 可以写成

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (71)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

确定了 n , 就得到氢原子的能级公式为

$$E_n = -\frac{z^2 m e^4}{2 \hbar^2 n^2} = -\frac{m z^2 e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (72)$$

有了 \hat{A}_n^+ 和 \hat{A}_n^- , 就可以从任何一个径向函数出发, 得出全部径向波函数 $R_{nl}(r)$.

参考文献

- [1] 周世勋. 量子力学教程[M]. 北京: 高等教育出版社, 1979.
- [2] 喀兴林. 高等量子力学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1999.
- [3] 曾谨言. 量子力学[M]. 北京: 科学出版社, 1993.
- [4] 余寿绵. 高等量子力学[M]. 济南: 山东科技出版社, 1985.
- [5] 钱伯初, 曾谨言. 量子力学学习题精选与剖析[M]. 北京: 科学出版社, 1988.
- [6] 时庆云. 量子力学[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1993.

The raising and lowering operator in Quantum mechanics

DAI Qi-run¹, WEI Shu-min²

(1. Dept of Phys Xinyang Teachers College, Xinyang 464000, China;

2 Xinyang Forestry School, Xinyang 464000, China)

Abstract: The raising and lowering operator is studied in Quantum Mechanics. By using raising and lowering operators, one can solve the eigenvalue question of coordinate, momentum and angular momentum, one can also find the energy eigenvalue and eigenfunction of the linear harmonic oscillator and hydrogen atom.

Key words: raising operator; lowering operator; eigenvalue; eigenfunction

责任编辑: 任长江