量子力学习题精选与剖析

（第二版）

下册

钱伯初
曾谨言 著



科学出版社

量子力学习题精选与剖析

（第二版）

下　册

钱伯初　曾谨言　著

科学出版社

1999

内 容 简 介

本书是作者在北京大学和兰州大学讲授量子力学的基础上，精选内容新颖、难度较大的习题汇集．这些题大部分选自国内外研究生试题和资格考试题，全部给出了详细的分析和解答，其中有些解法是作者独创的．这次第二版分上、下册．下册包括动量表象、能量表象、Heisenberg 图象、算符运算、谐振子的相干态与压缩态、Feynman-Hellmann 定理和位力定理、角动量（续）、对称性、准经典近似、二次量子化、相对论量子力学．

本书适于配合“高等量子力学”课程使用．

图书在版编目（CIP）数据

量子力学习题精选与剖析　下册/钱伯初，曾谨言著．
2 版．-北京：科学出版社，1999．1

ISBN 7-03-006761-4

Ⅰ．量…　Ⅱ．①钱…　②曾…　Ⅲ．量子力学-高等学校-习题　Ⅳ．0413．1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 13159 号

科学出版社出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
北京科普印刷厂 印刷
新华书店北京发行所发行　各地新华书店经售
*
1988 年 4 月第　一　版　　开本：850×1168　1/32
1999 年 1 月第　二　版　　印张：10 1/4
1999 年 1 月第三次印刷　　字数：271 000
印数：11 239—14 738

定 价：18.00 元

（如有印装质量问题，我社负责调换〈环伟〉）

目　录

第一章　动量表象 …… (1)
第二章　能量表象与 Heisenberg 图象 …… (15)
第三章　算符运算 …… (35)
第四章　谐振子的相干态与压缩态 …… (53)
第五章　Feynman-Hellmann 定理和位力定理 …… (72)
第六章　角动量(续) …… (90)
第七章　对称性 …… (126)
第八章　准经典近似 …… (206)
第九章　二次量子化 …… (245)
第十章　相对论量子力学 …… (275)

第一章　动量表象

1.1　质量为 m 的粒子在均匀力场 $f(x)=-F(F>0)$ 中运动，运动范围限制在 $x\geqslant 0$. 试在动量表象中求解束缚态能级和本征函数.

解　势能为 $V(x)=Fx$，总能为

$$H=T+V=\frac{p^2}{2m}+Fx \tag{1}$$

在动量表象中，x 的算符表示为

$$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\cdot}{\mathrm{d}p} \tag{2}$$

H 的算符表示为

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}+\mathrm{i}\hbar F\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} \tag{3}$$

定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\mathrm{i}\hbar F\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\varphi(p)=E\varphi(p) \tag{4}$$

其中 $\varphi(p)$ 是动量表象中的波函数. 式(4)是非常简单的一阶微分方程，其解为

$$\varphi(p)=A\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6m}-Ep\right)\right] \tag{5}$$

A 是归一化常数.

变到 x 表象，波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x) &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p\\ &= A(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{p^3}{6mF}+\left(x-\frac{E}{F}\right)p\right]\mathrm{d}p\\ &= 2A(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_0^{\infty}\cos\left[\frac{p^3}{6\hbar mF}+\frac{p}{\hbar}\left(x-\frac{E}{F}\right)\right]\mathrm{d}p\end{aligned}$$

$$= \frac{C}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) \mathrm{d}u \tag{6}$$

其中

$$u = p(2\hbar m F)^{-1/3} \tag{7}$$

$$\xi = \left(x - \frac{E}{F}\right)\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3} = \frac{x}{l} - \lambda \tag{8}$$

$$l = \left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{1/3} \tag{9}$$

$$\lambda = \left(\frac{2m}{\hbar^2 F^2}\right)^{1/3} E = \frac{2mE}{\hbar^2} l^2 \tag{10}$$

l 是本题的特征长度.

除归一化常数 C 外,式(6)右端正是以 ξ 为变量的 Airy 函数①.

当 $\xi > 0$($x > E/F$,即经典禁区),Airy 函数表现为第二类变型 Bessel 函数,即

$$\psi(x) = \sqrt{\xi}\, K_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) \xrightarrow{\xi \to \infty} \sqrt{\xi}\left(\frac{3\pi}{4\xi^{3/2}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \tag{11}$$

当 $\xi < 0$($x < E/F$,即经典允许区),Airy 函数表现为第一类 Bessel 函数,即

$$\psi(x) = \sqrt{|\xi|}\left[J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right) + J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)\right] \tag{12}$$

能级 E 由边界条件 $\psi(0) = 0$ 决定,即

$$J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{3/2}\right) + J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{3/2}\right) = 0 . \tag{13}$$

其解可由 Bessel 函数表查出,为

$$\lambda = 2.3381, 4.0880, 5.5206, 6.7867, 7.9441, \cdots$$

能量本征值和 λ 的关系见式(10). 基态能级为

$$E_1 = 1.8558\left(\frac{\hbar^2 F^2}{m}\right)^{1/3} \tag{14}$$

---

① Airy 函数的基本性质可以参看 Landau 等著《量子力学》上册(高等教育出版社,1980)中的附录 6.

1.2 一个电子被限制在一块电介质(无限大)平面的上方($x\geqslant 0$)运动,介质的介电常数为 ε,不可穿透.

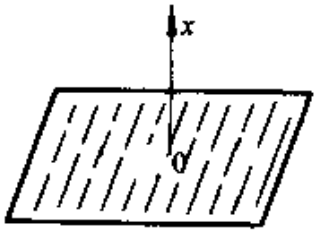


图 1.2

按电象法可求出静电势能为

$$V(x)=-\frac{\alpha}{x},\quad \alpha=\frac{e^2}{4}\left(\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+1}\right)>0 \qquad (1)$$

试求电子的能级($E<0$).

解一 电子在 y、z 方向的运动为自由运动,其动能可连续变化,这部分能量不予考虑.

x 方向的运动,能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)-\frac{\alpha}{x}\psi(x)=E\psi(x) \qquad (2)$$

边界条件为 $\psi(0)=0$.

式(2)的结构和 Coulomb 场 $V(r)=-\alpha/r$ 中 s 态($l=0$)的径向方程相同,后者为

$$\psi=R(r)=u(r)/r \qquad (3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)-\frac{\alpha}{r}u(r)=Eu(r) \qquad (4)$$

边界条件为 $u(0)=0$[$\psi(0)$有限]. 众所周知,式(4)的束缚态能级为

$$E_n=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2},\qquad n=1,2,3,\cdots \qquad (5)$$

这也就是式(2)的能级. 波函数也可以利用 Coulomb 场的 s 态解而写出来.

解二 在动量表象中求解. 能量本征方程为

$$\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{\alpha}{x}\right)\varphi(p)=E\varphi(p) \qquad (6)$$

$\varphi(p)$为波函数. 在 p 表象中,

$$x=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p},\qquad \frac{1}{x}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int\mathrm{d}p \qquad (7)$$

所以式(6)可以写成

$$(p^2+\eta^2)\varphi(p)=\frac{2m\alpha}{i\hbar}\int\varphi(p)dp,\qquad \eta^2=-2mE \tag{8}$$

令

$$\Phi(p)=\int\varphi(p)dp \tag{9}$$

则

$$\varphi(p)=\frac{d}{dp}\Phi(p) \tag{9'}$$

式(8)可以写成一阶微分方程的形式：

$$(p^2+\eta^2)\frac{d}{dp}\Phi(p)=\frac{2m\alpha}{i\hbar}\Phi(p) \tag{10}$$

即

$$\frac{d\Phi}{\Phi}=\frac{2m\alpha}{i\hbar}\frac{dp}{p^2+\eta^2} \tag{10'}$$

积分，即得

$$\ln\Phi(p)=\frac{2m\alpha}{i\hbar}\frac{1}{\eta}\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)$$

$$\Phi(p)=\int\varphi(p)dp=\exp\left[\frac{2m\alpha}{i\hbar}\frac{1}{\eta}\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)\right] \tag{11}$$

$\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)$是 p 的多值函数，

$$\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)=\left[\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)\right]_{\text{主值}}\pm k\pi,\qquad k=1,2,3,\cdots$$

而 $\varphi(p)$和 $\Phi(p)$应该是单值的，为此，必须

$$\frac{2m\alpha}{\hbar\eta}\pi=2n\pi,\qquad n=1,2,3,\cdots$$

即

$$\eta=m\alpha/n\hbar \tag{12}$$

因此，能级为

$$E=-\frac{\eta^2}{2m}=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2n^2},\qquad n=1,2,3,\cdots \tag{13}$$

和式(5)一致．

1.3 质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$ 中作一维运动，试建立动量表象中的能量本征方程．

解 采用 Dirac 符号，能量本征方程可以写成

$$H|\psi\rangle=(T+V)|\psi\rangle=E'|\psi\rangle \tag{1}$$

其中 $T=p^2/2m$ 为动能算符．以 $|p\rangle$、$|p'\rangle$ 等表示动量算符的本征态矢量，即

$$\hat{p}|p\rangle=p|p\rangle,\qquad \hat{p}|p'\rangle=p'|p'\rangle \tag{2}$$

态矢量 $|\psi\rangle$ 在 p 表象中的表示式（即波函数）记为

$$\langle p|\psi\rangle=\varphi(p) \tag{3}$$

动量本征态矢量 $|p\rangle$ 的正交“归一”性和完备性条件为

$$\langle p|p'\rangle=\delta(p-p') \tag{4}$$

$$\int|p'\rangle\langle p'|\mathrm{d}p'=1 \tag{5}$$

利用式(5)，可将 $|\psi\rangle$ 表示成

$$|\psi\rangle=\int|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle\mathrm{d}p'=\int|p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p' \tag{6}$$

代入式(1)，即成

$$(T+V)\int|p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\int|p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p'$$

再以 $\langle p|$ 左乘上式，即得

$$\int\langle p|(T+V)|p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\int\langle p|p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p' \tag{7}$$

其中

$$\langle p|T|p'\rangle=\frac{p'^2}{2m}\langle p|p'\rangle=\frac{p^2}{2m}\delta(p-p') \tag{8}$$

定义 $V_{pp'}=\langle p|V|p'\rangle$，并利用公式

$$\int\delta(p-p')\varphi(p')\mathrm{d}p'=\varphi(p) \tag{9}$$

式(7)最后可以化成

$$\boxed{\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p)} \tag{10}$$

这正是所求的 p 表象中的能量本征方程．各式中$\int\cdots\mathrm{d}p'$ 的积分上下限均为 $-\infty$ 至 $+\infty$．

式(10)中 $V_{pp'}$是势能 $V(x)$在 p 表象中的矩阵元，

$$V_{pp'}=\langle p|V|p'\rangle \tag{11}$$

如用 x 表象中波函数的积分形式来表示，就是

$$\begin{aligned}V_{pp'}&=\int\psi_p^*(x)V(x)\psi_{p'}(x)\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x\end{aligned}\tag{11'}$$

如果 $V(x)$可以方便地表示成 x 的正幂级数，

$$V(x)=\sum_{n=0}^{\infty}C_nx^n$$

由于

$$x\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}$$

式(11')可以进一步化成

$$\begin{aligned}V_{pp'}&=\sum_nC_n\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x\\&=\sum_nC_n\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\delta(p-p')\\&=V(\hat{x})\delta(p-p')\end{aligned}\tag{12}$$

其中

$$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tag{13}$$

代入式(10)，即得

$$\boxed{\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi(p)=E\varphi(p)}\tag{14}$$

例如题 1.1，就是直接从此式出发求解的，其中

$$V(\hat{x})=F\hat{x}=\mathrm{i}\hbar F\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$$

又如谐振子，

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2=-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}$$

能量本征方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\varphi(p)=E\varphi(p)$$

1.4　在动量表象中求解 δ 势阱

$$V(x)=-V_0\delta(x)$$

的束缚态能级和本征函数.

解　动量表象中的能量本征方程(参看题 1.3)为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p) \tag{1}$$

其中

$$\begin{aligned}V_{pp'}&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xV(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\\&=-\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\delta(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}=-\frac{V_0}{2\pi\hbar}\end{aligned} \tag{2}$$

代入式(1),即得

$$\left(\frac{p^2}{2m}-E\right)\varphi(p)=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\mathrm{d}p'=C,\qquad(\text{与 }p\text{ 无关}) \tag{3}$$

所以

$$\varphi(p)=\frac{2mC}{p^2-2mE}=\frac{A}{p^2-2mE} \tag{4}$$

此即 p 表象中的能量本征函数,A 为归一化常数.

将式(4)代入式(3)右端,得到

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-2mE}=\frac{\pi\hbar}{mV_0} \tag{5}$$

此即能级方程. 束缚态 $E<0$,令

$$k=\sqrt{-2mE}/\hbar \tag{6}$$

式(5)中定积分容易算出,为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-2mE}=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\hbar^2k^2}=\frac{\pi}{\hbar k}$$

代入式(5),即得

$$k=mV_0/\hbar^2 \tag{7}$$

因此

$$\boxed{E=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}} \tag{8}$$

波函数 $\varphi(p)$ 由式(4)表示,即

$$\boxed{\varphi(p)=\frac{A}{p^2+\hbar^2k^2}} \tag{4'}$$

常数 A 可以利用归一化条件求得,

$$1=\int|\varphi(p)|^2\mathrm{d}p=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^2}=|A|^2\frac{\pi}{2(\hbar k)^3}$$

$$A=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}(\hbar k)^{3/2}=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{mV_0}{\hbar}\right)^{3/2} \tag{9}$$

x 表象中的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x)&=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\\&=A(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\end{aligned} \tag{10}$$

利用围道积分法容易求出

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}=\frac{\pi}{\hbar k}\mathrm{e}^{-k|x|} \tag{11}$$

代入式(10)即得

$$\psi(x)=\sqrt{k}\,\mathrm{e}^{-k|x|} \tag{12}$$

这和上册题 2.1 所得结果完全一致.

1.5 利用题 1.4 得到的波函数,在 p 表象中计算 Δx、Δp,验

证测不准关系.

解 在 p 表象中归一化波函数为

$$\varphi(p)=A/(p^2+\hbar^2k^2) \tag{1}$$

其中

$$A=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}(\hbar k)^{3/2}, \qquad k=mV_0/\hbar^2 \tag{2}$$

p 和 p^2 平均值分别为

$$\overline{p}=\int p|\varphi(p)|^2\mathrm{d}p=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^2}=0 \tag{3}$$

$$\overline{p^2}=\int p^2|\varphi(p)|^2\mathrm{d}p=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^2}$$

$$=A^2\frac{\pi}{2\hbar k}=\hbar^2k^2 \tag{4}$$

因此

$$\Delta p=(\overline{p^2}-\overline{p}^2)^{1/2}=\hbar k \tag{5}$$

在 p 表象中,x 的算符表示为

$$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p} \tag{6}$$

利用平均值公式

$$\overline{F}=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)^*\,\hat{F}\,\varphi(p)\mathrm{d}p \tag{7}$$

即得

$$\overline{x}=\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}p}\mathrm{d}p=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}[\varphi(p)]^2\Big|_{-\infty}^{+\infty}=0 \tag{8}$$

$$\overline{x^2}=(\mathrm{i}\hbar)^2\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}p^2}\mathrm{d}p=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}p}\right)^2\mathrm{d}p$$

$$=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{4A^2p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^4}=4\hbar^2A^2\frac{\pi}{16(\hbar k)^5}=\frac{1}{2k^2} \tag{9}$$

因此

$$\Delta x=(\overline{x^2}-\overline{x}^2)^{1/2}=1/\sqrt{2}\,k \tag{10}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/\sqrt{2} \tag{11}$$

和测不准关系

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \hbar/2$$

是一致的.

1.6 用动量表象计算粒子(能量 $E>0$)对于 δ 势垒 $V(x)=V_0\delta(x)$的透射概率.

解 x 表象中定态Schrödinger方程为

$$\psi''+k^2\psi-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\delta(x)\psi=0, \qquad k=\sqrt{2mE}/\hbar \tag{1}$$

令

$$\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} \tag{2}$$

$\varphi(p)$即动量表象中的波函数,应满足方程(见题 1.3)

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p) + \int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p' = E\varphi(p) \tag{3}$$

其中

$$V_{pp'} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xV_0\delta(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar} = \frac{V_0}{2\pi\hbar} \tag{4}$$

因此,利用式(4)和(2),可求出

$$\int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p' = \frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\mathrm{d}p' = \frac{V_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0) \tag{5}$$

将式(4)、(5)代入式(3),即得

$$(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)+\frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=0 \tag{6}$$

根据 δ 函数的基本公式

$$(\xi-\xi_0)\delta(\xi-\xi_0)=0 \tag{7}$$

可知式(6)的通解为

$$\varphi(p)=C_1\delta(p-\hbar k)+C_2\delta(p+\hbar k)-\frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi}\hbar}\frac{\psi(0)}{(p^2-\hbar^2k^2)} \tag{8}$$

其中 C_1、C_2、$\psi(0)$为待定常数．

式(8)代入式(2)，得到 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ikx}+\frac{C_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ikx}-\frac{2mV_0}{2\pi\hbar}\psi(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{p^2-\hbar^2k^2}e^{ipx/\hbar} \tag{9}$$

式(9)中最后的积分应取主值，可以用复 p 平面上的围道积分法算出，结果为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{p^2-\hbar^2k^2}e^{ipx/\hbar}=\begin{cases}\dfrac{i\pi}{2\hbar k}(e^{ikx}-e^{-ikx}), & x>0\\ \dfrac{i\pi}{2\hbar k}(e^{-ikx}-e^{ikx}), & x<0\end{cases} \tag{10}$$

当 $x\to 0$，式(10)右端为 0，则由式(9)得到

$$\psi(0)=(C_1+C_2)/\sqrt{2\pi\hbar} \tag{11}$$

将式(10)，(11)代入式(9)，即得

$$\sqrt{2\pi\hbar}\psi(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx}-\frac{imV_0}{2\hbar^2k}(C_1+C_2)(e^{ikx}-e^{-ikx}),\qquad x>0$$

如规定入射波为 e^{ikx}(即入射动量 $p=\hbar k$)，则在 $x>0$ 区域应该只有透射波，即 e^{ikx}项，而不能存在 e^{-ikx}项．因此 C_1、C_2 必须有下列关系：

$$C_2=-i\frac{mV_0}{2\hbar^2k}(C_1+C_2) \tag{12}$$

从而

$$\psi(x)=\frac{C_1+C_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ikx},\qquad x>0 \tag{13}$$

类似地，可得

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}[(C_1-C_2)e^{ikx}+2C_2e^{-ikx}],\qquad x<0 \tag{14}$$

其中 e^{ikx}项为入射波，e^{-ikx}项为反射波．如规定入射波振幅为 1，即

式(14)写成

$$\psi(x)=e^{ikx}+Re^{-ikx} \tag{14'}$$

则应取

$$C_1-C_2=\sqrt{2\pi\hbar} \tag{15}$$

由式(13)、(14)易见，

$$\text{透射系数}=\left|\frac{C_1+C_2}{C_1-C_2}\right|^2=\frac{1}{\left|1-\frac{2C_2}{C_1+C_2}\right|^2}$$

利用式(12)，即得

$$\text{透射系数}=\frac{1}{|1+imV_0/\hbar^2k|^2}=\frac{1}{1+(mV_0/\hbar^2k)^2} \tag{16}$$

这结果和上册题 2.3 的式(9)完全一样．

1.7 质量为 m 的粒子束以动量 $p=\hbar k$ 从 $x=-\infty$ 处入射，受到周期性 δ 势垒

$$V(x)=V_0\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na),\qquad a>0$$

的作用，求能够出现完全反射的动量值．

解 采用动量表象，定态Schrödinger 方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\varphi(p) \tag{1}$$

其中

$$\begin{aligned}V_{pp'}&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xV(x)e^{i(p'-p)x/\hbar}\\&=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}e^{i(p'-p)na/\hbar}\end{aligned} \tag{2}$$

$\varphi(p)$即 p 表象中的波函数．x 表象中的波函数为

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi(p)e^{ipx/\hbar} \tag{3}$$

将式(2)代入式(1)，得到

$$(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)=-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_n\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p'\varphi(p')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)na/\hbar}$$
$$=-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_n\sqrt{2\pi\hbar}\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar} \tag{4}$$

根据 δ 函数基本公式

$$(\xi-\xi_0)\delta(\xi-\xi_0)=0 \tag{5}$$

可知式(4)的通解为

$$\varphi(p)=\sqrt{2\pi\hbar}[A\delta(p-\hbar k)+B\delta(p+\hbar k)]$$
$$-\frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_n\frac{\psi(na)}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar} \tag{6}$$

代入式(3),即得

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_n\psi(na)$$
$$\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-na)p/\hbar} \tag{7}$$

其中定积分应取主值,可以用复 p 平面上围道积分法算出,结果为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-na)p/\hbar}$$
$$=\begin{cases}\dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}], & x>na\\ \dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}], & x<na\end{cases}$$

代入式(7),并令 $x\to\infty$(即 $x>na$,$n=0,1,2,\cdots$),即得

$$\psi(x)\xrightarrow{x\to\infty}\left[A-\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$
$$+\left[B+\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{8}$$

根据题意,入射波$\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$,则在 $x\to\infty$ 处 $\psi(x)$ 应表现为透射波,即

$$\psi(x)\xrightarrow{x\to\infty}D\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

式(8)中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 项系数应为 0,因此

$$B=-\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}nak} \tag{9}$$

类似地，对于 $x<0$(即 $x<na, n=0,1,2,\cdots$)，式(7)给出

$$\psi(x)=\left[A+\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+2B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{10}$$

其中第一项为入射波，第二项为反射波．

如果出现完全反射，$x\to\infty$处透射波振幅应等于 0，即式(8)中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$项系数为 0，这时

$$A=\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak} \tag{11}$$

在这条件下，式(10)可以写成

$$\psi(x)=2A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+2B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\qquad x<0 \tag{12}$$

这时，反射概率$=\left|\frac{B}{A}\right|^2=1$，所以$|B|=|A|$，即

$$\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\right|=\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right| \tag{13}$$

能使式(13)成立的最简单的充分条件是

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka}=1 \tag{14}$$

相应的动量值为

$$p=\hbar k=\frac{\pi\hbar}{a},2\frac{\pi\hbar}{a},3\frac{\pi\hbar}{a},\cdots \tag{15}$$

入射波波长为

$$\lambda=\frac{2\pi}{k}=2a,\frac{1}{2}(2a),\frac{1}{3}(2a),\cdots \tag{15'}$$

在这条件下，从相邻两个 δ 势垒上反射回来的波相位相同，从而使总的反射波达到最强；而透射波则逐级减弱，最后衰减为零．

第二章　能量表象与 Heisenberg 图象

2.1　给定总能量算符 $H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$，以 E_n、ψ_n 表示其本征值和本征函数．态矢量 $|\psi_n\rangle$ 简记为 $|n\rangle$.

按照 Heisenberg 运动方程，力学量算符 $A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 的时间变化率为

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(AH-HA) \tag{1}$$

定义能量表象中矩阵元

$$A_{kn}\equiv\langle\psi_k|A|\psi_n\rangle\equiv\langle k|A|n\rangle \tag{2}$$

证明

$$\boxed{\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}=\mathrm{i}\omega_{kn}A_{kn}} \tag{3}$$

其中

$$\omega_{kn}=(E_k-E_n)/\hbar$$

证　ψ_n 满足本征方程

$$H|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle \tag{4}$$

其共轭方程为

$$\langle\psi_n|H=E_n\langle\psi_n| \tag{4'}$$

式(1)两端取能量表象中矩阵元，即得

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_k|AH-HA|\psi_n\rangle\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_n-E_k)\langle\psi_k|A|\psi_n\rangle\\&=\mathrm{i}\omega_{kn}A_{kn}\end{aligned}$$

此即式(3).

2.2 设 $H=p^2/2\mu+V(r)$，证明求和规则

$$\boxed{\sum_n (E_n-E_k)|x_{nk}|^2=\hbar^2/2\mu} \tag{1}$$

证 利用算符 x 的 Heisenberg 运动方程，可得

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar\mu}[x,p^2]=\frac{p_x}{\mu} \tag{2}$$

取矩阵元，并利用上题结果，即得

$$(p_x)_{kn}=\mathrm{i}\mu\omega_{kn}x_{kn} \tag{3}$$

再利用基本对易式

$$[x,p_x]=xp_x-p_xx=\mathrm{i}\hbar \tag{4}$$

在能量本征态$|k\rangle$下求平均值，即得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar&=(xp_x)_{kk}-(p_xx)_{kk}\\&=\sum_n[x_{kn}(p_x)_{nk}-(p_x)_{kn}x_{nk}]\\&=\mathrm{i}\mu\sum_n(\omega_{nk}x_{kn}x_{nk}-\omega_{kn}x_{kn}x_{nk})\\&=2\mathrm{i}\mu\sum_n\omega_{nk}|x_{nk}|^2\\&=\frac{2\mathrm{i}\mu}{\hbar}\sum_n(E_n-E_k)|x_{nk}|^2\end{aligned}$$

两端各乘$(-\mathrm{i}\hbar/2\mu)$，即得式(1).

r 的另外两个分量 y 和 z 的矩阵元，显然也有同样的求和规则．注意，式(1)中 E_k 可以是任何一个特定的能级，$\sum_n$ 则遍及所有能态．

2.3 一维谐振子的能量算符为

$$H=p_x^2/2\mu+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \tag{1}$$

试利用前两题所得公式求出全部能级以及 x、p_x 的矩阵元．p_x 简写成 p.

解 利用 Heisenberg 运动方程，易得

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p,H]=\frac{\mu\omega^2}{2\mathrm{i}\hbar}[p,x^2]=-\mu\omega^2 x \tag{2}$$

取能量表象矩阵元，即得

$$\mathrm{i}\omega_{kn}p_{kn}=-\mu\omega^2 x_{kn} \tag{3}$$

而上题已得

$$p_{kn}=\mathrm{i}\omega_{kn}\mu x_{kn} \tag{4}$$

式(3)和(4)合并，即得

$$(\omega^2-\omega_{kn}^2)x_{kn}=0 \tag{5}$$

其中 k、n 可以理解为能态编号数．由式(5)易见

$$\begin{aligned}&\text{如 } \omega_{kn}\neq\pm\omega, \qquad \text{则 } x_{kn}=0\\&\text{如 } x_{kn}\neq 0, \qquad \text{则 } \omega_{kn}=\pm\omega\end{aligned} \tag{6}$$

由于

$$(x^2)_{kk}=\sum_n x_{kn}x_{nk}=\sum_n |x_{nk}|^2>0 \tag{7}$$

对于任何选定的能级 E_k，必有某些 n 使 $x_{nk}\neq 0$．则由式(6)可知，能级差 $E_n-E_k=\pm\hbar\omega$，亦即，任意指定一个能级后，必然还存在和它相差 $\hbar\omega$ 的其他能级．所以，全部能级为

$$E=E_0, \qquad E_0+\hbar\omega, \qquad E_0+2\hbar\omega,\cdots$$

即

$$E_n=E_0+n\hbar\omega. \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{8}$$

为了求出基态能级 E_0，可以利用上题证明的公式

$$\sum_n (E_n-E_k)|x_{nk}|^2=\hbar^2/2\mu \tag{9}$$

取 k 为基态，由式(6)、(7)和(9)，可得

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}=\hbar\omega\sum_n |x_{n0}|^2=\hbar\omega(x^2)_{00}$$

因此，势能的基态平均值为

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2)_{00}=\frac{1}{4}\hbar\omega \tag{10}$$

而由位力定理，应有

$$\langle T\rangle_0=\langle V\rangle_0=\frac{1}{2}E_0$$

和式(10)比较,即得

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{11}$$

代入式(8),即得能级公式

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{8'}$$

考虑到式(6),由式(9)得出

$$|x_{k+1,k}|^2-|x_{k-1,k}|^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega} \tag{12}$$

适当选择各能量本征函数的相因子($e^{i\delta}$),总可使各 x_{nk} 为非负实数,则式(12)可以写成(k 改为 n)

$$(x_{n+1,n})^2-(x_{n,n-1})^2=\hbar/2\mu\omega \tag{12'}$$

当 $n=0$,上式给出

$$(x_{10})^2=\hbar/2\mu\omega, \qquad x_{10}=\sqrt{\hbar/2\mu\omega} \tag{13}$$

反复利用式(12')即得

$$x_{n+1,n}=\sqrt{\frac{n+1}{2}\frac{\hbar}{\mu\omega}}. \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{14}$$

再利用式(4),即得

$$p_{n+1,n}=i\omega\mu x_{n+1,n} \tag{15}$$

注意:x 的矩阵元为实数,p 的矩阵元为纯虚数. 因此

$$x_{n,n+1}=(x_{n+1,n})^*=x_{n+1,n} \tag{16}$$

$$p_{n,n+1}=(p_{n+1,n})^*=-p_{n+1,n} \tag{17}$$

2.4 设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 为 Hermite 算符,证明在能量表象中下式成立:

$$\sum_n(E_n-E_k)|F_{nk}|^2=\frac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle \tag{1}$$

证 式(1)左端为

$$\sum_n (E_n-E_k)|F_{nk}|^2=\sum_n (E_n-E_k)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle$$
$$=\sum_n \langle k|F|n\rangle\langle n|(HF-FH)|k\rangle$$
$$=\langle k|F[H,F]|k\rangle \tag{2}$$

计算中利用了公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n|=1 \tag{3}$$

由于 H、F 是 Hermite 算符，有下列算符关系：

$$[H,F]^+=[F,H]=-[H,F] \tag{4}$$

式(2)取共轭，得到

$$\sum_n (E_n-E_k)|F_{nk}|^2=-\langle k|[H,F]F|k\rangle \tag{2'}$$

和式(2)相加，即得式(1).

2.5 对于任意算符 $F(r,p)$及其共轭 F^+，有下列矩阵元关系：

$$(F_{kn})^*=(\langle k|F|n\rangle)^*=\langle n|F^+|k\rangle=F^+_{nk}$$

试证明在能量表象中有下列求和规则：

$$\sum_n (E_n-E_k)(|F_{nk}|^2+|F_{kn}|^2)$$
$$=\langle k|[F^+,[H,F]]|k\rangle \tag{1}$$

证 $[F^+,[H,F]]=F^+HF+FHF^+-HFF^+$
$$-F^+FH \tag{2}$$

在能量本征态$|k\rangle$下逐项计算平均值，并利用公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n|=1$$

即得

$$\langle k|F^+HF|k\rangle=\sum_n \langle k|F^+H|n\rangle\langle n|F|k\rangle$$
$$=\sum_n E_nF^+_{kn}F_{nk}=\sum_n E_n|F_{nk}|^2 \tag{3}$$
$$\langle k|FHF^+|k\rangle=\sum_n \langle k|F|n\rangle\langle n|HF^+|k\rangle$$

$$=\sum_n E_n F_{kn} F_{nk}^{+}=\sum_n E_n |F_{kn}|^2 \tag{4}$$

$$\langle k|HFF^{+}|k\rangle = E_k \sum_n \langle k|F|n\rangle\langle n|F^{+}|k\rangle$$

$$= E_k \sum_n F_{kn} F_{nk}^{+} = E_k \sum_n |F_{kn}|^2 \tag{5}$$

$$\langle k|F^{+}FH|k\rangle = E_k \sum_n \langle k|F^{+}|n\rangle\langle n|F|k\rangle$$

$$= E_k \sum_n F_{kn}^{+} F_{nk} = E_k \sum_n |F_{nk}|^2 \tag{6}$$

式(3)加式(4),再减式(5)和(6),即得式(1).

注意,如 $F\neq F^{+}$,F_{nk}和 F_{kn}并无简单关系.

如 F 为 Hermite 算符,即 $F=F^{+}$,则 $F_{nk}=(F_{kn})^{*}$,这时 $|F_{nk}|=|F_{kn}|$,式(1)就变成题 2.4 式(1).

2.6 限于一维运动. 设

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(x)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x) \tag{1}$$

设 $F=F(x)$为 x 的任意函数,证明求和规则

$$\sum_n (E_n-E_k)|F_{nk}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\langle k||F'|^2|k\rangle \tag{2}$$

其中 $F'=\mathrm{d}F/\mathrm{d}x$.

证 利用基本对易式

$$[p,F(x)]=-\mathrm{i}\hbar\mathrm{d}F/\mathrm{d}x=-\mathrm{i}\hbar F' \tag{3}$$

易得

$$[H,F]=\frac{1}{2\mu}[p^2,F]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(pF'+F'p) \tag{4}$$

$$[F^{+},[H,F]]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}([F^{+},p]F'+F'[F^{+},p])$$

$$=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}F^{+}}{\mathrm{d}x}F'+F'\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x}\right)=\frac{\hbar^2}{\mu}|F'|^2 \tag{5}$$

利用题 2.5 式(1),即得

$$\sum_n (E_n-E_k)(|F_{nk}|^2+|F_{kn}|^2)=\frac{\hbar^2}{\mu}\langle k||F'|^2|k\rangle \tag{6}$$

由于一维束缚定态波函数可以取为实函数，所以

$$F_{kn}=\int\psi_k(x)F(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x$$
$$=\int\psi_nF\psi_k\mathrm{d}x=F_{nk} \tag{7}$$

代入式(6)，即得式(2).

如取 $F(x)=x$，则 $F'=1$，式(2)成为

$$\sum_n(E_n-E_k)|x_{nk}|^2=\hbar^2/2\mu \tag{8}$$

此即题 2.2 已经证明的结果.

推广到三维情况，设 $F=F(\boldsymbol{r})$，则

$$\sum_n(E_n-E_k)|\langle n|F|k\rangle|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\langle k||\nabla F|^2|k\rangle \tag{9}$$

2.7 一维定态问题，设

$$H=p^2/2\mu+V(x) \tag{1}$$

设 q 为实参数，证明

$$\sum_n(E_n-E_k)|\langle n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}|k\rangle|^2=\frac{\hbar^2q^2}{2\mu} \tag{2}$$

证 本题相当于上题中

$$F(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} \tag{3}$$
$$F'=\mathrm{i}q\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx},\qquad |F'|^2=q^2 \tag{4}$$

将式(3)、(4)代入上题式(2)，即得本题式(2).

2.8 设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$为任意算符，$F^+$为其共轭. 证明能量表象中的求和规则

$$\sum_n(E_k-E_n)^2|F_{kn}|^2=\langle k|[H,F][H,F]^+|k\rangle \tag{1}$$

证 利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,H]=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,F] \tag{2}$$

及其共轭方程

$$\frac{dF^+}{dt}=\frac{i}{\hbar}[H,F^+]=-\frac{i}{\hbar}[H,F]^+ \tag{3}$$

以及题 2.1 的式(3)(其中 A 改为 F):

$$\left(\frac{dF}{dt}\right)_{kn}=i\omega_{kn}F_{kn}=\frac{i}{\hbar}(E_k-E_n)F_{kn} \tag{4}$$

可得

$$\begin{aligned}(E_k-E_n)^2|F_{kn}|^2&=\left|\frac{\hbar}{i}\left(\frac{dF}{dt}\right)_{kn}\right|^2\\&=|\langle k|[H,F]|n\rangle|^2\\&=\langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|[H,F]^+|k\rangle\end{aligned} \tag{5}$$

式(5)对 n 求和,并利用公式

$$\sum_n|n\rangle\langle n|=1$$

即得式(1).

如 F 为 Hermite 算符,则$[H,F]^+=[F,H]$,式(1)可以写成

$$\sum_n(E_k-E_n)^2|F_{kn}|^2=-\langle k|[H,F]^2|k\rangle \tag{6}$$

2.9 一维定态问题,设

$$H=p^2/2\mu+V(x) \tag{1}$$

证明求和规则

$$\boxed{\sum_n(E_k-E_n)^2|x_{kn}|^2=-2\hbar^2\frac{\partial E_k}{\partial\mu}} \tag{2}$$

证 利用上题式(6),令 $F=x$,就有

$$[H,x]=\frac{1}{2\mu}[p^2,x]=-\frac{i\hbar}{\mu}p \tag{3}$$

$$-[H,x]^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}p^2=\frac{2\hbar^2}{\mu}(H-V) \tag{4}$$

代入题 2.8 的式(6),即得

$$\sum_n(E_k-E_n)^2|x_{kn}|^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle p^2\rangle_k$$

$$=\frac{2\hbar^2}{\mu}(E_k-\langle V\rangle_k) \tag{5}$$

根据位力定理，

$$\frac{1}{2\mu}\langle p^2\rangle_k=\frac{1}{2}\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\rangle_k \tag{6}$$

式(5)又可以写成

$$\sum_n(E_k-E_n)^2|x_{kn}|^2=\frac{\hbar^2}{\mu}\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\rangle_k \tag{5'}$$

如果 $V(x)$ 与粒子质量 μ 无关，则 F-H 定理给出(见题 5.9)

$$\frac{1}{2\mu}\langle p^2\rangle_k=-\mu\frac{\partial E_k}{\partial\mu} \tag{7}$$

代入式(5)，即得式(2). 各式中 $\langle\quad\rangle_k$ 表示 $|k\rangle$ 态下的平均值.

2.10 对于中心力场的 s 态($l=0$)和 p 态($l=1$)，证明

$$\sum_n(E_{n's}-E_{np})^2|z_{n's,np}|^2=\frac{2\hbar^2}{3\mu}\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\rangle_{n's} \tag{1}$$

证 $\psi_{n's}$ 即 $\psi_{n'1m}=\psi_{n'00}$，能使 $z_{n's,nlm}\neq0$ 的 (nlm) 必须是 $(n\ 1\ 0)$，这是式(1)左端求和时需要注意的. 正因为这样，

$$\text{式(1)左端}=\sum_{nlm}(E_{n's}-E_{nl})^2|z_{n's,nlm}|^2 \tag{2}$$

由于

$$H=\boldsymbol{p}^2/2\mu+V(r) \tag{3}$$

$$[H,z]=\frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{p}^2,z]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z \tag{4}$$

$$[H,z][H,z]^+=\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z\right)\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z\right)=\frac{\hbar^2}{\mu^2}p_z^2$$

利用题 2.8 的式(1)，取 $F=z$，就得到

$$\text{式(1)左端}=\frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle p_z^2\rangle_{n's} \tag{5}$$

$\psi_{n's}$ 是球对称的，应有

$$\langle p_x^2\rangle=\langle p_y^2\rangle=\langle p_z^2\rangle=\frac{1}{3}\langle\boldsymbol{p}^2\rangle \tag{6}$$

将式(6)代入式(5),即得式(1). 证明完毕.

如 $V(r)\propto r^{\nu}$,则可利用位力定理将式(1)进一步化成

$$\sum_{n}(E_{n's}-E_{np})^2|z_{n's,np}|^2=\frac{2\nu}{3(2+\nu)}\frac{\hbar^2}{\mu}E_{n's} \tag{7}$$

2.11 对于一维谐振子的 x、p,以及升降算符 a、a^+,求它们在 Heisenberg 表象中的表示式.

解 Schrödinger 表象中,a、a^+、x、p 和 H 间有如下关系(参看题 3.1):

$$x=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(a+a^+) \tag{1}$$

$$p=\mathrm{i}\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a^+-a) \tag{2}$$

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{3}$$

$$[a,a^+]=1 \tag{4}$$

$$[a,H]=a\hbar\omega$$

$$[a^+,H]=-a^+\hbar\omega \tag{5}$$

在 Heisenberg 表象中,

$$a(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} \tag{6}$$

$$a^+(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}a^+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}=[a(t)]^+ \tag{7}$$

式(6)对 t 求导,并利用对易式(5),即得方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a(t)=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}[H,a]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}=-\mathrm{i}\omega a(t) \tag{8}$$

解为

$$a(t)=a(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}=a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{9}$$

再取共轭,即得

$$a^+(t)=a^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{10}$$

算符之间的关系,不随表象而变. 将式(1)、(2)换成 Heisenberg 表象,即得

$$x(t)=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}[a(t)+a^{+}(t)]$$

$$=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}[a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+a^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}]$$

$$=x\cos\omega t+p\frac{1}{m\omega}\sin\omega t \tag{11}$$

$$p(t)=\mathrm{i}\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}[a^{+}(t)-a(t)]$$

$$=\mathrm{i}\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}[a^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}-a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}]$$

$$=p\cos\omega t-xm\omega\sin\omega t \tag{12}$$

注意，x 即 $x(t=0)$，p 即 $p(t=0)$. 式(11)、(12)在经典力学中也是成立的.

2.12 对于一维谐振子，计算 $x(t_1)$、$p(t_1)$及 $x(t_2)$、$p(t_2)$之间的对易式.

解 利用上题结果，易得

$$[x(t_1),x(t_2)]=[x,p]\frac{1}{m\omega}(\cos\omega t_1\sin\omega t_2-\sin\omega t_1\cos\omega t_2)$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m\omega}\sin\omega(t_2-t_1) \tag{1}$$

类似地，可得

$$[p(t_1),p(t_2)]=\mathrm{i}m\omega\hbar\sin\omega(t_2-t_1) \tag{2}$$

$$[x(t_1),p(t_2)]=\mathrm{i}\hbar\cos\omega(t_2-t_1) \tag{3}$$

(3) 式中当 $t_1=t_2=t$，得到

$$[x(t),p(t)]=\mathrm{i}\hbar \tag{4}$$

这个对易式相当于Schrödinger 表象中的$[x,p]=\mathrm{i}\hbar$，它不仅适用于谐振子问题，也适用于任何其他问题. 至于式(1)、(2)、(3)，则是谐振子所特有的关系.

2.13 有一个定域电子(作为近似模型，可以不考虑轨道运

动)受到均匀磁场作用,磁场 B 指向正 x 方向. 磁作用能为

$$H=\frac{eB}{\mu c}s_x=\frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x$$

设 $t=0$ 时电子的自旋"向上",即 $s_z=\frac{\hbar}{2}$,求 $t>0$ 时,s 的平均值.

解 直接求解 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s,H] \tag{1}$$

容易得到

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_x=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s_x,H]=0\\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_y=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s_y,H]=\frac{2\omega}{\mathrm{i}\hbar}[s_y,s_x]=-2\omega s_z\\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_z=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s_z,H]=\frac{2\omega}{\mathrm{i}\hbar}[s_z,s_x]=2\omega s_y
\end{aligned} \tag{2}$$

式中 $\omega=\frac{eB}{2\mu c}$. 求平均值,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_x\rangle=0 \tag{3a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_y\rangle=-2\omega\langle s_z\rangle \tag{3b}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_z\rangle=2\omega\langle s_y\rangle \tag{3c}$$

初始条件为

$$\langle s_x\rangle_{t=0}=\langle s_y\rangle_{t=0}=0,\qquad \langle s_z\rangle_{t=0}=\frac{\hbar}{2} \tag{4}$$

由式(3a)容易解出

$$\langle s_x\rangle_t=\langle s_x\rangle_{t=0}=0 \tag{5}$$

注意 s_x 为守恒量,由于 $t=0$ 时其平均值为 0,所以 $\langle s_x\rangle_t=0$. 式(3c)+i×式(3b),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_z+\mathrm{i}s_y\rangle=-2\mathrm{i}\omega\langle s_z+\mathrm{i}s_y\rangle \tag{3d}$$

解为

$$\langle s_x+\mathrm{i}s_y\rangle_t=\langle s_x+\mathrm{i}s_y\rangle_{t=0}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}=\frac{\hbar}{2}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t} \tag{6}$$

$\langle s\rangle$应为实数，上式分别取实部、虚部，即得

$$\langle s_x\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

$$\langle s_y\rangle_t=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t \tag{7}$$

此结果与在 Schrödinger 表象中所得结果(见上册题 6.27)完全一样.

2.14 有一自旋$\frac{\hbar}{2}$的粒子，磁矩$\mu=\mu_0\sigma$，置于均匀磁场 B 中，B 指向任意方向(θ,φ). 不考虑轨道运动. 设 $t=0$ 时粒子沿正 z 方向极化，即$\sigma_z=1$，$\langle\sigma\rangle_{t=0}=e_z$，试在 Heisenberg 表象中求 $t>0$ 时粒子的极化方向，即求$\langle\sigma\rangle_t$.

解一 利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma,H]=\mathrm{i}\omega[\sigma,\sigma_n] \tag{1}$$

在上册题 6.21 中已经证明

$$[\sigma,\sigma_n]=2\mathrm{i}n\times\sigma \tag{2}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma=-2\omega n\times\sigma, \tag{3}$$

以 $n\times$式(3)，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(n\times\sigma)=-2\omega n\times(n\times\sigma)$$

$$=2\omega(\sigma-n\sigma_n) \tag{4}$$

由于 σ_n 和 H 对易，为运动常数，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_n=0$. 以 i 乘式(4)，和式(3)相加，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\sigma+\mathrm{i}n\times\sigma-n\sigma_n)$$

$$=2\mathrm{i}\omega(\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-n\sigma_n) \tag{5}$$

上式取平均值,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-n\sigma_n\rangle$$

$$=2\mathrm{i}\omega\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-n\sigma_n\rangle \tag{5'}$$

其解为

$$\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-n\sigma_n\rangle_t=\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-n\sigma_n\rangle_{t\ 0}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t} \tag{6}$$

由于$\langle\sigma_n\rangle_t=\langle\sigma_n\rangle_{t=0}$,上式分别取实部和虚部,即得

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\cos\ 2\omega t-\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\sin\ 2\omega t$$

$$+\boldsymbol{n}\langle\sigma_n\rangle_{t=0}(1-\cos 2\omega t) \tag{7a}$$

$$\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\langle\boldsymbol{\sigma}-n\sigma_n\rangle_{t=0}\sin\ 2\omega t+\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\cos\ 2\omega t \tag{7b}$$

本题初始条件为

$$\left.\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{e}_3,\qquad\langle\sigma_n\rangle_{t=0}=n_3\\&\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{e}_3=n_2\boldsymbol{e}_1-n_1\boldsymbol{e}_2\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

代入式(7a),即得

$$\left.\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle_t&=n_1n_3(1-\cos\ 2\omega t)-n_2\sin\ 2\omega t\\\langle\sigma_y\rangle_t&=n_2n_3(1-\cos\ 2\omega t)+n_1\sin\ 2\omega t\\\langle\sigma_z\rangle_t&=n_3^2+(1-n_3^2)\cos\ 2\omega t\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

这和上册题 6.28 在 Schrödinger 表象中所得结果式(13)完全一致.

解二 利用公式[①]

$$\chi(t)=U(t)\chi(0) \tag{10}$$

其中

$$U(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} \tag{11}$$

为体系的时间演变算符. 在$\chi(t)$态中σ的平均值为

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\chi^+(t)\boldsymbol{\sigma}\chi(t)=\chi^+(0)U^+(t)\boldsymbol{\sigma}U(t)\chi(0)$$

$$=\chi^+(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\chi(0) \tag{12}$$

$$=\chi^+(0)\boldsymbol{\sigma}(t)\chi(0) \tag{12'}$$

---

① 参看曾谨言,《量子力学》卷 I (科学出版社,1997),§ 5.2.

其中 $\boldsymbol{\sigma}(t)$为 $\boldsymbol{\sigma}$ 的 Heisenberg 表象(绘景),即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}(t)&=e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{\sigma}e^{-iHt/\hbar}\\&=e^{-i\omega t\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}e^{i\omega t\sigma_n},\qquad \omega=\mu_0B/\hbar\end{aligned}\tag{13}$$

利用上册题 6.26 证明的公式

$$\begin{aligned}e^{i\lambda\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}e^{-i\lambda\sigma_n}=\boldsymbol{n}\sigma_n&+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda\\&+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda\end{aligned}\tag{14}$$

即得

$$\boldsymbol{\sigma}(t)=\boldsymbol{n}\sigma_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\omega t-\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\omega t\tag{15}$$

再利用恒等式

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\tag{16}$$

即得

$$\boldsymbol{\sigma}(t)=\boldsymbol{n}\sigma_n(1-\cos 2\omega t)+\boldsymbol{\sigma}\cos 2\omega t-\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\omega t\tag{15'}$$

代入式(12′),即得

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\boldsymbol{n}\langle\sigma_n\rangle_{t=0}&(1-\cos 2\omega t)\\&+\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\cos 2\omega t-\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\sin 2\omega t\end{aligned}\tag{17}$$

这和解一所得式(7a)完全一样. 接下去的做法也和解二相同,不再重复.

题 2.13 也可以用这个方法求解.

2.15 两个自旋 1/2 的定域非全同粒子(不考虑轨道运动),相互作用能为

$$H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$$

$t=0$ 时,粒子 1 自旋"向上"($s_{1z}=1/2$),粒子 2 自旋"向下"($s_{2z}=-1/2$). 试在 Heisenberg 表象中求任意 $t>0$ 时刻(a) 粒子 1 自旋"向上"的概率;(b) 粒子 1 和 2 自旋均"向上"的概率;(c) 总自旋量子数 $S=1$ 和 0 的概率;(d) $\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$ 的平均值.

解一 从自旋算符的 Heisenberg 运动方程入手. 由 H 的构造式易见总自旋 $\boldsymbol{S}$ 和 H 对易,为守恒量,因此总 $\boldsymbol{S}$ 各分量的取值及相应概率均守恒不变,$\boldsymbol{S}^2$的取值分布概率也不变. $t=0$ 时体系自旋态 $\alpha(1)\beta(2)$是 s_{1z}及 s_{2z}的共同本征态,因此也是总 S_z的本征

态，本征值 $S_z=0$. 由于 S_z 是守恒量，所以任何时刻 S_z 只能取本征值 0，不能取其它本征值．由此可见粒子 1，2 自旋均“向上”$\left(s_{1z}=s_{2z}=\frac{1}{2}, S_z=1\right)$ 的概率为 0. $t=0$ 时，上册题 6.47 式(3)成立，总自旋量子数 $S=1$、0，概率各为 1/2，由于 $\boldsymbol{S}^2$ 守恒，这个概率不随时间改变．以上为(b)、(c)两项的结论．

为了计算 $\langle s_1\rangle$ 和 $\langle s_2\rangle$，可以求解 Heisenberg 运动方程．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{s}_1=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{s}_1,H]=\mathrm{i}A[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_1]$$

$$=-A\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{s}_2=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{s}_2,H]=\mathrm{i}A[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_2]$$

$$=A\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{2}$$

两式相加、减，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S}=0 \tag{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2)=-2A\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{4}$$

$\boldsymbol{s}_1\times$式(2)＋式(1)$\times\boldsymbol{s}_2$，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)=A[\boldsymbol{s}_1\times(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)-(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)\times\boldsymbol{s}_2]$$

$$=\frac{A}{2}(\boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2) \tag{5}$$

计算中用到的 $\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$ 的三重乘积公式均见上册题 6.41.

式(5)乘 2i，和式(4)相加，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2+2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)$$

$$=\mathrm{i}A(\boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2+2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2) \tag{6}$$

取平均值，并对 t 积分，即得

$$(\boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2+2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)_t=(\boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2+2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)_{t=0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}At} \tag{7}$$

本题初始条件为

$$\chi(t=0)=\alpha(1)\beta(2) \tag{8}$$

因此

$$\left.\begin{aligned}&\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_{t=0}=\left(0,0,\frac{1}{2}\right),\qquad \langle \boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=\left(0,0,-\frac{1}{2}\right)\\&\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=0,\qquad \langle \boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=(0,0,1)=\boldsymbol{e}_3\\&\langle \boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_{t=0}\times\langle \boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=0\end{aligned}\right\}\tag{8'}$$

代入式(7),即得

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2\rangle_t+2\mathrm{i}\langle \boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2\rangle_t&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}At}\boldsymbol{e}_3\\&=(\cos At+\mathrm{i}\sin At)\boldsymbol{e}_3\end{aligned}\tag{9}$$

由于 $\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2$ 均为 Hermite 算符,平均值为实数,所以

$$\langle \boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\boldsymbol{e}_3\cos At\tag{10}$$

$$\langle \boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_3\sin At\tag{11}$$

式(3)表明 $\boldsymbol{S}$ 守恒,由初始条件(8')可知

$$\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=0\tag{12}$$

式(10)、(12)相加、减,即得

$$\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_t=-\langle \boldsymbol{s}_2\rangle_t=\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_3\cos\ At\tag{13}$$

亦即

$$\left.\begin{aligned}&\langle s_{1x}\rangle_t=\langle s_{1y}\rangle_t=\langle s_{2x}\rangle_t=\langle s_{2y}\rangle_t=0\\&\langle s_{1z}\rangle_t=-\langle s_{2z}\rangle_t=\frac{1}{2}\cos\ At\end{aligned}\right\}\tag{13'}$$

这结果和上册题 6.47 所得式(5)一致. 式(11)相当于

$$\left.\begin{aligned}&\langle s_{1x}s_{2y}-s_{1y}s_{2x}\rangle_t=\frac{1}{2}\sin\ At\\&\langle s_{1y}s_{2z}-s_{1z}s_{2y}\rangle_t=0\\&\langle s_{1z}s_{2x}-s_{1x}s_{2z}\rangle_t=0\end{aligned}\right\}\tag{11'}$$

读者不难利用上册题 6.47 所得式(4')验证这个结论,但在那里是不容易发现这个结果的.

设 $t>0$ 时粒子 1 自旋"向上"$\left(s_{1z}=\frac{1}{2}\right)$的概率为 $w(t)$,则

$$\langle s_{1z}\rangle_t=\frac{1}{2}\cos At=\frac{1}{2}w(t)-\frac{1}{2}[1-w(t)]$$

$$=w(t)-\frac{1}{2}$$

由此求得

$$w(t)=\frac{1}{2}(1+\cos At)=\cos^2\frac{At}{2} \tag{14}$$

解二 利用平均值公式的 Heisenberg 绘景[①]

$$\begin{aligned}\langle s_1\rangle_t &=\langle\chi(0)|s_1(t)|\chi(0)\rangle\\ &=\langle\chi(0)|U^{-1}(t)s_1U(t)|\chi(0)\rangle\end{aligned} \tag{15}$$

其中

$$\left.\begin{aligned}U(t)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}At s_1\cdot s_2}\\ U^+(t)&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}At s_1\cdot s_2}\end{aligned}\right\} \tag{16}$$

根据上册题 6.46 的式(2a),$s_1(t)$可以化成(取 $\lambda=At$)

$$\begin{aligned}s_1(t)&=U^+(t)s_1U(t)\\ &=\frac{1}{2}(s_1+s_2)+\frac{1}{2}(s_1-s_2)\cos At\\ &\quad -s_1\times s_2\sin At\end{aligned} \tag{17}$$

代入式(15),并利用初始平均值

$$\begin{aligned}\langle s_1\rangle_{t=0}&=\langle\chi(0)|s_1|\chi(0)\rangle=\langle\alpha(1)|s_1|\alpha(1)\rangle\\ &=\left(0,0,\frac{1}{2}\right)\\ \langle s_2\rangle_{t=0}&=\langle\chi(0)|s_2|\chi(0)\rangle=\langle\beta(2)|s_2|\beta(2)\rangle\\ &=\left(0,0,-\frac{1}{2}\right)\\ \langle s_1\times s_2\rangle_{t=0}&=\langle s_1\rangle_{t=0}\times\langle s_2\rangle_{t=0}=0\end{aligned} \tag{18}$$

即得

$$\begin{aligned}\langle s_1\rangle_t&=\frac{1}{2}\langle s_1+s_2\rangle_{t=0}+\frac{1}{2}\langle s_1-s_2\rangle_{t=0}\cos At\\ &\quad -\langle s_1\times s_2\rangle_{t=0}\sin At\\ &=\frac{1}{2}e_3\cos At\end{aligned} \tag{19}$$

总自旋 $S=s_1+s_2$,和 $s_1\cdot s_2$ 对易,因此和 U、U^+对易,所以

---

① 参看曾谨言,《量子力学》卷 I(科学出版社,1997),§ 5.2.

$$\boldsymbol{S}(t)=\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2, \tag{20}$$

$$\langle \boldsymbol{S}\rangle_t=\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=0 \tag{21}$$

因此

$$\langle \boldsymbol{s}_2\rangle_t=\langle \boldsymbol{S}\rangle_t-\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_t=-\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_t=-\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_3\cos At \tag{22}$$

这些结果都和解一相同．概率的计算方法和解一完全一样，结果当然也一样，从略．

2.16 对于自旋为 1/2 的粒子，常称$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$为极化矢量，记作 $\boldsymbol{P}$. 它也就是自旋角动量的空间指向. 设粒子为定域的，并受到沿 z 方向但强度随时间变化的磁场 $\boldsymbol{B}(t)$的作用，作用势为

$$H=-\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)=-\mu_0\sigma_z B(t)$$

在 Heisenberg 表象中求极化矢量随时间变化的规律，即求 $\boldsymbol{P}(t)=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t$.

解 按照 Heisenberg 运动方程．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_z=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_z,H]=0$$

所以

$$\langle\sigma_z\rangle_t=\langle\sigma_z\rangle_{t=0}=\cos 2\delta \tag{1}$$

此外，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_x=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_x,H]=-\frac{\mu_0}{\mathrm{i}\hbar}B(t)[\sigma_x,\sigma_z]$$

$$=\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)\sigma_y \tag{2}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_y=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_y,H]=-\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)\sigma_x$$

上面后二式合并，易得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)=-\mathrm{i}\,\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y) \tag{3}$$

求平均值，并对 t 积分，即得

$$\langle\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y\rangle_t=\langle\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y\rangle_{t=0}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right] \tag{4}$$

$\langle\sigma_x\rangle$、$\langle\sigma_y\rangle$均为实数，上式中分开实部、虚部，即得

$$\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle_t&=\langle\sigma_x\rangle_{t=0}\cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\\&\quad+\langle\sigma_y\rangle_{t=0}\sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}\langle\sigma_y\rangle_t&=\langle\sigma_y\rangle_{t=0}\cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\\&\quad-\langle\sigma_x\rangle_{t=0}\sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\end{aligned}$$

初始平均值为

$$\langle\sigma_z\rangle_{t=0}=\sin2\delta\cos2\alpha,\qquad\langle\sigma_y\rangle_{t-0}=\sin2\delta\sin2\alpha \tag{6}$$

代入式(5)，并仍按上册题 6.23 式(10)定义 $\varphi(t)$，即得

$$\langle\sigma_x\rangle_t=\sin2\delta\cos\varphi(t),\qquad\langle\sigma_y\rangle_t=\sin2\delta\sin\varphi(t) \tag{7}$$

$$\boldsymbol{P}(t)=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=(\sin2\delta\cos\varphi(t),\sin2\delta\sin\varphi(t),\cos2\delta) \tag{8}$$

这些结果和上册题 6.23 所得的式(13)、(14)完全一致.

第三章　算符运算

3.1　设 $\hat{A}$ 为无量纲算符，ξ、η 为参变量，定义

$$e^{\xi\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\xi^n}{n!}\hat{A}^n=1+\xi\hat{A}+\frac{1}{2!}\xi^2\hat{A}^2+\cdots$$

试证明

$$e^{(\xi+\eta)\hat{A}}=e^{\xi\hat{A}}e^{\eta\hat{A}}$$

$$\frac{d}{d\xi}e^{\xi\hat{A}}=\hat{A}e^{\xi\hat{A}}=e^{\xi\hat{A}}\hat{A}$$

证　按照定义，

$$e^{\xi\hat{A}}e^{\eta\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\xi^n\eta^m}{n!m!}\hat{A}^{n+m}\tag{1}$$

$$e^{(\xi+\eta)\hat{A}}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(\xi+\eta)^k\hat{A}^k$$

其中

$$(\xi+\eta)^k=\sum_{n=0}^{k}\frac{k!}{n!(k-n)!}\xi^n\eta^{k-n}$$

所以

$$e^{(\xi+\eta)\hat{A}}=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{k}\frac{\xi^n\eta^{k-n}}{n!(k-n)!}\hat{A}^k\tag{2}$$

令 $m=k-n$，即可看出式(2)右端即是式(1)右端，故已证

$$e^{(\xi+\eta)\hat{A}}=e^{\xi\hat{A}}e^{\eta\hat{A}}\tag{3}$$

一般地，如 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 对易，即 $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$，就有

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}} \tag{4}$$

$e^{\xi\hat{A}}$对 ξ 逐项微分，即得

$$\frac{d}{d\xi}e^{\xi\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{d}{d\xi}\left(\frac{1}{n!}\xi^n\hat{A}^n\right) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\xi^{n-1}\hat{A}^n$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\xi^m\hat{A}^{m+1}, \qquad (m = n-1)$$

故得

$$\frac{d}{d\xi}e^{\xi\hat{A}} = \hat{A}e^{\xi\hat{A}} = e^{\xi\hat{A}}\hat{A} \tag{5}$$

证明完毕.

3.2 对于一维问题，定义平移算符 $\hat{D}_x(a)$，它对波函数的作用是

$$\hat{D}_x(a)\psi(x) = \psi(x-a) \tag{1}$$

a 为实数. 设 $\psi(x)$各阶导数存在，试证明

$$D_x(a) = e^{a\hat{p}/i\hbar} = e^{-a\frac{d}{dx}} \tag{2}$$

证 按照指数算符的定义，

$$e^{a\hat{p}/i\hbar} = e^{-a\frac{d}{dx}} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-a)^n\frac{1}{n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n$$

因此

$$e^{a\hat{p}/i\hbar}\psi(x) = \psi(x) + \sum_{n=1}^{\infty}(-a)^n\frac{1}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x) = \psi(x-a)$$

所以 $e^{a\hat{p}/i\hbar}$就是平移算符 $\hat{D}_x(a)$.

3.3 若算符 $f(x)$与 $\hat{D}_x(a)$对易，求 $f(x)$的通解.

解 根据题意，$[f(x), \hat{D}_x(a)] = 0$，因此对于任意波函数

$\psi(x)$，有

$$\begin{aligned} f(x)\hat{D}_x(a)\psi(x) &= f(x)\psi(x-a) \\ &= \hat{D}_x(a)f(x)\psi(x) \\ &= f(x-a)\psi(x-a) \end{aligned}$$

因此，$f(x)$具有性质

$$f(x) = f(x-a)$$

即 $f(x)$为 x 的周期函数，周期为 a.

3.4 如算符 $\hat{A}(\xi)$是参变数 ξ 的函数，定义 $\hat{A}$ 对 ξ 的导数为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi) = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}[\hat{A}(\xi+\epsilon) - \hat{A}(\xi)]$$

(a) 证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\{\hat{A}(\xi)\quad \hat{B}(\xi)\} = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B} + \hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi} \tag{1}$$

(b) 如 $\hat{A}^{-1}$存在，证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}(\xi) = -\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1} \tag{2}$$

证 (a) 根据定义，当 $\epsilon\to 0$，有

$$\hat{A}(\xi+\epsilon) = \hat{A}(\xi) + \epsilon\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi) \tag{3}$$

$B(\xi)$也有类似关系. 因此

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\{A(\xi)\ B(\xi)\} &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}[\hat{A}(\xi+\epsilon)\hat{B}(\xi+\epsilon) - \hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)] \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}\left[\left(\hat{A}(\xi) + \epsilon\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\right)\right. \\ &\quad \left.\cdot\left(\hat{B}(\xi) + \epsilon\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}\right) - \hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)\right] \end{aligned}$$

$$= \frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{d\xi} + \lim_{\epsilon\to 0}\epsilon\frac{d\hat{A}}{d\xi}\frac{d\hat{B}}{d\xi}$$
$$= \frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{d\xi}$$

此即式(1).

(b) 如果 $\hat{A}^{-1}(\xi)$存在,就有

$$\hat{A}(\xi)\hat{A}^{-1}(\xi) = \hat{A}^{-1}(\xi)\hat{A}(\xi) = 1 \tag{4}$$

对 ξ 求导,即得

$$\frac{d}{d\xi}\{\hat{A}(\xi)\hat{A}^{-1}(\xi)\} = \frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{A}^{-1} + \hat{A}\frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi} = 0$$

以 $\hat{A}^{-1}$左乘上式,并利用式(4),即得

$$\frac{d}{d\xi}\hat{A}^{-1}(\xi) = -\hat{A}^{-1}(\xi)\frac{dA(\xi)}{d\xi}\hat{A}^{-1}(\xi) \tag{2}$$

3.5 给定算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$,令

$$\hat{C}_0 = \hat{B}$$
$$\hat{C}_1 = [\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$
$$\hat{C}_2 = [\hat{A},\hat{C}_1] = [\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]$$
$$\cdots\cdots$$

证明

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} = \hat{C}_0 + \hat{C}_1 + \frac{1}{2!}\hat{C}_2 + \frac{1}{3!}\hat{C}_3 + \cdots$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\hat{C}_n}{n!}$$

证 引入参变数 ξ,作

$$f(\xi) = e^{\xi\hat{A}}\hat{B}e^{-\xi\hat{A}} \tag{1}$$

则

$$f(0)=\hat{B},\quad f(1)=e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} \tag{2}$$

对 ξ 求导,即得

$$\frac{d}{d\xi}f(\xi)=e^{\xi\hat{A}}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})e^{-\xi\hat{A}}=e^{\xi\hat{A}}\hat{C}_1e^{-\xi\hat{A}}$$

$$\left(\frac{d}{d\xi}\right)^2 f(\xi)=e^{\xi\hat{A}}(\hat{A}\hat{C}_1-\hat{C}_1\hat{A})e^{-\xi\hat{A}}=e^{\xi\hat{A}}\hat{C}_2e^{-\xi\hat{A}}$$

$$\cdots$$

$$\left(\frac{d}{d\xi}\right)^n f(\xi)=e^{\xi\hat{A}}\hat{C}_ne^{-\xi\hat{A}} \tag{3}$$

根据 Taylor 公式,

$$f(1)=f(0)+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\frac{d^n}{d\xi^n}f(\xi)\right]_{\xi=0} \tag{4}$$

而由式(3),令 $\xi\to 0$ 即得

$$\left[\frac{d^n}{d\xi^n}f(\xi)\right]_{\xi=0}=\hat{C}_n \tag{5}$$

代入式(4),并顾及式(2),即得

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}=\hat{C}_0+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{C}_n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{C}_n \tag{6}$$

亦即

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}=\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]]+\cdots \tag{6'}$$

3.6 设算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 不对易,$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}$,但是 $\hat{C}$ 与 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易,即$[\hat{A},\hat{C}]=0$,$[\hat{B},\hat{C}]=0$,试计算

$$[\hat{A},\hat{B}^n],[\hat{A},e^{\hat{B}}],[\hat{A},e^{\lambda\hat{B}}],[\hat{A},f(\hat{B})]$$

其中 n 为正整数,λ 为参变数,f 为任何可以展开成正幂级数的函

数.

解 在以下的计算中,略去算符上面的记号"^",

$$[A,B^n]=[A,B]B^{n-1}+B[A,B^{n-1}]$$
$$=CB^{n-1}+B[A,B^{n-1}]$$

将 n 换成$(n-1)$,就有

$$[A,B^{n-1}]=CB^{n-2}+B[A,B^{n-2}]$$

代入前式,即得

$$[A,B^n]=2CB^{n-1}+B^2[A,B^{n-2}]$$

重复这种递推过程,即得

$$[A,B^n]=nCB^{n-1} \tag{1}$$

根据定义,

$$e^B=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{B^n}{n!}$$

因此

$$[A,e^B]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[A,B^n]=C\sum_{n=1}^{\infty}\frac{B^{n-1}}{(n-1)!}$$

令$(n-1)=m$,即得

$$[A,e^B]=C\sum_{m=0}^{\infty}\frac{B^m}{m!}=Ce^B \tag{2}$$

如令 $B\to\lambda B$,则 $C\to[A,\lambda B]=\lambda C$,式(2)中作此置换,即得

$$[A,e^{\lambda B}]=\lambda Ce^{\lambda B} \tag{3}$$

设

$$f(B)=\sum_n f_nB^n$$

利用式(1),即得

$$[A,f(B)]=\sum_n f_n nCB^{n-1}=Cf'(B) \tag{4}$$

其中

$$f'(B)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}B}f(B) \tag{5}$$

式(2)和(3)均可视为式(4)的特例，也可利用题 3.5 结果直接得出，即取题 3.5 中 $C_1=C, C_2=C_3=\cdots=0$.

3.7 设算符 A 与 B 不对易，$[A,B]=C$，但是 C 与 A 及 B 对易，即 $[A,C]=0, [B,C]=0$. 试证明 Glauber 公式：

$$\boxed{\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C}=\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}C}}$$

证 引入参变数 λ，作

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B} \tag{1}$$

注意 $f(0)=1, f(1)=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}$. 上式对 λ 求导，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}(A+B)\mathrm{e}^{\lambda B} \tag{2}$$

而根据题 3.6 式(3)，

$$A\mathrm{e}^{\lambda B}=\mathrm{e}^{\lambda B}(A+\lambda C) \tag{3}$$

代入式(2)，即得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)&=\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}(A+B+\lambda C)\\&=f(\lambda)(A+B+\lambda C)\end{aligned} \tag{4}$$

以 $f^{-1}(\lambda)$ 乘之，得到

$$\frac{1}{f(\lambda)}\frac{\mathrm{d}f(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}=A+B+C\lambda \tag{4'}$$

积分，即得

$$\ln f(\lambda) = \ln f(0) + (A + B)\lambda + \frac{1}{2}C\lambda^2$$

因此

$$f(\lambda) = f(0)\mathrm{e}^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2}$$

由于 $f(0)=1$，故得

$$f(\lambda) = \mathrm{e}^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2} \tag{5}$$

以 $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C\lambda^2}$ 右乘上式，即得

$$\boxed{\mathrm{e}^{\lambda(A+B)} = \mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2 C}} \tag{6}$$

如令 $A\to B, B\to A$，则 $C\to[B,A]=-C$，上式变成

$$\mathrm{e}^{\lambda(A+B)} = \mathrm{e}^{\lambda B}\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^2 C} \tag{6'}$$

式(6)和(6′)中取 $\lambda=1$，即得

$$\boxed{\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C} = \mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}C}} \tag{7}$$

如 A、B 对易，则 $C=0$，上式即还原成题 3.1 式(4).

3.8 设 ψ 为归一化的波函数，$\hat{F}$ 为算符，试证明在 ψ 态下，$\overline{F^{\dagger}F}\geqslant 0$，并求等号成立的条件.

证 根据平均值公式

$$\bar{A} = \int \psi^* \hat{A}\psi \mathrm{d}^3x$$

(其中积分范围为全空间)即得 $\hat{F}+\hat{F}$ 的平均值为

$$\overline{F^+F} = \int \psi^* \hat{F}^+\hat{F}\psi \mathrm{d}^3x \tag{1}$$

令 $\hat{F}\psi=\varphi$，按照共轭算符的定义，

$$\int \psi^* \hat{F}^+ \varphi \, \mathrm{d}^3x = \int (\hat{F}\psi)^* \varphi \, \mathrm{d}^3x$$

因此

$$\boxed{\overline{F^+ F} = \int (\hat{F}\psi)^* (\hat{F}\psi) \mathrm{d}^3x = \int |\hat{F}\psi|^2 \mathrm{d}^3x \geqslant 0} \tag{2}$$

如要等号成立，必须

$$\hat{F}\psi = 0 \tag{3}$$

即 ψ 为算符 $\hat{F}$ 的本征函数，相应于本征值 0.

如 $\hat{F}$ 为 Hermite 算符，即 $\hat{F}^+ = \hat{F}$，则式(2)化为

$$\boxed{\overline{F^2} = \int |\hat{F}\psi|^2 \mathrm{d}^3x \geqslant 0} \tag{4}$$

如 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 为矢量 Hermite 算符，分别令 $\hat{F} = \hat{A}_1、\hat{A}_2、\hat{A}_3$，即得

$$\overline{\hat{A}^2} = \int (|\boldsymbol{A}\psi|^2 \mathrm{d}^3x = \int (|\hat{A}_1\psi|^2 + |\hat{A}_2\psi|^2 + |\hat{A}_3\psi|^2) \mathrm{d}^3x \tag{5}$$

例如

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar \nabla$$

$$\overline{\boldsymbol{p}^2} = \int |\hat{\boldsymbol{p}}\psi|^2 \mathrm{d}^3x = \hbar^2 \int |\nabla \psi|^2 \mathrm{d}^3x \tag{6}$$

如用球坐标 (r, θ, φ)，而 $\psi = \psi(r)$，与 θ、φ 无关，则

$$\nabla \psi = \frac{\boldsymbol{r}}{r} \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}, \qquad |\nabla \psi|^2 = \left| \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r} \right|^2$$

这时

$$\overline{\boldsymbol{p}^2} = \hbar^2 \int \left| \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r} \right|^2 \mathrm{d}^3x$$

$$= 4\pi\hbar^2 \int_0^\infty \left| \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r} \right|^2 r^2 \mathrm{d}r \tag{6'}$$

3.9 设 $\hat{U}$ 为幺正算符，证明 $\hat{U}$ 必可分解成 $\hat{U}=\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B}$，$\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 为 Hermite 算符，并满足 $\hat{A}^2+\hat{B}^2=1$，$[\hat{A},\hat{B}]=0$. 试找出 $\hat{A}$、$\hat{B}$. 进而再证明 $\hat{U}$ 可以表示成 $\hat{U}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}$，$\hat{H}$ 为 Hermite 算符.

解 如存在 Hermite 算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$，使

$$\hat{U}=\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B} \tag{1}$$

则

$$\hat{U}^+=\hat{A}-\mathrm{i}\hat{B} \tag{1'}$$

容易解出

$$\hat{A}=\frac{1}{2}(\hat{U}+\hat{U}^+),\qquad \hat{B}=\frac{\mathrm{i}}{2}(\hat{U}^+-\hat{U}) \tag{2}$$

显然，这样确定的 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 都是 Hermite 算符.

$\hat{U}$ 作为幺正算符，满足

$$\hat{U}\hat{U}^+=\hat{U}^+\hat{U}=1 \tag{3}$$

以式(1)和(1′)代入式(3)，即得

$$\hat{U}\hat{U}^+=(\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B})(\hat{A}-\mathrm{i}\hat{B})=\hat{A}^2+\hat{B}^2-\mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}]=1$$
$$\hat{U}^+\hat{U}=(\hat{A}-\mathrm{i}\hat{B})(\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B})=\hat{A}^2+\hat{B}^2+\mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}]=1$$

因此必有

$$\hat{A}^2+\hat{B}^2=1,\qquad [\hat{A},\hat{B}]=0 \tag{4}$$

容易验证由式(2)确定的 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 确实满足式(4).

由于 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 是对易的 Hermite 算符，故存在共同本征态 $|n\rangle$，满足本征方程

$$\hat{A}|n\rangle=A_n|n\rangle,\quad \hat{B}|n\rangle=B_n|n\rangle \tag{5}$$

由于 $\hat{A}^2+\hat{B}^2=1$，易见

$$A_n^2+B_n^2=1 \tag{6}$$

因此，对于每组本征值 (A_n,B_n)，在 $(0,2\pi)$ 区间必然存在实数 H_n，

使

$$A_n = \cos H_n, \qquad B_n = \sin H_n \tag{7}$$

从而

$$\hat{U}|n\rangle = (\hat{A} + \mathrm{i}\hat{B})|n\rangle = e^{\mathrm{i}H_n}|n\rangle \tag{8}$$

如在全体$|n\rangle$所张态矢量空间中定义 Hermite 算符 $\hat{H}$，使

$$\hat{H}|n\rangle = H_n|n\rangle$$

则

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}|n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_n}|n\rangle \tag{8'}$$

而且

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}})^+ = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}} = 1$$

即 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}$为幺正算符. 由此可见

$$\hat{U} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}} \tag{9}$$

3.10 (a) 设$\hat{U}(t)$为幺正算符，对 t 求导，证明$\hat{U}(t)$满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = \hat{H}\hat{U} \tag{1}$$

其中 $\hat{H}(t)$为 Hermite 算符.

(b) 设 $\hat{H}(t)$ 为 Hermite 算符，而 $\hat{U}(t)$满足式(1)，证明 $\hat{U}\hat{U}^+$ 必满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{U}\hat{U}^+) = [\hat{H}, \hat{U}\hat{U}^+] \tag{2}$$

进而再证明：如 $t=t_0$ 时，$\hat{U}(t_0)$为幺正算符，则 $\hat{U}(t)$也总是幺正算符.

证 (a) 因为 $\hat{U}(t)$是幺正的，所以

$$\hat{U}(t)\hat{U}^+(t) = \hat{U}^+(t)\hat{U}(t) = 1 \tag{3}$$

对 t 求导，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{U}\hat{U}^{+}) = \frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+} + \hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} = 0$$

即

$$\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+} = -\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} \tag{4}$$

以 $\mathrm{i}\hbar\hat{U}$ 右乘式(4)两边，并令

$$\hat{H} = -\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+} \tag{5}$$

即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = \hat{H}\hat{U} \tag{1}$$

容易验证

$$\hat{H}^{+} = \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+}\right)^{+} = -\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} = \hat{H}$$

即 $\hat{H}$ 为 Hermite 算符.

(b) 如 $\hat{U}(t)$满足式(1)，而且 $\hat{H}(t)=\hat{H}^{+}(t)$，则式(1)的共轭方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} = \hat{U}^{+}\hat{H} \tag{1'}$$

因此

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{U}\hat{U}^{+}) &= \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+} + \mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} \\ &= \hat{H}\hat{U}\hat{U}^{+} - \hat{U}\hat{U}^{+}\hat{H} = [\hat{H},\hat{U}\hat{U}^{+}]\end{aligned}$$

此即式(2).

另外，利用公式(参看题 3.4)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1} = -\hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1} \tag{6}$$

可得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{-1}}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\hbar\hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}H\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}H \tag{7}$$

和式(1′)比较，可见 $\hat{U}^{-1}$和 $\hat{U}^{+}$满足同样的方程. 但是这并不表示 $\hat{U}^{+}$就是 $\hat{U}^{-1}$，因为对于任意常数 λ，$\lambda\hat{U}^{+}$也满足同样方程. 但是，如在时刻 t_0，$\hat{U}(t_0)\hat{U}^{+}(t_0)=1$，即 $\hat{U}(t_0)$为幺正算符，则 $\hat{U}^{+}(t_0)=\hat{U}^{-1}(t_0)$. 有此初始条件，就可得出结论：$\hat{U}^{+}(t)=\hat{U}^{-1}(t)$，即对任何 t 值，$\hat{U}(t)$为幺正算符. 当然，这时就有$[\hat{H},\hat{U}\hat{U}^{+}]=0$.

3.11 设 A 为 Hermite 或幺正矩阵(这些矩阵都是可以“对角化”的)，证明：在任何表象中，

$$\det\mathrm{e}^{A} = \mathrm{e}^{\mathrm{Tr}A}$$

证 令 $B=\mathrm{e}^{A}$，矩阵(算符)B 既为 A 的函数，则 A 与 B 可以同时对角化. 在 A 表象中，A 表现为对角矩阵，对角矩阵元 $A_{nn}=A_n$ 为 A 的本征值. 因此，A 的迹为

$$\mathrm{Tr}A = \sum_n A_{nn} = \sum_n A_n \tag{1}$$

而 B 的本征值为 e^{A_n}，即

$$B_n = B_{nn} = \mathrm{e}^{A_n} \tag{2}$$

因此

$$\det B = \prod_n B_{nn} = \prod_n \mathrm{e}^{A_n} = \mathrm{e}^{\sum_n A_n} = \mathrm{e}^{\mathrm{Tr}A} \tag{3}$$

考虑到矩阵的行列式和迹均与表象之选择无关，式(3)适用于任何表象.

3.12 设$|u\rangle$、$|v\rangle$为态矢量，$\langle u|u\rangle$及$\langle v|v\rangle$有限，证明

$$\mathrm{Tr}|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle, \mathrm{Tr}|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle$$

证 $|u\rangle\langle v|$的性质是算符(矩阵),其迹可以在任何表象中计算,其值与表象无关. 设某表象的基矢为$|n\rangle$,$n=1,2,\cdots$,利用公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \tag{1}$$

即得

$$\begin{aligned}\langle v|u\rangle &= \sum_n \langle v|n\rangle\langle n|u\rangle = \sum_n \langle n|u\rangle\langle v|n\rangle \\ &= \sum_n (|u\rangle\langle v|)_{nn} = \mathrm{Tr}|u\rangle\langle v|\end{aligned} \tag{2}$$

取$|v\rangle = |u\rangle$,即得

$$\mathrm{Tr}|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle \tag{3}$$

3.13[①] 设力学量算符 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程为

$$f(\hat{A}) = \hat{A}^n + C_1\hat{A}^{n-1} + C_2\hat{A}^{n-2} + \cdots + C_n = 0 \tag{1}$$

$C_1, C_2, \cdots$为常数. 试证明 $\hat{A}$ 有 n 个本征值,它们都是方程 $f(x)=0$ 的根.

证 将式(1)作用于任意状态的波函数 ψ,应有

$$f(\hat{A})\psi = 0 \tag{2}$$

如 ψ 是 $\hat{A}$ 的本征函数,应有

$$\hat{A}\psi = a\psi \tag{3}$$

a 为本征值,将式(3)代入式(2),即得

$$f(a)\psi = (a^n + C_1a^{n-1} + \cdots + C_n)\psi = 0 \tag{4}$$

因此

① 参看 P. A. M. Dirac,《量子力学原理》,科学出版社,1979, § 9.

$$f(a) = a^n + C_1 a^{n-1} + \cdots + C_n = 0 \tag{5}$$

已经假定式(1)是最简单的代数方程，故式(5)应有 n 个根，即 $\hat{A}$ 有 n 个本征值.

反之，如已知力学量算符 $\hat{A}$ 的本征值为 $a_1, a_2, \cdots, a_n$，则 $\hat{A}$ 的任何一个本征函数显然满足方程

$$(\hat{A} - a_1)(\hat{A} - a_2)\cdots(\hat{A} - a_n)\psi = 0 \tag{6}$$

任何波函数总可以表示成 $\hat{A}$ 的本征函数的线性叠加，所以式(6)对于任何波函数成立，因此 $\hat{A}$ 满足方程

$$(\hat{A} - a_1)(\hat{A} - a_2)\cdots(\hat{A} - a_n) = 0 \tag{7}$$

它和式(1)应该等价.

3.14 已知二阶矩阵 A 与 B 满足下列关系：

$$A^2 = 0, \qquad AA^+ + A^+ A = 1, \qquad B = A^+ A$$

试证明 $B^2 = B$，并在 B 表象中求出矩阵 A、B.

解 根据定义 $B = A^+ A$，有

$$B^2 = A^+ AA^+ A = A^+ A(1 - AA^+) = A^+ A - A^+ A^2 A^+$$

由于 $A^2 = 0$，故得

$$B^2 = B \tag{1}$$

由此可以求出 B 的本征值为 0、1.

在 B 表象中，B 为对角矩阵，对角矩阵元等于本征值，所以 B 可以表示成

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

设

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \tag{3}$$

应有

$$A^+A=\begin{pmatrix}a^*c^*\\b^*d^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a^*a+c^*c&a^*b+c^*d\\b^*a+d^*c&b^*b+d^*d\end{pmatrix}$$

$$=B=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix} \tag{4}$$

$$AA^+=\begin{pmatrix}a^*a+b^*b&c^*a+d^*b\\a^*c+b^*d&c^*c+d^*d\end{pmatrix}=1-B$$

$$=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix} \tag{5}$$

$$A^2=\begin{pmatrix}a^2+bc&ab+bd\\ac+dc&d^2+bc\end{pmatrix}=0=\begin{pmatrix}0&0\\0&0\end{pmatrix} \tag{6}$$

由式(4)可得

$$a=0,\quad c=0,\quad b^*b+d^*d=1 \tag{4'}$$

由式(5)可得

$$c=0,\quad d=0,\quad a^*a+b^*b=1 \tag{5'}$$

由式(4')及(5')求出

$$a=c=d=0,\quad b^*b=1 \tag{7}$$

现在式(6)已经得到满足,因此可取

$$b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha},\qquad (\alpha\text{ 为实数}) \tag{8}$$

代入式(3)即得 B 表象中 A 的矩阵表示:

$$A=\begin{pmatrix}0&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\\0&0\end{pmatrix},\qquad A^+=\begin{pmatrix}0&0\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}&0\end{pmatrix} \tag{9}$$

由式(2)和(9)表示的 A 和 B,已经满足所有题设条件,故 α 可取任意实数.最简单的一种选择是

$$\alpha=0,\quad A=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix},\quad A^+=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix} \tag{9'}$$

3.15 设算符 $\hat{H}$ 具有连续本征值 ω，其本征函数 $u_\omega(x)$ 构成正交完备系，即

$$\hat{H}u_\omega(x) = \omega u_\omega(x) \tag{1}$$

$$\int u_{\omega'}^*(x)u_\omega(x)\mathrm{d}^3x = \delta(\omega - \omega') \tag{2}$$

$$\int u_\omega^*(x')u_\omega(x)\mathrm{d}\omega = \delta(x - x') \tag{3}$$

求方程

$$(\hat{H} - \omega_0)u(x) = F(x) \tag{4}$$

的解，其中 $F(x)$ 为已知函数，ω_0 为 $\hat{H}$ 的某个特定本征值.

解 由于 $u_\omega(x)$ 是完备系，式(4)的解总可以表示成

$$u(x) = \int C_\omega u_\omega(x)\mathrm{d}\omega \tag{5}$$

代入式(4)，即得

$$\int(\omega - \omega_0)C_\omega u_\omega(x)\mathrm{d}\omega = F(x) \tag{6}$$

将 $F(x)$ 展开为

$$\begin{aligned} F(x) &= \int F(x')\delta(x - x')\mathrm{d}^3x' \\ &= \iint F(x')u_\omega^*(x')u_\omega(x)\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}\omega \\ &= \int F_\omega u_\omega(x)\mathrm{d}\omega \end{aligned} \tag{7}$$

其中

$$F_\omega = \int F(x')u_\omega^*(x')\mathrm{d}^3x' = \int F(x)u_\omega^*(x)\mathrm{d}^3x \tag{8}$$

将式(7)代入式(6)，即得

$$C_\omega = F_\omega/(\omega - \omega_0) \tag{9}$$

再代入式(5),即得方程(4)的解为

$$u(x) = \int \frac{F_\omega}{\omega - \omega_0} u_\omega(x)\mathrm{d}\omega \tag{10}$$

3.16 证明积分方程

$$\hat{B}(t) = \hat{B}_0 + \mathrm{i}\left[\hat{A}, \int_0^t \hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right] \tag{1}$$

的解为

$$\hat{B}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t} \tag{2}$$

证 令

$$\hat{f}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t} \tag{3}$$

则 $\hat{f}(0)=\hat{B}_0$. 式(3)对 t 求导,得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{f}(t) = \mathrm{i}\hat{A}\hat{f}(t) - \hat{f}(t)\mathrm{i}\hat{A} = \mathrm{i}[\hat{A}, \hat{f}(t)] \tag{4}$$

而由积分方程(1),也得到

$$\hat{B}(0) = \hat{B}_0 + \mathrm{i}[\hat{A}, 0] = \hat{B}_0 \tag{5}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t) = \mathrm{i}[\hat{A}, \hat{B}(t)] \tag{6}$$

$B(t)$和 $\hat{f}(t)$满足同样的一阶微分方程和初始条件,故知

$$\hat{B}(t) = \hat{f}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t} \tag{2}$$

第四章　谐振子的相干态与压缩态

4.1　对于一维谐振子，求消灭算符 a 的本征态，将其表示成各能量本征态 $|n\rangle$ 的线性叠加.

解　消灭算符 a 对于能量本征态 $|n\rangle$ 的作用结果为(参看上册题 3.1 式(26))

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{1}$$

除 $n=0$ 以外，一般 $|n\rangle$ 不是算符 a 的本征态(根源于 $\hat{n}$ 和 a 不对易)，而且，上式表明 a 的本征态不可能由有限个 $|n\rangle$ 叠加而成，必须包含所有 $|n\rangle$. 设

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\alpha)\,|n\rangle \tag{2}$$

满足本征方程

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{3}$$

α 为本征值. 利用式(1)，即得

$$a|\alpha\rangle = a\sum_n C_n|n\rangle = a\sum_n C_n|n\rangle = \sum_n C_n\sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

以 $\langle n-1|$ 左乘上式，并利用正交归一条件

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$$

即得

$$C_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n}}C_{n-1} \tag{4}$$

依次递推，即得

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0 \tag{5}$$

C_0 为归一化常数. 归一化条件为

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_n |C_n|^2 = |C_0|^2 \sum_n \frac{|\alpha^2|^n}{n!} = 1$$

由于

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \mathrm{e}^{|\alpha|^2}$$

所以,

$$C_0 = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{i\delta}, \qquad \delta \text{ 为实数} \tag{6}$$

通常,可取 C_0 为正实数,即取 $\delta = 0$. 这时

$$\boxed{|\alpha\rangle = \sum_n C_n |n\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle} \tag{7}$$

这就是算符 a 的本征态. 由于 a 并非 Hermite 算符,所以本征值 α 原则上可取任意复数. 上式中 $|n\rangle$ 态的成分为

$$|\langle n|\alpha\rangle|^2 = |C_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \mathrm{e}^{-|\alpha|^2} \tag{8}$$

呈 Poisson 分布. 式(7)称为谐振子的相干态(coherent state).

4.2 在相干态 $|\alpha\rangle$ 中,计算 $\hat{n}$、H、x、p 等主要物理量的平均值及涨落.

解 相干态 $|\alpha\rangle$ 满足本征方程

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{1}$$

其共轭方程为

$$\langle \alpha | a^{\dagger} = \alpha^* \langle \alpha | \tag{1'}$$

能量算符为

$$H = \left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(a^{+}\, a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{2}$$

在$|\alpha\rangle$态下求平均,即得

$$\bar{n} = \langle\alpha|a^{+}\, a|\alpha\rangle = \alpha^{*}\alpha\langle\alpha|\alpha\rangle = |\alpha|^{2} \tag{3}$$

$$\bar{H} = \left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(|\alpha|^{2} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \bar{E} \tag{4}$$

用产生、消灭算符来表示$\hat{n}^2$和H^2,有

$$\hat{n}^2 = a^{+}\, aa^{+}\, a = a^{+}\,(a^{+}\, a + 1)a = (a^{+})^2 a^2 + \hat{n} \tag{5}$$

$$H^2 = \left(\hat{n}^2 + \hat{n} + \frac{1}{4}\right)\hbar^2\omega^2 \tag{6}$$

利用式(1),(1′),即得

$$\overline{n^2} = (\alpha^{*})^2\alpha^2 + \alpha^{*}\alpha = |\alpha|^4 + |\alpha|^2 = \bar{n}^2 + \bar{n} \tag{7}$$

$$\overline{H^2} = \left(\bar{n}^2 + 2\bar{n} + \frac{1}{4}\right)\hbar\omega \tag{8}$$

统计涨落为

$$\Delta n = (\overline{n^2} - \bar{n}^2)^{1/2} = \sqrt{\bar{n}} \tag{9}$$

$$\Delta E = (\overline{H^2} - \overline{H}^2)^{1/2} = \sqrt{\bar{n}}\,\hbar\omega \tag{10}$$

相对涨落为

$$\Delta n/\bar{n} = 1/\sqrt{\bar{n}} \tag{11}$$

$$\Delta E/\bar{E} = \sqrt{\bar{n}}\Big/\left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right) \tag{12}$$

$|\alpha|$越大,$\bar{n}$越大,相对涨落越小.

x、x^2、p、p^2用a和a^{+}的表示式为

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^+ + a)$$

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}[(a^+)^2 + a^2 + 2a^+ a + 1] \tag{13}$$

$$p = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^+ - a)$$

$$p^2 = \frac{1}{2}m\omega\hbar(2a^+ a + 1 - a^2 - a^{+2})$$

平均值为

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha^* + \alpha) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\mathrm{Re}(\alpha) \tag{14}$$

$$\overline{x^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}[(\alpha^*)^2 + \alpha^2 + 2\alpha^*\alpha + 1]$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}[1 + (\alpha + \alpha^*)^2] \tag{15}$$

$$\bar{p} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\alpha^* - \alpha) = \sqrt{2m\omega\hbar}\,\mathrm{Im}(\alpha) \tag{16}$$

$$\overline{p^2} = \frac{1}{2}m\omega\hbar[2\alpha^*\alpha + 1 - \alpha^2 - (\alpha^*)^2]$$

$$= \frac{1}{2}m\omega\hbar[1 - (\alpha - \alpha^*)^2] \tag{17}$$

统计涨落为

$$\Delta x = (\overline{x^2} - \bar{x}^2)^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{18}$$

$$\Delta p = (\overline{p^2} - \bar{p}^2)^{1/2} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \tag{19}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2 \tag{20}$$

注意，Δx、Δp 均为常量，和 α 及 $\bar{n}$ 无关.

如 α 是实数 $\alpha+\alpha^*=2\alpha$，$\alpha-\alpha^*=0$，这时

$$\bar{n}=\alpha^2$$

$$\overline{E}=\left(\alpha^2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\bar{x}=\alpha\sqrt{2\hbar/m\omega}=\sqrt{2\bar{n}\hbar/m\omega}$$

$$\overline{x^2}=\left(\alpha^2+\frac{1}{4}\right)\frac{2\hbar}{m\omega}=\left(\bar{n}+\frac{1}{4}\right)\frac{2\hbar}{m\omega}$$

$$\bar{p}=0$$

$$\overline{p^2}=\frac{1}{2}m\omega\hbar$$

动能和势能平均值为

$$\frac{1}{2m}\overline{p^2}=\frac{1}{4}\hbar\omega \tag{21}$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}=\left(\bar{n}+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega=\overline{E}-\frac{1}{4}\hbar\omega \tag{22}$$

如 $\bar{n}\gg1$，平均动能就显得微不足道. 而对于能量本征态 $|n\rangle$，平均动能等于平均势能，并且等于总能之半.

如 α 为纯虚数，$\alpha+\alpha^*=0$，$\alpha-\alpha^*=2\alpha$，这时情况刚好相反，有下列结果：

$$\bar{x}=0 \tag{23}$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}=\frac{1}{4}\hbar\omega$$

$$\bar{p}=\sqrt{2m\omega\hbar}|\alpha|=\sqrt{2\bar{n}m\omega\hbar}$$

$$\frac{1}{2m}\overline{p^2}=\left(|\alpha|^2+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega=\left(\bar{n}+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega=\overline{E}-\frac{1}{4}\hbar\omega \tag{24}$$

如 $\bar{n}\gg1$，平均势能显得微不足道，平均动能近似等于总能.

4.3 证明谐振子相干态可以表示成

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}|0\rangle \tag{1}$$

并求出$|\alpha\rangle$在x表象中的表示式$\langle x|\alpha\rangle$(即波函数).

解 利用产生、消灭算符的基本对易式

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+ a = 1 \tag{2}$$

即得

$$[a, \alpha a^+ - \alpha^* a] = \alpha[a, a^+] = \alpha \tag{3}$$

反复利用式(3),可得

$$[a, (\alpha a^+ - \alpha^* a)^n] = n\alpha(\alpha a^+ - \alpha^* a)^{n-1} \tag{4}$$

因此,

$$\begin{aligned}[a, e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}[a, (\alpha a^+ - \alpha^* a)^n] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \alpha \frac{(\alpha a^+ - \alpha^* a)^{n-1}}{(n-1)!} = \alpha e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}\end{aligned} \tag{5}$$

亦即,对于任何$|\psi\rangle$,均有

$$a e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}|\psi\rangle = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}(a + \alpha)|\psi\rangle \tag{5'}$$

但是,对于谐振子的基态$|0\rangle$,

$$a|0\rangle = 0 \tag{6}$$

因此

$$a e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}|0\rangle = \alpha e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}|0\rangle \tag{7}$$

亦即$e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}|0\rangle$是算符$a$的本征态,本征值为$\alpha$.因此这就是相干态$|\alpha\rangle$.

利用 Glauber 公式(参看题 3.7)

$$e^{A+B} = e^{A}e^{B}e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \tag{8}$$

可得

$$e^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a} = e^{\alpha a^{+}}e^{-\alpha^{*}a}e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}} \tag{9}$$

代入式(1),即得

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}e^{\alpha a^{+}}e^{-\alpha^{*}a}|0\rangle$$

其中

$$e^{-\alpha^{*}a}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\alpha^{*})^{n}}{n!}a^{n}|0\rangle = |0\rangle$$

因此

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}e^{\alpha a^{+}}|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}\sum_{n}\frac{\alpha^{n}}{n!}(a^{+})^{n}|0\rangle$$

利用公式

$$a^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{10}$$

即得

$$(a^{+})^{n}|0\rangle = \sqrt{n!}\,|n\rangle \tag{11}$$

因此

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{n}}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{12}$$

写成 x 表象中波函数,就是

$$\psi_{\alpha}(x) = \langle x|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}\sum_{n}\frac{\alpha^{n}}{\sqrt{n!}}\psi_{n}(x) \tag{13}$$

下面给出相干态波函数的另一种表示式.

先将式(1)中算符写成如下形式:

$$e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = \exp\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\alpha - \alpha^*)x - i\frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2m\omega\hbar}}p\right] \tag{14}$$

再利用公式(8),即得

$$e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = \exp\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\alpha - \alpha^*)x\right]\exp\left[-i\frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2m\omega\hbar}}p\right] \cdot \exp\left[\frac{1}{4}(\alpha^{*2} - \alpha^2)\right] \tag{15}$$

式(1)的 x 表象为

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}\psi_0(x) \tag{1'}$$

将式(11)代入式(1'),并取

$$p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

即得

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = e^{i\theta}e^{i\bar{p}x/\hbar}e^{-\bar{x}\frac{\partial}{\partial x}}\psi_0(x) \tag{16}$$

其中

$$i\theta = \frac{1}{4}(\alpha^{*2} - \alpha^2) \tag{17}$$

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*) \tag{18}$$

$$\bar{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\alpha^* - \alpha) \tag{19}$$

(参看题 4.2).式(16)中 $e^{-\bar{x}\frac{\partial}{\partial x}}$即平移算符,它对波函数的作用是

$$e^{-\bar{x}\frac{\partial}{\partial x}}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\bar{x})^n}{n!}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\psi(x) = \psi(x - \bar{x}) \tag{20}$$

代入式(16),即得相干态波函数的具体函数形式:

$$\boxed{\psi_a(x) = \langle x|a\rangle = e^{i\theta}e^{i\bar{p}x/\hbar}\psi_0(x-\bar{x})} \tag{21}$$

其中 $\psi_0(x)$是谐振子基态波函数.

如 a 是实数,则 $\theta=0,\bar{p}=0$,上式变成

$$\psi_a(x) = \psi_0(x-\bar{x}) \tag{22}$$

其意义为:将基态作空间平移,即得相干态,平移的距离等于相干态中 x 的平均值.式(22)的波形如图 3.10 所示.

由于 $\psi_0(x)$和 $\psi_a(x)$的波形相同,所以 Δx 及 Δp 均为

$$\Delta x = \sqrt{\hbar/2m\omega}$$

$$\Delta p = \sqrt{m\omega\hbar/2}$$

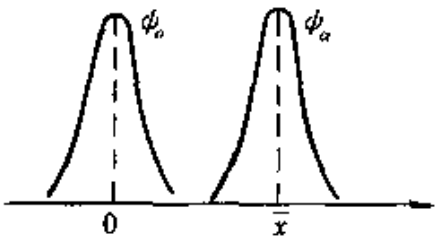


图 3.10

乘积为

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$$

刚好等于测不准关系所规定的下限(参看题 4.2).

4.4 一维谐振子,$t=0$ 时给定初始波函数

$$\psi(x,0) = \psi_0(x-x_0) = N_0 e^{-m\omega(x-x_0)^2/2\hbar}$$

求 $\psi(x,t)$,并描述其主要运动特征.

解 将 $\psi(x,0)$展开成能量本征函数 ψ_n 的叠加:

$$\psi(x,0) = \sum_n C_n\psi_n(x) \tag{1}$$

则

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} \tag{2}$$

其中

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{3}$$

在 $t=0$ 时，显然

$$\bar{x}(t=0) = x_0 \tag{4}$$

令

$$\alpha_0 = x_0\sqrt{m\omega/2\hbar} \tag{5}$$

根据题 4.3，$\psi_0(x-x_0)$就是相干态波函数 $\psi_{\alpha_0}(x)$，因此，由题 4.3 式(12)，

$$\psi(x,0) = \langle x|\alpha_0\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x) \tag{6}$$

和式(1)比较，即得

$$C_n = \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2} \tag{7}$$

代入式(2)，即得

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}i\omega t}\sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}}[\alpha(t)]^n\psi_n(x) \tag{8}$$

其中

$$\boxed{\alpha(t) = \alpha_0\mathrm{e}^{-i\omega t}} \tag{9}$$

除相因子 $\mathrm{e}^{i\omega t/2}$外，式(8)正是相干态波函数$\langle x|\alpha(t)\rangle$. 由题 4.3 中式(21)可知

$$\psi(x,t) = \langle x|\alpha(t)\rangle = \mathrm{e}^{i\theta}\mathrm{e}^{i\bar{p}x/\hbar}\psi_0(x-\bar{x}) \tag{10}$$

其中

$$i\theta = \frac{1}{4}\{[\alpha^*(t)]^2 - [\alpha(t)]^2\} = \frac{i}{2}\alpha_0^2\sin 2\omega t \tag{11}$$

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[a(t) + a^*(t)] = x_0\cos\omega t \tag{12}$$

$$\bar{p} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}[a^*(t) - a(t)] = -m\omega x_0\sin\omega t \tag{13}$$

因此，

$$\psi(x,t) = \psi_0(x - x_0\cos\omega t)\exp\mathrm{i}\left(\frac{m\omega x_0^2}{4\hbar}\sin 2\omega t - \frac{\omega t}{2} - \frac{m\omega x_0 x}{\hbar}\sin\omega t\right) \tag{10'}$$

这是一个随时间振荡的波包，每当

$$t = 2\pi/\omega, \quad 4\pi/\omega, \quad 6\pi/\omega, \cdots$$

时，$a(t)$恢复成初始值 a_0，$\psi(x,t) = \pm\psi(x,0)$，即波包又恢复到初始状态. 由于

$$|\psi(x,t)|^2 = |\psi_0(x - x_0\cos\omega t)|^2 \tag{14}$$

在振荡过程中波包不扩散，波形不变，只是波包中心($\bar{x}$)随时间作周期性振荡.

注意，在任何时刻，$\psi(x,t)$都是一个相干态波函数，其 Δx，Δp 均保持不变，$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$.

至于 $\bar{x}$、$\bar{p}$ 的振荡规律[式(12)，(13)]，这并非相干态特有的性质，而是任何谐振子波包的特点. 可由 Heisenberg 运动方程直接导出式(12)，(13). 但是，一般的谐振子波包，在振荡过程中波形将随时间变化，作周期性扩张和收缩. 波形不变的只有相干态振荡波包.

4.5 考虑谐振子升、降算符 a^+、a 的线性变换

$$b = \lambda a + \nu a^+, \qquad b^+ = \nu a + \lambda a^+ \tag{1}$$

λ、ν 为实数，并满足关系 $\lambda^2-\nu^2=1$. 试证明：对于算符 b 的任何一个本征态，$\Delta x\cdot\Delta p=\hbar/2$.

证　利用 a 与 a^+ 的基本对易式 $[a,a^+]=1$，可得

$$[b,b^+]=(\lambda^2-\nu^2)[a,a^+]=\lambda^2-\nu^2=1 \tag{2}$$

式(1)的逆变换为

$$a=\lambda b-\nu b^+,\qquad a^+=-\nu b+\lambda b^+ \tag{3}$$

根据上册题 3.1 所建立的关系

$$x=\sqrt{\hbar/m\omega}Q,\qquad p=\sqrt{m\omega\hbar}\,P \tag{4}$$

$$Q=\frac{1}{\sqrt{2}}(a^++a),\qquad P=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^+-a) \tag{5}$$

容易将 Q、P 表示成 b 和 b^+：

$$\begin{aligned}Q&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda-\nu)(b^++b)\\ P&=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\lambda+\nu)(b^+-b)\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}Q^2&=\frac{1}{2}(\lambda-\nu)^2(b^{+2}+b^2+2b^+b+1)\\ P^2&=-\frac{1}{2}(\lambda+\nu)^2(b^{+2}+b^2-2b^+b-1)\end{aligned} \tag{7}$$

设 $|\beta\rangle$ 为算符 b 的本征态，满足本征方程

$$b|\beta\rangle=\beta|\beta\rangle \tag{8}$$

取共轭，即得

$$\langle\beta|b^+=\beta^*\langle\beta| \tag{8'}$$

在 $|\beta\rangle$ 态中计算 Q、Q^2、P、P^2 平均值，即得

$$\bar{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda - \nu)(\beta^* + \beta)$$

$$\bar{P} = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\lambda + \nu)(\beta^* - \beta)$$

$$\begin{aligned}\overline{Q^2} &= \frac{1}{2}(\lambda - \nu)^2(\beta^{*2} + \beta^2 + 2\beta^*\beta + 1) \\ &= \frac{1}{2}(\lambda - \nu)^2[1 + (\beta^* + \beta)^2]\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\overline{P^2} &= -\frac{1}{2}(\lambda + \nu)^2(\beta^{*2} + \beta^2 - 2\beta^*\beta - 1) \\ &= \frac{1}{2}(\lambda + \nu)^2[1 - (\beta^* - \beta)^2]\end{aligned}$$

Q、P 的统计涨落为

$$\begin{aligned}\Delta Q &= (\overline{Q^2} - \bar{Q}^2)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\lambda - \nu| \\ \Delta P &= (\overline{P^2} - \bar{P}^2)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\lambda + \nu|\end{aligned} \tag{10}$$

由式(4)即得

$$\begin{aligned}\Delta x &= \sqrt{\hbar/m\omega}\Delta Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|\lambda - \nu| \\ \Delta p &= \sqrt{m\omega\hbar}\Delta P = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}|\lambda + \nu|\end{aligned} \tag{11}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}|\lambda^2 - \nu^2| = \frac{\hbar}{2} \tag{12}$$

证明完毕.

注意，Δx 和 Δp 虽与 β 之值无关，但与 λ、ν 的取值有关. 在条件 $\lambda^2 - \nu^2 = 1$ 下调节 λ、ν 的取值，可以使 Δx 任意缩小(Δp 则相应增大). 这一点和算符 a 的本征态不同，后者 Δx 和 Δp 均为常数(参看题 4.2). 当然，$|\beta\rangle$ 也可表示成谐振子能量本征态的线性叠

加，称为相干压缩态.

4.6 从谐振子升、降算符的基本对易关系

$$[a,a^+]=1 \tag{1}$$

出发，证明

$$e^{\lambda a^+}ae^{-\lambda a^+a}=e^{-\lambda}a \tag{2}$$

(λ 为参数)而对于 $\lambda>0$，计算

$$T(\lambda)=\mathrm{Tr}e^{-\lambda a^+a}$$

进而讨论算符 a^+a 的本征值谱.

解 将式(2)左端记为 $f(\lambda)$，显然

$$f(0)=a \tag{3}$$

视 λ 为参变量，将 $f(\lambda)$ 对 λ 求导数，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=e^{\lambda a^+a}(a^+a^2-aa^+a)e^{-\lambda a^+a}$$

利用式(1)，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=-f(\lambda) \tag{4}$$

其解为

$$f(\lambda)=f(0)e^{-\lambda}=ae^{-\lambda}$$

此即式(2).

算符 a^+a 在任意状态 $|\psi\rangle$ 下的平均值为

$$\langle\psi|a^+a|\psi\rangle=|a|\psi\rangle|^2\geqslant 0$$

因此 a^+a 的本征值为非负实数，(注意 a^+a 为 Hermite 算符!)记为 $k_0,k_1,k_2,\cdots,k_n,\cdots$，则

$$T(\lambda) = \mathrm{Tr}e^{-\lambda a^+ a} = \sum_n e^{-\lambda k_n} \tag{5}$$

另一方面，视 λ 为参变量，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) = \mathrm{Tr}(-a^+ a e^{-\lambda a^+ a})$$

利用式(2)，即得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) &= -\mathrm{Tr}(a^+ e^{-\lambda a^+ a}a)e^{-\lambda} \\ &= -e^{-\lambda}\mathrm{Tr}(aa^+ e^{-\lambda a^+ a}) \\ &= -e^{-\lambda}\mathrm{Tr}[(1 + a^+ a)e^{-\lambda a^+ a}] \\ &= e^{-\lambda}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) - T(\lambda)\right]\end{aligned}$$

即

$$(1 - e^{-\lambda})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) = -e^{-\lambda}T(\lambda)$$

即

$$\frac{\mathrm{d}T(\lambda)}{T(\lambda)} = -\frac{e^{-\lambda}}{1 - e^{-\lambda}}\mathrm{d}\lambda \tag{6}$$

积分，得

$$\ln T(\lambda) = -\ln(1 - e^{-\lambda}) + C'$$

$$T(\lambda) = \frac{C}{1 - e^{-\lambda}} \tag{7}$$

其中 $C = e^{C'}$ 为积分常数，待定.

式(7)中令 $\lambda \to \infty$，得到 $T(\infty) = C$，和式(5)比较，可知 $a^+ a$ 的最小本征值 $k_0 = 0$[否则式(5)给出 $T(\infty) = 0$]，因此

$$T(\infty) = 1, \qquad C = 1 \tag{8}$$

代入式(7)，即得

$$T(\lambda)=\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-\lambda}}=1+\mathrm{e}^{-\lambda}+\mathrm{e}^{-2\lambda}+\mathrm{e}^{-3\lambda}+\cdots \tag{9}$$

当 $\lambda\to\infty,\mathrm{e}^{-\lambda}\to 0^{+}$，将式(5)和(9)从 $\mathrm{e}^{-\lambda}$的最低次幂开始逐项比较，可知

$$k_n=n \tag{10}$$

亦即 $a^{+}a$ 的本征值谱为

$$0,1,2,3,\cdots,n,\cdots \tag{11}$$

这和上册题 3.1 结论一致，可谓殊途同归.

4.7 某量子体系的能量算符为

$$H=\frac{5}{3}a^{+}a+\frac{2}{3}(a^{2}+a^{+2}) \tag{1}$$

其中

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}(q+\mathrm{i}p),\qquad a^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}(q-\mathrm{i}p) \tag{2}$$

p、q 满足基本对易式

$$[q,p]=qp-pq=\mathrm{i} \tag{3}$$

即

$$p=-\mathrm{i}\frac{d}{dq} \tag{3'}$$

试求 H 的本征值谱以及基态波函数 $\psi_0(q)$.

解一 算符 a、a^{+}的定义使人立刻联想到谐振子的升、降算符. 下面先将 H 用 p、q 表示，再相机寻找解决办法.

$$\begin{aligned}H=&\frac{5}{3}\cdot\frac{1}{2}(q-\mathrm{i}p)(q+\mathrm{i}p)\\&+\frac{2}{3}\cdot\frac{1}{2}[(q+\mathrm{i}p)^{2}+(q-\mathrm{i}p)^{2}]\end{aligned}$$

$$= \frac{3}{2}q^2 + \frac{1}{6}p^2 - \frac{5}{6} \tag{4}$$

如令

$$Q = \sqrt{3}\,q, \quad P = \frac{1}{\sqrt{3}}p \tag{5}$$

则仍有对易式

$$[Q,P] = [q,p] = \mathrm{i} \tag{6}$$

而式(4)可以写成

$$H = \frac{1}{2}(Q^2 + P^2) - \frac{5}{6} \tag{7}$$

现在 H 的结构已经和谐振子类似. 再令

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + \mathrm{i}P), \qquad b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - \mathrm{i}P) \tag{8}$$

则

$$[b,b^+] = \frac{1}{2}[Q + \mathrm{i}p, Q - \mathrm{i}P] = -\mathrm{i}[Q,P] = 1 \tag{9}$$

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}(Q - \mathrm{i}P)(Q + \mathrm{i}P) - \frac{\mathrm{i}}{2}(QP - PQ) - \frac{5}{6} \\ &= b^+ b - \frac{1}{3} \end{aligned} \tag{10}$$

$$[b,H] = [b,b^+ b] = [b,b^+]b = b \tag{11}$$

仿照上册题 3.1,设

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{12}$$

容易证明

$$b^+ b|n\rangle = n|n\rangle$$

$$b|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \quad b^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{13}$$

因此，能级为

$$E_n = n - \frac{1}{3}, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{14}$$

基态能级 $E_0 = -1/3$. 基态波函数 ψ_0 满足方程

$$b\psi_0 = 0 \tag{15}$$

即

$$(Q + \mathrm{i}P)\psi_0 = \left(\sqrt{3}\,q + \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\right)\psi_0 = 0 \tag{15'}$$

解为

$$\psi_0(q) = C\mathrm{e}^{-3q^2/2} = C\mathrm{e}^{-Q^2/2} \tag{16}$$

C 为归一化常数.

解二 由定义式(2)，可算出 a 和 a^+ 的对易式为

$$[a,a^+] = \frac{1}{2}[q + \mathrm{i}p, q - \mathrm{i}p] = -\mathrm{i}[q,p] = 1 \tag{17}$$

为了将 H 化成谐振子的形式，应该找到一对算符 b、b^+，满足

$$[b,b^+] = 1 \tag{9}$$

并使 H 化成下列形式：

$$H = kb^+ b + E_0 \tag{18}$$

此时仿照上册题 3.1，设 $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ 后，就可导致结论式(13)以及

$$E_n = kn + E_0 \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{19}$$

为此，试令

$$b = \lambda a + \nu a^+, \quad b^+ = \lambda a^+ + \nu a \tag{20}$$

(λ，ν 为待定实数)，利用式(17)，易得

$$[b,b^+] = \lambda^2[a,a^+] + \nu^2[a^+,a] = \lambda^2 - \nu^2 \tag{21}$$

$$b^+ b = (\lambda^2 + \nu^2)a^+ a + \lambda\nu(a^2 + a^{+2}) + \nu^2 \tag{22}$$

比较式(9)、(21),即得

$$\lambda^2 - \nu^2 = 1 \tag{23}$$

比较式(1)、(18)、(22),即得

$$\lambda^2 + \nu^2 = \frac{5}{2}\lambda\nu \tag{24}$$

由式(23)和(24),容易解出其实根为

$$\lambda = 2/\sqrt{3}, \quad \nu = 1/\sqrt{3} \tag{25}$$

代入式(22),再代入式(18),即得 $k=1$,以及

$$H = b^+ b - \frac{1}{3}$$

此即式(10).因此

$$E_n = n - \frac{1}{3}, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{14}$$

基态波函数 $\psi_0(q)$仍可根据式(15)求出.

第五章　Feynman-Hellmann 定理和位力定理

5.1　设量子体系的束缚态能级和归一化能量本征态分别为 E_n 和 ψ_n(n 为量子数或编号数)，设 λ 为 Hamilton 算符 H 含有的任何一个参数．证明

$$\boxed{\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}=\left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle} \tag{1}$$

这称为 Feynman-Hellmann 定理[①]．以后简称 F-H 定理．

证　ψ_n 满足能量本征方程

$$(H-E_n)|\psi_n\rangle=0 \tag{2}$$

其共轭方程为

$$\langle\psi_n|(H-E_n)=0 \tag{2'}$$

视 λ 为参变量，式(2)对 λ 求导，得到

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \lambda}-\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}\right)|\psi_n\rangle+(H-E_n)\frac{\partial}{\partial \lambda}|\psi_n\rangle=0 \tag{3}$$

以 $\langle\psi_n|$ 左乘式(3)，利用式(2′)和归一化条件 $\langle\psi_n|\psi_n\rangle=1$，即得式(1)．

5.2　设 Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

设 ψ_n 为归一化的束缚态波函数，证明

$$\boxed{\langle\psi_n|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}|\psi_n\rangle=\frac{1}{2}\langle\psi_n|\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r})|\psi_n\rangle} \tag{2}$$

---

① H. Hellmann, *Acta Physicochimica URSS* 1, **6**(1935), 913.; IV, **2**(1936), 225; R. F. Feynman, *Phys. Rev.*, **56**(1939), 340. 总结性文章，可参看 C. Quigg and J. L. Rosner, *Physics Reports*, **56**(1979), 167～235.

这称为位力定理．讨论 $V(\boldsymbol{r})$是(x,y,z)的 ν 次齐次函数的情形．

证一 在 $\boldsymbol{r}$ 表象中，H 表示成

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{1a}$$

视 $\hbar$为参变量，则

$$\frac{\partial H}{\partial \hbar}=-\frac{\hbar}{\mu}\nabla^2=-\frac{2}{\hbar}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}$$

根据 F-H 定理，就有

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}&=\left\langle\psi_n\left|\frac{\partial H}{\partial \hbar}\right|\psi_n\right\rangle\\&=\frac{2}{\hbar}\left\langle\psi_n\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right|\psi_n\right\rangle\end{aligned} \tag{3}$$

在 $\boldsymbol{p}$ 表象中，H 表示成

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\right) \tag{1b}$$

其中

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}=\boldsymbol{r} \tag{4}$$

这时可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial \hbar}&=\frac{\partial V}{\partial \hbar}=\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \hbar}\cdot\frac{\partial V}{\partial \boldsymbol{r}}\\&=\frac{\boldsymbol{r}}{\hbar}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{5}$$

利用 F-H 定理，即得

$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}=\frac{1}{\hbar}\langle\psi_n|\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r})|\psi_n\rangle \tag{3'}$$

比较式(3)和(3′)，即得式(2).

证二 利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})=\frac{1}{i\hbar}[F,H] \tag{6}$$

在束缚态 ψ_n 下求平均值，显然有

$$\langle\psi_n|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F|\psi_n\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_n|(FH-HF)|\psi_n\rangle=0 \tag{7}$$

取 $F=\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{r}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} \tag{8}$$

其中

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}^2]=\frac{\boldsymbol{p}}{\mu} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{p},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]\\&=-\nabla V(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{10}$$

代入式(8)，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})=\frac{\boldsymbol{p}^2}{\mu}-\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{8'}$$

对 ψ_n 态求平均值，并利用式(7)，即得式(2).

如 $V(\boldsymbol{r})$是(x,y,z)的 ν 次齐次函数，则

$$\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r})=\nu V(\boldsymbol{r}) \tag{11}$$

代入式(2)，即得

$$\boxed{\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle_n=\frac{\nu}{2}\langle V\rangle_n} \tag{12}$$

其中$\langle\rangle_n$表示 ψ_n 态下的平均值．式(12) 规定了束缚态下动能平均值和势能平均值的比例关系．如 E_n 已知，就有

$$\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle_n=\frac{\nu}{\nu+2}E_n,\qquad\langle V\rangle_n=\frac{2}{\nu+2}E_n \tag{13}$$

5.3 在原子核(电荷 Ze) 周围运动的 N 电子体系，忽略自旋和相对论效应后，总能量算符可以写成

$$H=T+V \tag{1}$$

其中

$$T=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}_i^2,\qquad\boldsymbol{p}_i=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i} \tag{2}$$

$$V=-Ze^2\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{r_i}+e^2\sum_{i<j}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|} \tag{3}$$

对于体系的任何一个束缚态，证明位力定理：

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle=-E \tag{4}$$

证一 令$(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=x_\alpha,\alpha=1,2,\cdots,3N$，动能可以表示成

$$T=\frac{1}{2\mu}\sum_\alpha p_\alpha^2=\frac{1}{2\mu}\sum_\alpha\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\right)^2 \tag{2'}$$

势能V显然满足

$$\sum_\alpha x_\alpha\frac{\partial V}{\partial x_\alpha}=-V \tag{5}$$

即V为各x_α的(-1)次齐次函数.

本题和上题之差别，在于自由度从3变成$3N$. 仿照上题，容易证明

$$\begin{aligned}\langle T\rangle&=\frac{1}{2}\left\langle\sum_\alpha x_\alpha\frac{\partial V}{\partial x_\alpha}\right\rangle\\&=-\frac{1}{2}\langle V\rangle\end{aligned} \tag{6}$$

由于$E=(T+V)$，所以

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle=-E \tag{4}$$

证二 设某个束缚态的归一化波函数为

$$\psi(x_\alpha)=\psi(x_1,x_2,\cdots,x_{3N}) \tag{7}$$

引入参变量λ，考虑归一化的试探波函数

$$\psi(\lambda,x_\alpha)=\lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_1,\cdots,\lambda x_{3N})=\lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_\alpha)$$

以$\langle\quad\rangle$表示$\psi(x_\alpha)$态下平均值，$\langle\quad\rangle_\lambda$表示$\psi(\lambda,x_\alpha)$态下平均值，容易求出

$$\begin{aligned}\langle T\rangle_\lambda&=\frac{\lambda^{3N}}{2\mu}\int\psi^*(\lambda x_\alpha)\sum_\alpha\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\right)^2\psi(\lambda x_\alpha)\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{3N}\\&=\frac{\lambda^2}{2\mu}\int\psi^*(\xi_\alpha)\sum_\alpha\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\xi_\alpha}\right)^2\psi(\xi_\alpha)\mathrm{d}\xi_1\cdots\mathrm{d}\xi_{3N}\end{aligned}$$

$$= \lambda^2\langle T\rangle \tag{8}$$

其中 $\xi_a=\lambda r_a$. 类似地可得

$$\langle V\rangle_\lambda=\lambda\langle V\rangle \tag{9}$$

因此

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle_\lambda=\lambda^2\langle T\rangle+\lambda\langle V\rangle \tag{10}$$

按照变分原理，束缚态能量应该取变分极小值，满足条件

$$\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0 \tag{11}$$

由此得到

$$\lambda=-\langle V\rangle/2\langle T\rangle \tag{12}$$

但是，真正的束缚态波函数 $\lambda=1$，以此代入上式，即得

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle=-E \tag{2}$$

5.4 质量为 μ 的粒子在势场 $V_1(x)$中运动时，束缚态能级为 $E_n(1)$；在势场 $V_2(x)$中运动时，束缚态能级为 $E_n(2)$，$n=1,2,\cdots$ 为能级编号．设对于任何 x 值，均有

$$V_1(x)\leqslant V_2(x)$$

试证明

$$E_n(1)\leqslant E_n(2)$$

即 V_2 场的各个能级均高于(或等于)V_1 场的相应能级．

证 考虑另一个介于 V_1、V_2 间的势场

$$V(\lambda,x)=(2-\lambda)V_1(x)+(\lambda-1)V_2(x),\qquad 1\leqslant\lambda\leqslant 2 \tag{1}$$

相应的 Hamilton 算符记为

$$H(\lambda,x)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(\lambda,x) \tag{2}$$

能级记为 $E_n(\lambda)$. 注意

$$V(1,x)=V_1(x),\qquad V(2,x)=V_2(x)$$

视 λ 为参变量，对 λ 求导，有

$$\frac{\partial H(\lambda,x)}{\partial\lambda}=\frac{\partial V(\lambda,x)}{\partial\lambda}=V_2(x)-V_1(x)\geqslant 0 \tag{3}$$

利用 F-H 定理，即得

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} \geqslant 0 \tag{4}$$

即 λ 增大时，$E_n(\lambda)$ 只增不减，所以

$$E_n(1) \leqslant E_n(2) \tag{5}$$

5.5 粒子在势场

$$V(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{2}kx^2, & |x|<b \\ \dfrac{1}{2}kb^2, & |x|>b\end{cases} \tag{1}$$

中运动，试粗略估计束缚态能级总数 N 的上、下限．（设 $N \gg 1$）

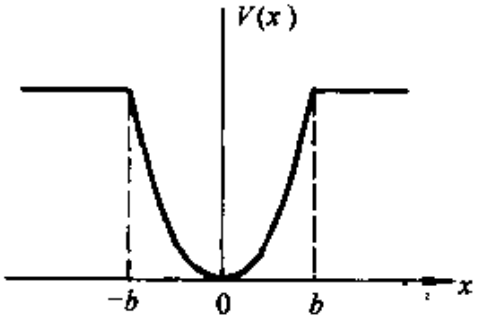


图 5.5

解 束缚态能量显然不能大于 $V(\pm\infty)$，即

$$E \leqslant \frac{1}{2}kb^2 \tag{2}$$

本题势能介于直角势阱

$$V_1(x)=\begin{cases}0 & |x|<b \\ \dfrac{1}{2}kb^2 & |x|>b\end{cases} \tag{3}$$

和谐振子势阱

$$V_2(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \tag{4}$$

之间，即

$$V_1(x) \leqslant V(x) \leqslant V_2(x) \tag{5}$$

根据上题，三种势场造成的能级应取和这相同的高低次序．因此，在式(2)限制下，三者能级总数应取与此相反的大小次序，亦即

$$N_2<N<N_1 \tag{6}$$

谐振子势阱 V_2 的能级为

$$E_n(2)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{7}$$

能级总数 N_2 由下式决定：

$$\left(N_2-1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\leqslant\frac{1}{2}kb^2$$

作为粗略估计，可取

$$N_2\approx kb^2/2\hbar\omega=\frac{b^2}{2\hbar}\sqrt{k\mu} \tag{8}$$

根据上册题 1.3 的计算，直角势阱 V_1 的能级总数约为

$$N_1\approx\frac{2b^2}{\pi\hbar}\sqrt{k\mu} \tag{9}$$

本题能级总数 N 介于 N_2、N_1 之间，因此

$$\frac{b^2}{2\hbar}\sqrt{k\mu}<N<\frac{2b^2}{\pi\hbar}\sqrt{k\mu} \tag{10}$$

右端(N_1)为上限，左端(N_2)为下限．

5.6 粒子在 Hulthen 势场

$$V(r)=-V_0/(\mathrm{e}^{r/a}-1), \qquad V_0,a>0 \tag{1}$$

中运动，证明束缚态能级 E_n 满足不等式

$$E_n>-\mu V_0^2a^2/2n^2\hbar^2. \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{2}$$

证 和类氢离子能级公式比较，可以看出式(2)右端正好是 Coulomb 场

$$V_c(r)=-V_0a/r \tag{3}$$

的束缚态能级．将 $V(r)$ 和 $V_c(r)$ 加以比较，易得

$$V(r)=-V_0\Big/\left[\frac{r}{a}+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]$$

$$=V_c(r)\Big/\left[1+\frac{1}{2!}\frac{r}{a}+\frac{1}{3!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right] \tag{4}$$

上式分母恒大于 1，因此

$$|V(r)|<|V_c(r)|, \qquad V(r)>V_c(r) \tag{5}$$

根据题(5.4)，$V(r)$场的每个能级均应高于 $V_c(r)$场的相应能级，故不等式(2)成立.

5.7 粒子作一维运动，当总能量算符为

$$H_0=p^2/2m+V(x) \tag{1}$$

时，能级为 $E_n^{(0)}$. 如总能量算符变成

$$H=H_0+\lambda p/m \tag{2}$$

求能级 E_n.

解一 视 λ 为参变量，则

$$\partial H/\partial\lambda=p/m \tag{3}$$

根据 F-H 定理，应有

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle_n=\frac{1}{m}\langle p\rangle_n \tag{4}$$

但因

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar m}\left[x,\frac{p^2}{2}+\lambda p\right]$$

$$=\frac{1}{m}(p+\lambda) \tag{5}$$

对于任何束缚态，均有

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right\rangle_n=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle xH-Hx\rangle_n=0$$

因此

$$\langle p\rangle_n=-\lambda \tag{6}$$

代入式(4)，即得

$$\partial E_n/\partial\lambda=-\lambda/m \tag{7}$$

积分，即得

$$E_n=-\frac{\lambda^2}{2m}+C \tag{8}$$

C 为积分常数．由于 $\lambda=0$ 时，$H=H_0$，$E_n=E_n^{(0)}$，所以 $C=E_n^{(0)}$，代入式(8)，即得

$$E_n=E_n^{(0)}-\frac{\lambda^2}{2m} \tag{9}$$

解二 将 H 写成

$$\begin{aligned} H &=\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda p}{m}+V(x) \\ &=\frac{P^2}{2m}+V(x)-\frac{\lambda^2}{2m} \end{aligned} \tag{10}$$

其中

$$P=p+\lambda \tag{11}$$

在动量表象中，

$$x=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial P} \tag{12}$$

因此

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right) \tag{13}$$

$$H=\frac{P^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial P}\right)-\frac{\lambda^2}{2m} \tag{14}$$

H 和 H_0 的差别，除常数项外，无非是 p 换成 P，后面这一点对能级没有影响．由此可知

$$E_n=E_n^{(0)}-\frac{\lambda^2}{2m} \tag{15}$$

5.8 将电荷为 q 的一维谐振子放在均匀电场 $\mathscr{E}$ 中，总能量算符成为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\mathscr{E}x \tag{1}$$

求各束缚态能级和$\bar{x}$.

解 本题将采取和题 3.12 不同的解法．首先，利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p,H]=q\mathscr{E}-m\omega^2x \tag{2}$$

在任何束缚态 ψ_n 下求平均值，得到

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p \right\rangle_n = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle pH - Hp\rangle_n = 0$$

所以

$$\langle x\rangle_n = q\mathscr{E}/m\omega^2 \tag{3}$$

其次，视电场强度 $\mathscr{E}$ 为参变量，式(1)对 $\mathscr{E}$ 求导，得到

$$\partial H/\partial\mathscr{E} = -qx \tag{4}$$

利用 F-H 定理以及式(3)，可得

$$\frac{\partial E_n}{\partial\mathscr{E}} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial\mathscr{E}} \right\rangle_n = -q^2\mathscr{E}/m\omega^2 \tag{5}$$

积分，即得

$$E_n = E_n(0) - q^2\mathscr{E}^2/2m\omega^2 \tag{6}$$

$E_n(0)$ 为 $\mathscr{E}=0$ 时的能级，即自由谐振子的能级，

$$E_n(0) = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{7}$$

将式(7)代入式(6)，最后得到能级公式

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{q^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2} \tag{8}$$

5.9 质量为 μ 的粒子在中心力场中运动，

$$V(r) = \lambda r^\nu, \qquad -2<\nu, \qquad \nu/\lambda>0, \tag{1}$$

试利用 F-H 定理及位力定理分析能级构造式对于 $\hbar$、λ、μ 的依赖关系．

解 能量算符为

$$H = T+V = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \lambda r^\nu \tag{2}$$

令 $\beta=\hbar^2/2\mu$，λ 和 β 是独立的参数．易见

$$\beta\frac{\partial H}{\partial\beta} = T, \qquad \lambda\frac{\partial H}{\partial\lambda} = V \tag{3}$$

根据 F-H 定理，对于任何一个束缚态，有

$$\langle T\rangle = \beta\partial E/\partial\beta \tag{4}$$

$$\langle V\rangle=\lambda\partial E/\partial\lambda \tag{5}$$

两式相加，即得

$$\beta\frac{\partial E}{\partial\beta}+\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda}=\langle T+V\rangle=E \tag{6}$$

而由位力定理则得

$$\langle T\rangle=\frac{\nu}{2}\langle V\rangle$$

亦即

$$\beta\frac{\partial E}{\partial\beta}=\frac{\nu}{2}\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda} \tag{7}$$

将式(7)代入式(6)，可得

$$\left(1+\frac{\nu}{2}\right)\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda}=E \tag{8}$$

$$\left(1+\frac{2}{\nu}\right)\beta\frac{\partial E}{\partial\beta}=E \tag{9}$$

式(8)积分，得到 E 和 λ 间构造关系

$$E=C_1\lambda^{2/(2+\nu)} \tag{10}$$

C_1 为“积分常数”，与 λ 无关．式(9)积分，得到 E 和 β 间构造关系

$$E=C_2\beta^{\nu/(2+\nu)} \tag{11}$$

C_2 与 ν 无关．比较式(10)和(11)，可知

$$E=C\lambda^{2/(2+\nu)}\beta^{\nu/(2+\nu)}=C\lambda^{2/(2+\nu)}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu/(2+\nu)} \tag{12}$$

C 与 λ、β 无关，是无量纲纯数(和 ν 及量子数有关)．容易验证，上式是量纲正确的唯一可能的能量构造式．

由式(12)易见(注意 $\nu>-2$)，当作用强度 $|\lambda|$ 增加时，$|E|$ 随之增加，能级间隔增大．如 λ 与粒子质量无关，则当 $\nu>0$，μ 增大时 $|E|$ 减小；当 $\nu<0$，μ 增大时 $|E|$ 增大．

如 λ 与 μ 无关，由式(2)、(4)还可看出

$$\mu\frac{\partial E}{\partial\mu}=-\langle T\rangle<0 \tag{13}$$

即粒子质量的增大总是导致能级的代数值下降．

由式(12)还可看出，如果 $\lambda\propto\mu^{\nu/2}$，则 E 和 μ 无关．属于这种情况的著名例子就是谐振子，即

$$V(r)=\lambda r^{\nu}=\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

$$\left(\nu=2,\qquad \lambda=\frac{1}{2}\mu\omega^2.\right)$$

能级为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega.\qquad N=0,1,2,\cdots$$

如 ω 保持不变，E_N 就与 μ 无关．

5.10 粒子在对数函数型势场中运动，

$$V(r)=C\ln\left(\frac{r}{r_0}\right),\qquad C,r_0>0$$

C、r_0 是与质量无关之常数，试证明：(a) 各束缚态动能平均值相等．(b) 能级间距与粒子质量无关．

解 总能量算符为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+C\ln\left(\frac{r}{r_0}\right)\tag{1}$$

视质量 μ 为参变量，显然有

$$-\mu\frac{\partial H}{\partial\mu}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}=T\tag{2}$$

利用 F-H 定理，即得

$$-\mu\frac{\partial E_n}{\partial\mu}=\langle T\rangle_n\tag{3}$$

如对坐标作尺度变换，令

$$\boldsymbol{R}=\sqrt{\mu}\,\boldsymbol{r}\tag{4}$$

则能量算符可以重新写成

$$H\longrightarrow\tilde{H}=-\frac{\hbar^2}{2}\nabla_R^2+C[\ln R-\ln(r_0\sqrt{\mu})]\tag{5}$$

这时有

$$-\mu\frac{\partial\tilde{H}}{\partial\mu}=\frac{C}{2} \tag{6}$$

利用 F-H 定理即得

$$-\mu\frac{\partial E_n}{\partial\mu}=\frac{C}{2} \tag{7}$$

比较式(3)、(7),即得

$$(T)_n=\frac{C}{2}, \tag{8}$$

至此已经证明了命题(a). 对式(7)积分,得到

$$E_n=-\frac{C}{2}\ln\mu+\epsilon_n \tag{9}$$

ϵ_n 为"积分常数",与 μ 无关. 任何两个能级之差为

$$E_n-E_k=\epsilon_n-\epsilon_k \tag{10}$$

与质量 μ 无关. 这就是命题(b).

命题(a)也可以直接用位力定理来证明.

5.11 粒子在势场

$$V(x)=V_0|x/a|^\nu \qquad V_0,a>0 \tag{1}$$

中运动,求 $\nu\longrightarrow\infty$时能级和各参数的依赖关系.

解 总能量算符为

$$H=T+V=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_0|x/a|^\nu \tag{2}$$

从量纲关系看,如以 x_0 表示特征长度,应有

$$E\sim\frac{\hbar^2}{\mu x_0^2}\sim V_0x_0^\nu/a^\nu \tag{3}$$

不难解出

$$x_0\sim\left(\frac{\hbar^2a^\nu}{\mu V_0}\right)^{\frac{1}{\nu+2}}\xrightarrow{\nu\longrightarrow\infty}a \tag{4}$$

$$E\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}}V_0^{2/(\nu+2)}a^{-2\nu/(\nu+2)}\xrightarrow{\nu\longrightarrow\infty}\hbar^2/\mu a^2 \tag{5}$$

特征长度和能级构造均与 V_0 无关,这个结论也可以引用题 5.9 的

式(12)而得出，只需取

$$\lambda=V_0a^{-\nu}$$

并令 $\nu\longrightarrow\infty$. 事实上，由式(1)不难看出

$$\nu\longrightarrow\infty,\qquad V(x)\longrightarrow\begin{cases}0, & |x|<a\\ \infty, & |x|>a\end{cases}\tag{6}$$

这正是宽为 $2a$ 的无限深直角势阱，能级为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2},\qquad n=1,2,3,\cdots\tag{7}$$

当 ν 有限时，根据位力定理，对任何束缚态，动能平均值和势能平均值间有关系

$$\frac{2}{\nu}\langle T\rangle=\langle V\rangle\tag{8}$$

则当 $\nu\longrightarrow\infty$，就有

$$\langle V\rangle\longrightarrow 0,\qquad \langle T\rangle\longrightarrow E\tag{9}$$

这个结论，也和无限深势阱问题相符合(参看上册题 1.4).

5.12 粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动，试证明：在径向量子数 n_r 相同的各束缚态中，角量子数 l 越大，能级越高.

证 中心力场中束缚态波函数(取为 H,l^2,l_z 的共同本征函数)可以表示成

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\tag{1}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u(r)=Eu(r)\tag{2}$$

及边界条件

$$r\longrightarrow 0,\infty,\qquad u(r)\longrightarrow 0\tag{3}$$

式(2)作为能量本征方程，和一维问题类似，$u(r)$ 相当于一维问题中的能量本征函数，能量算符相当于

$$H(l,r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(l,r)\tag{4}$$

$$V(l,r)=V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\equiv V_l(r) \tag{5}$$

$V_l(r)$称为等效势能，其中和角量子数 l 有关的第二项是离心势能．式(2)中能量本征值一般记为

$$E=E_{nl},\qquad n=1,2,\cdots\qquad l=0,1,2,\cdots \tag{6}$$

n 是属于同一个 l 值的能级编号数，其次序为

$$E_{1l}<E_{2l}<E_{3l}<\cdots \tag{7}$$

通常 $n=n_r+1$，n_r 为径向量子数(径向波函数的节点数)．

式(2)和(4)中，视 l 为参变数，显然有

$$\frac{\partial H(l,r)}{\partial l}=\frac{\partial V_l(r)}{\partial l}=\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu r^2}>0 \tag{7'}$$

利用 F-H 定理，就有

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{nl}}{\partial l}&=\left\langle\frac{\partial H(l,r)}{\partial l}\right\rangle_{nl}\\&=\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}>0\end{aligned} \tag{8}$$

因此 E_{nl} 随 l 之增加而升高．n 固定时，l 越大，E_{nl} 越高．l 之最小值为 0，故基态必为 s 态($l=0$)．

如能级已经求出，利用式(8)就可以得到离心势能的平均值：

$$\left\langle l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right\rangle_{nl}=\frac{l(l+1)}{2l+1}\frac{\partial E_{nl}}{\partial l} \tag{9}$$

5.13 质量为 μ 的粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动，处于基态．已知 $V(r)$ 是 r 之单调渐增函数，即 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r>0$．$V(r)$ 与质量 μ 无关．试证明：在任意给定的球面(半径 R)内粒子出现的概率将随粒子质量的增加而增加．

证 基态必为 s 态($l=0$)，波函数可以写成

$$\psi(r)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{u(r)}{r} \tag{1}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$u''(r)=\frac{d^2}{dr^2}u(r)=\frac{2\mu}{\hbar^2}[V(r)-E]u(r) \tag{2}$$

设 ψ 已经归一化，则粒子在球面(半径 R)内出现概率为

$$P(R)=\int_0^R u^2(r)dr \tag{3}$$

令

$$G(R)=\frac{1}{2}\frac{\partial P(R)}{\partial \mu}=\int_0^R u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial \mu}dr \tag{4}$$

需要证明：对于一切 R 值，$G(R)>0$.

对于任何质量值，概率 $P(R)$ 显然满足

$$P(0)=0, \qquad P(\infty)=1 \tag{5}$$

因此 $G(R)$ 满足

$$G(0)=G(\infty)=0 \tag{6}$$

所以，要证明 $G(R)>0$，只需证明 $G(R)$ 只有极大，没有极小．为此，只需证明

$$\frac{dG}{dR}=0 \text{ 处} \qquad \frac{d^2G}{dR^2}<0$$

由定义式(4)，易见

$$\frac{d}{dR}G(R)=u(R)\frac{\partial u(R)}{\partial \mu} \tag{7}$$

基态波函数没有节点，$u(R)\neq 0$，因此

$$\frac{dG}{dR}=0 \text{ 处} \qquad \frac{\partial u(R)}{\partial \mu}=0 \tag{8}$$

式(7)再求导数，得到

$$\frac{d^2G}{dR^2}=u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial \mu}+u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial \mu} \tag{9}$$

利用式(8)，可知

$$\frac{dG}{dR}=0 \text{ 处} \qquad \frac{d^2G}{dR^2}=u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial \mu} \tag{10}$$

现在只需证明上式右端小于 0.

以 $u(r)\frac{\partial}{\partial \mu}$ 作用于式(2)两端，得到

$$u\frac{\partial u''}{\partial\mu}=\frac{2}{\hbar^2}\left[Vu^2-Eu^2-\mu\frac{\partial E}{\partial\mu}u^2+\mu(V-E)u\frac{\partial u}{\partial\mu}\right] \tag{11}$$

而由 F-H 定理，

$$-\mu\frac{\partial E}{\partial\mu}=-\mu\left\langle\frac{\partial H}{\partial\mu}\right\rangle=\left\langle\frac{p^2}{2\mu}\right\rangle=E-\overline{V} \tag{12}$$

将式(12)代入式(11)，得到

$$u\frac{\partial u''}{\partial\mu}=\frac{2}{\hbar^2}(V-\overline{V})u^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E)u\frac{\partial u}{\partial\mu} \tag{13}$$

另一方面，以 $\partial u/\partial\mu$ 乘式(2)，则得

$$u''\frac{\partial u}{\partial\mu}=\frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E)u\frac{\partial u}{\partial\mu} \tag{14}$$

式(13)减式(14)，并积分 $\int_0^R\cdots\mathrm{d}r$，得到

$$\int_0^R\left(u\frac{\partial u''}{\partial\mu}-u''\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r=\frac{2}{\hbar^2}\int_0^R(V-\overline{V})u^2\mathrm{d}r \tag{15}$$

在题设的 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r>0$ 条件下，可以证明(见上册题 5.6)

$$\int_0^R(V-\overline{V})u^2\mathrm{d}r<0 \tag{16}$$

而式(15)右端为

$$\begin{aligned}&\int_0^R\left(u\frac{\partial u''}{\partial\mu}-u''\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r\\&=\int_0^R\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(u\frac{\partial u'}{\partial\mu}-u'\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r\\&=u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial\mu}-u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial\mu}\\&\quad-u(0)\frac{\partial u'(0)}{\partial\mu}+u'(0)\frac{\partial u(0)}{\partial\mu}\end{aligned}$$

在 $r=0$ 处，$u(0)=0$，因此 $\partial u(0)/\partial\mu=0$，所以

$$\int_0^R\left(u\frac{\partial u''}{\partial\mu}-u''\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r=u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial\mu}-u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial\mu} \tag{17}$$

将式(16)、(17)一起代入式(15)，即得

$$u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial \mu}-u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial \mu}<0 \tag{18}$$

此式对任何 R 值成立．再利用式(8)和(10)，即得

$$\text{在}\frac{dG}{dR}=0\text{处},\qquad \frac{d^2G}{dR^2}<0 \tag{19}$$

证明完毕①.

① 本题取自 C. Quigg and J. L. Rosner, *Physics Reports*, **56**(1979), 167 ~ 235.

第六章　角动量（续）

6.1　设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$(\boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征态记为$|jm\rangle$，满足本征方程(取 $\hbar=1$)

$$\boldsymbol{J}^2|jm\rangle=j(j+1)|jm\rangle$$
$$J_z|jm\rangle=m|jm\rangle$$

定义算符

$$T=\sum_{ijk}\varepsilon_{ijk}J_iJ_jJ_k \tag{1}$$

(ε_{ijk}为 Levi-Civita 符号)．试问$|jm\rangle$是否是 T 的本征态，如果是，求出 T 的相应本征值；如不是，试以$|jm\rangle$去构造出 T 的任何一个本征态．

解　容易看出式(1)可以表示成

$$T=\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J})=\boldsymbol{J}\cdot(\mathrm{i}\boldsymbol{J})=\mathrm{i}\boldsymbol{J}^2 \tag{1'}$$

所以$|jm\rangle$是 T 的本征态，本征值为 $T=\mathrm{i}j(j+1)$

6.2　设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 对易，证明

$$\boxed{[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}} \qquad (\text{取 } \hbar=1) \tag{1}$$

证一　设 $\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)$．则

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}=n_xJ_x+n_yJ_y+n_zJ_z \tag{2}$$

利用角动量的基本对易式

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\boldsymbol{J} \tag{3}$$

即得

$$[J_x,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=n_y[J_x,J_y]+n_z[J_x,J_z]$$
$$=i(n_yJ_z-n_zJ_y)=\mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})_x$$

此即式(1)的 x 分量．同理可证 y 分量和 z 分量公式．

证二　利用矢量算符三重矢积公式

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\boldsymbol{C})}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$
$$=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$
（条件：$\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 对易）

即得

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})-(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})\boldsymbol{J}=\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J})$$

再利用基本对易式 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\boldsymbol{J}$，即得式(1).

6.3 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量，$\boldsymbol{n}$、$\boldsymbol{m}$ 为任意两个方向的单位矢量，计算 $[J_m,J_n]$. 其中 $J_m=\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{J}$，$J_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$

解一 利用上题结果，即得(取 $\hbar=1$)

$$[J_m,J_n]=\boldsymbol{m}\cdot[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\boldsymbol{m}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})$$
$$=\mathrm{i}(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{J} \qquad (1)$$

解二 设 $\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)$，$\boldsymbol{m}=(m_x,m_y,m_z)$，则

$$J_m=m_xJ_x+m_yJ_y+m_zJ_z$$
$$J_n=n_xJ_x+n_yJ_y+n_zJ_z$$

因此

$$[J_m,J_n]=m_xn_y[J_x,J_y]+m_yn_x[J_y,J_x]+\cdots$$
$$=(m_xn_y-m_yn_x)\mathrm{i}J_z+\cdots$$
$$=\mathrm{i}(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{J} \qquad (1)$$

讨论：如 $\boldsymbol{n}\perp\boldsymbol{m}$，令 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n}$，则 $\boldsymbol{k}$ 也是单位矢量，而且 $\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{n}$ 互相垂直，三者具有对称的关系：

$$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n},\qquad \boldsymbol{m}=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k},\qquad \boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{m} \qquad (2)$$

这时 $\boldsymbol{J}$ 在 $\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{n}$ 三个方向的投影有下列关系：

$$[J_k,J_m]=\mathrm{i}J_n,\quad [J_m,J_n]=\mathrm{i}J_k,\quad [J_n,J_k]=\mathrm{i}J_m \qquad (3)$$

这是基本对易式 $[J_x,J_y]=\mathrm{i}J_z$ 等的推广.

6.4 设算符 F 和角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 对易，即 F 为标量算符，证明：

(a) 在 $(\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下，F 的平均值和量子数 m 无

关；

(b) 给定 j 后，在$|jm\rangle$子空间中，F 可以表示成常数矩阵．

证 令 $J_{\pm}=J_x\pm iJ_y$，根据题设，

$$[F,J_{\pm}]=0,\qquad [F,J_z]=0 \tag{1}$$

(a) 根据角动量一般理论，

$$J_+|jm\rangle=a_m|jm+1\rangle,\qquad (a_m\text{ 为实数}) \tag{2}$$

取共轭，成为

$$\langle jm|J_-=a_m\langle jm+1| \tag{2'}$$

二式取内积，得到

$$\langle jm|J_-J_+|jm\rangle=(a_m)^2\langle jm+1|jm+1\rangle=(a_m)^2$$

亦即

$$J_-J_+|jm\rangle=(a_m)^2|jm\rangle \tag{3}$$

现在，在$|jm+1\rangle$态下计算 F 的平均值，并利用式(1)至(3)，得到

$$\begin{aligned}\langle jm+1|F|jm+1\rangle&=\langle jm|J_-FJ_+|jm\rangle/(a_m)^2\\&=\langle jm|FJ_-J_+|jm\rangle/(a_m)^2\\&=\langle jm|F|jm\rangle\end{aligned} \tag{4}$$

依此类推，对于属于同一个 j 的 m、m'，总有

$$\langle jm'|F|jm'\rangle=\langle jm|F|jm\rangle \tag{5}$$

即$\langle F\rangle$和 m 无关．

(b) 考虑到$|jm\rangle$是 J_z 的本征态(本征值 m)，利用 F 和 J_z 的对易性，易得

$$\begin{aligned}m\langle jm'|F|jm\rangle&=\langle jm'|FJ_z|jm\rangle\\&=\langle jm'|J_zF|jm\rangle\\&=m'\langle jm'|F|jm\rangle\end{aligned} \tag{6}$$

由此可知，如 $m'\neq m$，则$\langle jm'|F|jm\rangle=0$，亦即

$$\langle jm'|F|jm\rangle=\langle jm|F|jm\rangle\delta_{mm'}=f(j)\delta_{mm'} \tag{7}$$

其中

$$\begin{aligned}f(j)&=\langle jj|F|jj\rangle=\langle j,j-1|F|j,j-1\rangle\\&=\cdots=\langle jm|F|jm\rangle=\cdots\end{aligned}$$

因此，当 j 给定后，在$|jm\rangle$子空间中，F 的非对角矩阵元全部为 0，

对角矩阵元全部等于 $f(j)$，所以 F 的矩阵表示为

$$F=f(j)I \tag{8}$$

(I 为单位矩阵)，即 F 相当于数 $f(j)$.

6.5 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$J_{\pm}=J_x\pm iJ_y$，取 $\hbar=1$

(a) 证明

$$J_z^n J_{\pm}=J_{\pm}(J_z\pm 1)^n, \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{1}$$

(b) 证明

$$\boxed{\begin{aligned} e^{i\lambda J_z}J_x e^{-i\lambda J_z}&=J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda\\ e^{i\lambda J_z}J_y e^{-i\lambda J_z}&=J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda\end{aligned}} \tag{2}$$

证 (a) 利用基本对易式 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\boldsymbol{J}$，易得

$$[J_z,J_{\pm}]=\pm J_{\pm} \tag{3}$$

亦即

$$J_zJ_{\pm}=J_{\pm}(J_z\pm 1) \tag{3'}$$

反复应用此式，即得

$$J_z^n J_{\pm}=J_{\pm}(J_z\pm 1)^n, \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{4}$$

因此，对于任何可以表示成 J_z 正幂级数的函数(算符) $f(J_z)$，有

$$\boxed{f(J_z)J_{\pm}=J_{\pm}f(J_z\pm 1)} \tag{5}$$

例如

$$e^{i\lambda J_z}J_{\pm}=J_{\pm}e^{i\lambda J_z}e^{\pm i\lambda}. \qquad (\lambda\text{ 为常数}) \tag{6}$$

(b) 以 $e^{-i\lambda J_z}$ 右乘式(6)，得到

$$\boxed{\begin{aligned} e^{i\lambda J_z}J_+e^{-i\lambda J_z}&=J_+e^{i\lambda}\\ e^{i\lambda J_z}J_-e^{-i\lambda J_z}&=J_-e^{-i\lambda}\end{aligned}} \tag{7}$$

二式相加、减，利用

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-), \qquad J_y=\frac{1}{2i}(J_+-J_-) \tag{8}$$

即得式(2).

证明式(7)也可用参数微分法，即视 λ 为参变数，令

$$f(\lambda)=e^{i\lambda J_z}J_+e^{-i\lambda J_z}$$

注意 $f(0)=J_+$. 上式对 λ 求导,得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}[J_z,J_+]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}=\mathrm{i}f(\lambda)$$

其解为

$$f(\lambda)=f(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}=J_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}$$

此即式(7)中第一式. 上式取共轭,并将 λ^* 再换成 λ,即得式(7)第二式.

式(2)中 x、y、z 轮换,还可以得到以下各式:

$$\left.\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_x}J_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_x}&=J_y\cos\lambda-J_z\sin\lambda\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_x}J_z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_x}&=J_y\sin\lambda+J_z\cos\lambda\end{aligned}\right\}\tag{9}$$

$$\left.\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_y}J_z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}&=J_z\cos\lambda-J_x\sin\lambda\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_y}J_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}&=J_z\sin\lambda+J_x\cos\lambda\end{aligned}\right\}\tag{10}$$

式(2)、(9)、(10)在有关转动变换的问题中经常用到.

6.6 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符,$\boldsymbol{n}$ 为任意给定方向的单位矢量,λ 为实数. 令 $J_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$,并取 $\hbar=1$,证明

$$\boxed{\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_n}\boldsymbol{J}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_n}=&nJ_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}\cos\lambda\\ &+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda\end{aligned}}\tag{1}$$

证 视 λ 为参变量,但 $\boldsymbol{n}$ 固定不变,令

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_n}\boldsymbol{J}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_n}\tag{2}$$

注意

$$\boldsymbol{f}(0)=\boldsymbol{J},\qquad\qquad \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}(\lambda)=J_n\tag{3}$$

式(2)对 λ 求导,并利用公式(见题 6.2)

$$[\boldsymbol{J},J_n]=\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\tag{4}$$

得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\boldsymbol{f}(\lambda)=-\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_n}[\boldsymbol{J},J_n]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_n}=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)\tag{5}$$

再以 $\boldsymbol{n}\times$式(5),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)]=\boldsymbol{n}\times[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)]$$

$$=\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f})-\boldsymbol{f}=\boldsymbol{n}J_n-\boldsymbol{f}(\lambda) \qquad (6)$$

式(5)±i×式(6),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{f}(\lambda)\pm\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)]$$

$$=\mp\mathrm{i}[\boldsymbol{f}(\lambda)\pm\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}J_n]$$

由于 $\boldsymbol{n}J_n$ 与 λ 无关,上式即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{f}(\lambda)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}J_n]$$

$$=-\mathrm{i}[\boldsymbol{f}(\lambda)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}J_n] \qquad (7)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{f}(\lambda)-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}J_n]$$

$$=\mathrm{i}[\boldsymbol{f}(\lambda)-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}J_n] \qquad (7')$$

注意,$\boldsymbol{f}(\lambda)$为 Hermite 算符,所以式(7′)为式(7)的共轭方程,它们的解显然是

$$\boldsymbol{f}(\lambda)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}J_n=[\boldsymbol{f}(0)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0)-\boldsymbol{n}J_n]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}$$

$$=[\boldsymbol{J}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{n}J_n]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}$$

$$=[(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \qquad (8)$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda)-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}J_n=[(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} \qquad (8')$$

式(8′)是式(8)的共轭方程. 二式相加,即得

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{n}J_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}\cos\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda \qquad (9)$$

此即式(1),其中

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{J}-\boldsymbol{n}J_n \qquad (10)$$

故式(9)也可以写成

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{n}J_n(1-\cos\lambda)+\boldsymbol{J}\cos\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda \qquad (9')$$

如 $\boldsymbol{J}$ 是自旋 1/2 粒子的自旋角动量,即

$$\boldsymbol{J}\longrightarrow\boldsymbol{s}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

式(1)就变成上册题 6.26 式(1).

如 $\boldsymbol{n}$ 为正 z 轴,即 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_3$,则

$$J_n=J_z,\qquad \boldsymbol{n}J_n=\boldsymbol{e}_3J_z,\qquad \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}=\boldsymbol{e}_2J_x-\boldsymbol{e}_1J_y$$

代入式(9′),就得到上题式(2).

6.7 以 $\boldsymbol{n}$ 表示(θ_0,φ_0)方向的单位矢量，即

$$\boldsymbol{n}=(\sin\theta_0\cos\varphi_0,\sin\theta_0\sin\varphi_0,\cos\theta_0) \tag{1}$$

轨道角动量算符 $\boldsymbol{l}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影为

$$l_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{l}=l_x\sin\theta_0\cos\varphi_0+l_y\sin\theta_0\sin\varphi_0+l_z\cos\theta_0 \tag{2}$$

证明 $\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}Y_{lm}(\theta,\varphi)$是 l_n 的本征态，本征值为 m.（取 $\hbar=1$）

证一 算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}$相当于将体系绕 y 轴转 θ_0 角，算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}$相当于将体系绕 z 轴转 φ_0 角，Y_{lm}原为 l_z 的本征态，本征值为 m. 经过两次转动，固定于体系的坐标系（即随体系一起转动的坐标系）的 z' 轴（开始时和实验室 z 轴重合）已转到实验室坐标系的(θ_0,φ_0)方向，即 $\boldsymbol{n}$ 方向，Y_{lm}变成了 ψ，即变成了 l_n 的本征态. 本征值是状态的物理属性，不受坐标变换的影响，故仍为 m.

证二 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$是 l_z 的本征态，满足本征方程

$$l_z Y_{lm}=mY_{lm} \tag{3}$$

利用题 6.5 式(10)（取 $\lambda=-\theta_\theta$），可得公式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}l_z=(l_z\cos\theta_0+l_x\sin\theta_0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}$$

再利用题 6.5 式(2)，可得

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}(l_z\cos\theta_0+l_x\sin\theta_0)\\&\quad=[l_z\cos\theta_0+(l_x\cos\varphi_0+l_y\sin\varphi_0)\sin\theta_0]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\\&\quad=l_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\end{aligned}$$

因此

$$\boxed{l_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}l_z} \tag{4}$$

将上式作用于 Y_{lm}，并利用式(3)，即得

$$l_n(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}Y_{lm})=m\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}Y_{lm} \tag{5}$$

可见 $\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}Y_{lm}$是 l_n 的本征函数，本征值为 m.

6.8 对于角动量算符$(\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态$|jm\rangle$，证明

(a) J_x 和 J_y 的任何奇幂次式的平均值为 0；

(b) 对于任何 m'值$(m'=j,j-1,\cdots,-j)$，J_x 或 J_y 取本征值

$\pm m'$的概率相等(取 $\hbar=1$).

证 (a) 根据升降算符的定义和基本性质,

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),\qquad J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(J_+-J_-) \tag{1}$$

$$J_+|jm\rangle\longrightarrow|jm\pm1\rangle \tag{2}$$

易知 J_x、J_y 的任何奇次式(如 J_x^3,$J_xJ_y^2$ 等等)均可表示成 J_+、J_- 的奇次式,而后者作用于$|jm\rangle$的结果,将得到各种$|jm'\rangle$,$m'-m=$奇数,因此 $m'\neq m$. 由此可见

$$\langle jm|(J_x,J_y\text{奇次式})|jm\rangle=\sum_{\substack{m'\\ m'\neq m}}C_{m'}\langle jm|jm'\rangle=0$$

证明完毕.

(b) 设在$|jm\rangle$态中测得 $J_x=m'$的概率为 $w(m')$,测得 $J_x=-m'$的概率为 $w(-m')$,下面证明 $w(m')=w(-m')$.

如 j 为正整数,作 J_x 的奇次式

$$f(J_x)=J_x(J_x^2-1^2)(J_x^2-2^2)\cdots(J_x^2-j^2)$$

其中不含因子$(J_x^2-m'^2)$,则

$$f(m')=-f(-m')\neq0$$

$$f(m'')=0,\qquad m''\neq\pm m'$$

根据(a)中的证明,在$|jm\rangle$态下 $f(J_x)$平均值应等于 0,因此

$$\begin{aligned}\langle f(J_x)\rangle&=\sum_{m''}f(m'')w(m'')\\&=f(m')[w(m')-w(-m')]=0\end{aligned}$$

所以 $w(m')=w(-m')$.

如 j 为半奇数,作 J_x 的奇次式

$$f(J_x)=J_x\left[J_x^2-\left(\frac{1}{2}\right)^2\right]\left[J_x^2-\left(\frac{3}{2}\right)^2\right]\cdots[J_x^2-j^2]$$

其中不含因子$[J_x^2-m'^2]$. 仍可证明 $w(m')=w(-m')$.

对 J_y 取$\pm m'$的概率可以作出类似的证明.

最后,证明在$|jm\rangle$态下测得 $J_x=m'$的概率等于测得 $J_y=m'$的概率.

对于给定的 j,$J_x=m'$的本征态为(见上题,相当于 $\varphi_0=0$,$\theta_0=$

$\pi/2$)

$$|J_x=m'\rangle=e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle \tag{3}$$

因此，在$|jm\rangle$态下测得$J_x=m'$的概率为

$$w(J_x=m')=|\langle jm|e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle|^2 \tag{4}$$

而$J_y=m'$的本征态为(相当于上题中$\theta_0=\varphi_0=\pi/2$)

$$|J_y=m'\rangle=e^{-i\frac{\pi}{2}J_x}e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle \tag{5}$$

在$|jm\rangle$态下测得$J_y=m'$的概率为

$$\begin{aligned}w(J_y=m')&=|\langle jm|e^{-i\frac{\pi}{2}J_x}e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle|^2\\&=|e^{-im\pi/2}\langle jm|e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle|^2\end{aligned} \tag{6}$$

由于$|e^{-im\pi/2}|=1$，所以$w(J_x=m')=w(J_y=m')$

讨论：对于任何垂直于z轴的方向$\boldsymbol{n}(\theta_0=\pi/2,\varphi_0$任意)，$J_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$取本征值$m'$的本征态为

$$|J_n=m'\rangle=e^{-i\varphi_0J_z}e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle \tag{7}$$

因此，在$|jm\rangle$态下测得$J_n=m'$的概率为

$$w(J_n=m')=|\langle jm|e^{-i\varphi_0J_z}e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle|^2$$

由于

$$\langle jm|e^{-i\varphi_0J_z}=\langle jm|e^{\quad im\varphi_0}$$

显然

$$\begin{aligned}w(J_n=m')&=w(J_x=m')=w(J_y=m')\\&=|\langle jm|e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle|^2\end{aligned} \tag{8}$$

6.9 角动量为$j[\boldsymbol{J}^2=j(j+1)]$的体系，处于$J_z$取最大值$(m=j)$的本征态$|jj\rangle$. 设$z'$轴和$z$轴夹角为$\theta$，求在$|jj\rangle$态下测得$J_{z'}=j$的概率$P(\theta)$. 先讨论$j=1/2$的情形，再推广到一般情形.

解 设z'轴是z轴绕y轴旋转θ角而成，则$J_{z'}=j$的本征态为

$$|j,J_{z'}=j\rangle=e^{-i\theta J_y}|jj\rangle \tag{1}$$

因此，所求概率为

$$P(\theta)=|\langle jj|e^{-i\theta J_y}|jj\rangle|^2 \tag{2}$$

对于自旋 1/2 体系，$j=1/2$，$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$，$\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 算符，

$$|jj\rangle=\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=|+\rangle$$

$|+\rangle$表示 $\sigma_z=1$ 的本征态．利用公式

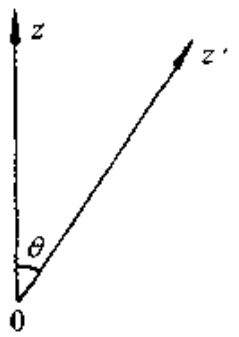


图 6.9

$$e^{i\theta\sigma_y/2}=\cos\frac{\theta}{2}-i\sigma_y\sin\frac{\theta}{2} \tag{3}$$

即得

$$P(\theta)=|\langle+|\left(\cos\frac{\theta}{2}-i\sigma_y\sin\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle|^2$$

$$=\cos^2\frac{\theta}{2} \tag{4}$$

计算中利用了$\langle+|\sigma_y|+\rangle=0$.

对于一般的角动量 j，$|jj\rangle$态相当于 $2j$ 个自旋 1/2 粒子的体系处于全体粒子自旋“向上”的状态，即$|jj\rangle$可以等价地表示为

$$|jj\rangle=|+\rangle_1|+\rangle_2\cdots|+\rangle_{2j} \tag{5}$$

而

$$J_z=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2j}(\sigma_k)_y$$

各$(\sigma_k)_y$彼此对易，因此，

$$e^{-i\theta J_y}=\prod_{k=1}^{2j}\left[\cos\frac{\theta}{2}-i(\sigma_k)_y\sin\frac{\theta}{2}\right] \tag{6}$$

代入式(2)，即得

$$P(\theta)=\left|\langle jj|\prod_{k=1}^{2j}\left[\cos\frac{\theta}{2}-i(\sigma_k)_y\sin\frac{\theta}{2}\right]|jj\rangle\right|^2$$

其中$(\sigma_k)_y$作用于$|+\rangle_k$，变成$i|-\rangle$，对 $P(\theta)$无贡献，因此

$$\boxed{P(\theta)=\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{4j}} \tag{7}$$

6.10 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量，在$\langle\boldsymbol{J}^2,J_z\rangle$表象中定义矩阵

$$d^{j}_{m'm}(\lambda)\equiv\langle jm'|e^{-i\lambda J_y}|jm\rangle,\qquad(\lambda\text{ 为实数})\tag{1}$$

试就 $j=\frac{1}{2}$ 的情形，求出这个矩阵(取 $\hbar=1$).

解 $j=\frac{1}{2}$，$\boldsymbol{J}^2=\frac{3}{4}$，$J_x^2=J_y^2=J_z^2=\frac{1}{4}$，$\boldsymbol{J}$ 的任何一个分量的本征值均为 $\pm\frac{1}{2}$. 可以用电子的自旋作为 $\boldsymbol{J}$ 的物理模型，令

$$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\tag{2}$$

$|jm\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ 记作 $\left|\frac{1}{2}\right\rangle$，$\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$ 记作 $\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$. J_y 的矩阵元为

$$\begin{aligned}&\left\langle\frac{1}{2}|J_y|\frac{1}{2}\right\rangle=0,&&\left\langle-\frac{1}{2}|J_y|-\frac{1}{2}\right\rangle=0\\&\left\langle\frac{1}{2}|J_y|-\frac{1}{2}\right\rangle=-\frac{i}{2},&&\left\langle-\frac{1}{2}|J_y|\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{i}{2}\end{aligned}\tag{3}$$

利用公式(见上册题 6.22)

$$\begin{aligned}e^{-i\lambda J_y}=e^{-i\frac{\lambda}{2}\sigma_y}&=\cos\frac{\lambda}{2}-i\sigma_y\sin\frac{\lambda}{2}\\&=\cos\frac{\lambda}{2}-2iJ_y\sin\frac{\lambda}{2}\end{aligned}\tag{4}$$

代入式(1)，并利用式(3)，即得

$$\begin{aligned}&d^{1/2}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\lambda)=d^{1/2}_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(\lambda)=\cos\frac{\lambda}{2}\\&d^{1/2}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(\lambda)=-\sin\frac{\lambda}{2}\\&d^{1/2}_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\lambda)=\sin\frac{\lambda}{2}\end{aligned}\tag{5}$$

亦即

$$d^{1/2}_{m'm}(\lambda)=\begin{bmatrix}\cos\frac{\lambda}{2}&-\sin\frac{\lambda}{2}\\\sin\frac{\lambda}{2}&\cos\frac{\lambda}{2}\end{bmatrix}\tag{5'}$$

6.11 同上题，就 $j=1$ 的情形，求矩阵

$$d^{j}_{m'm}(\lambda)\equiv\langle jm'|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}|jm\rangle \tag{1}$$

解 $j=1$ 时，J_y 的本征值为 1，0，−1，因此 J_y 满足代数方程

$$J_y^3=J_y \tag{2}$$

而 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}$ 可以化成(参看上册题 6.10)

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}=1-\mathrm{i}J_y\sin\lambda-(1-\cos\lambda)J_y^2 \tag{3}$$

利用升降算符 $J_\pm$ 对 $|jm\rangle$ 的作用公式，容易求得 J_y 在 $\langle J^2,J_z\rangle$ 表象中的矩阵表示为①

$$J_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\ 0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix}$$

$$=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-1&0\\ 1&0&-1\\ 0&1&0\end{bmatrix},\qquad (j=1) \tag{4}$$

代入式(3)，即得

$$d^{1}_{m'm}(\lambda)=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}(1+\cos\lambda)&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda&\frac{1}{2}(1-\cos\lambda)\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda&\cos\lambda&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda\\ \frac{1}{2}(1-\cos\lambda)&\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda&\frac{1}{2}(1+\cos\lambda)\end{bmatrix} \tag{5}$$

6.12 同题 6.10，对任意 j 值，求

$$d^{j}_{jm}(\lambda)=\langle jj|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}|jm\rangle \tag{1}$$

解 根据角动量一般理论，

$$\left.\begin{aligned}J_+|jm\rangle&=(J_x+iJ_y)|jm\rangle=a_{jm}|jm+1\rangle\\ J_-|jm\rangle&=(J_x-iJ_y)|jm\rangle=a_{j,-m}|jm-1\rangle\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

其中

$$a_{jm}=\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \tag{3}$$

---

① 参见曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 9.3.

当 $m=j$ 时

$$J_+|jj\rangle=0, \qquad \langle jj|J_-=0 \tag{4}$$

(第二式为第一式的共轭方程.)因此

$$\langle jj|J_-e^{-i\lambda J_y}|jm\rangle=0 \tag{5}$$

利用题 6.5 式(10),可得

$$\begin{aligned} J_-e^{-i\lambda J_y}&=e^{-i\lambda J_y}(J_z\sin\lambda+J_x\cos\lambda-iJ_y)\\ &=e^{-i\lambda J_y}\Big[J_z\sin\lambda+\frac{1}{2}(\cos\lambda-1)J_+\\ &\quad+\frac{1}{2}(\cos\lambda+1)J_-\Big] \end{aligned} \tag{6}$$

代入式(5),并利用式(2),即得

$$\begin{aligned} &m\sin\lambda d^j_{jm}(\lambda)+\frac{1}{2}(\cos\lambda-1)a_{jm}d^j_{jm+1}(\lambda)\\ &\quad+\frac{1}{2}(\cos\lambda+1)a_{j,-m}d^j_{jm-1}(\lambda)=0 \end{aligned} \tag{7}$$

另外,利用题 6.5 式(10),还可得到

$$\begin{aligned} J_ze^{-i\lambda J_y}&=e^{-i\lambda J_y}(J_z\cos\lambda-J_x\sin\lambda)\\ &=e^{-i\lambda J_y}\Big[J_z\cos\lambda-\frac{1}{2}\sin\lambda(J_++J_-)\Big] \end{aligned} \tag{8}$$

分别以 $\langle jj|$ 和 $|jm\rangle$ 从左、右乘上式,即得

$$\begin{aligned} &(j-m\cos\lambda)d^j_{jm}(\lambda)+\frac{1}{2}\sin\lambda[a_{jm}d^j_{jm+1}(\lambda)\\ &\quad+a_{j,-m}d^j_{jm-1}(\lambda)]=0 \end{aligned} \tag{9}$$

将式(7)和(9)合并,消去 $d^j_{jm-1}(\lambda)$,即得更简单的递推关系:

$$\sin\lambda\cdot a_{jm}d^j_{jm+1}(\lambda)=-(j-m)(1+\cos\lambda)d^j_{jm}(\lambda) \tag{10}$$

即

$$\boxed{d^j_{jm}(\lambda)=-\frac{\sin\frac{\lambda}{2}}{\cos\frac{\lambda}{2}}\left(\frac{j+m+1}{j-m}\right)^{\frac{1}{2}}d^j_{jm+1}(\lambda)} \tag{10'}$$

因此,只要求出 d^j_{jj},即可递推出所有 d^j_{jm}. 下面先求 d^j_{jj}.

$$d^j_{jj}(\lambda)=\langle jj|e^{-i\lambda J_y}|jj\rangle \tag{11}$$

注意 $d^j_{jj}(0)=1$,上式对 λ 求导,得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}d^j_{jj}(\lambda)=\langle jj|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}(-\mathrm{i}J_y)|jj\rangle$$

$$=\frac{1}{2}\langle jj|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}(J_--J_+)|jj\rangle$$

$$=\frac{1}{2}a_{j,-j}d^j_{j,j-1}(\lambda) \tag{12}$$

而式(7)取 $m=j$,注意到 $a_{jj}=0$,可得

$$\frac{1}{2}(\cos\lambda+1)a_{j,-j}d^j_{j,j-1}(\lambda)=-j\sin\lambda\cdot d^j_{jj}(\lambda) \tag{13}$$

代入式(12),即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}d^j_{jj}(\lambda)=-j\frac{\sin\lambda}{1+\cos\lambda}d^j_{jj}(\lambda) \tag{14}$$

积分,并利用 $d^j_{jj}(0)=1$,得到

$$\boxed{d^j_{jj}(\lambda)=\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{2j}} \tag{15}$$

这个公式也可以利用题 6.9 的模型而导出. 利用式(15)及递推关系式(10′),即可依次得出

$$d^j_{j,j-1}(\lambda)=-(2j)^{1/2}\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{2j-1}\sin\frac{\lambda}{2}$$

$$d^j_{jj-2}(\lambda)=\left[\frac{2j(2j-1)}{2!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{2j-2}\left(\sin\frac{\lambda}{2}\right)^{2}$$

$$\vdots$$

$$d^j_{jm}(\lambda)=(-1)^{j-m}\left[\frac{(2j)!}{(j+m)!\ (j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\cdot\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{j+m}\left(\sin\frac{\lambda}{2}\right)^{j-m} \tag{16}$$

$$\vdots$$

$$d^j_{j-j}(\lambda)=(-1)^{2j}\left(\sin\frac{\lambda}{2}\right)^{2j}$$

讨论 1° 当 $\lambda\longrightarrow-\lambda$,易见

$$d^j_{jm}(-\lambda)=(-1)^{j-m}d^j_{jm}(\lambda) \tag{17}$$

这结果和 $d^j_{m'm}$的一般性质相符合.

2° 当 $\lambda=\pi$,易见唯一不等于 0 的矩阵元为

$$d^j_{-j,j}(\pi)=(-1)^{2j} \tag{18}$$

这是因为

$$\begin{aligned} e^{-i\pi J_y}|jm\rangle&=(-1)^{j-m}|j-m\rangle \\ e^{-i\pi J_y}|j-j\rangle&=(-1)^{2j}|jj\rangle \end{aligned} \tag{19}$$

[算符 $e^{-i\pi J_y}$ 的意义是将体系绕 y 轴旋转 180°，因此 $|jm\rangle$ 态变成 $|j-m\rangle$ 态，式(19)是对 $|jm\rangle$ 和 $|j-m\rangle$ 关系的相因子所作的规定.]

6.13 设体系处于 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 的共同本征态 $|jj\rangle$，方向 $\boldsymbol{n}$ 和 z 轴的夹角为 θ，求 J_n 的可能测值及相应概率.

解 取 $\hbar=1$. 当体系处于 $|jj\rangle$ 态，$\boldsymbol{J}^2=j(j+1)$，J_n 的可能测值即是本征值 $m(=j, j-1, \cdots, -j)$，设相应概率为 $w(m)$.

为了便于计算，可取 $\boldsymbol{n}$ 在 x-z 平面内，则 $e^{-i\theta J_y}|jm\rangle$ 就是 $(\boldsymbol{J}^2, J_n)$ 的共同本征态，$J_n=m$. ($e^{-i\theta J_y}$ 相当于将体系绕 y 轴转 θ 角)因此，在 $|jj\rangle$ 态中测得 $J_n=m$ 的概率为

$$w(m)=|\langle jj|e^{-i\theta J_y}|jm\rangle|^2=|d^j_{jm}(\theta)|^2 \tag{1}$$

根据上题的计算，结果为

$$\begin{aligned} w(m)=&\frac{(2j)!}{(j+m)!\ (j-m)!}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m} \\ &\cdot\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m} \end{aligned} \tag{2}$$

讨论 1° 对于给定的方向 θ，概率最大的 m 值满足

$$w(m)\geqslant w(m'), \qquad m'\neq m$$

特别是

$$w(m)\geqslant w(m\pm1) \tag{3}$$

由式(2)可得

$$\frac{w(m+1)}{w(m)}=\frac{j-m}{j+m+1}\cdot\frac{\cos^2\frac{\theta}{2}}{\sin^2\frac{\theta}{2}} \tag{4}$$

则式(3)给出

$$\left(j+\frac{1}{2}\right)\cos\theta-\frac{1}{2}\leqslant m\leqslant\left(j+\frac{1}{2}\right)\cos\theta+\frac{1}{2} \tag{5}$$

据此，给定 j 和 θ，就可定出 J_n 取值概率最大的 m 值．

对于 $\theta=\pi/2$，式(5)成为

$$-\frac{1}{2}\leqslant m\leqslant\frac{1}{2} \tag{6}$$

因此，如 j 为整数，则在 $\theta=\pi/2$ 方向上(即在和 z 轴垂直的方向上)J_n 取值为 0 的概率最大；如 j 为半奇数，则在 $\theta=\pi/2$ 方向上 J_n 取值 $\pm\frac{1}{2}$ 的概率最大$\left[\text{由式(2)易知，}w\left(\frac{1}{2}\right)=w\left(-\frac{1}{2}\right)\right]$．具体数值为

$$\theta=\frac{\pi}{2},\qquad w(\theta)=\frac{(2j)!}{(j!)^2 2^{2j}}$$

$$=\frac{(2j-1)!!}{(2j)!!},\qquad j\text{ 为整数} \tag{7}$$

$$w\left(\pm\frac{1}{2}\right)=\frac{(2j)!}{\left(j+\frac{1}{2}\right)!\,\left(j-\frac{1}{2}\right)!\,2^{2j}}$$

$$=\frac{(2j)!!}{(2j+1)!!},\qquad j\text{ 为半奇数} \tag{8}$$

2° 对于指定的 j、m，概率 $w(m)$ 取极大值的方向由极值条件 $\mathrm{d}w(m)/\mathrm{d}\theta=0$ 决定．经过简单计算，得到

$$\theta=\arccos\left(\frac{m}{j}\right) \tag{9}$$

特别是，对于 $m=j$，$\theta=0$；对于 $m=-j$，$\theta=\pi$；对于 $m=0$(j 为整数)，$\theta=\frac{\pi}{2}$．

当 $j\gg1$$\left(j\sim j+\frac{1}{2}\right)$，式(5)及(9)和经典力学结果一致．经典力学中，如角动量 $\boldsymbol{J}$ 指向 z 轴，则在 θ 方向的投影为

$$(\boldsymbol{J})_n=J\cos\theta$$

$(\boldsymbol{J})_n$ 相当于本题式(5)或(9)中的 m，$J=|\boldsymbol{J}|$ 相当于 j 或$\left(j+\frac{1}{2}\right)$．

3° 对于式(2)，可给以如下形象地解释．考虑由 $2j$ 个自旋 1/2 粒子构成的体系，$\boldsymbol{J}$ 代表体系的总自旋角动量(参看题 6.9)．

如各粒子均取“向上”自旋态$|+\rangle$，则体系状态为

$$|jj\rangle=|+\rangle_1|+\rangle_2\cdots|+\rangle_{2j}$$

在θ方向，各单粒子自旋投影$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n})$取值$\frac{1}{2}$的概率为$\cos^2\frac{\theta}{2}$，取值$\left(-\frac{1}{2}\right)$的概率为$\sin^2\frac{\theta}{2}$(参看题6.9和上册题6.13). 如在$\theta$方向测得总自旋投影$J_n=m$，则必有$(j+m)$个粒子$s_n=\frac{1}{2}$，$(j-m)$个粒子$s_n=-\frac{1}{2}$，相应概率为

$$\begin{aligned}w(m)&=C_{2j}^{j+m}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m}\\&=\frac{(2j)!}{(j+m)!\ (j-m)!}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\\&\quad\cdot\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m}\end{aligned}$$

此即式(2).

4° 利用二项式定理

$$(a+b)^n=\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!\ (n-k)!}a^kb^{n-k}$$

容易验证

$$\sum_m w(m)=\left(\cos^2\frac{\theta}{2}+\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{2j}=1 \tag{10}$$

其意义为在θ方向测得J_n取各种可能本征值$(m=j,j-1,\cdots,-j)$的总概率为1. 利用$d^j_{jm}(\theta)$的定义，也很容易证明式(10)如下：

$$\begin{aligned}\sum_m w(m)&=\sum_m|d^j_{jm}(\theta)|^2\\&=\sum_m\langle jj|e^{-i\theta J_y}|jm\rangle\langle jm|e^{i\theta J_y}|jj\rangle\end{aligned}$$

在属于同一个j的$|jm\rangle(m=j,j-1,\cdots,-j)$子空间，$\sum_m|jm\rangle\langle jm|=1$，因此

$$\sum_m w(m)=\langle jj|e^{-i\theta J_y}e^{i\theta J_y}|jj\rangle=\langle jj|jj\rangle=1$$

6.14 粒子处于轨道角动量(l^2,l_z)的共同本征态Y_{20}，求l_x的可能测值及概率(取$\hbar=1$).

解一 (l^2,l_z)的共同本征态Y_{lm}记为$|lm\rangle$. 设在$|20\rangle$态中测得$l_x=m$的概率为$w(m)$. 根据题6.8的证明，已知

$$w(-1)=w(1),\qquad w(-2)=w(2) \tag{1}$$

因此只需计算$w(0)$、$w(1)$、$w(2)$. 另外，总概率为1，因此

$$\sum_m w(m)=w(0)+2w(1)+2w(2)=1 \tag{2}$$

所以，只要算出其中两个，就可得到第三个. $l=2$时，l_x的本征态为

$$e^{i\frac{\pi}{2}J_y}|2m\rangle,\qquad m=0,\pm1,\pm2$$

因此，在$|20\rangle$态中测得$l_x=2$的概率为

$$w(2)=|\langle 20|e^{i\frac{\pi}{2}J_y}|22\rangle|^2=\left|d^2_{02}\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2$$
$$=\left|d^2_{20}\left(-\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \tag{3}$$

根据题6.12的计算，

$$d^2_{20}\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\left[\frac{4!}{(2!)^2}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^4=\sqrt{\frac{3}{8}} \tag{4}$$

所以

$$w(2)=w(-2)=3/8 \tag{5}$$

另外，在$|20\rangle$态中，$l_z=0$，$l^2=6$，l_x^2和l_y^2的平均值为

$$\langle l_x^2\rangle=\langle l_y^2\rangle=\frac{1}{2}\langle l^2-l_z^2\rangle=3 \tag{6}$$

亦即

$$\langle l_x^2\rangle=0\cdot w(0)+(\pm1)^2\cdot 2w(1)+(\pm2)^2 2w(2)$$
$$=2w(1)+8w(2)=3 \tag{7}$$

以式(5)代入式(7)，即得

$$w(1)=w(-1)=0 \tag{8}$$

再利用式(2)，即是$w(0)=1/4$.

结论：在 Y_{20} 态中，

l_z 的可能测值为　2，　1，　0，　−1，　−2，

概率为　3/8，　0，　1/4，　0，　3/8.

解二　利用公式

$$\langle l,m+1|l_+|lm\rangle=\sqrt{(l-m)(l+m+1)} \tag{1}$$

易得(l^2,l_z)表象中 $l=2$ 子空间中 $l_\pm$ 的矩阵表示为

$$l_+=\begin{bmatrix}0 & 2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$l_-=(l_+)^+=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0\end{bmatrix} \tag{2}$$

（行和列均按量子数 m 由大到小的次序排列．）因此，l_x 的矩阵表示为

$$l_x=\frac{1}{2}(l_++l_-)=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0\end{bmatrix} \tag{3}$$

设 l_x 的本征态矢量为

$$\phi=\begin{bmatrix}C_2\\ C_1\\ C_0\\ C_{-1}\\ C_{-2}\end{bmatrix} \tag{4}$$

即

$$\phi=C_2Y_{22}+C_1Y_{21}+C_0Y_{20}+C_{-1}Y_{2-1}+C_{-2}Y_{2-2} \qquad (4')$$

ϕ 满足本征方程

$$l_z\phi=\lambda\phi \qquad (5)$$

由 $\det(l_z-\lambda I)=0$，求得本征值 $\lambda=0,\pm1,\pm2$. 将各个 λ 值代回本征方程，就可求出本征态矢量 $\phi_{2\lambda}(l_z=\lambda=2,1,0,-1,-2)$（相因子根据 $d^2_{2m}(\pi/2)$ 的正负而确定，即 C_2 的正负号和 $(-1)^{2-\lambda}$ 相同），结果如下：

$$\phi_{22}=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{bmatrix},\qquad \phi_{21}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}-1\\-1\\0\\1\\1\end{bmatrix}$$

$$\phi_{20}=\sqrt{\frac{3}{8}}\begin{bmatrix}1\\0\\-\sqrt{2/3}\\0\\1\end{bmatrix},\qquad \phi_{2-1}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}-1\\1\\0\\-1\\1\end{bmatrix}$$

$$\phi_{2-2}=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}1\\-2\\\sqrt{6}\\-2\\1\end{bmatrix}$$

在 (l^2,l_z) 表象的 $l=2$ 子空间中，Y_{20} 态表示为第三个基矢

$$\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\\0\end{bmatrix}$$

因此，在 Y_{20} 态中测得 $l_z=2、1、0、-1、-2$ 的概率分别为

$$w(2)=|\langle Y_{20}|\phi_{22}\rangle|^2=\left(\frac{\sqrt{6}}{4}\right)^2=\frac{3}{8}$$

$$w(1)=|\langle Y_{20}|\phi_{21}\rangle|^2=0$$

$$w(0)=|\langle Y_{20}|\phi_{20}\rangle|^2=\left(-\sqrt{\frac{3\times2}{8\times3}}\right)^2=\frac{1}{4}$$

$$w(-1)=|\langle Y_{20}|\phi_{2-1}\rangle|^2=0=w(1)$$

$$w(-2)=|\langle Y_{20}|\phi_{2-2}\rangle|^2=\left(\frac{\sqrt{6}}{4}\right)^2=\frac{3}{8}=w(2)$$

6.15 两个大小相等的、属于不同自由度的角动量 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 耦合成总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$，取 $\hbar=1$，设

$$\boldsymbol{J}_1^2=\boldsymbol{J}_2^2=j(j+1) \tag{1}$$

则

$$\boldsymbol{J}^2=J(J+1),\qquad \boldsymbol{J}=2j,2j-1,\cdots,1,0 \tag{2}$$

在总角动量量子数 $J=0$ 的状态下，求 J_{1z} 和 J_{2z} 的可能取值及相应概率。

解 $(\boldsymbol{J}_1^2,J_{1z})$ 的本征态记为 $|jm_1\rangle_1$，$(\boldsymbol{J}_2^2,J_{2z})$ 的本征态记为 $|jm_2\rangle_2$，$(\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态记为 $|jjJM\rangle$，M 为 J_z 的本征值．$|jjJM\rangle$ 也可简记为 $|JM\rangle$．

$J=0$ 时，$M=0$，$m_1=-m_2=m$，故所讨论的状态可以表示为

$$|jj00\rangle=\sum_m C_m|jm\rangle_1|j-m\rangle_2 \tag{3}$$

C_m 即 $j_1=j_2=j$，$J=M=0$，$m_1=-m_2=m$ 时的 C.G. 系数 $\langle j_1m_1j_2m_2|JM\rangle$．$|C_m|^2$ 即 J_{1z} 取值 m（同时 J_{2z} 取值 $-m$）的概率．下面求 C_m．

由于 $\boldsymbol{J}^2|jj00\rangle=0$，而 $\boldsymbol{J}^2$ 是正定的，因此必然有

$$\boldsymbol{J}|jj00\rangle=0 \tag{4}$$

从而

$$(J_x+\mathrm{i}J_y)|jj00\rangle=0 \tag{5}$$

其中

$$J_x+\mathrm{i}J_y=(J_{1x}+\mathrm{i}J_{1y})+(J_{2x}+\mathrm{i}J_{2y})=J_{1+}+J_{2+} \tag{6}$$

根据角动量升降算符的基本公式，

$$J_{1+}|jm\rangle_1=(J_{1x}+\mathrm{i}J_{1y})|jm\rangle_1=a_{jm}|jm+1\rangle_1$$
$$a_{jm}=\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \tag{7a}$$

$$J_{2+}|j,-m\rangle_2=(J_{2x}+\mathrm{i}J_{2y})|j,-m\rangle_2$$
$$=a_{j,-m}|j,1-m\rangle_2 \tag{7b}$$

$$a_{j,-m}=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}=a_{j,m-1}$$

将式(5)至(7)代入式(3)，即得

$$\sum_m C_m[a_{jm}|j,m+1\rangle_1|j,-m\rangle_2$$
$$+a_{j,m-1}|jm\rangle_1|j,1-m\rangle_2]=0 \tag{8}$$

由于

$$\sum_m C_m a_{j,m-1}|jm\rangle_1|j1-m\rangle_2$$
$$\xrightarrow{m\to m+1}\sum_m C_{m+1}a_{jm}|jm+1\rangle_1|j-m\rangle_2$$

因此式(8)即

$$\sum_m (C_m+C_{m+1})a_{jm}|jm+1\rangle_1|j-m\rangle_2=0 \tag{8'}$$

由于各基矢是线性独立的，因此必有

$$(C_m+C_{m+1})a_{jm}=0 \tag{9}$$

亦即

$$C_m=-C_{m+1},\qquad m=j-1,j-2,\cdots,(-j) \tag{9'}$$

式(3)中$|jj00\rangle$、$|jm\rangle_1$、$|j,-m\rangle_2$等都是正交归一化的，而m共有$(2j+1)$种取值，由归一化条件

$$\sum_m |C_m|^2=1 \tag{10}$$

和式(9')，立刻得到$|C_m|^2=1/(2j+1)$. 如取

$$C_j=1/\sqrt{2j+1}$$

就有

$$\boxed{C_m=(-1)^{j-m}C_j=(-1)^{j-m}\frac{1}{\sqrt{2j+1}}} \tag{11}$$

代入式(3)即得

$$|jj00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_m(-1)^{j-m}|jm\rangle_1|j-m\rangle_2 \tag{12}$$

显然，在 $J_{1z}=-J_{2z}$ 的前提下，J_{1z} 和 J_{2z} 取各本征值 $(j,j-1,\cdots,-j)$ 的概率相等，均为 $1/(2j+1)$.

6.16 考虑由两个自旋为 1 的粒子组成的体系，总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$，求总自旋平方及 z 分量 $(\boldsymbol{S}^2,S_z)$ 的共同本征态，表示成 s_{1z}、s_{2z} 本征函数乘积的线性叠加(取 $\hbar=1$).

解 单粒子自旋分量 s_{1z}、s_{2z} 的本征值为 1、0、−1，相应的本征态记为 α、β、γ，即

$$s_{iz}\alpha(i)=\alpha(i),\qquad s_{iz}\beta(i)=0,\qquad s_{iz}\gamma(i)=-\gamma(i)$$
$$i=1,2,$$

令

$$s_{i+}=s_{ix}+\mathrm{i}s_{iy},\qquad s_{i-}=s_{ix}-\mathrm{i}s_{iy},\qquad i=1,2$$

根据角动量普遍理论，

$$J_\pm|jm\rangle=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|jm\pm1\rangle \tag{1}$$

对于本题中粒子 1 或 2，相当子 $j=1$，$m=1$、0、−1，应有

$$s_{i+}\alpha(i)=0,\ s_{i+}\beta(i)=\sqrt{2}\,\alpha(i),\ s_{i+}\gamma(i)=\sqrt{2}\,\beta(i),$$
$$s_{i-}\alpha(i)=\sqrt{2}\,\beta(i),\ s_{i-}\beta(i)=\sqrt{2}\,\gamma(i),\ s_{i-}\gamma(i)=0 \tag{2}$$

其中 $i=1$、2 代表粒子 1、2.

总自旋平方可以表示成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2&=(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)^2=\boldsymbol{s}_1^2+\boldsymbol{s}_2^2+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\\&=\boldsymbol{s}_1^2+\boldsymbol{s}_2^2+2s_{1z}s_{2z}+s_{1+}s_{2-}+s_{1-}s_{2+}\end{aligned} \tag{3}$$

其中

$$\boldsymbol{s}_1^2=\boldsymbol{s}_2^2=2 \tag{4}$$

根据角动量耦合的普遍理论，$\boldsymbol{S}^2$ 和 S_z 的本征值为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{S}^2=S(S+1), && S=2,1,0\\ &S_z=M, && M=S,S-1,\cdots,(-S) \end{aligned} \tag{5}$$

与量子数 S、M 相应的$(\boldsymbol{S}^2,S_z)$的共同本征态记为 χ_{SM}.

(a) $S=2$. M 的最大值为 2，最小值为-2，相应的本征函数显然是

$$\chi_{22}=\alpha(1)\alpha(2),\chi_{2,-2}=\gamma(1)\gamma(2) \tag{6}$$

以量子数 M 的升降算符

$$S_+=s_{1+}+s_{2+},\qquad S_-=s_{1-}+s_{2-} \tag{7}$$

作用于式(6)，即可得到 χ_{21} 和 $\chi_{2,-1}$，再作用之，即得 χ_{20}. 利用式(1)，应有

$$S_-\chi_{22}=2\chi_{21},\qquad S_-\chi_{21}=\sqrt{6}\,\chi_{20},\qquad S_+\chi_{2,-2}=2\chi_{2,-1}$$

再利用式(2)，不难将 χ_{2M}逐个求出：

$$\begin{aligned} \chi_{22}&=\alpha(1)\alpha(2)\\ \chi_{21}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]\\ \chi_{20}&=\frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\gamma(2)+2\beta(1)\beta(2)+\gamma(1)\alpha(2)]\\ \chi_{2,-1}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2)+\gamma(1)\beta(2)]\\ \chi_{2,-2}&=\gamma(1)\gamma(2) \end{aligned} \tag{8}$$

(b) $S=1$. M 最大为 1，χ_{11}显然只能由 $\alpha(1)\beta(2)$和 $\beta(1)\alpha(2)$组成，χ_{11}应和 χ_{21}正交，因此 χ_{11}必然是

$$\chi_{11}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

(按通常习惯，取 $\alpha(1)$项系数为正). 再以 S_-逐次作用之，即可求出

$$\begin{aligned} \chi_{10}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\gamma(2)-\gamma(1)\alpha(2)]\\ \chi_{1,-1}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2)-\gamma(1)\beta(2)] \end{aligned} \tag{9}$$

(c) $S=0$. M 只能是 0，χ_{00}可以利用上题结果写出：

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\gamma(2)-\beta(1)\beta(2)+\gamma(1)\alpha(2)] \qquad (10)$$

容易验证，以上 9 个 χ_{SM}是互相正交的．它们作为 S_z 的本征函数，是明显可见的；以式(3)作用之，可以验明它们确实均为 S^2 的本征态．

6.17 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，满足关系

$$[J_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma, \qquad (\text{取 } \hbar=1) \qquad (1)$$

即

$$[J_x,A_x]=0, \qquad [J_x,A_y]=\mathrm{i}A_z \qquad \text{等等}.$$

(a) 计算 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}$

(b) 计算$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]$,$[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]$

(c) 证明 $\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}$

$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J})-\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2+\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}$

(d) 证明$[\boldsymbol{J}^2,[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]]=2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})$

解 按照定义，$\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的相同分量可以对易，因此

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}=J_xA_x+J_yA_y+J_zA_z \qquad (2)$$

根据式(1)，易得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_z&=A_xJ_y-A_yJ_x+J_xA_y-J_yA_x\\&=[A_x,J_y]+[J_x,A_y]=2\mathrm{i}A_z\end{aligned}$$

因此

$$\boxed{\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}} \qquad (3)$$

其次，

$$\begin{aligned}[J_x,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]&=[J_x,J_yA_y]+[J_x,J_zA_z]\\&=[J_x,J_y]A_y+J_y[J_x,A_y]\\&\qquad+[J_x,J_z]A_z+J_z[J_x,A_z]\\&=\mathrm{i}(J_zA_y+J_yA_z)-\mathrm{i}(J_yA_z+J_zA_y)\\&=0\end{aligned}$$

亦即

$$\boxed{[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]=0} \tag{4}$$

这反映了 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 的标量算符．其次

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J}^2,A_x]&=[J_y^2,A_x]+[J_z^2,A_x]\\&=-\mathrm{i}(J_yA_z+A_zJ_y)+\mathrm{i}(J_zA_y+A_yJ_z)\\&=\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_x\end{aligned}$$

亦即

$$\boxed{[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]=\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})} \tag{5}$$

式(3)或(5)两端乘 $\boldsymbol{J}$，取内积，即得

$$(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})=\mathrm{i}\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A} \tag{6}$$

利用算符公式

$$[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha$$

可得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})]_x&=\boldsymbol{J}\cdot(J_x\boldsymbol{A})-\boldsymbol{J}^2A_x\\&=J_x^2A_x+J_yJ_xA_y+J_zJ_xA_z-\boldsymbol{J}^2A_x\\&=J_x(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})+\mathrm{i}(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_x-\boldsymbol{J}^2A_x\end{aligned}$$

即

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})=\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} \tag{7}$$

类似地，利用公式

$$[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$$

可证

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 \tag{8}$$

[如 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermite 算符，式(7)取共轭即得式(8).]

利用式(5)以及 $\boldsymbol{J}^2$ 和 $\boldsymbol{J}$ 的对易性，可得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J}^2,[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]]&=\mathrm{i}[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}]-\mathrm{i}[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}]\\&=\mathrm{i}[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{J}-\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]\\&=(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J}\\&\quad+\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

再利用式(3)、(7)、(8)，上式可以化简成

$$\boxed{[\boldsymbol{J}^2,[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]]=2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})} \tag{9}$$

上式左端即$(\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^4-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2)$.

6.18 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量，$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，满足关系(取 $\hbar=1$)

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

在$(\boldsymbol{J}^2,J_z)$表象中，证明

(a) 在$|jm\rangle$态下，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 的平均值与量子数 m 无关；

(b) $\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\dfrac{\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j}{j(j+1)}$

证 (a) 上题已证明$(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})$和 $\boldsymbol{J}$ 对易．根据题 6.4 的论证，$\langle jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|jm\rangle$与 m 无关，仅为 j 的函数，可以记为

$$\langle jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j \tag{1}$$

题 6.4 还证明了

$$\langle jm'|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j\delta_{mm'} \tag{2}$$

亦即在属于同一个 j 的$\{|jm\rangle\}$子空间中，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 等价于常数$\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j$.

(b) 利用上题得到的公式

$$\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^4-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2=2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{3}$$

取矩阵元$\langle jm'|\cdots|jm\rangle$，则 $\boldsymbol{J}^2\longrightarrow j(j+1)$，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\longrightarrow\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j$，式(3)左端对矩阵元的贡献为 0，因此得到

$$\boxed{\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\frac{\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j}{j(j+1)}} \tag{4}$$

如取 $m'=m$，即得平均值公式

$$\boxed{\langle\boldsymbol{A}\rangle_{jm}=\langle\boldsymbol{J}\rangle_{jm}\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j/j(j+1)} \tag{5}$$

式(4)和(5)称为投影定理．式(5)不仅对$|jm\rangle$态成立，而且对于 $\boldsymbol{J}$ 在任何 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影 J_n 的任何一个本征态$|jJ_n=m\rangle$也是成立的．

6.19 设 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 为属于不同自由度的角动量，则它们之和 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ 也是角动量．试对 $(\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态 $|j_1j_2jm\rangle$ 计算 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 的平均值．(取 $\hbar=1$)

解 $\boldsymbol{J}_1$、$\boldsymbol{J}_2$ 各自满足角动量算符基本对易式

$$\boldsymbol{J}_1\times\boldsymbol{J}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_1,\qquad \boldsymbol{J}_2\times\boldsymbol{J}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_2 \tag{1}$$

$\boldsymbol{J}_1$、$\boldsymbol{J}_2$ 属于不同自由度，彼此对易，于是

$$\begin{aligned}&[J_x,J_{1x}]=[J_{1x}+J_{2x},J_{1x}]=0\\&[J_x,J_{1y}]=[J_{1x}+J_{2x},J_{1y}]=\mathrm{i}J_{1z}\end{aligned} \tag{2}$$

$\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 也有类似关系．总之，$\boldsymbol{J}_1$ 或 $\boldsymbol{J}_2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 之间满足上题中矢量算符 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 之间的全部关系．而且

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}_1=\boldsymbol{J}_1^2+\boldsymbol{J}_2\cdot\boldsymbol{J}_1=\frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{J}_1^2-\boldsymbol{J}_2^2) \tag{3}$$

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}_2=\boldsymbol{J}_2^2+\boldsymbol{J}_1\cdot\boldsymbol{J}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{J}_2^2-\boldsymbol{J}_1^2) \tag{4}$$

利用上题的式(5)，即得

$$\begin{aligned}j(j+1)\langle\boldsymbol{J}_1\rangle_{j_1j_2jm}=\frac{1}{2}[&j(j+1)+j_1(j_1+1)\\&-j_2(j_2+1)]\langle\boldsymbol{J}\rangle_{j_1j_2jm}\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}j(j+1)\langle\boldsymbol{J}_2\rangle_{j_1j_2jm}=\frac{1}{2}[&j(j+1)+j_2(j_2+1)\\&-j_1(j_1+1)]\langle\boldsymbol{J}\rangle_{j_1j_2jm}\end{aligned} \tag{6}$$

由于在 $|J_z=m\rangle$ 态中

$$\langle J_x\rangle=\langle J_y\rangle=0,\qquad \langle J_z\rangle=m$$

所以式(5)和(6)给出

$$\begin{aligned}&\langle J_{1x}\rangle_{j_1j_2jm}=\langle J_{1y}\rangle_{j_1j_2jm}=\langle J_{2x}\rangle_{j_1j_2jm}=\langle J_{2y}\rangle_{j_1j_2jm}=0\\&\langle J_{1z}\rangle_{j_1j_2jm}=m\,\frac{j(j+1)+j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)}{2j(j+1)}\\&\langle J_{2z}\rangle_{j_1j_2jm}=m\,\frac{j(j+1)+j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)}{2j(j+1)}\\&\qquad=m-\langle J_{1z}\rangle_{j_1j_2jm}\end{aligned} \tag{7}$$

6.20 设 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 为属于不同自由度的角动量，则它们之和 $\boldsymbol{J}$

$=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ 也是角动量．$(\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态$|j_1j_2jm\rangle$简记为$|jm\rangle$．试求$\langle j'm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle\neq0$时量子数 j 和 m 的选择定则，即求 $\Delta j=(j'-j)$和 $\Delta m=(m'-m)$的允许值．

解 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 属于不同自由度，彼此对易．令

$$\begin{aligned}&J_{1+}=J_{1x}\pm\mathrm{i}J_{1y},\qquad J_{2\pm}=J_{2x}\pm\mathrm{i}J_{2y}\\&J_\perp=J_x\pm\mathrm{i}J_y=(J_{1x}+J_{2x})\pm\mathrm{i}(J_{1y}+J_{2y})\\&\qquad=J_{1+}+J_{2+}\end{aligned}\tag{1}$$

利用基本对易式

$$\boldsymbol{J}_1\times\boldsymbol{J}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_1,\qquad \boldsymbol{J}_2\times\boldsymbol{J}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_2\tag{2}$$

易证

$$[J_z,J_{1z}]=0,\qquad [J_z,J_{1\pm}]=\pm J_{1\perp}\tag{3}$$

$\boldsymbol{J}_1^2$ 和 $\boldsymbol{J}_2^2$ 的本征值为

$$\boldsymbol{J}_1^2=j_1(j_1+1),\qquad \boldsymbol{J}_2^2=j_2(j_2+1)\tag{4}$$

当 j_1 和 j_2 给定后，$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值为

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2=j(j+1),\qquad j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots,|j_1-j_2|\\&J_z=m,\qquad m=j,j-1,\cdots,(-j)\end{aligned}\tag{5}$$

式(3)取矩阵元$\langle j'm'|\cdots|jm\rangle$，即$\langle j_1j_2j'm'|\cdots|j_1j_2jm\rangle$，可得

$$\begin{aligned}&(m'-m)\langle j'm'|J_{1z}|jm\rangle=0\\&(m'-m\mp1)\langle j'm'|J_{1\pm}|jm\rangle=0\end{aligned}\tag{6}$$

易见 m 的选择定则为

$$\begin{aligned}&\langle j'm'|J_{1z}|jm\rangle\neq0,\qquad \Delta m=m'-m=0\\&\langle j'm|(J_{1x}\pm\mathrm{i}J_{1y})|jm\rangle\neq0,\qquad \Delta m=m'-m=\pm1\end{aligned}\tag{7}$$

因此 $\boldsymbol{J}_1$ 有任何一个分量的矩阵元不为 0 的条件是 $\Delta m=0,\pm1$．对于 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$，利用公式

$$J_z|jm\rangle=m|jm\rangle,\qquad J_\pm|jm\rangle\longrightarrow|j,m\pm1\rangle$$

易得选择定则为

$$\begin{aligned}&\langle j'm'|J_z|jm\rangle\neq0,\qquad \Delta j=j'-j=0,\Delta m=m'-m=0\\&\langle j'm'|J_\pm|jm\rangle\neq0,\Delta j=0,\Delta m=m'-m=\pm1\end{aligned}\tag{8}$$

题 6.17 已经证明(取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{J}_1$)

$$\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{J}^4-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{J}^2-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{J}_1-2\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{J}^2$$
$$=-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}_1)=-2\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{J}_1^2-\boldsymbol{J}_2^2) \tag{9}$$

取矩阵元$\langle jm'|\cdots|jm\rangle$，即得

$$2j(j+1)\langle jm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle=[j(j+1)+j_1(j_1+1)$$
$$-j_2(j_2+1)]\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle \tag{10}$$

易见$\langle jm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle\neq0$和$\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\neq0$的选择定则相同，为

$$\boxed{\begin{aligned}&\langle jm'|J_{1z}|jm\rangle\neq0, \qquad \Delta m=m'-m=0\\&\langle jm'|(J_{1x}\pm\mathrm{i}J_{1y}|jm\rangle\neq0\\&\qquad\qquad \Delta m=m'-m=\pm1\end{aligned}} \tag{11}$$

式(11)和(7)的差别在于，式(7)仅是必要条件，式(11)则是充分必要条件．[注意式(11)是在$j'=j$的条件下得出的．]

当$j'\neq j$，式(9)取矩阵元$\langle j'm'|\cdots|jm\rangle$，右端贡献为0，因此

$$[j'^2(j'+1)^2+j^2(j+1)^2-2jj'(j+1)(j'+1)$$
$$-2j'(j'+1)-2j(j+1)]\langle j'm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle=0$$

因此，如$\langle j'm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle\neq0$，除了量子数$m'$、$m$必须满足式(7)外，还必须

$$j'^2(j'+1)^2+j^2(j+1)^2-2jj'(j+1)(j'+1)$$
$$-2j'(j'+1)-2j(j+1)=0 \tag{12}$$

上式可以化成

$$[(j'+j+1)^2-1][(j'-j)^2-1]=0 \tag{12'}$$

由于$j'+j+1>1$，上式的解为

$$\boxed{\Delta j=j'-j=\pm1} \tag{13}$$

结论：所求选择定则为

$$\boxed{\begin{aligned}&\Delta j=j'-j=0,\pm1\\&\Delta m=m'-m=0,\pm1\end{aligned}} \tag{14}$$

在计算过程中，对于j_1、j_2的相对大小未作任何限制，所以对于$\boldsymbol{J}_2$也可以求出同样的选择定则．

6.21 按照原子结构的LS耦合模型，多电子原子中各电子

的自旋耦合成总自旋 $\boldsymbol{S}$，各电子的轨道角动量耦合成总轨道角动量 $\boldsymbol{L}$，然后 $\boldsymbol{L}$ 与 $\boldsymbol{S}$ 耦合成总角动量 $\boldsymbol{J}$，即

$$\boldsymbol{L}=\sum_i \boldsymbol{l}_i, \qquad \boldsymbol{S}=\sum_i \boldsymbol{s}_i, \qquad \boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$$

(a) 在$(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态中，计算原子磁矩的平均值；

(b) 将原子置于弱磁场中，求能级分裂.

解 (a) $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 属于不同的自由度，彼此对易，$\boldsymbol{L}$、$\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{J}$ 都具有角动量的性质. 由于

$$\boldsymbol{J}^2=(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})^2=\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{S}^2+2\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \tag{1}$$

易见 $\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z$ 互相对易. 它们的本征值可以表示成

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{L}^2=L(L+1)\hbar^2, && \boldsymbol{S}^2=S(S+1)\hbar^2\\
&\boldsymbol{J}^2=J(J+1)\hbar^2, && J=L+S,[L+S-1],\cdots,|L-S|\\
&J_z=M\hbar, && M=J,J-1,\cdots,(-J)
\end{aligned} \tag{2}$$

$(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态记为$|LSJM\rangle$.

原子的磁矩(略去原子核的磁矩)算符为

$$\boldsymbol{\mu}=-\frac{e}{2m_ec}(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})=-\frac{e}{2m_ec}(\boldsymbol{J}+\boldsymbol{S}) \tag{3}$$

如角动量以 $\hbar$ 为单位，磁矩以 Bohr 磁子 $\mu_B=e\hbar/2m_ec$ 为单位，式(3)可以改写成

$$\boldsymbol{\mu}=-(\boldsymbol{J}+\boldsymbol{S}) \tag{3'}$$

在$|LSJM\rangle$态下计算$\langle\boldsymbol{\mu}\rangle$，只需引用题 6.19 的结果，就可以得到

$$\langle\boldsymbol{S}\rangle_{LSJM}=\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}\langle\boldsymbol{J}\rangle_{LSJM} \tag{4}$$

因此

$$\boxed{\langle\boldsymbol{\mu}\rangle_{LSJM}=-g\langle\boldsymbol{J}\rangle_{LSJM}} \tag{5}$$

其中 g 为 Landè 因子：

$$g=1+\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{6}$$

式(4)和(5)中，$\langle \boldsymbol{J} \rangle$为

$$\langle J_x \rangle_{LSJM} = \langle J_y \rangle_{LSJM} = 0, \qquad \langle J_z \rangle_{LSJM} = M \tag{7}$$

因此$\langle \mu \rangle$为(添上单位 μ_B)

$$\begin{aligned} \langle \mu_x \rangle_{LSJM} &= \langle \mu_y \rangle_{LSJM} = 0 \\ \langle \mu_z \rangle_{LSJM} &= -gM\ \mu_B \end{aligned} \tag{8}$$

(b) 在弱磁场 $\boldsymbol{B}$ 中，原子获得磁作用能

$$W = -\mu \cdot \boldsymbol{B} = \mu_B (\boldsymbol{J} + \boldsymbol{S}) \cdot \boldsymbol{B} \tag{9}$$

如以磁场方向作为 z 轴，则

$$W = \mu_B B (J_z + S_z) \tag{9'}$$

如取 W 在自由原子的 $|LSJM\rangle$ 态下的平均值作为磁作用能的近似值(所谓弱磁场，即指可作这种近似处理的情况)，即得

$$\boxed{\langle W \rangle_{LSJM} = gMB\ \mu_B} \qquad (\mu_B = e\hbar/2m_e c) \tag{10}$$

此即磁场引起的能级分裂．分裂后相邻能级($\Delta M = 1$)间隔为

$$\Delta E = gB\ \mu_B \tag{11}$$

总裂距为

$$\langle W \rangle_{LSJJ} - \langle W \rangle_{LSJ-J} = 2JgB\ \mu_B \tag{12}$$

测得 ΔE 和总裂距，就可获知 g 和 J，从而也可获知 L 和 S.

上册题 6.36 可以认为是本题的特例．

6.22 氘核是质子-中子结合态，总角动量 $J=1$，总自旋 $S=1$，宇称偶．实验测得其磁矩为 $0.857\mu_N$(核磁子).

(a) 如视氘核为纯 S 态(轨道角动量 $L=0$)，计算其磁矩；

(b) 对于纯 D 态($L=2$)，求磁矩；

(c) 实际上，氘核是以 S 态为主，而混有少量 D 态．试利用磁矩的上述实验值和计算值，求 D 态百分比．

(内禀磁矩：质子，$2.793\ \mu_N$；中子，$-1.913\ \mu_N$)

解 以 l_p、l_n、s_p、s_n 分别表示质子和中子的轨道角动量和自旋角动量．中子的轨道运动对磁矩无贡献．中子-质子体系(氘核)的总角动量和总磁矩算符为

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}_{\mathrm{p}}+\boldsymbol{l}_{\mathrm{n}}+\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}+\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S},\qquad(\text{取}\ \hbar=1)\tag{1}$$

$$\boldsymbol{\mu}=(\boldsymbol{l}_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{p}}\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}}\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}})\mu_{\mathrm{N}}\tag{2}$$

其中

$$g_{\mathrm{p}}=2\times 2.793=5.586$$

$$g_{\mathrm{n}}=2\times(-1.913)=-3.826$$

$\boldsymbol{l}_{\mathrm{p}}$、$\boldsymbol{l}_{\mathrm{n}}$、$\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}$、$\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}$ 属于不同自由度，互相对易，并各自满足角动量的基本对易式($\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}\times\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}=\mathrm{i}\boldsymbol{s}_{n}$，等等)．$\boldsymbol{\mu}$ 作为矢量算符，显然满足对易式

$$[\mu_x,J_x]=0,\qquad[\mu_x,J_y]=\mathrm{i}\mu_z,\qquad\text{等等}\tag{3}$$

因此，根据题 6.17 和 6.18，在 $(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态 $|LSJJ\rangle$ 下，μ_z 的平均值为

$$\mu=\langle\mu_z\rangle_{LSJJ}=\frac{1}{J+1}\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{\mu}\rangle_{LSJJ}\tag{4}$$

在质心坐标系中，$\boldsymbol{l}_{\mathrm{p}}$ 和 $\boldsymbol{l}_{\mathrm{n}}$ 对 $\boldsymbol{L}$ 的贡献各占一半，所以式(2)中 $\boldsymbol{l}_{\mathrm{p}}$ 可用 $\frac{1}{2}\boldsymbol{L}$ 代替．总自旋 $S=1$ 为自旋三重态，应有

$$\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}^2+\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}^2+2\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}\cdot\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}=\frac{3}{2}+2\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}\cdot\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}=2\tag{5}$$

因此

$$\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}\cdot\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}=\frac{1}{4},\qquad\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}\cdot\mathrm{S}=\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}\cdot\mathrm{S}=1\tag{6}$$

亦即计算$\langle\mu_z\rangle$时，$\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}}$ 和 $\boldsymbol{s}_{\mathrm{n}}$ 均等价于 $\frac{1}{2}\boldsymbol{S}$，因此

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{\mu}\Rightarrow&\left[\frac{1}{2}\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}(g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}})\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{S}\right]\mu_{\mathrm{N}}\\&=\frac{1}{2}[\boldsymbol{J}^2+(g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}}-1)\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{S}]\mu_{\mathrm{N}}\\&=\frac{1}{2}[\boldsymbol{J}^2+\frac{1}{2}(g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}}-1)\\&\quad\cdot(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{L}^2)]\mu_{\mathrm{N}}\end{aligned}\tag{7}$$

代入式(4)，即得

$$\begin{aligned}\mu=\langle\mu_z\rangle_{LSJJ}=&\left\{\frac{J}{2}+\frac{g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}}-1}{4(J+1)}[J(J+1)\right.\\&\left.+S(S+1)-L(L+1)]\right\}\mu_{\mathrm{N}}\end{aligned}\tag{8}$$

其中

$$g_p+g_n-1=0.760$$

(a) 纯 S 态($L=0, J=S=1$),由式(8)得出

$$\mu(L=0)=0.880\ \mu_N \tag{9}$$

(b) 纯 D 态($L=2, J=S=1$),由式(8)得到

$$\mu(L=2)=0.310\ \mu_N \tag{10}$$

(c) 设氘核中 D 态成分为 w,S 态成分为$(1-w)$,应有

$$0.310w+0.880(1-w)=0.857$$

右端为实验值. 容易解出

$$w=0.040=4\% \tag{11}$$

即氘核中 D 态约占 4%,S 态约占 96%.

6.23 对于自旋 1/2 粒子,常称$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$为极化矢量,记作 $\boldsymbol{P}$,它也就是自旋角动量的空间指向.

(a) 给定 $t=0$ 时初始自旋波函数(σ_z 表象)

$$\chi(0)=\begin{bmatrix}\cos\delta & e^{-i\alpha}\\ \sin\delta & e^{i\alpha}\end{bmatrix} \tag{1}$$

其中 δ、α 为正实数(或 0),$\delta\leqslant\pi/2$,$\alpha\leqslant\pi$,试确定初始极化矢量 $\boldsymbol{P}(t=0)$的空间方位角(θ_0,φ_0);

(b) 设粒子为定域的,并受到沿 z 方向但强度随时间变化的磁场 $\boldsymbol{B}(t)$的作用,作用势为

$$H=-\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)=-\mu_0\sigma_zB(t) \tag{2}$$

求极化矢量随时间变化的规律,即求 $\boldsymbol{P}(t)=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t$.

解 (a) 任何确定的自旋态都是 $\boldsymbol{\sigma}$ 在某个方向(θ,φ)的投影 σ_n 的本征态(本征值为 1),而且

$$\boldsymbol{P}=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n} \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 为(θ,φ)方向的单位矢量(参看上册题 6.12、6.13),$\sigma_n=1$ 的本征函数为

$$\phi_1(\theta,\varphi)=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\,e^{-i\varphi/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\,e^{i\varphi/2}\end{bmatrix} \tag{4}$$

比较式(1)和(4),即得初始极化矢量 $\boldsymbol{P}(t=0)$的方位角

$$\theta_0=2\delta,\qquad \varphi_0=2\alpha \tag{5}$$

(b) 设受磁场作用后自旋波函数为

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}C_1(t)\\ C_2(t)\end{bmatrix} \tag{6}$$

代入Schrödinger-Pauli 方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}\chi(t)=H\chi(t) \tag{7}$$

得到

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}C_1\\ C_2\end{bmatrix}=-\mu_0B(t)\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_1\\ C_2\end{bmatrix}$$
$$=-\mu_0B(t)\begin{bmatrix}C_1\\ -C_2\end{bmatrix}$$

即

$$\frac{dC_1}{dt}=i\frac{\mu_0}{\hbar}B(t)C_1$$
$$\frac{dC_2}{dt}=-i\frac{\mu_0}{\hbar}B(t)C_2 \tag{8}$$

解为

$$C_1(t)=C_1(0)\exp\left[i\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)d\tau\right]$$
$$C_2(t)=C_2(0)\exp\left[-i\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)d\tau\right] \tag{9}$$

初始条件(1)即为

$$C_1(0)=\cos\delta e^{-i\alpha}$$
$$C_2(0)=\sin\delta e^{i\alpha} \tag{1'}$$

令

$$\boxed{\varphi(t) = 2\alpha - \frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau} \tag{10}$$

则任意时刻的波函数为

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}C_1(t)\\C_2(t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\delta\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi(t)}\\ \sin\delta\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi(t)}\end{bmatrix} \tag{11}$$

和式(4)比较，可知极化矢量 $\boldsymbol{P}(t)$ 的方位角 (θ,φ) 为

$$\theta = \theta_0 = 2\delta, \qquad \varphi = \varphi(t) = \varphi_0 - \frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{12}$$

极化矢量为

$$\boldsymbol{P}(t)=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\boldsymbol{n}(t)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta) \tag{13}$$

即

$$\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle_t &= \sin\theta\cos\varphi = \sin2\delta\cos\left[2\alpha - \frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\\ \langle\sigma_y\rangle_t &= \sin\theta\sin\varphi = \sin2\delta\sin\left[2\alpha - \frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\\ \langle\sigma_z\rangle_t &= \cos\theta = \cos 2\delta = \langle\sigma_z\rangle_{t=0}\end{aligned} \tag{14}$$

极化矢量 $\boldsymbol{P}(t)$ 和 z 轴(即磁场方向)保持固定的夹角 $\theta=2\delta$，同时绕 z 轴旋转，旋转角速度为

$$\boxed{\omega(t)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varphi(t)=-\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)} \tag{15}$$

注意，σ_z 和 H 对易，为守恒量.

第七章 对 称 性

7.1 考虑由两个全同粒子组成的体系．设可能的单粒子态为 ϕ_1、ϕ_2、ϕ_3，试求体系的可能态数目．分三种情况讨论：(a) 粒子为 Bose 子 (Bose 统计)；(b) 粒子为 Fermi 子 (Fermi 统计)；(c) 粒子为经典粒子(Boltzmann 统计).

解 以符号△、○、□ 分别表示 ϕ_1、ϕ_2、ϕ_3 态．Bose 子体系的量子态对于两个粒子的交换必须是对称的，Fermi 子体系则必须是反对称的，经典粒子被认为是可区分的，体系状态没有对称性的限制．

当两个粒子处子相同的单粒子态时，体系的状态必然是交换对称的，这种状态只能出现于 Bose 子体系和经典粒子体系，体系波函数的构造方式为

$$\psi(1,2)=\phi_i(1)\phi_i(2),\ i=1,2,3$$

当两个粒子处子不同的单粒子态(ϕ_i 和 ϕ_j，$i\neq j$)时，如果是经典粒子，有两种体系态，即

$$\psi(1,2)=\phi_i(1)\phi_j(2),\ \phi_i(2)\phi_j(1).\ i\neq j$$

由单粒子态 ϕ_i 和 ϕ_j 可以构成对称和反对称的体系态各一种，即

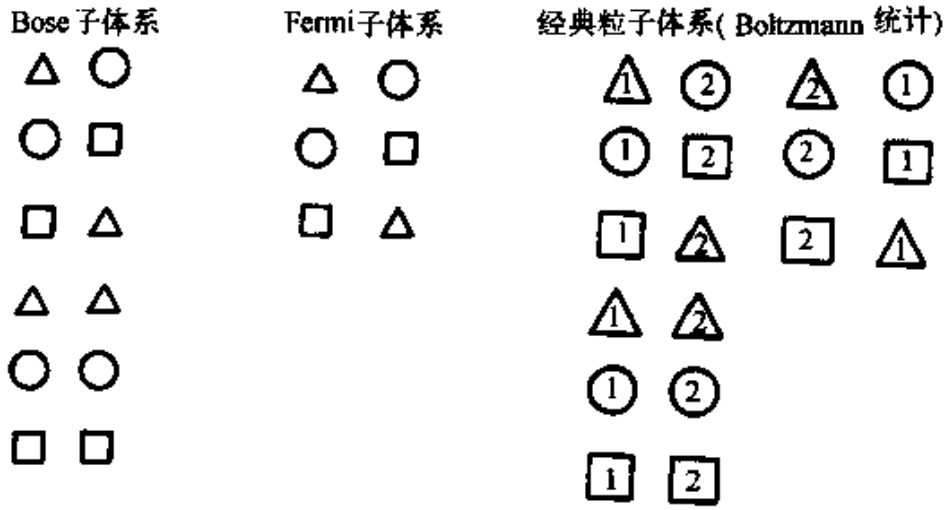
$$\psi(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_i(1)\phi_j(2)\pm\phi_i(2)\phi_j(1)],\ i\neq j$$

对称态适用于 Bose 子体系，反对称态适用于 Fermi 子体系．

对于两粒子体系来说，Bose 子体系的可能态总数与 Fermi 子体系的可能态总数之和，显然正好等于经典粒子(可区分粒子)体系的可能态总数．如可能的单粒子态为 k 个，则三种两粒子体系的可能态数目如下：

经典粒子	$N=k^2$
Fermi 子	$N=\frac{1}{2}k(k-1)$
Bose 子	$N=\frac{1}{2}k(k+1)$

本题 $k=3$，Fermi 子、Bose 子、经典粒子体系的可能态数目分别为 3、6、9. 体系态的构造方式如下：



Bose 子体系态(共 6 种，均为交换对称态)有

$$\phi_1(1)\phi_1(2),\ \phi_2(1)\phi_2(2),\ \phi_3(1)\phi_3(2)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_i(1)\phi_j(2)+\phi_i(2)\phi_j(1)],i,j=1,2,3,i\neq j$$

Fermi 子体系态(反对称态)只有 3 种：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_i(1)\phi_j(2)-\phi_i(2)\phi_j(1)]$$

$$i,j=1,2,3,i\neq j$$

当全同粒子体系的粒子数超过两个时，一般来说，对于粒子间的交换完全对称的状态(适用于 Bose 子)数目与完全反对称的状态(适用子 Fermi 子)数目之和，总是小子没有对称性限制的体系

状态(适用于经典粒子)总数．亦即，后者除了完全对称态和完全反对称态，还有一些没有对称性或只有混杂对称性的状态．例如，由三个全同粒子组成的体系，如可能的单粒子态有 3 种，则在 Boltzmann 统计、Bose 统计、Fermi 统计下，体系的可能态数目分别为 27、10 和 1.

7.2 设 $^{8}_{4}\mathrm{Be}$ 核可以看成由两个 α 粒子组成，证明总轨道角动量量子数 L 必为偶数(取质心坐标系).

证 α 粒子的自旋为 0，只需考虑轨道波函数．在质心坐标系(即 Be 核为静止的坐标系)中，两 α 粒子(1,2)体系的波函数可以表示成

$$\Psi(r_1,r_2)=\psi(r)=R(r)\mathrm{Y}_{LM}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

其中 $r=r_1-r_2$ 为两 α 粒子的相对坐标，(r,θ,φ) 是 r 的球坐标表示．波函数(1)已经取为相对运动角动量(在质心系中，就是总角动量)L 的平方和 z 分量(L^2,L_z)的共同本征函数．(设两个 α 粒子间的作用势只与 $r=|r|$ 有关．)

交换两个 α 粒子(即交换 r_1,r_2)时，$r=|r_1-r_2|$ 不变，θ、φ 的变化为

$$\theta\to\pi-\theta,\varphi\to\pi+\varphi$$

因此，波函数的变化为

$$\begin{aligned}P_{12}\Psi(r_1,r_2)&=\Psi(r_2,r_1)=\psi(-r)\\&=R(r)\mathrm{Y}_{LM}(\pi-\theta,\pi+\varphi)\\&=(-1)^L R(r)\mathrm{Y}_{LM}(\theta,\varphi)\\&=(-1)^L\psi(r)=(-1)^L\Psi(r_1,r_2)\end{aligned} \tag{2}$$

α 粒子为玻色子，玻色子体系的总波函数必须是交换对称的，即必须满足

$$P_{12}\Psi(r_1,r_2)=\Psi(r_1,r_2) \tag{3}$$

只有 $L=0,2,4,\cdots$(偶数)才能满足这条件，因此 L 必须取偶数．

7.3 两个全同粒子，处于中心外力场中，单粒子能级为 E_{nlj}

(与单粒子总角动量量子数 j 有关). 试证明:不管它们是 Bose 子(j 为整数)还是 Fermi 子(j 为半奇数),当它们处于同一个单粒子能级时,体系的总角动量量子数 J 必为偶数.

证 这两粒子体系的总波函数可以取为守恒量完全集(H, $\boldsymbol{J}_1^2, \boldsymbol{J}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$)的共同本征函数

$$\Psi(1,2) = R(r)\psi(j_1 j_2 JM) \tag{1}$$

其中 $R(r)$ 为径向波函数($r = |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|$),它是交换对称的;$\psi(j_1 j_2 JM)$ 为($\boldsymbol{J}_1^2, \boldsymbol{J}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$)的共同本征函数,它的交换对称性和 $\Psi(1,2)$ 的相同. 当两个粒子处于同一条能级 E_{nj} 时,$j_1 = j_2 = j$,按角动量耦合法则,当不考虑对称性时 J 的可能取值是

$$J = 2j, 2j-1, \cdots, 1, 0 \tag{2}$$

以 ϕ_{jm} 表示单粒子角动量本征态,按照角动量耦合的理论,在非耦合表象中 $\psi(jjJM)$ 的表示式为

$$\psi(jjJM) = \sum_{m_1, m_2} \langle jm_1 jm_2 \,\big|\, JM\rangle \phi_{jm_1}(1)\phi_{jm_2}(2) \tag{3}$$

根据 C. G. 系数的对称性公式

$$\langle jm_1 jm_2 | JM\rangle = (-1)^{2j-J}\langle jm_2 jm_1 | JM\rangle \tag{4}$$

易知:当($2j-J$)为偶数,

$$\langle jm_1 jm_2 | JM\rangle = \langle jm_2 jm_1 | JM\rangle$$

相应的 $\psi(jjJM)$ 为交换对称;

当($2j-J$)为奇数,

$$\langle jm_1 jm_2 | JM\rangle = -\langle jm_2, jm_1 | JM\rangle$$

相应的 $\psi(jjJM)$ 为交换反对称.

对子 Bose 子体系,$2j$ 为偶数,而 $\psi(jjJM)$ 应该交换对称,故 J 应取偶数. 对子 Fermi 子体系,$2j$ 为奇数,而 $\psi(jjJM)$ 应该是反对称函数,故 J 也应取偶数.

讨论 给定 $j_1 = j_2 = j$ 后,共有($2j+1$)种单粒子状态[ϕ_{jm}, m

$=j,j-1,\cdots,(-j)]$，两粒子体系(不考虑对称性)的独立状态数为$(2j+1)^2$，其中对称态比反对称态多$(2j+1)$种(参看 7.1 题)，所以

$$\begin{aligned}&\text{对称态数目}=(j+1)(2j+1)\\&\text{反对称态数目}=j(2j+1)\end{aligned}\tag{5}$$

从另一方面看，给定 $j_1=j_2=j$ 后，J 的可能取值如式(2)所示，每种 J 值又有$(2J+1)$种 M 值与之相应，所以体系状态总数为

$$\begin{aligned}\sum_{J=0}^{2j}(2J+1)&=\frac{1}{2}(2j+1)(1+4j+1)\\&=(2j+1)^2\end{aligned}$$

当 $2j$ 为奇数，对称态和反对称态各有$\frac{1}{2}(2j+1)$种 J 值，

对称态	$J=2j,2j-2,\cdots,1$
反对称态	$J=2j-1,2j-3,\cdots,0$

易见对称态数目比反对称态数目多$\frac{1}{2}(2j+1)\times 2=2j+1$.($J=2j$ 和 $J=2j-1$ 相比，前者状态数多 2，依此类推.)

当 $2j$ 为偶数(j 为整数)，对称态有$(j+1)$种 J 值，反对称态有 j 种 J 值，

对称态	$J=2j,2j-2,\cdots,2,0$
反对称态	$J=2j-1,2j-3,\cdots,1$

易见对称态数目仍比反对称态数目多$(2j+1)$. 所以，无论 $2j$ 是奇数还是偶数，对称态和反对称态数目均为式(5).

Bose 子体系应为对称态，状态数目为$(j+1)(2j+1)$；

Fermi 子体系应为反对称态，状态数目为 $j(2j+1)$，与式(5)一致.

7.4 原子中处于同一个单电子能级 E_{nl} 上的两个电子，讨论其总 L、S、J 的可能取值，证明 $L+S=$偶数.

解 以 $\boldsymbol{l}_1$、$\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{j}_1$ 及 $\boldsymbol{l}_2$、$\boldsymbol{s}_2$、$\boldsymbol{j}_2$ 分别表示电子 1、2 的轨道、自旋和

总角动量，以 $\boldsymbol{L}$、$\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{J}$ 表示两电子体系的总轨道角动量、总自旋和总角动量．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}&=\boldsymbol{l}_1+\boldsymbol{l}_2,\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\\ \boldsymbol{J}&=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2\end{aligned}\tag{1}$$

$\boldsymbol{J}$ 的构成可取 L-S 耦合，也可取 j-j 耦合，我们取 L-S 耦合，即取守恒量完全集为$(H,\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$．在以下的讨论中取 $\hbar=1$．

总自旋量子数记为 S，$\boldsymbol{S}^2$ 的本征值为 $S(S+1)$，$S=1$ 相应于自旋三重态(对称态)$\chi_{1M_S}(M_S=1,0,-1)$，$S=0$ 相应于自旋单态(反对称态)χ_{00}．

总轨道角动量量子数记为 L，$\boldsymbol{L}^2$ 的本征值为 $L(L+1)$．由于两个电子处于同一能级 E_{nl}，所以 $l_1=l_2=l$，根据角动量耦合法则，L 的取值为

$$L=2l,2l-1,\cdots,1,0\tag{2}$$

L 为偶数时，是对称态；L 为奇数时，是反对称态(参看 7.2 题)．

电子是 Fermi 子，总波函数应该是反对称的．因此

$$\begin{aligned}&S=0,\quad L\text{ 取偶数}\\ &S=1,\quad L\text{ 取奇数}\end{aligned}\tag{3}$$

体系总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的平方的本征值为 $\boldsymbol{J}^2=J(J+1)$，按照角动量耦合法则，J 的可能取值是

$$J=L+S,L+S-1,\cdots,|L-S|\tag{4}$$

当 $S=0$，$J=L$，必为偶数；当 $S=1$，$J=L+1,L,L-1$，有偶数，也有奇数．但式(3) 表明，$L+S$ 必为偶数．

注意，本题和 13.3 题不同，13.3 题中两粒子 $j_1=j_2$，本题 j_1，j_2 可能相同，也可能不同，甚至可能 j_1,j_2 没有确定值．

7.5 对于原子中处于 np 能级($l=1$)的两个电子，试分别用 L-S 耦合和 j-j 耦合求所有可能的总角动量本征态的数目．

解 (a) L-S 耦合　根据上题的分析，L、S、J 的可能组合以及相应状态数如下表：

L	2	0	1
S	0	0	1
J	2	0	0 1 2
光谱学符号	$^1D_2$	$^1S_0$	$^3P_0$ $^3P_1$ $^3P_2$
简并度(2J+1)	5	1	1+3+5

共有 15 种可能的总角动量，(J^2, J_z)本征态(反对称态).

(b) j-j 耦合，单电子总角动量量子数的可能取值为

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

体系可能的电子组态和相应的 J 值及简表度如下表：

电子组态	$(p_{1/2})^2$	$(p_{3/2})^2$	$(p_{1/2})(p_{3/2})$
J	0	0,2	1,2
简并度(2J+1)	1	1+5	3+5

总状态数仍为 15.

两种耦合方式相当于选取不同的基矢，但不会影响状态总数.

7.6 比较双原子分子 H_2、D_2、HD、O_2 的转动光谱线的强度变化规律.

解 分子发生转动跃迁时，原子中电子轨道并无变化，只需考虑原子核体系波函数的变化.

(a) 氢分子 H_2

两个原子核均为质子(自旋 1/2)，两质子总自旋量子数 S 的取值为 1 或 0. 两质子体系总波函数(取质心坐标系)可以取为

$$\Psi_{H_2} = R(r)Y_{LM}(\theta,\varphi)\chi_{SM_S} \tag{1}$$

其中 χ_{SM_S} 为自旋波函数，(r,θ,φ)是两原子核相对距离(r_1-r_2)的球坐标表示. 质子为 Fermi 子，体系波函数应该是反对称的，因此

S,L 的可能取值是

$$\begin{aligned} S &= 1(\text{三重态}), L = 1,3,5,\cdots \\ S &= 0(\text{单态}), L = 0,2,4,\cdots \end{aligned} \tag{2}$$

转动跃迁属于电型跃迁,自旋量子数 S 不变,为了保持总波函数的反对称性,跃迁前后 L 必须相差偶数,概率最大的是 $\Delta L=2$. [跃迁概率和 $(e^2/\hbar c)^{2\Delta L}$ 成正比,ΔL 越大,跃迁概率越小,所以 $\Delta L=4$、6、8,…的跃迁可以忽略.]如以 I 表示分子的转动惯量,转动跃迁 $L\to L-2$,所放光子能量为

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{\hbar^2}{2I}[L(L+1)-(L-2)(L-1)] \\ &= \frac{\hbar^2}{I}(2L-1) \end{aligned} \tag{3}$$

ΔE 和 L 呈线性关系. 在氢分子的自然分布中,正氢分子($S=1$)数是仲氢分子($S=0$)数的 3 倍,所以 L 为奇数的谱线强度大体上是 L 为偶数的谱线强度的 3 倍,所以相邻谱线的强度呈现出明显的明暗交替规律.

(b) 重氢分子 D_2

D 表示氘核,自旋为 1,是 Bose 子,总波函数应该交换对称. 两原子核体系总自旋量子数 $S=2$、1、0,因此,S、L 的可能取值为

$S=2$、0,　　$L=$偶数(自旋和轨道波函数均为对称)

$S=1$,　　$L=$奇数(自旋和轨道波函数均为反对称)

跃迁前后 $\Delta S=0$,$\Delta L=2$(理由同 H_2 分子). 在自然界分布中 S 取 2、1、0 的分子数(和 $2S+1$ 成正比)之比为 5∶3∶1,S 取偶数的分子数和 $S=1$ 的分子数之比为

$$(5+1):3=2:1$$

故转动光谱的相邻谱线仍呈明暗交替规律,强度比约为 2∶1.

(c) HD 分子

两原子核一为质子,一为氘核,是不同粒子,原子核体系的波函数没有交换对称性的要求,S 和 L 的取值没有制约关系. 所以转动光谱谱线强度没有明暗交替的变化.

(d) 氧分子 O_2

在自然分布中，绝大多数氧原子核为^{16}O，自旋为 0，是 Bose 子. 两原子核体系的总波函数(即总轨道波函数)可以表示成

$$\Psi_{O_2}=R(r)Y_{LM}(\theta,\varphi) \tag{4}$$

(r,θ,φ)是相对距离(r_1-r_2)的球坐标表示. Ψ_{O_2} 应该交换对称，故 L 必为偶数. 跃迁前后仍有 $\Delta L=2$. 转动光谱线全部属于 $L=$偶数的情形，谱线强度没有明暗交替的现象.

7.7 已知氘核 d 自旋为 1，宇称为偶；中子(n)自旋为 1/2；π^-介子自旋为 0. 试根据反应

$$\pi^-(\text{静止})+d\rightarrow n+n$$

决定 π^-介子的内禀宇称.

解 取质心坐标系. 反应前 π^-介子及氘核均处于静止状态，总动量和总轨道角动量均为 0，体系的总角动量量子数 $J=1$. 反应前后总角动量应守恒，所以反应后两中子体系的总角动量量子数 $J=1$.

以 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{l}_1+\boldsymbol{l}_2$ 和 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ 表示中子体系的轨道和自旋角动量，它们的可能取值为

$\boldsymbol{L}^2=L(L+1)$，$L=0,1,2,\cdots$

$\boldsymbol{S}^2=S(S+1)$，$S=1,0$

L 取偶数时，轨道波函数为交换对称；L 取奇数时为反对称态；$S=1$，自旋波函数为对称态(三重态)；$S=0$，为反对称态(单态). 中子是 Fermi 子，体系总波函数必须是反对称的，因此 $S=0$ 时 L 应取偶数，$S=1$ 时 L 应取奇数. J 和 L、S 的关系是

$$J=L+S,L+S-1,\cdots,|L-S|$$

反应后 $J=1$，因此 L 和 S 的取值只能是

$$\boxed{L=1,S=1}$$

因为 $L=1$，中子体系总状态为奇宇称. 本题反应类型属于强作用，宇称应守恒，所以反应前总宇称为奇. 由于氘核为偶宇称，π^-

和 d 的轨道角动量又均等于 0(因此轨道波函数为偶宇称),故知 π^- 介子的内禀宇称为奇.

7.8 π^- 介子(赝标量粒子,自旋为 0,宇称为奇)在氘核(质子和中子的 $^3S_1$ 结合态)Coulomb 场的作用下处于基态,后来该 π^- 介子被氘核 d 俘获而产生下列反应:

$$\pi^- + d \to n + n$$

(a) 求反应后中子对的轨道角动量;(b) 求反应后中子对的自旋角动量.(c) 求两中子自旋均指向与氘核自旋相反方向的概率.(d) 如果原来氘核自旋是 100%沿 $\hat{k}$ 方向(z 轴)极化的,求出射中子中有一个自旋和氘核自旋方向相反的角分布概率.

解 反应前 π^- 介子和氘核的轨道角动量均为 0,氘核自旋为 1,因此反应前总角动量为 1. 反应前后总角动量应该守恒,因此反应后中子对的总角动量 $J=1$. 设中子对的轨道和自旋角动量分别为 L、S,根据角动量耦合的三角形法则,不考虑对称性时 L、S 的取值有下列可能组合:

(i) $S=0, L=1$;

(ii) $S=1, L=0, 2$;

(iii) $S=1, L=1$.

其中 (i)、(ii)两种情形,中子对总波函数是交换对称的,第(iii)种情形则是反对称的. 中子为 Fermi 子,体系波函数应该是反对称的,所以,S、L 只能取第(iii) 种情况,即

$$\boxed{S=1, L=1} \tag{1}$$

以反应前氘核的极化方向(即氘核自旋指向,也就是氘核总角动量的指向)$\hat{k}$ 为 z 轴,则总角动量平方及 z 分量的量子数为

$$J=1, J_z=M=1 \tag{2}$$

这也就是反应后中子对的总角动量量子数. 如两中子自旋均指向 $-\hat{k}$ 方向,则总 $S_z=-1$,从而 L_z 必须取 $+2$ 才能使 $J_z=1$. 但由式(1),$L=1$,故 L_z 不可能取 $+2$. 这个矛盾表明两中子自旋不可能

均指向 $-k$ 方向．至此，已可对前三个问题作出回答，即

$$\boxed{\text{(a) } L=1,\ \text{(b) } S=1,\ \text{(c) 概率为 0}}$$

中子对 S_z 和 L_z 的可能取值为

$$S_z=1, L_z=0; \text{或 } S_z=0, L_z=1 \tag{3}$$

因此中子对总波函数的角动量部分为

$$\begin{aligned}&\psi(S=1, L=1, J=1, J_z=1)\\&=C_1\chi_{11}Y_{1_0}(\theta,\varphi)+C_2\chi_{10}Y_{1_1}(\theta,\varphi)\end{aligned} \tag{4}$$

(r,θ,φ)为两中子相对距离 r_1-r_2 的球坐标．在总角动量

$$J=L+S$$

的构造中，L 和 S 的地位相等$(L=S=1)$，因此可以断定式(4)中 $|C_1|=|C_2|$．事实上，由 C.G. 系数表查得

$$C_1=-1/\sqrt{2},\ C_2=1/\sqrt{2} \tag{5}$$

式(4)中 C_1 项相当于 $S_z=1$，即两中子自旋均指向 $+\hat{k}$ 方向；C_2 项相当于 $S_z=0$，即两中子自旋一个指向 $+\hat{k}$，另一个指向 $-\hat{k}$ 方向，这正是问题(d)所指的情况．所以问题(d)的回答是

(d) 设两中子的出射方向联线指向(θ,φ)方向，[一个中子沿(θ,φ)方向出射，另一个中子沿$(\pi-\theta,\pi+\varphi)$方向出射．]其中一个中子自旋指向 $-\hat{k}$ 方向(另一个自旋指向 $+\hat{k}$)的角分布概率(每单位立体角)为

$$|C_2Y_{1_1}|^2=\frac{3}{16\pi}\sin^2\theta \tag{6}$$

总概率为 $|C_2|^2=1/2$.

由于 $\sin\theta=\sin(\pi-\theta)$，故发现任何一个中子沿$(\theta,\varphi)$方向立体角元 $d\Omega$ 出射，且其自旋指向 $-\hat{k}$ 方向的概率为

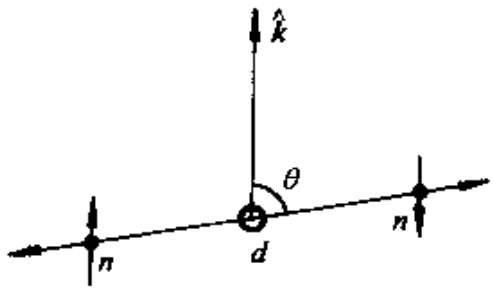


图 7.8

$$|C_2 Y_{1_1}|^2 d\Omega = \frac{3}{16\pi}\sin^2\theta d\Omega \tag{7}$$

7.9 利用同位旋守恒定律证明反应

$$p + d \rightarrow \begin{cases} n + \pi^+ + d \\ p + \pi^0 + d \end{cases}$$

的分支比为 2∶1.

证 本题讨论的反应属于强作用，同位旋量子数 I 及 I_z 应该守恒．各粒子的同位旋如下：

d	$I=I_z=0$	
p,n	$I=1/2,$	$I_z=1/2,-1/2$
π^+,π^0,π^-	$I=1,$	$I_z=1,0,-1$

反应前总同位旋为 $I=1/2, I_z=1/2$，由于同位旋守恒，这也就是反应后的总同位旋量子数．氘核 d 同位旋为 0，在以下的讨论中不予考虑．反应后，π 介子(记为 1)核子(记为 2)体系的同位旋状态(耦合表象)为

$$\left|II_z\right\rangle = \left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle \tag{1}$$

反应产物的两个分支，同位旋状态(无耦合表象)为

$$\begin{aligned} &(\pi^+,n),\ \left|I_1 I_{1z}, I_2 I_{2z}\right\rangle = \left|11, \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle \\ &(\pi^0,p),\ \left|I_1 I_{1z}, I_2 I_{2z}\right\rangle = \left|10, \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle \end{aligned} \tag{2}$$

同位旋的耦合法则与角动量类似，如将式(1)按照式(2)展开，

$$\begin{aligned} \left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle = &\left|11, \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle 11, \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right|\left.\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle \\ &+ \left|10, \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\left\langle 10, \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right|\left.\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle \end{aligned} \tag{3}$$

第一项相应于产物 (π^+,n)，第二项相应于产物 (π^0,p)．由 C. G. 系数表查得

$$\left\langle 11,\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{2/3}$$

$$\left\langle 10,\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=-\sqrt{1/3} \tag{4}$$

它们的平方就是反应产物两个分支出现的概率，即产物为(π^+,n)的概率为 2/3，产物为(π^0,p)的概率为 1/3，亦即分支比为

$$\frac{2}{3}:\frac{1}{3}=2:1$$

7.10 在核子与 π 介子反应过程中，同位旋(I,I_z)守恒．设反应主要通过 $I=3/2$ 道进行，试求下列反应的分支比．

(a) $p+\pi^+\to p+\pi^+$

(b) $p+\pi^-\to n+\pi^0$

(c) $p+\pi^-\to p+\pi^-$

解 核子 N(质子 p 或中子 n)的同位旋量子数为

$$I_N=\frac{1}{2},I_{Nz}=\pm\frac{1}{2} \tag{1}$$

π 介子(π^+,π^0,π^-)的同位旋量子数为

$$I_\pi=1,I_{\pi z}=1,0,-1 \tag{2}$$

故核子 π 介子体系总同位旋 $I=3/2$ 或 1/2．在耦合表象和非耦合表象中核子 π 介子体系的同位旋本征态分别记为

耦合表象，$|II_z\rangle$，即 $|I_NI_\pi II_z\rangle$

非耦合表象，$|I_NI_{Nz}\rangle|I_\pi I_{\pi z}\rangle$

由于 I_z 守恒，所以反应前后

$$I_z=I_{\pi z}+I_{Nz} \tag{3}$$

不变．反应(a)、(b)、(c)中，反应前后的同位旋状态均为非耦合表象中的基矢，它们在耦合表象中的表达式如下：

$$|p,\pi^+\rangle=\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\left|11\right\rangle=\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$$

$$|\mathrm{p},\pi^-\rangle = \left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle|1,-1\rangle = \Big(\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \langle\frac{3}{2},-\frac{1}{2}| + \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|\Big)\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle|1,-1\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{4}$$

$$|\mathrm{n},\pi^0\rangle = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\ |10\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}}\ \left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

以 $V(\mathrm{N},\pi)$表示 N-π 作用势，$f_{3/2}$和 $f_{1/2}$表示同位旋三重态和单态的跃迁振幅．由于同位旋守恒，跃迁(反应)过程可以表示成

$$V\left|\frac{3}{2},I_z\right\rangle \to f_{3/2}\left|\frac{3}{2},I_z\right\rangle$$

$$V\left|\frac{1}{2},I_z\right\rangle \to f_{1/2}\left|\frac{1}{2},I_z\right\rangle \tag{5}$$

由题设，反应的主要通道为 $I=3/2$，亦即 $|f_{3/2}| \gg |f_{1/2}|$．如略去 $f_{1/2}$项，则除去共同的常数因子后，三种反应的跃迁矩阵元为

(a) $\langle \mathrm{p}\pi^+|V|\mathrm{p}\pi^+\rangle \Rightarrow f_{3/2} = f_a$

(b) $\langle \mathrm{n}\pi^0|V|\mathrm{p}\pi^-\rangle \Rightarrow \frac{\sqrt{2}}{3}f_{3/2} - \frac{\sqrt{2}}{3}f_{1/2}$

$$\approx \frac{\sqrt{2}}{3}f_{3/2} = f_b \tag{6}$$

(c) $\langle \mathrm{p}\pi^-|V|\mathrm{p}\pi^-\rangle \Rightarrow \frac{1}{3}f_{3/2} + \frac{2}{3}f_{1/2}$

$$\approx \frac{1}{3}f_{3/2} = f_c$$

它们的平方之比即三种反应的分支比：

$$\sigma_a : \sigma_b : \sigma_c = f_a^2 : f_b^2 : f_c^2 = 9 : 2 : 1 \tag{7}$$

实验分析表明，这个分支比关系基本上是正确的．

7.11 在非相对论情况下，试根据各种对称性要求，分析它们对于二核子相互作用势函数形式的限制．

解 核子-核子作用势可由二核子的坐标、动量、自旋、同位旋等力学量构成．考虑到体系的时间平移不变性，作用势不应显含时间 t，所以

$$V = V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2) \tag{1}$$

考虑到空间平移不变性，V 中不能含质心坐标

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)$$

只能含相对坐标 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$．再考虑到 Galileo 变换下 V 的不变性，V 中不能含体系总动量 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2$，只能含相对动量

$$\boldsymbol{p} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2)$$

考虑到以上对称性后，可以确定 V 的可能形式为

$$V = V(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2) \tag{2}$$

再考虑 V 对同位旋的依赖关系．利用单粒子同位旋分量的对易关系

$$\tau_\alpha \tau_\beta = \delta_{\alpha\beta} + i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\tau_\gamma, (\alpha, \beta, \gamma = x, y, z)$$

$\boldsymbol{\tau}$ 的任意多项式均可简化成 $\boldsymbol{\tau}$ 的线性函数，所以 V 可以表示成 $\boldsymbol{\tau}_1$（以及 $\boldsymbol{\tau}_2$）的线性函数．考虑到同位旋空间的转动不变性，V 中只应含有由 $\boldsymbol{\tau}_1$ 和 $\boldsymbol{\tau}_2$ 组成的标量，即 $(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)$．($\boldsymbol{\tau}_1^2$ 和 $\boldsymbol{\tau}_2^2$ 也是标量，但均等于常数 3，不必写出．)因此可以进一步确定 V 的函数形式为

$$V = V_1(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 V_2(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{3}$$

下面讨论与同位旋无关的其他对称性要求对 V 的限制．所得结论对 V_1、V_2 同样适用，所以 V 的下标 1、2 从略．

根据空间反射不变性，应有

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2)=V(-\boldsymbol{r},-\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2) \tag{4}$$

而根据全同粒子交换对称性，应有

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2)=V(-\boldsymbol{r},-\boldsymbol{p},\sigma_2,\sigma_1) \tag{5}$$

联合式(4)、(5)，可知

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2)=V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_2,\sigma_1) \tag{6}$$

现在考虑坐标空间转动不变性对 V 的限制．将 V 展开成 σ_1、σ_2 各分量的幂级数，利用 Pauli 矩阵的对易关系，V 可以表示成

$$\begin{aligned}V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2)=&V_\alpha(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})+V_\beta(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2)\\&+V_\gamma(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2)\end{aligned} \tag{7}$$

其中 V_α 与自旋无关，V_β 为 σ_1、σ_2 的一次函数，V_γ 为 σ_1、σ_2 的二次函数[$\sigma_i(1)\sigma_j(2)$型]．V_α 必须是空间转动下的标量，而由 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 可以构成的标量 Hermite 算符只有

$$\boldsymbol{r}^2,\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}$$

考虑到时间反演不变性，最后一种必须以平方的形式出现．可以证明

$$(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})^2=2\boldsymbol{r}^2\boldsymbol{p}^2+2\boldsymbol{p}^2\boldsymbol{r}^2-4\boldsymbol{l}^2+3\hbar^2$$

(其中 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，为质心系中轨道角动量算符)因此 V_α 可以表示成

$$V_\alpha=V_\alpha(\boldsymbol{r}^2,\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{l}^2) \tag{8}$$

V_β 是 σ_1、σ_2 的一次函数，在式(6)的限制下，V_β 必须与总自旋

$$\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_2)$$

成正比．但因 V_β 必须是空间转动下的标量，所以 $\boldsymbol{S}$ 必须和另一矢量以内积的形式构成标量，唯一的构造是$(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l})$．所以式(7)中 V_β 的可能形式是

$$V_\beta(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\sigma_1,\sigma_2)=(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l})V_\beta(\boldsymbol{r}^2,\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{l}^2) \tag{9}$$

V_γ 是 σ_1、σ_2 的二次型，这种形式的标量[而且满足式(6)]有下列几种：

$$\sigma_1\cdot\sigma_2,(\sigma_1\cdot\boldsymbol{r})(\sigma_2\cdot\boldsymbol{r}),(\sigma_1\cdot\boldsymbol{p})(\sigma_2\cdot\boldsymbol{p})$$

$$(\sigma_1\cdot l)(\sigma_2\cdot l)+(\sigma_2\cdot l)(\sigma_1\cdot l) \qquad (10)$$
$$(\sigma_1\cdot p)(\sigma_2\cdot r)+(\sigma_2\cdot r)(\sigma_1\cdot p)$$
$$+1\longleftrightarrow 2\text{(前两项中 1,2 互换)}$$

考虑到时间反演不变性,最后一种应该用下式代替:

$$[(\sigma_1\cdot p)(\sigma_2\cdot r)+(\sigma_2\cdot r)(\sigma_1\cdot p)$$
$$+1\longleftrightarrow 2](r\cdot p+p\cdot r)$$

可以证明,这一项可以表示成式(10)中前几项的叠加. 因此,V_r 可以表示成

$$\begin{aligned} V_r = {} & \sigma_1\cdot\sigma_2 V_r^{\mathrm{I}} + (\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r)V_r^{\mathrm{I}} \\ & + (\sigma_1\cdot p)(\sigma_2\cdot p)V_r^{\mathrm{II}} \\ & + [(\sigma_1\cdot l)(\sigma_2\cdot l) + 1\longleftrightarrow 2]V_r^{\mathrm{N}} \end{aligned} \qquad (11)$$

其中 V_r^{I} 至 V_r^{N} 均为(r^2,p^2,l^2)的函数.

总结一下,核子核子作用势的一般形式为式(3),其中 V_1、V_2 均可表示成下列形式:

$$\begin{aligned} V_{1,2} = {} & V_0 + V_\sigma(\sigma_1\cdot\sigma_2) + V_T S_{12} + V_{ls}(S\cdot l) \\ & + V_{\sigma p}(\sigma_1\cdot p)(\sigma_2\cdot p) \\ & + V_{\sigma l}[(\sigma_1\cdot l)(\sigma_2\cdot l) + 1\longleftrightarrow 2] \end{aligned} \qquad (12)$$

其中 V_0、V_σ、V_T、V_{ls}、$V_{\sigma p}$、$V_{\sigma l}$都是(r^2,p^2,l^2)的函数,而

$$S_{12} = \frac{3}{r^2}(\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r) - (\sigma_1\cdot\sigma_2) \qquad (13)$$

用 S_{12}代替$(\sigma_1\cdot r)(\sigma_2\cdot r)$的好处是,$S_{12}$对空间各方向的平均值为 0,即

$$\int S_{12}\mathrm{d}\Omega = 0$$

因此张量力 $V_T S_{12}$对空间各方向的平均值为 0(参看上册题 6.42).

7.12 同上题,进一步假设核子核子作用势为定域势,试写出

其一般表示式.

解 作为定域势,应与动量 $\boldsymbol{p}$ 无关,因而与轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 也无关. 在上题式(12)中去掉与 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{l}$ 有关的各项后,可知

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\tau}_1,\boldsymbol{\tau}_2) = V_c + V_T \tag{1}$$

V_c 为中心力,V_T 为张量力,即

$$V_c = V_0(r) + V_\sigma(r)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) + V_\tau(r)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) + V_{\sigma\tau}(r)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) \tag{2}$$

$$V_T = [V_{T0}(r) + V_{T\tau}(r)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)]S_{12} \tag{3}$$

存在张量力的证据之一是氘核(np 结合态)的基态($J^\pi = 1^+$)电四极矩不为 0. 若核力为纯中心力,则基态轨道角动量 $l=0$,电四极矩应为 0. 若存在张量力(非中心力),基态将含有 d 波($l=2$)成分,从而具有电四极矩.

引入坐标、自旋、同位旋交换算符 P_r、P_σ、P_τ,波函数的反对称性要求归结为

$$\boxed{P_r P_\sigma P_\tau = -1} \tag{4}$$

另外,容易证明

$$P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2), \qquad P_\tau = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) \tag{5}$$

因此式(2)中各算符均可用 P_r、P_σ、$P_r P_\sigma$ 表示,其中

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) = 1 - 4P_r - 2P_\sigma + 2P_r P_\sigma \tag{6}$$

因此式(2)可以重新写成

$$V_c = V_W(r) + V_M(r)P_r + V_B(r)P_\sigma + V_H(r)P_r P_\sigma \tag{7}$$

其中

$V_W = V_0 - V_\sigma - V_\tau + V_{\sigma\tau}$ (Wigner 力)

$V_M = -4V_{\sigma\tau}$ (Majorana 力)

$V_B = 2V_\sigma - 2V_{\sigma\tau}$ (Bartlett 力)

$V_H = 2V_{\sigma\tau} - 2V_\tau$ (Heisenberg 力)

7.13 作为一维铁磁体的简化模型,考虑自旋为 $\hbar/2$ 的许多

粒子排列在一直线上，每个粒子各处一定的位置，如图所示．假设每个粒子只与左右近邻发生自旋-自旋相互作用，体系的总能量算符为(取 $\hbar=1$)

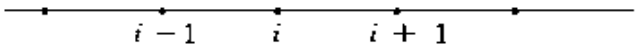


图 7.13

$$H=\gamma\sum_i\left[\frac{1}{4}-\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_{i+1}\right],\ \gamma>0$$

试证明(a)总自旋

$$\boldsymbol{S}=\sum_i\boldsymbol{s}_i$$

为守恒量；(b) 在体系的基态下，相邻粒子之间必然构成自旋三重态(自旋指向互相"平行")．讨论基态能级的简并度．

(本题内容即 Heisenberg 铁磁体一维模型．)

证 属于不同粒子的自旋算符 $\boldsymbol{s}_i$ 和 $\boldsymbol{s}_j(i\neq j)$是互相对易的．以 P_{ij}表示粒子 i 和 j 之间的自旋交换算符，容易证明

$$P_{ij}=\boldsymbol{S}_{ij}^2-1 \tag{1}$$

其中

$$\boldsymbol{S}_{ij}=\boldsymbol{s}_i+\boldsymbol{s}_j$$

$$\boldsymbol{S}_{ij}^2=\boldsymbol{s}_i^2+\boldsymbol{s}_j^2+2\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_j=\frac{3}{2}+2\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_j \tag{2}$$

因此

$$\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_j=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{S}_{ij}^2-\frac{3}{2}\right)=\frac{1}{2}\left(P_{ij}-\frac{1}{2}\right)$$

$$\frac{1}{4}-\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_j=\frac{1}{2}(1-P_{ij}) \tag{3}$$

于是，总能量算符可以写成

$$\boxed{H=\frac{\gamma}{2}\sum_i(1-P_{i,i+1}),\qquad \gamma>0} \tag{4}$$

总自旋算符

$$\boldsymbol{S}=\sum_i \boldsymbol{s}_i$$

显然和 $P_{i,i+1}$ 对易，因此 $\boldsymbol{S}$ 和 H 对易，所以 $\boldsymbol{S}$ 为守恒量．

当近邻粒子 $i,i+1$ 形成自旋三重态(交换对称态)时，$\boldsymbol{S}^2_{i,i+1}$ 取本征值 2，$P_{i,i+1}$ 取本征值 1；当粒子 $i,i+1$ 形成自旋单态(反对称态)时，$\boldsymbol{S}^2_{i,i+1}$ 取本征值 0，$P_{i,i+1}$ 取本征值 -1.

当体系状态为 $\alpha(1)\alpha(2)\cdots\alpha(i)\alpha(i+1)\cdots$，即所有粒子自旋平行“向上”，这时总自旋量子数 $S=\frac{1}{2}\times$(粒子总数)，为 S 的最大值．这时任何一对粒子之间均构成对称态(三重态)，即

$$P_{i,i+1}=1$$

因而 H 取极小值，即 $E=0$，此即体系的基态能级．

将总自旋算符 (S_x-iS_y) 作用于 $\alpha(1)\alpha(2)\cdots\alpha(i)\cdots$，总自旋 z 分量 S_z 的本征值将减少 1，而总 $\boldsymbol{S}^2$ 的量子数 S 则不变，波函数的对称性也不变，因此仍有 $P_{i,i+1}=1$，$E=0$. 依此类推．可见基态能级是简并的，简并度为

$$2S_{\max}+1=\text{粒子总数}+1 \tag{5}$$

总 S_z 取最小值的状态显然是 $\beta(1)\beta(2)\cdots\beta(i)\cdots$，所有粒子自旋均平行“向下”，因此 $P_{i,i+1}=1$，$H=0$.

讨论 式(4)中，相邻的交换算符($P_{i-1,i}$ 和 $P_{i,i+1}$)是不对易的(原因在于 $\boldsymbol{s}_{i-1}\cdot\boldsymbol{s}_i$ 和 $\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_{i+1}$ 不对易)，因此一般来说 H 的本征值并不等于各项 $\frac{\gamma}{2}(1-P_{i,i+1})$ 的本征值之和．但是上述各种完全对称态 $\alpha(1)\alpha(2)\cdots\alpha(i)\cdots$ 则是例外，他们是所有 P_{ij} 的共同本征态(本征值均为 1)，因此各 $(1-P_{i,i+1})$ 同时为 0，能级亦为 0. 由于 H 是正定的[因为 $(1-P_{i,i+1})$ 是正定的]，所以 $E=0$ 必为基态能级．

反之，如同时取各 $P_{i,i+1}=-1$（相当于 $s_i \cdot s_{i+1}=-3/4$），因而认为体系能级的最大值等于 $\gamma\times$（粒子总数 -1），就不对了，因为根本不存在这样的状态．

7.14 粒子在二维谐振子势场中运动，讨论能级的简并度．

解 二维谐振子势的一般形式为

$$V(x,y)=\frac{\mu}{2}(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2) \tag{1}$$

能量本征方程为

$$H\psi=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi + \frac{\mu}{2}(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2)\psi=E\psi \tag{2}$$

由于可以分离变量，其能级可以利用一维谐振子的结果而得出，为

$$E_{n_xn_y}=\left(n_x+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x+\left(n_y+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y$$
$$n_x,n_y=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

如 ω_x/ω_y 为无理数，则所有能级都是非简并的、为便于讨论，令

$$\omega_x=(1-\varepsilon)\omega_0,\omega_y=(1+\varepsilon)\omega_0 \tag{4}$$

则

$$\omega_0=\frac{1}{2}(\omega_x+\omega_y) \tag{5}$$

$$\varepsilon=(\omega_y-\omega_x)/2\omega_0=(\omega_y-\omega_x)/(\omega_y+\omega_x) \tag{6}$$

$$\omega_x\omega_y=(1-\varepsilon^2)\omega_0 \tag{7}$$

ε 称为形变度（注意，$|\varepsilon|<1$）．当 $\varepsilon=0,\omega_x=\omega_y=\omega_0$，成为二维各向同性谐振子．这种对称性导致能级简并，能级公式为

$$E_n=(n+1)\hbar\omega_0.\ n=n_x+n_y=0,1,2,\cdots \tag{8}$$

能级值取决于 n_x,n_y 的一种特殊组合 $n=n_x+n_y$，给定 n 后，(n_x,n_y) 有 $(n+1)$ 种组合方式，所以能级 E_n 的简并度为 $(n+1)$，它比一

般的二维中心力场 $V(\rho)$($\rho=\sqrt{x^2+y^2}$)的能级简并度(等于 2,但基态不简并)高．其原因是二维各向同性谐振子势 $V(\rho)\propto\rho^2$,具有比一般中心力场的 O_2 对称性更高的对称性(SU_2).

如 ω_x/ω_y 为有理数,能级仍可能简并．特别是当

$$\omega_x/\omega_y = 1/2,1/3,\cdots$$

等简单分数时,低激发能级就会出现简并．

以 $\omega_x/\omega_y=1/2$(即 $\epsilon=1/3$)为例,能级为

$$\begin{aligned} E_N &= \frac{2}{3}\left(n_x + 2n_y + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0 \\ &= \frac{2}{3}\left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0 \\ N &= n_x + 2n_y = 0,1,2,\cdots \end{aligned} \tag{9}$$

能级取决于 n_x、n_y 的特殊组合 $N=n_x+2n_y$. 能级简并度为

$$f_N = \begin{cases} \dfrac{N}{2}+1, & N = 0,2,4,\cdots \\ \dfrac{N+1}{2}, & N = 1,3,5,\cdots \end{cases} \tag{10}$$

有些书上将这种简并称为“偶然简并”,其实这种简并仍是系统地出现,是体系的某种对称性的反映．

7.15 讨论三维轴对称谐振子的能级简并度．

解 取对称轴为 z 轴,势能可以表示成

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}\mu\omega_\perp^2\,(x^2+y^2) + \frac{1}{2}\mu\omega_z^2 z^2 \tag{1}$$

能级为

$$\begin{aligned} E_{n_\perp n_z} &= (n_\perp + 1)\,\hbar\omega_\perp + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z \\ n_\perp &= n_x + n_y, \qquad n_x,n_y,n_z = 0,1,2,3,\cdots \end{aligned} \tag{2}$$

能级取决于量子数 $n_\perp$、n_z. 如 $\omega_\perp/\omega_z$ 为无理数,则能级简并度为

(参看上题)

$$f = n_\perp + 1 \tag{3}$$

为便于讨论,令

$$\omega_\perp = \left(1 + \frac{\varepsilon}{3}\right)\omega_0, \qquad \omega_z = \left(1 - \frac{2\varepsilon}{3}\right)\omega_0 \tag{4}$$

则

$$\omega_0 = \frac{1}{3}(2\omega_\perp + \omega_z) \tag{5}$$

$$\varepsilon = (\omega_\perp - \omega_z)/\omega_0 = (\omega_\perp - \omega_z)/(2\omega_\perp - \omega_z) \tag{6}$$

ε 称为形变度. 如 $\varepsilon=0$,则 $\omega_\perp=\omega_z=\omega_0$,成为三维各向同性谐振子. 如 $\varepsilon>0$,则 $\omega_\perp>\omega_z$,等势面为长椭球;如 $\varepsilon<0$,则 $\omega_\perp<\omega_z$,等势面为扁椭球.

如 $\omega_\perp/\omega_z$ 为有理数,能级简并度将比式(3)有所增加.

对于 $\omega_\perp=\omega_z$,即三维各向同性谐振子,其能级和简并度是众所周知的①:

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0$$

$$N = n_x + n_y + n_z = 0,1,2,3,\cdots \tag{7}$$

简并度

$$f_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{8}$$

一般中心力场(SO_3 对称性)的能级简并度为$(2l+1)$,三维各向同性谐振子势场具有更高的对称性(SU_3),故简并度更大.

对于 $\omega_\perp/\omega_n=2$ ($\varepsilon=3/5$),能级为

$$E_N = \frac{1}{2}\left(N + \frac{5}{2}\right)\hbar\omega_\perp$$

$$N = 2n_\perp + n_z = 2(n_x + n_y) + n_z = 0,1,2,\cdots \tag{9}$$

给定 N 后,$n_\perp$和 n_z 的可能组合为

---

① 参看曾谨言,《量子力学》卷 I (科学出版社,1997), § 6.4.

$$n_\perp = 0, \quad 1, \cdots, \frac{N}{2}(N\text{ 偶}) \quad \text{或} \frac{N-1}{2}(N\text{ 奇})$$
$$n_z = N, \quad N-2, \quad \cdots, 0(N\text{ 偶})\text{ 或 }1(N\text{ 奇})$$

对于每种$(n_\perp, n_z)$，尚有$(n_\perp+1)$种(n_x, n_y)组合，故简并度为

$$f_N = \sum_{n_\perp} (n_\perp + 1)$$
$$= \begin{cases} \frac{1}{8}(N+2)(N+4), & N\text{ 偶} \\ \frac{1}{8}(N+1)(N+3). & N\text{ 奇} \end{cases} \tag{10}$$

7.16 试比较下列几种势场中的粒子能级的简并度．(a) 三维各向同性谐振子势场；(b) 无限深球方势阱或 Woods-Saxon 势场；(c) 进一步假设粒子有自旋 1/2，考虑自旋轨道耦合作用对能级的影响；(d) 设势场发生变形，但保持轴对称，对称轴取为 z 轴；(e) 设此轴对称势场以匀角速度 Ω 绕 x 轴旋转．

解 (a) 三维各向同性谐振子势场

$$V(r) = \frac{1}{2}M\omega^2 r^2 \tag{1}$$

中粒子的能级为

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{2}$$

其中

$$N = n_x + n_y + n_z, \quad n_x, n_y, n_z, N = 0, 1, 2, \cdots \tag{3}$$

给定 N 后，(n_x, n_y, n_z)有$\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$种组合，所以 E_N 能级的简并度为

$$\boxed{f_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)} \tag{4}$$

如在球坐标系中解定态 Schrödinger 方程，并取能量本征函

数为(H,l^2,l_z)的共同本征函数，可得能级表达式为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

其中

$$N=2n_r+l,\qquad l,\ n_r=0,1,2,\cdots \tag{5}$$

n_r是径向量子数，即径向波函数的节点(不包括无限远点)数．给定N后，l的可能值为

$$l=N,N-2,\cdots,1(N\text{奇})\text{或}0(N\text{偶})$$

对应每一个l值，l_z尚有$(2l+1)$种本征值：

$$l_z=m=l,l-1,\cdots,-l$$

所以能级简并度为

$$f_N=\sum_l(2l+1)=\frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{6}$$

和式(4)一致．能级简并度取决于势场的对称性，选取不同的坐标系，当然不会影响简并度的计算结果．

(b) 无限深球方势阱

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<R\\ \infty, & r\geqslant R\end{cases} \tag{7}$$

和 Woods-Saxon 势场

$$V(r)=-V_0/[1+e^{(r-R)/a}] \tag{8}$$

(V_0刻画势阱深度，R代表势阱"半径"，a代表势阱延伸的有效距离．)这些势场都属于一般的中心势场，粒子的轨道角动量l是守恒量．在球坐标系中求解定态 Schrödinger 方程，并取能量本征函数为(H,l^2,l_z)的共同本征函数，所得径向方程中只出现角量子数l，而与磁量子数m无关．解径向方程时，根据边界条件可以求出能量本征值，它既依赖于角量子数l，也与径向量子数n_r有关，故能级一般应表示成$E_{n_r l}$．由于能级与磁量子数m无关，所以能级

$E_{n,l}$的简并度为

$$\boxed{f_{n,l}=2l+1} \tag{9}$$

这是中心力场问题中最小的能级简并度．在三维各向同性谐振子势场中，能级只依赖于 n_r 与 l 的一种特殊组合，即依赖于

$$N = 2n_r + l$$

给定 N 后，l 尚有多种取值($l=N, N-2, \cdots$)均给出相同的能量，所以能级的简并度增大．这是由于 $V(r)\propto r^2$ 这种特殊对称性造成的．三维各向同性谐振子势场具有 SU_3 对称性，而一般中心力场只具有 SO_3 对称性．($SO_3\subset SU_3$)．

(c) 在一般中心力场中，如粒子具有自旋 $s=1/2$，而势场与自旋无关，则能级对于自旋的不同指向是简并的，即对

$$m_s = \pm\frac{1}{2}$$

简并．因此各能级的简并度都增加一倍，$f_{n,l}=2(2l+1)$．

若存在自旋轨道耦合作用，作用势$\propto \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}$，则 $\boldsymbol{l}$ 与 $\boldsymbol{s}$ 不再是守恒量．但可证明粒子的总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$ 仍为守恒量，l^2 也是守恒量．这时可选(H, l^2, J^2, J_z)作为守恒量完全集，它们的共同本征态记为 ψ_{n,l,j,m_j}，相应的能级记为 $E_{n,l,j}$，它不依赖于 m_j(J_z 的本征值)，因此能级简并度为

$$\boxed{f_{n,l,j}=2j+1} \tag{10}$$

量子数 j 和 l 的关系是

$$j=\begin{cases} l\pm 1/2, & l\neq 0 \\ 1/2, & l=0 \end{cases} \tag{11}$$

给定 n,l 后，如 $l=0$(s 态)，则 $j=1/2$，只形成一个能级，能值不变，简并度为 2；如 $l\neq 0$，则 $j=l\pm 1/2$，原来的(没有自旋轨道耦合作用的)能级 $E_{n,l}$在自旋轨道耦合作用下分裂成两条能级，其中 $j=l+1/2$ 者简并度为$(2l+2)$，$j=l-1/2$ 者简并度为 $2l$，这两条能级相应的状态总数为$(4l+2)$，和能级分裂前的状态数 $f_{n,l}$相同．

(d) 如势场发生轴对称变形(取对称轴为 z 轴),则 l^2 和 J^2 不再是守恒量,但 J_z 仍守恒. 但是通常所指轴对称变形势场还具有镜像反射(对于包含 z 轴在内的平面而言)对称性. 例如无限深椭球势阱. 又例如可分离势场

$$V(x,y,z) = V_1(\rho) + V_2(z), \qquad \rho = \sqrt{x^2 + y^2} \tag{12}$$

其中包括轴对称变形谐振子势场

$$V = \frac{1}{2}M\omega_\perp^2 \rho^2 + \frac{1}{2}M\omega_z^2 z^2 \tag{13}$$

在此情况下,能级与轨道角动量沿对称轴的投影 l_z 的绝对值 $|m|$ 有关,即能级对子 $l_z = \pm m$ 是简并的. 所以通常能级为二重简并. 至于轴对称变形谐振子势场(13),由于 $V_1(\rho) \propto \rho^2$,具有 SU_2 对称性,能级有更高的简并度(参看上册题 3.9).

在一般中心力场中运动的带电粒子,如再受到均匀外电场(沿 z 轴方向)的作用,也属于这种情况. 例如碱金属原子光谱的 Stark 效应.(参看上册题 8.23)

能级的这种二重简并性,也可以解释为 Kramers 简并,即时间反演不变性对 Fermi 子体系能级带来的简并. 这时,ψ_m 与 ψ_{-m} 互为时间反演态(相因子的差别除外),它们对应的能量相同.

在中心力场中运动的带电粒子,如再受到均匀外磁场(沿 z 轴方向)的作用,能级将与 l_z 的本征值 m 直接有关,ψ_m 与 ψ_{-m} 将对应不同的能级,这时能级简并全部解除. 例如碱金属原子光谱的 Zeeman 效应. 简并消除是由于外磁场的作用破坏了时间反演不变性(参看上册题 3.12).

(e) 设轴对称变形势场被推动,以匀角速度 Ω 绕 x 轴旋转,在这转动参参系中看来,粒子将受到一项 Coriolis 作用

$$H_C = -\Omega l_x \tag{14}$$

它反映粒子所受到的 Coriolis 力和离心力. 在此情况下,l_z 不再是守恒量,$[l_z, H_C] \neq 0$,或者说时间反演不变性被破坏,能级简并全部消除.

以上讨论粗略地反映了 30 多年来原子核结构理论的几个发展阶段．在 1949 年以前，只考虑核子在原子核内受到一个中心势场的作用，而未考虑自旋轨道耦合作用，所得出的单粒子能级无法解释由实验确定的“幻数”. M. G. Mayer 与 J. H. D. Jensen 提出了具有强自旋轨道耦合作用的壳层模型，正确地得出了“幻数”. 50 年代，A. Bohr 与 B. R. Mottelson 认识到原子核可能有变形以及转动和振动，而且对于变形较大的核，形变是轴对称的，这样产生的单粒子能级是二重简并的，这就是著名的 Nilsson 能级．在 70 年代后，对于高自旋核态的研究，说明 Coriolis 作用的重要性．考虑 Coriolis 作用后，轴对称性被破坏，单粒子能级的二重简并最终被全部解除．对于这一点，也可以理解为 Coriolis 作用破坏了时间反演不变性，从而解除了 Kramers 简并．

7.17 求 Galileo 变换下波函数的变换规律．

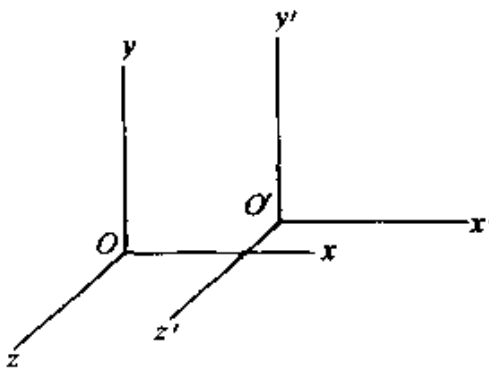


图 7.17

解 设惯性质 $O'(x',y',z')$ 相对于惯性系 $O(x,y,z)$ 以匀速 v 沿 x 轴正向运动，同一个物理点在两个惯性系中的坐标由 Galileo 变换联系：

$$\begin{cases} x' = x - vt \\ y' = y, z' = z, t' = t \end{cases} \tag{1}$$

并设在 O 和 O' 系中粒子所受作用力相同，即

$$\begin{aligned} V'(x',y',z',t') &= V(x,y,z,t) \\ &= V(x' + vt', y', z', t') \end{aligned} \tag{2}$$

在 $O(x,y,z)$ 系中，Schrodinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \right.$$

$$\left. + V(x,y,z,t) \right]\psi(x,y,z,t) \qquad (3)$$

Schrodinger 方程应该具有 Galileo 不变性，即在 $O'(x',y',z')$ 系中方程应为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'(x',y',z',t')$$

$$= [-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}+\frac{\partial^2}{\partial z'^2}\right)$$

$$+ V'(x',y',z',t')]\psi'(x',y',z',t') \qquad (4)$$

粒子的空间概率分布应该不受 Galileo 变换的影响，因此应有

$$|\psi(x,y,z,t)|^2 = |\psi'(x',y',z',t')|^2 \qquad (5)$$

因而波函数 ψ 和 ψ' 间的变换关系可以表示成下列形式：

$$\psi' = \mathrm{e}^{S/\mathrm{i}\hbar}\psi \qquad (6)$$

其中 $S=S(x,y,z,t)$ 为实函数，其具体形式应该取决于变换式(1)，而与势能 V 无关．将式(6)代入式(4)，并利用微分变换关系

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial t}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial x}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial y'} = \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\frac{\partial}{\partial z'} = \frac{\partial}{\partial z} \qquad (7)$$

经过仔细计算，得到 $S(x,y,z,t)$ 满足的方程为

$$\frac{\partial S}{\partial x} - mv = 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial y} = 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial z} = 0 \qquad (8a)$$

$$\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-v\frac{\partial S}{\partial x}-\frac{\partial S}{\partial t}=0 \tag{8b}$$

式(8a)之解为

$$S=S(x,t)=mvx+f(t)$$

代入式(8b),求得

$$f(t)=C-\frac{1}{2}mv^2t$$

C 为积分常数. 但 $v=0$ 时,O' 系和 O 系重合,ψ' 应等于 ψ,即 S 应等于 0,故应取 $C=0$,从而得到

$$S(x,t)=mvx-\frac{1}{2}mv^2t \tag{9}$$

代入式(6),即得波函数的变换规律

$$\boxed{\psi'=\psi\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\left(mvx-\frac{1}{2}mv^2t\right)\right]} \tag{10}$$

逆变换为

$$\begin{aligned}\psi&=\psi' e^{iS/\hbar}\\&=\psi'\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(mvx'+\frac{1}{2}mv^2t'\right)\right]\end{aligned} \tag{10'}$$

相当于式(10)中 $v\to -v$,带"′"的量和不带"′"的量互换.

讨论 $S(x,t)$的函数形式也可以用下法求出.

因 $S(x,t)$和势能 V 无关,所以只需比较平面波(自由粒子)在 O 系和 O' 系中的表现形式,即可确定 $S(x,t)$.

沿 x 方向运动的自由粒子,在Galileo 变换下,动量、能量的变换关系为

$$p'=p-mv$$

$$\begin{aligned}E'=\frac{p'^2}{2m}&=\frac{p^2}{2m}-vp+\frac{1}{2}mv^2\\&=E-vp+\frac{1}{2}mv^2\end{aligned} \tag{11}$$

据此，O 系和 O' 系中相应的平面波波函数为

$$\psi = e^{i(px-Et)/\hbar}$$

$$\psi' = e^{i(p'x'-E't')/\hbar} \tag{12}$$

将变换关系(1)，(11)代入式(12)，即得

$$\psi' = \psi \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\left(mvx - \frac{1}{2}mv^2t\right)\right]$$

此即式(10)．由于这个变换关系仅取决于 O' 系和 O 系的相对速度 v，而与粒子的动量 p 无关，所以上式适用于任何自由粒子，它正是所求的变换关系．

7.18 设质量为 m 的两个粒子，处于一维无限深方势阱($0 \leqslant x \leqslant a$)中．如忽略二粒子的相互作用，则体系的能量本征态可表示为

$$\psi_{n_1n_2}(x_1,x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2), n_1,n_2 = 1,2,3,\cdots$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{1}$$

能量本征值为

$$E_{n_1n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2) \tag{2}$$

基态波函数为 $\psi_{11}(x_1,x_2)$，能量为 $\pi^2\hbar^2/ma^2$，不简并．第一激发态为二重简并，$(n_1,n_2)=(1,2)$或$(2,1)$，能量为 $\varepsilon = \frac{5}{2}\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$．设二粒子之间有短程相互作用 $H' = g\delta(x_1 - x_2)$，试用简并态微扰论计算能级的移动．

解

令 $\psi_\alpha(x_1,x_2) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2), \psi_\beta = \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)$ (3)

易于计算出

$$H'_{\alpha\alpha} = H'_{\beta\beta} = H'_{\alpha\beta} = g/a \tag{4}$$

所以一级微扰近似下，能量 E 由下式确定

$$\begin{vmatrix} \mathscr{E} + g/a - E & g/a \\ g/a & \mathscr{E} + g/a - E \end{vmatrix} = 0 \tag{5}$$

解出得 $E = E_{\pm} = \mathscr{E} + g/a \pm g/a$，即 $E_- = \mathscr{E}$（不移动），而 $E_+ = \mathscr{E} + 2g/a$.

设 $g>0$（斥力），则较低能级 $E_- = \mathscr{E}$ 的波函数为

$$\psi^{(-)}_{(x_1,x_2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1,2}(x_1,x_2) - \psi_{2,1}(x_1,x_2)] \tag{6}$$

是空间交换反对称态．较高能级 $E_+ = \mathscr{E} + 2g/a$ 的波函数为

$$\psi^{(+)}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1,2}(x_1,x_2) + \psi_{2,1}(x_1,x_2)] \tag{7}$$

是空间交换对称态．

7.19 质量为 m 的两个粒子处于谐振子势 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中．设一个粒子处于基态 $\psi_0(x)$，一个粒子处于第一激发态 $\psi_1(x)$. 当不计及两个粒子相互作用时，两个粒子组成的体系的波函数可分三种情况：(1) 两粒子可以分辨（非全同）情况，波函数不计及交换对称性，

$$\psi_D(x_1,x_2) = \psi_0(x_1)\psi_1(x_2) \tag{1}$$

(2) 对于全同粒子（不可分辨），空间波函数要求满足交换对称或反对称，

$$\psi_S(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) + \psi_0(x_2)\psi_1(x_1)] \tag{2}$$

$$\psi_A(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) - \psi_0(x_2)\psi_1(x_1)] \tag{3}$$

例如，对于自旋为 0 的两个全同粒子，空间波函数就应该为 ψ_S，而对于自旋为 1/2 的粒子，若处于自旋三重态，则空间波函数应取 ψ_A，若处于自旋单态，则空间波函数应取 ψ_S.

现假设两个粒子有相互作用

$$V(x_1,x_2)=\frac{g}{d\sqrt{\pi}}e^{-(x_1-x_2)^2/2d^2} \tag{4}$$

g 表示作用强度，d 表征力程．不难证明

$$\lim_{d\to 0}V(x_1,x_2)=g\delta(x_1-x_2). \tag{5}$$

试用微扰论一级近似计算三种情况下的能级移动和两个粒子相对位置分布的特点．

答：利用 $\psi_0(x)=\sqrt{\frac{1}{L\sqrt{\pi}}}e^{-x^2/2L^2}$，　$L=\sqrt{\hbar/m\omega}$

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L\sqrt{\pi}}}\left(\frac{x}{\alpha}\right)e^{-x^2/2L^2} \tag{6}$$

可得能级移动分别为

$$\Delta E_D=(\psi_D,V\psi_D)=\frac{g}{\sqrt{\pi}}\frac{L^2+d^2}{(2L^2+d^2)^{3/2}}=V_0\left[\frac{1+\lambda^2}{(2+\lambda^2)^{3/2}}\right] \tag{7}$$

$$\Delta E_S=(\psi_S,V\psi_S)=\frac{g}{\sqrt{\pi}}\frac{2L^2+d^2}{(2L^2+d^2)^{3/2}}=V_0\left[\frac{2+\lambda^2}{(2+\lambda^2)^{3/2}}\right] \tag{8}$$

$$\Delta E_A=(\psi_A,V\psi_A)=\frac{g}{\sqrt{\pi}}\frac{d^2}{(2L^2+d^2)^{3/2}}=V_0\left[\frac{\lambda^2}{(2+\lambda^2)^{3/2}}\right] \tag{9}$$

式中 $V_0=g/L\sqrt{\pi}$，$\lambda=d/L$（无量纲参数）．ΔE 随参数 λ 的变化，见图 7.19．图中点线……是空间波函数对称(S)情况，划线------是反对称(A)情况，实线——是可分辨(D)情况．可以看出，ΔE 与两个粒子的交换对称性密切相关．

参数 $\lambda=d/L$ 是力程与谐振子势中粒子自然长度 L 之比．当 $\lambda\ll1$（力程≪两粒子相对距离）时，三种情况下的 ΔE 相差颇大，是波函数的交换对称性（全同性）导致的一种量子效应．当 $\lambda\gg1$ 时，这种差别逐渐消失．

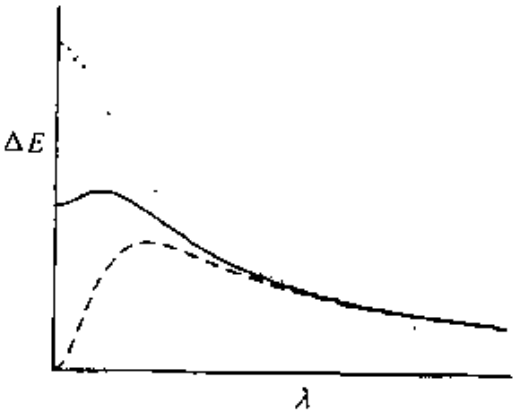


图 7.19 ΔE 随 λ 变化示意图

以上结果可以从两个粒子的相对距离的平方的平均值来理解．不难证明，在三种情况下，$\bar{x}_1=\bar{x}_2=0$，而

	$\overline{x_1^2}$	$\overline{x_2^2}$	$\overline{x_1x_2}$	$\overline{(x_1-x_2)^2}$
ψ_D	$L^2/2$	$3L^2/2$	0	$2L^2$
ψ_S	L^2	L^2	$L^2/2$	L^2
ψ_A	L^2	L^2	$-L^2/2$	$3L^2$

可见，与 ψ_D 情况（可分辨，非全同粒子）相比，在 ψ_S 态下，两粒子相对靠拢，表现两粒子有吸引作用，而在 ψ_A 态下，两粒子相对远离，表现两者有排斥作用．

7.20 讨论一维无限深势阱（$0\leqslant x\leqslant L$）中的电子气体的性质．

解

粒子能级公式为

$$E=E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2,\qquad n=1,2,3,\cdots \tag{1}$$

电子从最低能级（$n=1$）开始，在不违反 Pauli 原理的原则下，一直填充到 Fermi 能级（$n=n_f$）．考虑到电子的自旋自由度，电子气的电子总数为

$$N = 2n_F \tag{2}$$

Fermi 能为

$$E_F = \frac{\pi_2 \hbar^2}{2mL^2} n_F^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL^2} N^2 \tag{3}$$

电子气的总能量为

$$\begin{aligned} E_t &= 2\sum_{n=1}^{n_F} E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \sum_{n=1}^{n_F} n^2 \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \frac{1}{6} n_F(n_F + 1)(2n_F + 1) \\ &\approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{3mL^2} n_F^3 \quad (n_F \gg 1) \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mL^2} N^3 \end{aligned} \tag{4}$$

每个电子的平均能量为

$$\overline{E} = E_t/N \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mL^2} N^2 \tag{5}$$

不难看出

$$\overline{E} = \frac{1}{3} E_F \tag{6}$$

定义 $n_e = N/L$ （一维电子气的线密度），则

$$E_F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} n_e \propto n_e \tag{7}$$

即 E_F 和 $\overline{E}$ 都与 n_e 成正比．

值得注意，Pauli 原理在此起了重要作用．如不计及 Pauli 原理，则电子气的最低能量为 NE_1．而

$$E_t/NE_1 = \frac{N^2}{12} \qquad (N \gg 1) \tag{8}$$

E_t 比 NE_1 大得多．与此类似，如要压缩阱壁（缩小阱宽 L），则电子气将给阱壁作用力

$$F = -\frac{\partial E_t}{\partial L} = \frac{\pi^2\hbar^2}{12m}n_e^3 \tag{9}$$

也是不考虑 Pauli 原理情况下的作用力的 $N^2/12$ 倍．

7.21 讨论边长为 L 的二维盒子中的电子气体的性质．

解

二维盒子中的粒子的能级公式为

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2), n_x, \qquad n_y = 1,2,3,\cdots$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$$

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 \tag{1}$$

电子从基态开始，在不违反 Pauli 原理的原则下，一直往高能级填充，直到 Fermi 能级．对于电子数目很大的体系，我们不妨把量子数 n 看成连续变化，以计算电子气的各种性质．为此，把 (n_x, n_y) 换成“平面极坐标”（图 7.21），考虑到电子的自旋自由度，处于量子数 $(n, n+\mathrm{d}n)$ 中的电子数为

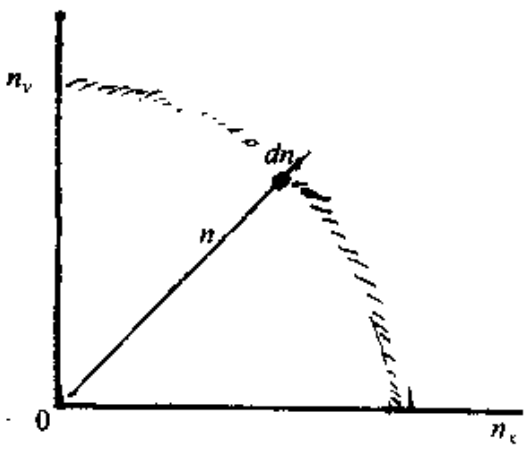


图 7.21

$$\mathrm{d}N = 2\cdot\frac{2\pi n\mathrm{d}n}{4}$$

$$= \pi n\mathrm{d}n \tag{2}$$

利用(1)式，得

$$\mathrm{d}E = \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}n\mathrm{d}n \tag{3}$$

所以态密度

$$\rho(E)\quad \frac{\mathrm{dN}}{\mathrm{d}E}=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2} \tag{4}$$

电子总数为

$$N=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2}\int_0^{E_f}\mathrm{d}E=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2}E_f \tag{5}$$

电子的平均能量为(利用(4)式)

$$\begin{aligned}\overline{E}&=\int_0^{E_f}E\mathrm{d}N/\int_0^{E_f}\mathrm{d}N\\&=\int_0^{E_f}E\mathrm{d}E/\int_0^{E_f}\mathrm{d}E\\&=\frac{1}{2}E_f\end{aligned} \tag{6}$$

令 $n_e=N/L^2$ 表示二维电子气的空间面密度,则由(5)式可得

$$E_f=\frac{\pi\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{L^2}\right)=\frac{\pi\hbar^2}{m}n_e\propto n_e \tag{7}$$

即 Fermi 能量 $E_f\propto n_e$(电子气面密度).

电子气的总能量为

$$\begin{aligned}E_t&=N\overline{E}=\frac{1}{2}NE_F\\&=\frac{\pi\hbar^2}{2mL^2}N^2=\frac{\pi\hbar^2}{2mA}N^2\quad(A=L^2,\text{面积})\end{aligned} \tag{8}$$

如要压缩二维电子气的面积 A,则"表面张力"为

$$F=-\frac{\partial E_t}{\partial A}=\frac{\pi\hbar^2}{2m}\left(\frac{N}{A}\right)^2=\frac{\pi\hbar^2}{2m}n_e^2 \tag{9}$$

F 正比于二维电子气的面密度的平方.

7.22 讨论边长为 L 的三维盒子中的电子气体的性质.

解

单粒子能级公式为

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2),\ n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2,(n^2=n_x^2+n_y^2+n_z^2) \tag{1}$$

$n=\sqrt{2mL^2E}/\pi\hbar$. 在(n_x,n_y,n_z)相应的"球坐标系"中,$(n,n+\mathrm{d}n)$范围中的电子数(计及电子自旋态)为

$$\mathrm{d}N=2\cdot\frac{4\pi n^2\mathrm{d}n}{8}\approx\pi n^2\mathrm{d}n \tag{2}$$

所以,当把(n_x,n_y,n_z)空间中半径$\lesssim R_N$的量子态全填满后,电子总数为

$$N=\pi\int_0^{R_N}n^2\mathrm{d}n=\frac{\pi}{3}R_N^3 \tag{3}$$

即 $R_N=(3N/\pi)^{1/3}$. 电子气的总能量为

$$E_t=2\sum_{(n_x,n_y,n_z)}E(n_x,n_y,n_z)$$

$$=\int_{(\text{Fermi球})}E(n)\mathrm{d}N=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\int_0^{R_N}n^2\pi n^2\mathrm{d}n$$

$$=\frac{\pi^3\hbar^2}{10mL^2}R_N^5 \tag{4}$$

所以

$$E_t=\frac{\pi^3\hbar^2}{10mL^2}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{5/3}N^{5/3} \tag{5}$$

而 Fermi 能量为

$$E_F=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}R_N^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(\frac{3}{\pi}N\right)^{2/3} \tag{6}$$

电子平均能量为

$$\overline{E} = E_t/N = \frac{\pi^3 \hbar^2}{10mL^2}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{5/3} N^{2/3} \tag{7}$$

由(6)、(7)式可得

$$\overline{E} = \frac{3}{5}E_F \tag{8}$$

当 L 固定时，$E_t \propto N^{5/3}$，$\overline{E} \propto N^{2/3}$，$E_F \propto N^{2/3}$.

对于电子数固定的电子气，令 $\Omega = L^3$ 表示电子气的体积，则电子气压强为

$$D = -\frac{\partial E_t}{\partial \Omega} \tag{9}$$

利用(5)式，($E_t \propto L^{-2} = \Omega^{-2/3}$)，可得出

$$P = \frac{\pi^3}{15} \cdot \left(\frac{3}{\pi}\right)^{5/3} \frac{\hbar^2}{m} \cdot n_e^{5/3} \propto n_e^{5/3} \tag{10}$$

式中 $n_e = N/\Omega$ 为电子气的空间密度．所以 $P \propto n_e^{5/3}$，这是 Pauli 原理的表现(对于经典的理想气体，$P \propto n$)．电子气的可压缩性(compressibility)可用 B 来刻画，

$$B = -\Delta P \Big/ \left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega}\right) = -\Omega \frac{\partial P}{\partial \Omega} \tag{11}$$

B 愈大，气体愈不可压缩．利用(10)式，可得出

$$B = \frac{5}{3}P \tag{12}$$

例如，对于 Na 原子气体(每个原子带一个价电子)，$n_e = 2.6 \times 10^{22}$ cm^{-3}，可得出 $B \approx 9 \times 10^9 N/m^2$．实验观测值为 $\sim 6.4 \times 10^{10} N/m^2$．这里显示出 Pauli 原理的重要影响(反抗压缩)．

以上结果还可如下得出．利用(1)和(2)式，可求出

$$\frac{dN}{dE} = \frac{m^2 L^3}{\pi^2 \hbar^2}\sqrt{2mE} \tag{13}$$

所以

$$N=\frac{m^2L^3}{\pi^2\hbar^2}\int_0^{E_F}\sqrt{2mE}\mathrm{d}E=\frac{L^3}{3\pi^2}\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$
$$=\frac{L^3}{3\pi^2}k_F^3 \tag{14}$$

式中 $k_F=\sqrt{2mE_F}/\hbar$ 为Fermi波数. 可以看出,$k_F\propto(N/L^3)^{1/3}=n_e^{1/3}$,而 $E_F\propto n^{2/3}\propto N^{2/3}$. 此外,还容易求出(利用(13)式)

$$\overline{E}=\int E\mathrm{d}N\Big/\int\mathrm{d}N$$
$$=\int_0^{E_f}E\sqrt{E}\,\mathrm{d}E\Big/\int_0^{E_F}\sqrt{E}\,\mathrm{d}E=\frac{3}{5}E_F$$

7.23 设有大量电子(或其它自旋为1/2的全同粒子)被束缚于二维各向同性谐振子势阱中,讨论电子气体的性质.

解

二维各向同性谐振子的能级公式为

$$E_n=(n+1)\hbar\omega,\ n=0,1,2,\cdots \tag{1}$$

简并度为 $f_n=(n+1)$. 设电子从 $n=0$ 能级开始,一直填充到 $n_F=(K-1)$能级,$E_F=K\hbar\omega$. 电子总数为

$$N=2\sum_{n=0}^{K-1}(n+1)=k(K+1)\approx K^2(\text{对于 }K\gg1) \tag{2}$$

电子气的总能量为

$$E_t=2\sum_{n=0}^{K-1}(n+1)E_n=2\hbar\omega\sum_{n=0}^{K-1}(n+1)^2$$
$$=2\cdot\frac{1}{6}K(K+1)(2K+1)\hbar\omega \tag{3}$$
$$=\frac{1}{3}K(K+1)(2K+1)\hbar\omega$$
$$\approx\frac{2}{3}K^3\hbar\omega$$

单个电子的平均能量为

$$\overline{E} = E_t/N = \frac{1}{3}(2K+1)\hbar\omega \tag{4}$$

所以

$$\overline{E} = \frac{2}{3}(1+\frac{1}{K})E_F \approx \frac{2}{3}E_F \quad (\text{对于 } K \gg 1) \tag{5}$$

对于 E_n 能级的粒子，按维里定理，势能平均值为 $\frac{1}{2}m\omega^2\langle r^2\rangle_n = \frac{1}{2}E_n = \frac{1}{2}(n+1)\hbar\omega$，所以 $\langle r^2\rangle_n = (n+1)\hbar/m\omega$. 对于电子气，则

$$\begin{aligned}\langle r^2\rangle &= \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{K-1}2(n+1)(n+1)\hbar/m\omega \\ &= \frac{\hbar}{3m\omega}(2k+1) \simeq \frac{2\hbar K}{3m\omega}, (K \gg 1) \\ &= \frac{2\hbar}{3m\omega}N^{1/2}\end{aligned} \tag{6}$$

二维电子气的“面积”为

$$A = \pi\langle r^2\rangle = \frac{2\pi\hbar}{3m\omega}K \approx \frac{2\pi\hbar}{3m\omega}N^{1/2} \tag{7}$$

电子气的平均面密度为

$$\begin{aligned}n_e &= \frac{N}{A} = \frac{3m\omega}{\pi\hbar}\frac{K(K+1)}{(2K+1)} \\ &= \frac{3m\omega}{2\pi\hbar}K \approx \frac{3m\omega}{2\pi\hbar}N^{1/2}\end{aligned} \tag{8}$$

电子气的总能量为

$$E_t \approx \frac{2}{3}\hbar\omega N^{3/2} \approx \frac{2}{3}\hbar\omega\left(\frac{3m\omega}{2\pi\hbar}\right)^3 A^3 \tag{9}$$

若 ω 保持为常数，则 $E_t \propto N^{3/2} \propto A^3$. 若要缩小二维电子气的面积，要需加“压力”.

$$P = \frac{\partial E_t}{\partial A} = 2\hbar\omega\left(\frac{3m\omega}{2\pi\hbar}\right)^3 A^2 = \frac{3m\omega^2}{\pi}N \tag{10}$$

这是 Pauli 原理的表现．随 N 增大，要压缩电子气则愈困难．

如要保持二维电子气的面密度为常数，从(8)式可以看出，要求 $N^{1/2}\omega$ 为常数，即要求

$$\omega \propto N^{-1/2} \tag{11}$$

此时，二维电子气的“半径”(见(6)式)

$$\sqrt{\langle r^2\rangle} \propto N^{1/2} \tag{12}$$

而

$$A = \pi\langle r^2\rangle \alpha N \tag{13}$$

这可以视为“二维核物质”的一种模型，其面密度是均匀分布的．

7.24 在原子核的壳模型理论中，原子核被看成是在三维各向同性谐振子势 $V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$ 中运动的全同粒子(中子或质子)系．讨论此全同粒子系的性质．

解

单粒子能级为

$$E_k = \left(k+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \qquad k = 0,1,2,\cdots \tag{1}$$

简并度(计及核子自旋态)为 $f_k=(k+1)(k+2)$．设核子从 $k=0$ 能级开始，一直填满 $k=K$ 壳层，则核子(中子或质子)总数为①

$$N = \sum_{k=0}^{K}(k+1)(k+2) = \frac{1}{3}(K+1)(K+2)(K+3)$$
$$\approx \frac{1}{3}k^3 \quad (\text{对子 } K \gg 1) \tag{2}$$

---

① 这里利用了

$$\sum_{k=0}^{K}k = \frac{1}{2}K(K+1),$$
$$\sum_{k=1}^{K}k^2 = \frac{1}{6}K(K+1)(2K+1),$$
$$\sum_{k=0}^{K}k^3 = \left[\frac{1}{2}K(K+1)\right]^3.$$

体系的总能量为

$$\begin{aligned} E_t &= \sum_{k=0}^{K} f_k E_k = \sum_{k=0}^{K} (k+1)(k+2)(k+3/2)\,\hbar\omega \\ &= \hbar\omega \sum_{k=0}^{K} \left[k^3 + \frac{9}{2}k^2 + \frac{13}{2}k + 3 \right] \\ &= \hbar\omega \left[\frac{1}{8}K^6 + \frac{3}{2}K^4 + \frac{13}{4}K^2 + 3K \right] \\ &\approx \frac{1}{8}\,\hbar\omega K^6 \quad (\text{对于 } K \gg 1) \propto N^2\omega \end{aligned} \tag{3}$$

每粒子的能量平均值为

$$\overline{E} = E_t/N \approx \frac{3}{8}K^3\,\hbar\omega \propto N\omega \tag{4}$$

Fermi 能量为 $E_F = (K + 3/2)\,\hbar\omega$，

$$\overline{E}/E_F \approx \frac{3}{8}K^2 \propto N^{2/3} \tag{5}$$

此结果与三维方盒子(边长固定)中的核子气的性质大不相同(对于后者，$\overline{E}/E_F = \frac{3}{5}$，是常数).

根据位力定理，对于处于 E_k 能壳的核子

$$\frac{1}{2}m\omega^2\langle r^2\rangle_k = \frac{1}{2}E_k = \frac{1}{2}(k + \frac{3}{2})\,\hbar\omega$$

所以 $\langle r^2\rangle_k = (k + \frac{3}{2})\,\hbar/m\omega$，而原子核的 r^2 平均值为

$$\begin{aligned} \langle r^2\rangle &= \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{k} f_k\langle r^2\rangle_k \\ &= \frac{1}{N}\,\frac{\hbar}{2m\omega}\sum_{k=0}^{K}(k+1)(k+2)(k+\frac{3}{2}) \\ &= \frac{3}{4}(K+2)\,\hbar/m\omega \approx \frac{3}{4}K\,\hbar/m\omega \quad (K \gg 1) \\ &\approx \frac{3}{4}^{2/3} N^{1/3}\,\hbar/m\omega \end{aligned} \tag{6}$$

核子在空间的平均密度为(设 Ω 为核体积)

$$n = N/\Omega \propto K^3/\langle r^2\rangle^{3/2} \propto K^{3/2}\omega^{3/2}$$
$$\propto N^{1/2}\omega^{3/2} \tag{7}$$

对于实际原子核，它是一个具有短程强相互作用的全同粒子体系，表现为核子的空间密度近似为常数(在这里，Pauli 原理及强短程作用起了关键作用)．这样，作为它的一个近似模型，壳模型中的谐振子势的强度参数 ω 就不应该为常数．按(7)式，均匀空间密度的要求，可得

$$\omega \propto N^{-1/3} \tag{8}$$

对于轻核，中子数 N＝质子数 Z，核子总数 $A=N+Z=2N$，因此

$$\omega \propto A^{-1/3} \tag{9}$$

这正是核壳模型理论中习惯采用的关系式．在这种假定下，原子核的 $\langle r^2\rangle \propto A^{1/3}/\omega \propto A^{2/3}$，因而核半径 $R \propto \sqrt{\langle r^2\rangle} \propto A^{1/3}$，即核半径的 $A^{1/3}$ 律．

7.25 氢原子的 Hamilton 算符为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \tag{1}$$

试按照下列步骤导出束缚态($E<0$)能级公式．

(a) 定义 Runge-Lenz 矢量算符

$$\boldsymbol{K} = \frac{\boldsymbol{r}}{r} + \frac{1}{2\mu e^2}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}) \tag{2}$$

(b) 证明 $\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{K}=0$，

证明 $[\boldsymbol{K},H]=0$，即 $\boldsymbol{K}$ 为守恒量．

(c) 证明 $\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K} = -\frac{2H}{\mu e^4}i\hbar\boldsymbol{l}$，

$$\boldsymbol{K}^2 = 1 + \frac{2H}{\mu e^4}(\boldsymbol{l}^2+\hbar^2)$$

(d) 在束缚态($E<0$)子空间中，定义

$$\boldsymbol{A}=\left(-\frac{\mu e^4}{2H}\right)^{1/2}\boldsymbol{K} \tag{3}$$

证明

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l},\ \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{l}=0$$

$$[l_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,\ \boldsymbol{l}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}$$

(e) 再定义$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A})$，证明

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}$$

$$\boldsymbol{J}^2=-\frac{1}{4}\left(\hbar^2+\frac{\mu e^4}{2H}\right)$$

(f) 确定$\boldsymbol{J}^2$的本征值，从而得出束缚态能级公式.

解 利用公式(见上册题 4.6)

$$[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}]=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}) \tag{4}$$

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{5}$$

可以将由式(2)定义的 Runge-Lenz 矢量写成以下几种等价的表示式：

$$\boldsymbol{K}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{1}{2\mu e^2}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}) \tag{2}$$

$$=\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{1}{\mu e^2}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}) \tag{2'}$$

$$=\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{\mathrm{i}}{2\hbar\mu e^2}[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}] \tag{2''}$$

在上册题 4.7 中已经证明

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}=0 \tag{6}$$

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=0 \tag{7}$$

$$\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{8}$$

利用式(2')以及式(6)、(7)、(8)，即得

$$\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{K}=0 \tag{9}$$

由于$[l^2,p^2]=0,\left[l^2,\frac{1}{r}\right]=0$,因此利用式(2″)即得

$$[\boldsymbol{K},H]=\frac{1}{2\mu}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r},p^2\right]-\frac{\mathrm{i}}{2\mu\hbar}\left(l^2\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]-\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]l^2\right) \tag{10}$$

在上册题 4.4 中已经算出

$$\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{11}$$

$$\left[p^2,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=2\hbar^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}+2\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\frac{1}{r}\boldsymbol{p}\right] \tag{12}$$

代入式(10),得到

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{K},H]=&\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\left[\frac{1}{r}\boldsymbol{p}-\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\right]\\&-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}+\frac{1}{2\mu r^3}[l^2,\boldsymbol{r}]\end{aligned} \tag{13}$$

容易证明

$$\begin{aligned}[l^2,\boldsymbol{r}]&=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{r})\\&=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{l}+2\hbar^2\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{l}&=\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\\&=\boldsymbol{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})-r^2\boldsymbol{p}\end{aligned} \tag{15}$$

因此

$$\begin{aligned}\frac{1}{r^3}[l^2,\boldsymbol{r}]=&2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\\&-2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{p}+2\hbar^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\end{aligned} \tag{16}$$

将式(16)代入式(13),即得

$$[\boldsymbol{K},H]=0 \tag{17}$$

因此 Runge-Lenz 矢量 $\boldsymbol{K}$ 是守恒量. 经典力学中也有这结论.

下面计算 $\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}$. 由式(2′),

$$\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}=\frac{1}{\mu e^2}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]$$

$$+\frac{1}{\mu^2e^4}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})$$

$$-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu^2e^4}[\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}] \tag{18}$$

根据上册题 4.10 的计算，式(18)中最后一项为 0. 再利用公式(见上册题 4.11、4.13)

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r} \tag{19}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}p^2 \tag{20}$$

即得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}&=\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\mu e^2}\frac{\boldsymbol{l}}{r}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu^2e^4}\boldsymbol{l}p^2\\&=-\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\mu e^4}\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}\right)\boldsymbol{l}=-\frac{2}{\mu e^4}H\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}\end{aligned} \tag{21}$$

再计算 $\boldsymbol{K}^2=\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{K}$. 由式(2′)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{K}^2=1&+\frac{1}{\mu^2e^4}[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})^2-\hbar^2p^2-\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}\\&-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]\\&+\frac{1}{\mu e^2}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right.\\&\left.-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\right]\end{aligned} \tag{22}$$

利用公式(见上册题 4.7、4.12、4.9、4.5)

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=0 \tag{23}$$

$$\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar p^2 \tag{24}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})^2=\boldsymbol{l}^2p^2 \tag{25}$$

$$\begin{aligned}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2\\&=2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2\end{aligned} \tag{26}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2 \tag{27}$$

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2p_r=-2i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \tag{28}$$

即得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{K}^2&=1+\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{\mu^2e^4}-\frac{2}{\mu e^2r}\right)(\boldsymbol{l}^2+\hbar^2)\\&=1+\frac{2}{\mu e^4}H(\boldsymbol{l}^2+\hbar^2)\end{aligned} \tag{29}$$

在束缚态子空间中，$E<0$，因此$(-H)^{-1/2}$存在，定义

$$\boldsymbol{A}=\left(-\frac{\mu e^4}{2}H^{-1}\right)^{1/2}\boldsymbol{K} \tag{3}$$

由于 H、$\boldsymbol{K}$ 对易，因此显然有

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=-\frac{\mu e^4}{2}H^{-1}\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}$$

利用式(21)．即得

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l} \tag{30}$$

由于 H、$\boldsymbol{l}$ 对易，则由定义式(3)并利用式(9)，即得

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{A}=0 \tag{31}$$

利用 $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 的对易式

$$[l_\alpha,x_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma,\qquad[l_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}p_\gamma$$

以及 $\boldsymbol{K}$ 的表示式$(2'')$，易得 $\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{K}$ 的对易关系

$$[l_\alpha,K_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}K_\gamma \tag{32}$$

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{K}+\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{K} \tag{33}$$

由于 $\boldsymbol{H}$ 与 $\boldsymbol{l}$ 对易，$\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 显然也有类似关系：

$$[l_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma \tag{34}$$

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A} \tag{35}$$

再定义

$$\boxed{\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A})} \tag{36}$$

显然有对易关系

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\frac{1}{4}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{l})$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J} \tag{37}$$

即 $\boldsymbol{J}$ 满足角动量算符的基本对易式．根据角动量基本理论，易知

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}^2]=0 \tag{38}$$

$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值为

$$\boldsymbol{J}^2=j(j+1)\hbar^2,\qquad j\text{ 取 }0\text{，正整数或正半奇数} \tag{39}$$

$$J_z=m_j\hbar,\qquad m_j=j,j-1,\cdots,(-j) \tag{40}$$

由于 $J_z=\frac{1}{2}(l_z+A_z)$，而 l_z、A_z 对易，故 J_z 的本征值为 l_z 的本征值及 A_z 的本征值之和．l_z 的本征值为

$$l_z=m_l\hbar,\ m_l=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{41}$$

由于 m_j 必须是 $\frac{1}{2}$ 的整倍数，所以 $A_z/\hbar$ 必须是整数．给定 A_z 的一个本征值后，由于 m_l 的最小变化为 1，所以 m_j 的最小变化为 $\frac{1}{2}$，因此 m_j 可取一切正负整数(包括 0)和半奇数，从而 j 的取值为

$$\boxed{j=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\cdots} \tag{42}$$

利用 $\boldsymbol{J}$ 的定义式(36)以及式(31)、(3)、(29)，易得

$$\boldsymbol{J}^2=\frac{1}{4}(\boldsymbol{l}^2+\boldsymbol{A}^2)=-\frac{1}{4}\left(\hbar^2+\frac{\mu e^4}{2}H^{-1}\right) \tag{43}$$

因此

$$\boxed{H=-\frac{\mu e^4}{8}\left(\boldsymbol{J}^2+\frac{\hbar^2}{4}\right)^{-1}} \tag{44}$$

以 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 代入上式，即得氢原子束缚态能级公式

$$E=-\frac{\mu e^4}{8\left(j+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2}-\frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2} \tag{45}$$

$$\boxed{n=2j+1=1,2,3,\cdots} \tag{46}$$

这结果和通常由定态 Schrodinger 方程解出的结果完全一致.

7.26 氢原子的束缚态($H,\boldsymbol{l}^2,l_z$ 的共同本征态)波函数可以表示成

$$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[\frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}u,\qquad E<0 \tag{2}$$

对于每一个 l 值，由式(2)可以求出一系列本征解，记为$\{E_1,u_1\}$. 令

$$\rho=\frac{r}{a_0},\qquad W_1=-\frac{E_l}{e^2/2a_0},\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{3}$$

可以将式(2)无量纲化，成为

$$D(l)u_l\equiv\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u_l=W_lu_l \tag{4}$$

引入算符

$$\boxed{A_+(l)\equiv\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{l+1}{\rho}+\frac{1}{l+1},\qquad l=0,1,2,\cdots} \tag{5a}$$

$$\boxed{A_-(l)\equiv\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{l}{\rho}-\frac{1}{l},\qquad l\neq0} \tag{5b}$$

试将 $D(l)$用 A_+、A_-表示，导出能级公式，并说明 A_+的含义．

解 根据定义式(4)，(5)，容易得到

$$A_-(l+1)A_+(l) = D(l) - 1/(l+1)^2 \tag{6a}$$

$$A_+(l-1)A_-(l) = D(l) - 1/l^2 \tag{6b}$$

因此径向方程(4)可以写成

$$A_-(l+1)A_+(l)u_l = [W_l - 1/(l+1)^2]u_l \tag{7a}$$

或

$$A_+(l-1)A_-(l)u_l = [W_l - 1/l^2]u_l \tag{7b}$$

以 $A_+(l)$作用于式(7a)，得到

$$A_+(l)A_-(l+1)A_+(l)u_l = [W_l - 1/(l+1)^2]A_+(l)u_l$$

将 l 换成$(l-1)$，得到

$$A_+(l-1)A_-(l)A_+(l-1)u_{l-1} = [W_{l-1} - 1/l^2]A_+(l-1)u_{l-1}$$

再利用式(6b)，即得

$$D(l)A_+(l-1)u_{l-1} = W_{l-1}A_+(l-1)u_{l-1} \tag{8}$$

和式(4)比较，可知：如 $A_+(l-1)u_{l-1} \neq 0$，它就是 $D(l)$的一个本征函数，属于本征值 W_{l-1}．但因 W_{l-1}本是 $D(l-1)$的本征值，故知能级必定存在“l 简并”．

这个推理过程可以从 $l=1$ 开始，反复应用，从而得出结论

$$W_0 = W_1 = \cdots = W_l = \cdots = W_{l_{\max}} \tag{9}$$

与 $l_{\max}$相应的 $u_{l_{\max}}$满足条件

$$A_+(l_{\max})u_{l_{\max}} = 0 \tag{10}$$

从而终止上述推理过程．当 $l=l_{\max}$，式(7a)左端为 0，则右端亦应为 0，因此

$$W_l = 1/(l_{\max}+1)^2, l = 0, 1, \cdots, l_{\max} \tag{11}$$

令

$$\boxed{n = l_{\max} + 1} \tag{12}$$

并将式(9)、(11)合并记为

$$W_{nl}=\frac{1}{n^2}=W_n,\qquad l=0,1,2\cdots,(n-1) \tag{11'}$$

由定义式(3),即得能级公式

$$\boxed{\begin{aligned}&E_{nl}=-\frac{e^2}{2n^2a_0}=E_n\\&n=1,2,3,\cdots,\qquad l=0,1,\cdots,(n-1)\end{aligned}} \tag{13}$$

以下与能级 E_n 相应的各 u_l 记为 u_{nl},并规定它们都是归一化的,归一化条件为

$$\int_0^\infty (u_{nl})^2\mathrm{d}r=a_0\int_0^\infty (u_{nl})^2\mathrm{d}\rho=1 \tag{14}$$

现在将式(10)具体写出,即

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{n}{\rho}+\frac{1}{n}\right)u_{n,n-1}=0 \tag{10'}$$

将上式写成

$$\frac{\mathrm{d}u_{n,n-1}}{u_{n,n-1}}=\left(\frac{n}{\rho}-\frac{1}{n}\right)\mathrm{d}\rho$$

积分,即得

$$u_{n,n-1}=C\rho^n\mathrm{e}^{-\rho/n} \tag{15}$$

C 为归一化常数,利用归一化条件(14),容易求出

$$C=\left(\frac{2}{n}\right)^{n+\frac{1}{2}}[a_0(2n)!]^{-1/2} \tag{16}$$

在上述推理过程中已经证明

$$A_+(l)u_{nl}=c_{nl}u_{n,l+1} \tag{17}$$

如以 $A_-(l)$作用式(7b),用类似的逻辑推理可以证明

$$A_-(l)u_{nl}=b_{nl}u_{n,l-1},\ l\neq 0 \tag{18}$$

c_{nl} 和 b_{nl} 为待定常数. 由式(17),(18)可见,A_+、A_-是量子数 l 的

升、降算符．注意，它们只改变 l 的取值，并不改变能级，即不改变主量子数 n.

下面设法求 c_{nl}、b_{nl}.

$\rho \longrightarrow 0, \infty$ 处，所有 u_{nl} 均 $\longrightarrow 0$，据此，容易证明

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)^{+} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \tag{19}$$

利用定义式(5)，即得关系

$$\begin{aligned} [A_{+}(l)]^{+} &= -A_{-}(l+1) \\ [A_{-}(l)]^{+} &= -A_{+}(l-1) \end{aligned} \tag{20}$$

式(17)、(18)中各 u_{nl} 均为实函数，则结合定义式(5)可知 c_{nl} 和 b_{nl} 均为实数．以 $u_{n,l-1}$ 乘式(18)，积分即得

$$b_{nl} = \langle u_{n,l-1} | A_{-}(l) | u_{nl} \rangle$$

再取共轭，可得

$$\begin{aligned} b_{nl} &= -\langle u_{nl} | A_{+}(l-1) | u_{n,l-1} \rangle \\ &= -\langle u_{nl} | c_{n,l-1} u_{nl} \rangle = -c_{n,l-1} \end{aligned} \tag{21}$$

利用式(17)、(18)、(21)，由式(7a)可得

$$c_{nl} b_{n,l+1} = -(b_{n,l+1})^2 = \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(l+1)^2}$$

合理选择各 u_{nl} 的相因子(± 1)，总可以使各 b_{nl} 为非负实数，因此

$$-c_{nl} = b_{n,l+1} = \left[\frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{n^2}\right]^{1/2} \tag{22}$$

有了这公式，将各 A_{-} 算符逐次作用于 $u_{n,n-1}$，就可求出全部 u_{nl}，$l = n-1, n-2, \cdots, 0$.

7.27 同上题，求 u_{nl} 的明显函数表达式．

解 径向变量改用

$$\xi = \frac{2}{n}\rho = \frac{2}{na_0}r \tag{1}$$

上题中 $A_+(l)$、$A_-(l)$改记为

$$A_+(n,l) = \frac{2}{n}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} - \frac{2(l+1)}{n\xi} + \frac{1}{l+1} \tag{2a}$$

$$A_-(n,l) = \frac{2}{n}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + \frac{2l}{n\xi} - \frac{1}{l} \tag{2b}$$

对 u_{nl}的作用结果为使量子数 l 升、降 1(n 不变)：

$$A_+(n,l)u_{nl} = c_{nl}u_{n,l+1} \tag{3a}$$

$$A_-(n,l)u_{nl} = b_{nl}u_{n,l-1} \tag{3b}$$

其中

$$b_{n,l+1} = \left[\frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{n^2}\right]^{1/2} = -c_{nl} \tag{4}$$

根据上题计算，$l=n-1$ 时，u_{nl}为

$$u_{n,n-1} = N_{n,n-1}\xi^n \mathrm{e}^{-\xi/2} \tag{5}$$

$$N_{n,n-1} = [2/na_0(2n)!]^{1/2} \tag{6}$$

由式(3b)并仔细观察 A_-的构造式(2b)以及 $u_{n,n-1}$的函数形式(5)，可以判断 u_{nl}的函数形式是

$$u_{nl} \sim \xi^{l+1}\mathrm{e}^{-\xi/2} \times [\xi \text{ 的 } (n-1-l) \text{ 次多项式}],$$

所以可令

$$u_{nl} = N_{nl}\xi^{l+1}\mathrm{e}^{-\xi/2}F(\xi) \tag{7}$$

N_{nl}为归一化常数．将式(7)连同能级公式一起代入径向方程，即得 $F(\xi)$满足的方程

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}\xi^2} + (2l+2-\xi)\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\xi} - (l+1-n)F = 0 \tag{8}$$

这正是合流超几何方程，其多项式解为

$$F = F(l+1-n, 2l+2, \xi) = F(-n_r, 2l+2, \xi) \tag{9}$$

其中 $n_r=(n-l-1)$称为径向量子数．式(9)是中断成 n_r 次多项式的合流超几何级数，其明显形式为

$$F(-n_r,2l+2,\xi)=1-\frac{n_r}{2l+2}\xi+\frac{n_r(n_r-1)}{(2l+2)(2l+3)}\frac{\xi^2}{2!}-\cdots+(-1)^{n_r}\frac{\xi^{n_r}}{(2l+2)\cdots(n+l)}+\cdots \tag{9'}$$

现在只需要求出式(7)中归一化常数 N_{nl}．由式(7)及(9')易见：

$$\left.\begin{aligned}&u_{nl}\text{ 中 }\xi^n e^{-\xi/2}\text{ 项系数为}(-1)^{n_r}\frac{(2l+1)!}{(n+l)!}N_{nl}=K_{nl}\\&u_{n,l+1}\text{ 中 }\xi^n e^{-\xi/2}\text{ 项系数为}(-1)^{n_r-1}\frac{(2l+3)!}{(n+l+1)!}N_{n,l+1}=K_{n,l+1}\end{aligned}\right\} \tag{10}$$

而式(3a)左端为

$$A_+(n,l)u_{nl}=N_{nl}\left(\frac{2}{n}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}-\frac{2l+2}{n\xi}+\frac{1}{l+1}\right)\xi^{l+1}\cdot e^{-\xi/2}F(-n_r,2l+2,\xi)$$

其中 $\xi^n e^{-\xi/2}$项系数为

$$\left(\frac{1}{l+1}-\frac{1}{n}\right)K_{nl}=\frac{n-l-1}{n(l+1)}K_{nl}$$

式(3a)右端，$\xi^n e^{-\xi/2}$项系数显然为 $c_{nl}K_{n,l+1}$，因此

$$\begin{aligned}\frac{K_{nl}}{K_{n,l+1}}&=\frac{n(l+1)}{n-l-1}c_{nl}\\&=-\frac{n(l+1)}{n-l-1}\left[\frac{1}{(l+1)^2}-\frac{1}{n^2}\right]^{1/2}\\&=-\left(\frac{n+l+1}{n-l-1}\right)^{1/2}\end{aligned}$$

而由式(10)则得

$$\frac{K_{nl}}{K_{n,l+1}}=-\frac{N_{nl}}{N_{n,l+1}}\frac{n+l+1}{(2l+3)(2l+2)}$$

联合两式即得

$$\frac{N_{nl}}{N_{n,l+1}}=\frac{(2l+3)(2l+2)}{\sqrt{(n+l+1)(n-l-1)}} \tag{11}$$

利用这递推关系以及式(6),就可最终求出

$$N_{nl}=N_{n,n-1}\frac{(2n-1)(2n-2)\cdots(2l+3)(2l+2)}{\sqrt{(2n-1)(2n-2)\cdots(n+l+1)\cdot(n-l-1)!}}$$

$$=\frac{1}{n(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}\frac{1}{\sqrt{a_0}} \tag{12}$$

由式(7)、(9′)、(12),取得 u_{nl}的明显表示式.

7.28 试对三维各向同性谐振子的径向Schrödinger 方程进行因式分解,求出相应的角动量和能量的升降算符,并讨论它们的选择定则.

解

三维各向同性谐振子势 $V(r)=\frac{1}{2}M\omega^2r^2$ 中粒子的能量本征方程(采用球坐标)为

$$H\psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r+\frac{\hat{l}^2}{2Mr^2}+\frac{1}{2}M\omega^2r^2\right]\psi=E\psi \tag{1}$$

$\hat{l}$ 为角动量算符,ψ 取为守恒量完全集$(H,\hat{l}^2,\hat{l}_z)$的共同本征态,令

$$\psi=\frac{x_l(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)\quad l=0,1,2\cdots,\ m=l,l-1,\cdots,-l+1,-l \tag{2}$$

则 $x_l(r)$满足下列径向方程(取自然单位 $\hbar=M=\omega=1$):

$$D(l)x_l(r)=\lambda_l x_l(r)\quad \lambda_l=-2E,\quad x_l(0)=0 \tag{3}$$

$$D(l)=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-r^2 \tag{4}$$

定义依赖于角动量 l 的算符

$$A_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+r,\quad A_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-r \tag{5}$$

$$B_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}-r,\quad B_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}+r \tag{6}$$

可以证明，它们满足下列因式分解关系式：

$$A_-(l+1)A_+(l)=D(l)+(2l+3)$$

$$A_+(l-1)A_-(l)=D(l)+(2l-1) \tag{7}$$

$$B_-(l+1)B_+(l)=D(l)-(2l+3)$$

$$B_+(l-1)B_-(l)=D(l)-(2l-1) \tag{8}$$

利用(7)、(8)和(3)式，不难证明

$$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}]=(\lambda_{l-1}+2)A_+(l-1)\chi_{l-1} \tag{9a}$$

$$D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}]=(\lambda_{l+1}-2)A_-(l+1)\chi_{l+1} \tag{9b}$$

$$D(l)[B_+(l-1)\chi_{l-1}]=(\lambda_{l-1}-2)B_+(l-1)\chi_{l-1} \tag{10a}$$

$$D(l)[B_-(l+1)\chi_{l+1}]=(\lambda_{l+1}+2)B_-(l+1)\chi_{l+1} \tag{10b}$$

由(9a)式可看出，如 χ_{l-1} 是 $D(l-1)$ 的本征态，本征值为 λ_{l-1}，则 $A_+(l-1)\chi_{l-1}$ 是 $D(l)$ 的本征态，本征值为 $\lambda_{l-1}+2$，即相应能量(参见(3)式)本征值减小 1. 因此算符 A_+ 的作用是使量子态的角动量 l 增加 1，同时使能量减小 1.

同样，从(9b)式可看出，算符 A_- 的作用是使角动量 l 减小 1，同时使能量增加 1. 类似地，从(10)式可看出，B_+(B_-)算符的作用是使角动量增加(减小)1，同时使能量也增加(减小)1. 为了更明显表示算子 A 和 B 的这种性质，不妨把它们改记为

$$\begin{aligned}&A_+(l)\to A(l\uparrow,N\downarrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+r\\&A_-(l)\to A(l\downarrow,N\uparrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-r\end{aligned} \tag{11}$$

$$B_+(l)\to B(l\uparrow,N\uparrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}-r$$
$$B_-(l)\to B(l\downarrow,N\downarrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}+r \tag{12}$$

式中 N 为标记能量 E 的量子数 $E=N+3/2$，$N=l+2n_r$（$n_r=0,1,2,\cdots$）为径向波函数的节点数（不包括 $r=0$ 和 $r=\infty$ 点）].

根据算符 A 和 B 的物理意义，可以构造出另外两类算符 C 和 D（见图 7.28）. 利用(11)、(12)、(3)和(4)式，可以证明

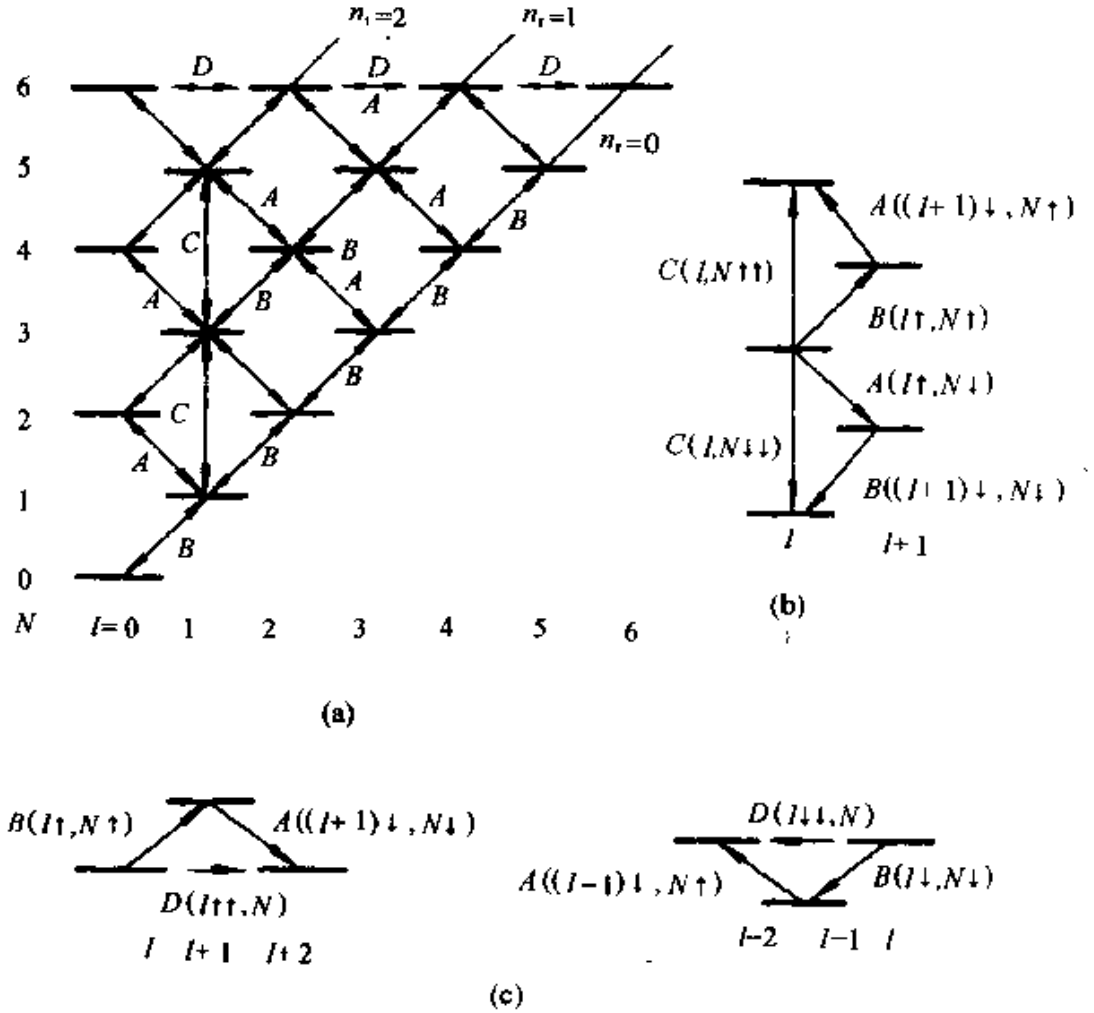


图 7.28

$$A((l+1)\downarrow,N\uparrow)B(l\uparrow,N\uparrow)=D(l)-2r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+2r^2-1$$
$$B((l+1)\downarrow,N\downarrow)A(l\uparrow,N\downarrow)=D(l)+2r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+2r^2+1 \tag{13}$$

用(13)式对能量本征态$|l,N\rangle$运算,得

$$\begin{aligned}&A((l+1)\downarrow,N\uparrow)B(l\uparrow,N\uparrow)|l,N\rangle\\&=-2\left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-r^2+N+2\right)|l,N\rangle\\&B((l+1)\downarrow,N\downarrow)A(l\uparrow,N\downarrow)|l,N\rangle\\&=2\left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+r^2-N-1\right)|l,N\rangle.\end{aligned} \tag{14}$$

根据A、B算符的物理意义,算符$A((l+1)\downarrow,N\uparrow)B(l\uparrow,N\uparrow)$的作用是使$N$(能量)增加2,但$l$不变,而算符$B((l+1)\downarrow,N\downarrow)A(l\uparrow,N\downarrow)$是使$N$减小2,但保持$l$不变. 这样就得出下列一类升、降算符:

$$C(l,N\uparrow\uparrow)=r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-r^2+(N+2)$$
$$C(l,N\downarrow\downarrow)=r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+r^2-(N+1) \tag{15}$$

7.29 与上题类似,对氢原子的径向Schrödinger 方程进行因式分解,求出相应的升降算符,并讨论相应的选择定则.

解

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$(H,\hat{l}^2,\hat{l}_z)$的共同本征态[5]

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

径向波函数$\chi_l(r)$满足($M=\hbar=e=1$)

$$D(l)\chi_l(r)=\lambda_l\chi_l(r)\qquad \lambda_l=-2E$$
$$D(l)\equiv\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2}{r} \tag{2}$$

定义与 l 有关的升、降算符

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

容易证明

$$A_-(l+1)A_+(l)=D(l)-1/(l+1)^2$$
$$A_+(l-1)A_-(l)=D(l)-1/l^2\quad l>0 \tag{4}$$

以及

$$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}]=\lambda_{l-1}A_+(l-1)\chi_{l-1}$$
$$D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}]=\lambda_{l+1}A_-(l+1)\chi_{l+1} \tag{5}$$

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，算符 A_+ 的作用是使角动量增加 1，但保持能量不变. 类似地，算符 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、降算符.

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

$$E=E_n=-1/(2n^2)\qquad n=l+n_r+1,\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{6}$$

径向波函数为

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

或

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

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($l=0,1,\cdots,n-1$)，简并度为 n^2.

由于算符 $A_\pm$ 的作用不改变能量，所以可改记为

$$A_+(l)\to A(l\uparrow,n)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+\frac{1}{l+1}$$
$$A_-(l)\to A(l\downarrow,n)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-\frac{1}{l}\quad l>0 \tag{8}$$

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符的表示式如下：

$$B(l,n\uparrow)=\left[r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{r}{n+1}+n\right]M\left(\frac{n}{n+1}\right)$$
$$B(l,n\downarrow)=\left[r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{r}{n-1}-n\right]M\left(\frac{n}{n-1}\right) \tag{9}$$

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

$$C(l\downarrow,n\downarrow)=\left\{[l(n-1)+r]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{r}{n-1}+\frac{l^2(n-1)}{r}+(n-l)\right\}M\left(\frac{n}{n+1}\right) \tag{10}$$

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

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

式中算符 M 定义为

$$M(k)f(x)=f(kx) \tag{12}$$

与算符 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符 A、B、C、D 的作用如图 7.29 所示.

表 1

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

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

类似地可以证明

$$\begin{aligned}&A((l-1)\downarrow,N\uparrow)B(l\downarrow,N\downarrow)\\&\quad=D(l)+\frac{2l-1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l(2l-1)}{r^2}\\&A((l+1)\uparrow,N\downarrow)B(l\uparrow,N\uparrow)\\&\quad=D(l)-\frac{2l+3}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{(l+1)(2l+3)}{r^2}\end{aligned}\tag{16}$$

用(16)式作用于能量本征态$|l,N\rangle$上，得

$$\begin{aligned}&A((l-1)\downarrow,N\uparrow)B(l\downarrow,N\downarrow)|l,N\rangle\\&\quad=(2l-1)\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r^2}-\frac{2N+3}{2l-1}\right]|l,N\rangle\\&A((l+1)\uparrow,N\downarrow)B(l\uparrow,N\uparrow)|l,N\rangle\\&\quad=-(2l+3)\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r^2}+\frac{2N+3}{2l+3}\right]|l,N\rangle\end{aligned}\tag{17}$$

根据算符 A、B 的物理意义，$A((l-1)\downarrow,N\uparrow)B(l\downarrow,N\downarrow)$的作

用是使角动量 l 减小 2，但保持能量不变，而 $A((l+1)\uparrow, N\downarrow)B(l\uparrow, N\uparrow)$ 的作用是使角动量 l 增加 2，同时保持能量不变．由此，可得出另一类升、降算符 D，

$$D(l\downarrow\downarrow, N)=\left(\frac{l}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r^2}-\frac{2N+3}{2l-1}\right)$$
$$D(l\uparrow\uparrow, N)=\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{1+1}{r^2}+\frac{2N+3}{2l+3}\right) \tag{18}$$

这样就找出了三维各向同性谐振子的四类升、降算符 A、B、C 和 D．它们相应的选择定则和守恒量子数列于表 1.

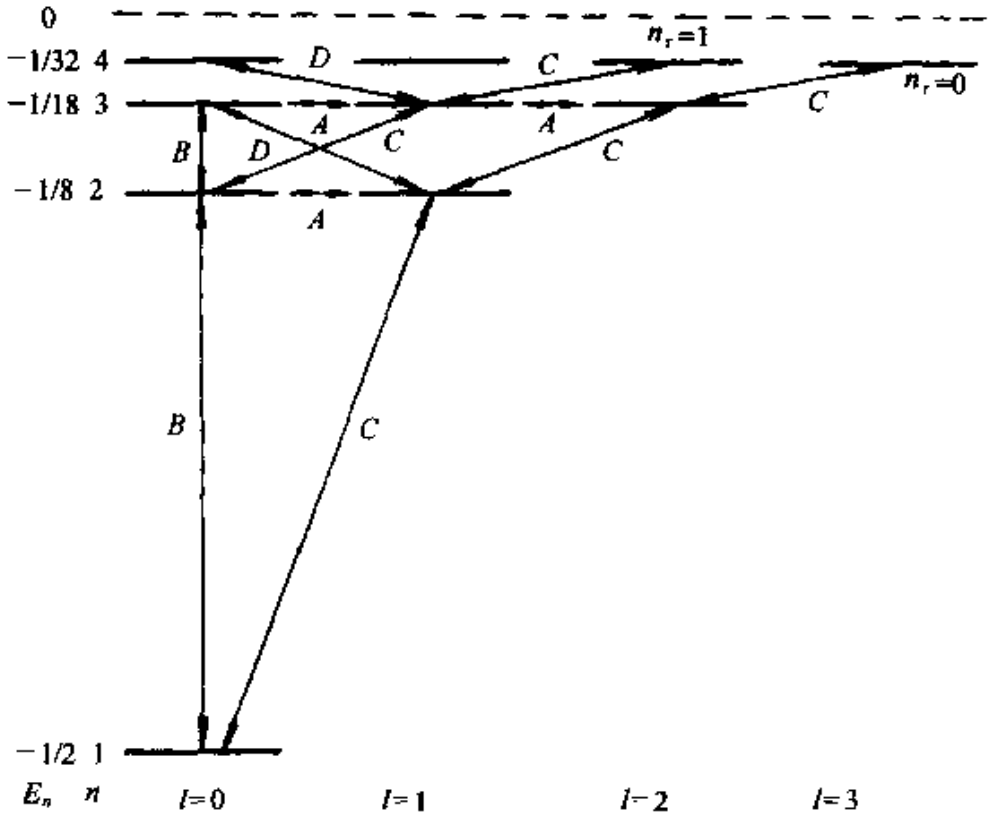


图 7-29　三维氢原子的能级和四类升、降算符

根据算符 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

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

解之，得

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

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 $A(l\downarrow,n)$，$A((l-1)\downarrow,n)$，…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 7.29 及算符 A 的物理意义，可以更形象地看出这一点．

附录

利用合流超几何函数的微商公式和基本递推关系①

(1) $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}F(\alpha,\gamma,x)=\frac{\alpha}{\gamma}F(\alpha+1,\gamma+1,x)$，

(2) $(\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\gamma,x)-\alpha F(\alpha+1,\gamma,x)=(\gamma-2\alpha-x)F(\alpha,\gamma,x)$，

(3) $\gamma(\gamma-1)F(\alpha,\gamma-1,x)+(\gamma-\alpha)xF(\alpha,\gamma+1,x)=\gamma(\gamma-1+x)F(\alpha,\gamma,x)$，

(4) $\gamma F(\alpha-1,\gamma,x)+xF(\alpha,\gamma+1,x)=\gamma F(\alpha,\gamma,x)$，

(5) $(\gamma-1)F(\alpha,\gamma-1,x)-\alpha F(\alpha+1,\gamma,x)=(\gamma-\alpha-1)F(\alpha,\gamma,x)$，

(6) $(\gamma-\alpha)xF(\alpha,\gamma+1,x)+\alpha\gamma F(\alpha+1,\gamma,x)=\gamma(\alpha+x)F(\alpha,\gamma,x)$，

(7) $(\gamma-1)F(\alpha,\gamma-1,x)-(\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\gamma,x)=(\alpha-1+x)F(\alpha,\gamma,x)$，

可导出下列递推关系：

(8) $\gamma F(\alpha+1,\gamma,x)-xF(\alpha+1,\gamma+1,x)=\gamma F(\alpha,\gamma,x)$，

(9) $\gamma(\gamma-\alpha)F(\alpha-1,\gamma,x)-\alpha xF(\alpha+1,\gamma+1,x)=\gamma(\gamma-\alpha-x)F(\alpha,\gamma,x)$，

(10) $(\gamma-\alpha)F(\alpha,\gamma+1,x)+\alpha F(\alpha+1,\gamma+1,x)=\gamma F(\alpha,\gamma,x)$，

(11) $\gamma(\gamma-1)F(\alpha,\gamma-1,x)-\alpha xF(\alpha+1,\gamma+1,x)=\gamma(\gamma-1)F(\alpha,\gamma,x)$.

利用这些公式可以证明

$$\left(\alpha+x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)F(\alpha,\gamma,x)=\alpha F(\alpha+1,\gamma,x)，$$

① 王竹溪，郭敦仁，特殊函数概论，pp. 330，370.（科学出版社，1979）.

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

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

$$\left\{[(\gamma-1)(\gamma-2)+\alpha x]+x(\gamma+2-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right\}F(\alpha,\gamma;x)$$

$$=(\gamma-1)(\gamma-2)F(\alpha,\gamma-2;x),$$

$$\left[-\alpha+(\gamma-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x)=\frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}xF(\alpha+2,\gamma+2;x),$$

$$\left[(\alpha-1)x+(\gamma-1-x)(\gamma-2-x)+(\gamma-2-x)x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]F(\alpha,\gamma;x)$$

$$=(\gamma-1)(\gamma-2)F(\alpha-2,\gamma-2;x).$$

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

7.30 证明，只当中心力场 $V(r)$ 为 Coulomb 势 ($V(r)\propto 1/r$)，或者为各向同性谐振子势 ($V(r)\propto r^2$)，相应的径向 Schrödinger 方程才可能进行因式分解，从而导出角动量和能量的升、降算符①.

证

中心力场 $V(r)$ 中粒子的能量本征态通常选为守恒量完全集 (H,l^2,l_z) 的共同本征态，即

$$\Psi=R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)=\frac{\chi_l(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi) \tag{1}$$

$$l=0,1,2,\cdots,\quad m=l,l-1,\cdots,-l$$

$\chi(r)$ 满足下列径向方程

$$\chi_l''(r)+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r)=0 \tag{2}$$

$$\chi_l(0)=0$$

① Y. F. Liu, Y. A. Lei, & J. Y. Zeng, Phys. Lett. A231(1997), 9.

取自然单位 $\mu=\hbar=1$，令 $-2E=\lambda_l$，则(2)式可写成

$$D(l)\chi_l(r)=\lambda_l\chi_l(r)$$
$$D(l)\equiv\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-2V(r) \tag{3}$$

为进行因式分解，定义与 l 有关的升、降算符

$$A_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+f(l,r)$$
$$A_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}+g(l,r) \tag{4}$$

$f(l,r)$和 $g(l,r)$待定，要求 $D(l)$可以因式分解，即

$$A_-(l+1)A_+(l)=D(l)+c_1(l)$$
$$A_+(l-1)A_-(l)=D(l)+c_2(l) \tag{5}$$

$c_1(l)$和 $c_2(l)$是常数(与 r 无关)．利用(4)式，可得

$$A_-(l+1)A_+(l)=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}[f(l,r)+g(l+1,r)]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\mathrm{d}f(l,r)}{\mathrm{d}r}$$
$$+[f(l,r)-g(l+1,r)]\frac{(l+1)}{r}+g(l+1,r)f(l,r)$$
$$A_+(l-1)A_-(l)=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+[g(l,r)+f(l-1,r)]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\mathrm{d}g(l,r)}{\mathrm{d}r}$$
$$+[f(l-1,r)-g(l,r)]\frac{l}{r}+f(l-1,r)g(l,r) \tag{6}$$

比较(5)、(6)式，可得

$$f(l,r)=-g(l+1,r) \tag{7}$$
$$-2V(r)+c_1(l)=\frac{\mathrm{d}f(l,r)}{\mathrm{d}r}+2f(l,r)\frac{l+1}{r}-f(l,r)^2 \tag{8}$$

$$-2V(r)+c_2(l)=-\frac{\mathrm{d}f(l-1,r)}{\mathrm{d}r}+2f(l-1,r)\frac{l}{r}$$
$$-f(l-1,r)^2 \tag{9}$$

假设 $V(r)$ 与 l 无关．(9)式中把 $l\to l+1$，再从(8)式中减去，可得

$$\frac{\mathrm{d}f(l,r)}{\mathrm{d}r}=a(l),\quad a(l)=\frac{1}{2}[c_1(l)-c_2(l+1)] \tag{10}$$

由此可得

$$f(l,r)=a(l)r+b(l) \tag{11}$$

$b(l)$ 为积分常数．(11)式代入(8)式或(9)式，可得

$$2V(r)+2b(l)\frac{l+1}{r}-a(l)^2r^2-2a(l)b(l)r$$
$$=\frac{1}{2}[c_1(l)+c_2(l+1)]-2a(l)+b(l)^2 \tag{12}$$

要求对于任意 l 值和在任意点 r(12)式都成立，意味着 $V(r)$ 只能取下列三种形式的中心力场．

$$\text{(i)}V(r)\propto\frac{1}{r},\quad \text{(ii)}V(r)\propto r^2,\quad \text{(iii)}V(r)\propto r \tag{13}$$

以下分别讨论．

(i) $V(r)\propto 1/r$

由(12)式可得 $a(l)=0, f(l,r)=b(l)=1/(l+1)$．此时，除了一个常数加项外，$V(r)=-\frac{1}{r}$．由(10)，(11)式，可得 $c_1(l)=c_2(l+1)$，而 $c_1(l)=-1/(l+1)^2, c_2=-1/l^2, (l\neq 0)$．这样，从(4)式可得

$$A_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+\frac{1}{l+1}$$
$$A_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}-\frac{1}{l} \tag{14}$$

而(5)式化为

$$A_-(l+1)A_+(l)=D(l)-\frac{1}{(l+1)^2}$$
$$A_+(l-1)A_-(l)=D(l)-\frac{1}{l^2},\quad (l>0) \tag{15}$$

这正是题 7.29 中已得出的结果．利用(15)和(3)式，可得

$$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}]=\lambda_{l-1}A_+(l-1)\chi_{l-1} \tag{16}$$

$$D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}]=\lambda_{l+1}A_-(l+1)\chi_{l+1} \tag{17}$$

可见 $A_\pm$ 是 l 的升、降算符，但保持能量不变．

(ii) $V(r)\propto r^2$

由(12)式，可得 $b(l)=0$，$a(l)=$常数．取自然单位，$a(l)^2=1$，则 $V(r)=\frac{1}{2}r^2$，此时 $a(l)=\pm 1$.

对于 $a(l)=+1$，可得出一类升、降算符

$$A_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+1}{r}+r,\quad A_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{1}{r}-r \tag{18}$$

对于 $a(l)=-1$，可得出另一类升、降算符

$$B_+(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{l+l}{r}-r,\quad B_-(l)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{l}{r}+r \tag{19}$$

这样，(5)式就化为

$$A_-(l+1)A_+(l)=D(l)+(2l+3)$$
$$A_+(l-1)A_-(l)=D(l)+(2l-1) \tag{20}$$

$$B_-(l+1)B_+(l)=D(l)-(2l+3)$$
$$B_+(l-1)B_-(l)=D(l)-(2l-1) \tag{21}$$

这正是题 7.28 中已得出的结果．从(20)、(21)和(3)式，可以证明

$$D(l)[A_+(l-1)\chi_{l-1}]=(\lambda_{l-1}+2)A_+(l-1)\chi_{l-1}$$
$$D(l)[A_-(l+1)\chi_{l+1}]=(\lambda_{l+1}-2)A_-(l+1)\chi_{l+1} \tag{22}$$

$$D(l)[B_+(l-1)\chi_{l-1}]=(\lambda_{l-1}-2)B_+(l-1)\chi_{l-1}$$
$$D(l)[B_-(l+1)\chi_{l+1}]=(\lambda_{l+1}+2)B_-(l+1)\chi_{l+1} \tag{23}$$

从(22)式可以看出，A_+(A_-)算符使角动量 l 增大(减小)1，同时使能量 E 减小(增大)1(自然单位)．类似，从(23)式可以看出，B_+(B_-)使 l 增大(减小)1，同时也使 E 增大(减小)1．注意，$A_\pm$和 $B_\pm$并非守恒量．这与 $V(r)\propto 1/r$ 情况不同．

(iii) $V(r)\propto r$

由(12)式，可得 $a(l)=b(l)=0$．但同时得到 $V(r)=$常数，所以 $V(r)\propto r$ 是不允许的．

综上分析，可得出如下结论，只当 $V(r)$为 Coulomb 势($V(r)\propto 1/r$)或各向同性谐振子势($V(r)\propto r^2$)，径向Schrödinger 方程才可以因式分解，从而导出角动量和能量的升降算符．

7.31 与题 7.28 类似，求出二维各向同性谐振子的四类升、降算符，并讨论相应的选择定则．

解 二维中心力场 $V(\rho)$中粒子的能量本征方程(平面极坐标)为

$$H\psi=\left\{-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]+V(\rho)\right\}\psi=E\psi \tag{1}$$

取 ψ 为守恒量完全集$\left(H,l_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$的共同本征态，令

$$\psi=\frac{\chi_m(\rho)}{\sqrt{\rho}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}\qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{2}$$

则 $\chi_m(\rho)$满足下列径向方程：

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{4\rho^2}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)+V(\rho)\right]\chi_m(\rho)\\&=\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{(m-1/2)(m+1/2)}{\rho^2}\right)+V(\rho)\right]\chi_m(\rho)\\&=E\chi_m(\rho)\end{aligned} \tag{3}$$

注意：方程中只出现 m^2. 与三维中心力场中粒子的径向方程比较，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)+V(r)\right]\chi_l(r)=E\chi_l(r) \tag{4}$$

参数对应关系为

$$l(l+1)\longleftrightarrow(m-1/2)(m+1/2)=(|m|-1/2)(|m|+1/2) \tag{5}$$

因此二维中心力场中粒子的径向波函数的性质可从三维中心力场中的径向波函数类比而得出①.

对于二维各向同性谐振子，$V(\rho)=\frac{1}{2}M\omega^2\rho^2$，径向方程（取自然单位 $\hbar=M=\omega=1$）可表示为

$$\begin{aligned} &D(m)\chi_m(\rho)=\lambda_m\chi_m(\rho) \quad \lambda_m=-2E \\ &D(m)\equiv\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{(m-1/2)(m+1/2)}{\rho^2}-\rho^2 \end{aligned} \tag{6}$$

先讨论 $m\geqslant 0$ 的情况（由此可自然延拓到 $m\leqslant 0$ 的情况）. 与三维各向同性谐振子相似，可定义两类升、降算符

$$A_+(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}+\rho, \quad A_-(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-\rho \tag{7}$$

$$B_+(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}-\rho, \quad B_-(m)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}+\rho \tag{8}$$

可以证明，它们满足下列因式分解关系式：

$$\begin{aligned} &A_-(m+1)A_+(m)=D(m)+2(m+1) \\ &A_+(m-1)A_-(m)=D(m)+2(m-1) \end{aligned} \tag{9}$$

---

① 曾谨言《量子力学》，卷Ⅰ，pp. 300～306.（1997，科学出版社）.

$$B_-(m+1)B_+(m)=D(m)-2(m+1)$$
$$B_+(m-1)B_-(m)=D(m)-2(m-1) \tag{10}$$

利用(9)、(10)和(6)式，可以证明

$$D(m)[A_+(m-1)\chi_{m-1}]=(\lambda_{m-1}+2)A_+(m-1)\chi_{m-1} \tag{11a}$$

$$D(m)[A_-(m+1)\chi_{m+1}]=(\lambda_{m+1}-2)A_-(m+1)\chi_{m+1} \tag{11b}$$

$$D(m)[B_+(m-1)\chi_{m-1}]=(\lambda_{m-1}-2)B_+(m-1)\chi_{m-1} \tag{12a}$$

$$D(m)[B_-(m+1)\chi_{m+1}]=(\lambda_{m+1}+2)B_-(m+1)\chi_{m+1} \tag{12b}$$

从(11a)式可以看出，如 χ_{m-1} 是 $D(m-1)$ 的本征态，本征值为 λ_{m-1}，则 $A_+(m-1)\chi_{m-1}$ 是 $D(m)$ 的本征态，本征值为 $\lambda_{m-1}+2$，即相应能量 E(参见(6)式)本征值减小 1. 因此算符 A_+ 的作用在于使量子态的角动量 m 增加 1，同时使能量减小 1. 类似地，从(11b)式可看出算符 A_- 的作用是使 m 减小 1，同时使能量增加 1. 从(12)式可知 B_+(B_-)算符的作用在于使 m 增加(减小)1，同时使能量也增加(减小)1. 根据 A，B 算符的这种性质，不妨把它们改记为

$$A_+(m)\to A(m\uparrow,N\downarrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}+\rho$$
$$A_-(m)\to A(m\downarrow,N\uparrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-\rho \tag{13}$$

$$B_+(m)\to B(m\uparrow,N\uparrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}-\rho$$
$$B_-(m)\to B(m\downarrow,N\downarrow)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}+\rho \tag{14}$$

式中 N 是标记能量 E 的量子数，$E=N+1$，$N=|m|+2n_\rho$，$n_\rho=0$，1，2，…是径向波函数的节点数($\rho=0,\infty$ 点除外).

根据与三维各向同性谐振子中相似的道理，按 A、B 的物理意义，可以构造出另外两类算子 C 和 D(见图 7.31).

$$C(m,N\uparrow\uparrow)=\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\rho^2+N+3/2$$

$$C(m,N\downarrow\downarrow)=\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\rho^2-N-1/2 \tag{15}$$

$$D(m\downarrow\downarrow,N)=\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho^2}-\frac{N+1}{m-1}$$

$$D(m\uparrow\uparrow,N)=\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m+1/2}{\rho^2}+\frac{N+1}{m+1} \tag{16}$$

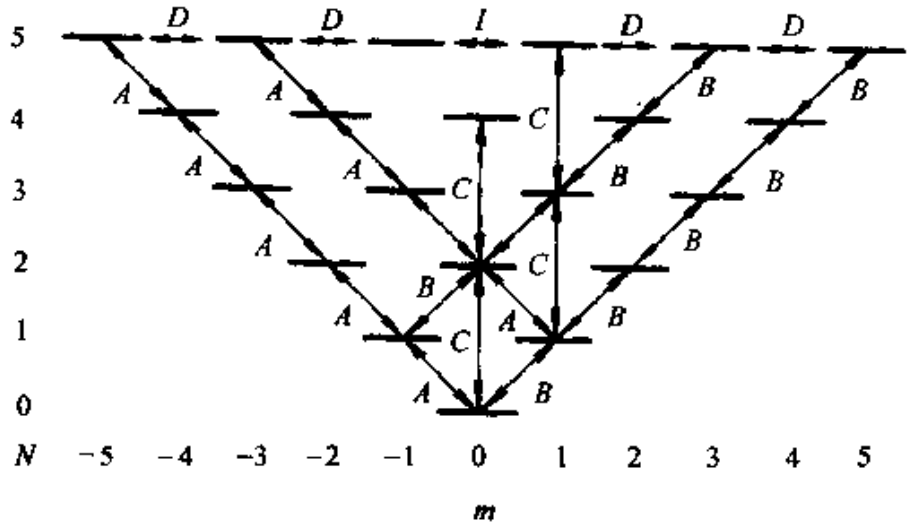


图 7.31

考虑到径向方程(3)中只出现$|m|$,径向波函数$\chi_{-m,n_\rho}=\chi_{m,n_\rho}$,可把以上所述的升、降算符的表示式延拓到$m\leqslant 0$情况. 此时算符$C$的形式不变,而$A$与$B$有下列关系:

$$A((-m)\downarrow,N\uparrow)=B(m\uparrow,N\uparrow),$$

$$\text{或 } B((-m)\uparrow,N\uparrow)=A(m\downarrow,N\uparrow)$$

$$A((-m)\uparrow,N\downarrow)=B(m\downarrow,N\downarrow), \tag{17}$$

$$\text{或 } B((-m)\downarrow,N\downarrow)=A(m\uparrow,N\downarrow)$$

而对算符D,有

$$D((-m)\uparrow\uparrow,N)=D(m\downarrow\downarrow,N)\quad m\neq\pm1 \tag{18}$$

对于 $m=\pm1$，考虑到 $\chi_{-1,n_\rho}=\chi_{1,n_\rho}$，所以可取

$$D((-1)\uparrow\uparrow,N)=D(1\downarrow\downarrow,N)=1 \tag{19}$$

表 1

升、降算符	m	n_ρ	$N=\lvert m\rvert+2n_\rho$	守恒量子数
$A(m\uparrow,N\downarrow)$	$m\to m+1$	$n_\rho\to n_\rho-1$	$N\to N-1$	$\lvert m\rvert+n_\rho,N-n_\rho$
$A(m\downarrow,N\uparrow)$	$m\to m-1$	$n_\rho\to n_\rho+1$	$N\to N+1$	
$B(m\uparrow,N\uparrow)$	$m\to m+1$	$n_\rho\to n_\rho$	$N\to N+1$	n_ρ
$B(m\downarrow,N\downarrow)$	$m\to m-1$	$n_\rho\to n_\rho$	$N\to N-1$	
$C(m,N\uparrow\uparrow)$	$m\to m$	$n_\rho\to n_\rho+1$	$N\to N+2$	m
$C(m,N\downarrow\downarrow)$	$m\to m$	$n_\rho\to n_\rho-1$	$N\to N-2$	
$D(m\uparrow\uparrow,N)$	$m\to m+2$	$n_\rho\to n_\rho-1$	$N\to N$	N
$D(m\downarrow\downarrow,N)$	$m\to m-2$	$n_\rho\to n_\rho+1$	$N\to N$	

这样，我们就给出了二维各向同性谐振子的四类升、降算符 A、B、C、D 的表示式．它们相应的选择定则和守恒量子数见表 1.

7.32 与题 7.29 类似，求出二维氢原子的四类升、降算符，并讨论它们的选择定则．

解

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$\left(H,\hat{l}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$的共同本征态

$$\psi=\frac{\chi_m(\rho)}{\sqrt{\rho}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{1}$$

$\chi_m(\rho)$满足径向方程

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

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

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

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 $l(l+1)\to(|m|-1/2)(|m|+1/2)$，容易得出二维氢原子的有关公式(直接从径向方程(2)出发，也可得同样的公式). 四类升、降算符的表示式如下($m\geqslant 0$ 情况)：

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

$$A(m\downarrow,n)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-\frac{1}{m-1/2} \tag{3}$$

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

$$B(m,n\downarrow)=\left[\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\rho}{n-1}-n\right]M\left(\frac{n}{n-1}\right) \tag{4}$$

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

$$C(m\downarrow,n\downarrow)=\left\{[(m-1/2)(n-1)+\rho]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\rho}{n-1}\right.$$
$$\left.+\frac{(m-1/2)^2(n-1)}{\rho}-n+m-1/2\right\}M\left(\frac{n}{n-1}\right) \tag{5}$$

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

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

(6)

考虑到(2)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 $m\leqslant 0$ 情况. 此时，算符 A 满足下列关系式：

$$A((-m)\uparrow,n)=A(m\downarrow,n),A((-m)\downarrow,n)=A(m\uparrow,n) \tag{7}$$

算符 B 的表示式不变. 算符 C 和 D 变化如下：

$$C((-m)\uparrow,n\uparrow)=-D(m\downarrow,n\uparrow)$$
$$C((-m)\downarrow,n\downarrow)=-D(m\uparrow,n\downarrow) \tag{8}$$

$$D((-m)\downarrow,n\uparrow)=-C(m\uparrow,n\uparrow)$$
$$D((-m)\uparrow,n\downarrow)=-C(m\downarrow,n\downarrow) \tag{9}$$

表 1

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

与算符 A、B、C、D 相应的选择定则和守恒量子数列于表 1. 二维氢原子的能级及算符 A、B、C、D 的作用如图 7.32 所示.

7.33 利用氢原子的动力学对称性，采用代数方法求解二维氢原子的束缚态能级和本征态①.

解

二维氢原子的 Runge-Lenz 矢量(取自然单位，$e=\hbar=M=1$)为

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

$$=\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\mathrm{i}\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\rho$$

式中 $\rho=\sqrt{x^2+y^2}$，$\boldsymbol{e}_\rho=\boldsymbol{\rho}/\rho$ 是径向单位矢量，$\boldsymbol{p}=p_x\mathrm{i}+p_y\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{l}=l_z\boldsymbol{k}=(xp_y-yp_x)\boldsymbol{k}$. 可以证明

① 参阅 Liu, Y. F., Huo, W. J. and Zeng, J. Y., *Phys. Rev.* A58(1998)

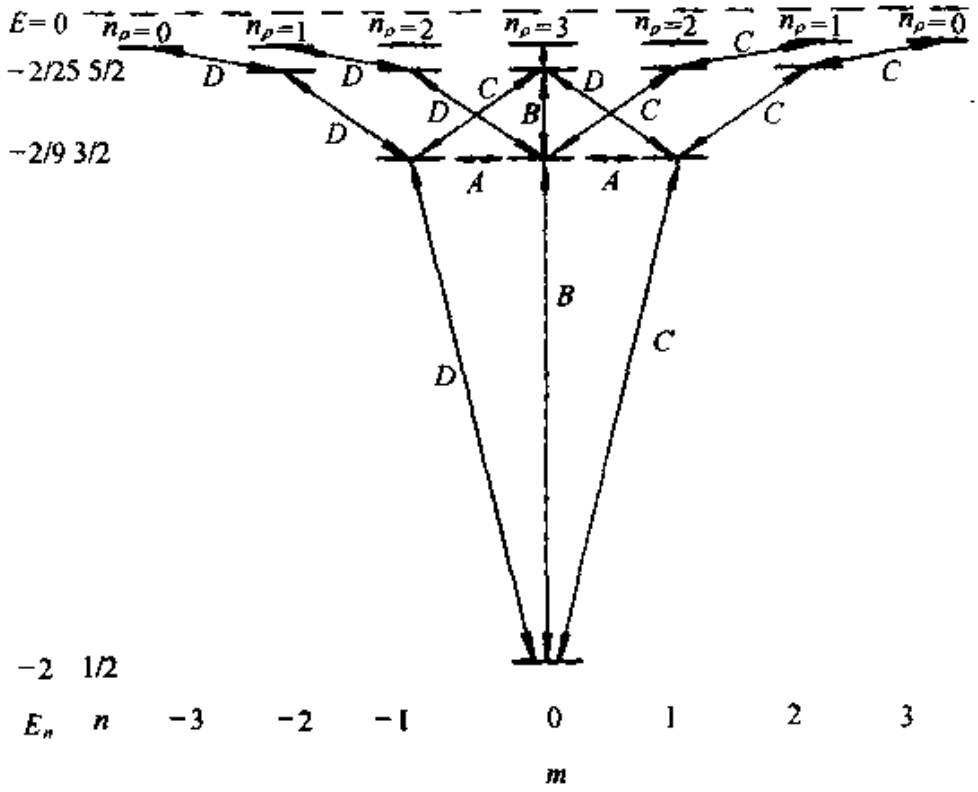


图 7.32　二维氢原子的能级和四类升、降算符

$$[l_z,a_x]=\mathrm{i}a_y$$

$$[l_z,a_y]=-\mathrm{i}a_x \tag{2}$$

$$[a_x,a_y]=-\mathrm{i}2Hl_z$$

$H=\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{\rho}$是 Hamilton 量．对于束缚态(能量 $E<0$)，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(2)式可以化为

$$[A_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma \tag{3}$$

即(A_x,A_y,A_z)满足角动量的基本对易式．按照角动量的理论，$A^2=A_x^2+A_y^2+A_z^2$ 的本征值必为

$$m_0(m_0+1),m_0=0,1,2,\cdots \tag{4}$$

这里已考虑了 $A_z=l_z$(轨道角动量算符)为 *Hermite* 算符性要求

(半奇数 m_0 已摒弃). 利用式(1),(2),(3),可以证明

$$A^2=-\frac{1}{4}-\frac{1}{2E} \tag{5}$$

联合(4)与(5)式,即可求出二维氢原子的束缚态能量为

$$E=E_n=-1/2n^2,n=m_0+1/2=1/2,3/2,5/2,\cdots \tag{6}$$

这个结果与直接求解Schrödinger 方程所得结果相同①.

定义

$$a_\pm=a_x\pm ia_y \tag{7}$$

可以证明

$$\begin{aligned}&[l_z,a_\pm]=\pm a_\pm\\&a_-a_+=\frac{H}{2}(2l_z+1)^2+1\end{aligned} \tag{8}$$

可见 $a_\pm$ 是磁量子数 m 的升、降算符. 令 $|Em\rangle$ 表示二维氢原子的守恒量完全集(H,l_z)的共同本征态,则 $a_\pm|Em\rangle$ 仍为能量本征态(本征值 E)和 l_z 的本征态(本征值为 $m\pm1$). 对于给定能级 E,m 的绝对值 $|m|$ 必有上限,不妨取为 m_0. 因此 $a_+|Em_0\rangle=0$,所以 $a_-a_+|Em_0\rangle=0$. 利用(8)式,可得

$$\frac{E}{2}(2m_0+1)^2=1 \tag{9}$$

这正是(6)式. 这也是本征值的一种代数解法. 属子 E_n 能级的各简并态可以表成

$$a_-^k|Em_0\rangle,k=0,1,2,\cdots,2m_0 \tag{10}$$

E_n 能级的简并度为 $2n=(2m_0+1)=1,3,5,\cdots$.

---

① 参阅曾谨言,《量子力学》,卷Ⅰ,p. 689. (1997,科学出版社).

7.34 证明二维氢原子的径向Schrödinger 方程的因式分解所得出的升降算符(题 7.32)与 Runge-Lenz 矢量等价.

证

二维氢原子的 Runge-lenz 矢量为

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

$$=\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\mathrm{i}\boldsymbol{p}-\boldsymbol{e}_\rho \tag{1}$$

由 a_x 和 a_y 构成的算符 $a_\pm=(a_x\pm\mathrm{i}a_y)$,在极坐标系中可以表示成

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

它们作用在本征函数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}R_m(\rho)$上,对磁量子数 m 的升降,已在 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}$ 因式中完成,所以当只作用子径向波函数 $R_m(\rho)$上时,$a_\pm$等价于算符 $a_\pm(m)$,

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

$$=-\left(\frac{1}{2}\pm m\right)\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m(m\pm1/2)}{\rho}-1 \tag{3}$$

除了一个不关紧要的常数因子外,$a_\pm(m)$可以表示成

$$a_+(m)=\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m}{\rho}+\frac{1}{m+1/2}$$

$$a_-(m)=\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m}{\rho}-\frac{1}{m-1/2} \tag{4}$$

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

$$A_+(m)=\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m+1/2}{\rho}+\frac{1}{m+1/2}$$

$$A_-(m)=\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{m-1/2}{\rho}-\frac{1}{m-1/2} \tag{5}$$

这正是题 7.32 中从径向Schrödinger 方程的因式分解所导出的角

动量 m 的升、降算符.

7.35 试利用二维各向同性谐振子的径向Schrödinger 方程的因式分解所导出的两类升、降算符来构造所有的守恒量,并讨论和经典轨道闭合性的关系.

解

按题 7.31,通过二维各向同性谐振子的径向方程的因式分解,得出了两类升降算符

$$\begin{aligned} A_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m\pm1/2}{\rho}\pm\rho \\ B_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m\pm1/2}{\rho}\mp\rho \end{aligned} \tag{1}$$

它们作用在 $\chi_m(\rho)=\sqrt{\rho}\,R_m(\rho)$上. 与上题类似,当作用到 $R_m(\rho)=\chi_m(\rho)/\sqrt{\rho}$ 上时,$A_{\pm}(m)$和 $B_{\pm}(m)$分别应代之为

$$\begin{aligned} a_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m}{\rho}\pm\rho \\ b_{\pm}(m)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mp\frac{m}{\rho}\mp\rho \end{aligned} \tag{2}$$

它们作用到全部波函数上,并采用直角坐标系,则应代之为算符 $a_{\pm}$和 $b_{\pm}$. 例如 $a_+(m)$代之为

$$a_+=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{1}{\rho}l_z+\rho\right)=\left(\frac{\partial}{\partial x}+x\right)+\mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y}+y\right) \tag{3}$$

类似有

$$\begin{aligned} a_-&=\left(\frac{\partial}{\partial x}-x\right)-\mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y}-y\right) \\ b_+&=\left(\frac{\partial}{\partial x}-x\right)+\mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y}-y\right) \\ b_-&=\left(\frac{\partial}{\partial x}+x\right)-\mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial y}+y\right) \end{aligned} \tag{4}$$

不难证明

$$[l_z,a_\pm]=\pm a_\pm,\quad [l_z,b_\pm]=\pm b_\pm$$
$$[H,a_\pm]=\mp a_\pm,\quad [H,b_\pm]=\pm b_\pm \tag{5}$$

这与题 7.31 中对 $A_\pm(m)$和 $B_\pm(m)$的选择定则的分析是一致的.

与二维氢原子不同(它的升、降算符 $a_\pm$是守恒量,与 Runge-Lenz 矢量等价),二维各向同性谐振子的升、降算符 $a_\pm$和 $b_\pm$并非守恒量. 但可以利用它们来构成下列守恒量:

$$-\frac{1}{4}(a_-a_+ + b_+b_-)=H-1$$
$$\frac{1}{4}(a_-a_+ - b_+b_-)=l_z \tag{6}$$

H 和 l_z 为守恒量是一般的二维中心力场中粒子的共同特性. 而对于二维各向同性谐振子,还有下列守恒量,也可由 $a_\pm$和 $b_\pm$构成,即

$$-\frac{1}{4}(a_-b_- + b_+a_+)=\frac{1}{2}(x^2-y^2+p_x^2-p_y^2)\equiv Q_1$$
$$-\frac{\mathrm{i}}{4}(a_-b_- - b_+a_+)=xy+p_xp_y\equiv Q_{xy} \tag{7}$$

在经典力学中,正是这两个守恒量保证了二维各向同性谐振子轨道的闭合性. 可以证明①,令

$$\tan 2r=Q_{xy}/Q_1 \tag{8}$$

则 r 表示椭圆长轴与 x 轴的夹角,而椭圆的偏心率$\propto\sqrt{Q_{xy}^2+Q_1^2}$.

以上分析表明,二维各向同性谐振子的径向Schrödinger 方程可以因式分解而导出两类升降算符,与经典轨道的闭合性有密切关系. 其物理本质是体系具有比其几何对称性 SO_2 更高的动力学对称性 SU_2. 类似地讨论可以推广到三维各向同性谐振子.

---

① 参阅,曾谨言,《量子力学》,卷Ⅰ,pp. 312～314(1997,科学出版社).

第八章　准经典近似

8.1　对于无自旋粒子，将波函数写成

$$\psi = \sqrt{\rho}\, e^{i\xi} \tag{1}$$

其中 ρ、ξ 为实函数，$\rho \geqslant 0$. 试求概率流密度的表达式，并在准经典近似下设法导出量子化条件.

解　由式(1)，显然可见概率密度为

$$\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 \tag{2}$$

概率流密度的量子力学公式为

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \tag{3}$$

由式(1)易得

$$\ln\psi = \frac{1}{2}\ln\rho + i\xi \tag{4}$$

上式求梯度，即得

$$\frac{\nabla \psi}{\psi} = \frac{1}{2}\frac{\nabla \rho}{\rho} + i \nabla \xi$$

以 $\psi^* \psi$ 乘上式，得到

$$\psi^* \nabla \psi = \frac{1}{2} \nabla \rho + i\rho \nabla \xi \tag{5}$$

其共轭方程为

$$\psi \nabla \psi^* = \frac{1}{2} \nabla \rho - i\rho \nabla \xi \tag{5'}$$

将式(5)、(5′)代入式(3)，即得概率流密度的表达式

$$j = \frac{\hbar}{m}\rho \nabla \xi \tag{6}$$

在准经典近似下，可取粒子速度为

$$v = \frac{1}{\rho}j \tag{7}$$

则式(6)给出

$$\nabla \xi = \frac{m}{\hbar}v = \frac{p}{\hbar} \tag{8}$$

p 为粒子的动量. 在准经典条件下，粒子的运动可以用轨道描述. 将式(8)沿任何闭合轨道积分，得到

$$\oint p \cdot \mathrm{d}r = \hbar \oint \nabla \xi \cdot \mathrm{d}r = \hbar \oint \mathrm{d}\xi \tag{9}$$

根据波函数的单值性，ξ 沿闭合轨道的改变量必须是 2π 的整倍数，即上式右端必须等于 $2\pi\hbar$的整倍数. 因此

$$\oint p \cdot \mathrm{d}r = 2n\pi\hbar = nh,\ n = 1,2,3,\cdots \tag{10}$$

此即量子化条件.

8.2 质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$作用下作一维运动. 根据 WKB 近似法，准经典束缚态的能级由量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[E - V(x)]}\mathrm{d}x = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\hbar \tag{1}$$

决定，其中 $n=0$、1、2、…，x_1 和 x_2 为经典转折点，即势能等于总能之处，

$$V(x_1) = V(x_2) = E \tag{2}$$

试利用量子化条件(1)和 F-H 定理，证明：对于任何一个准经典束缚态，动能平均值$\langle T\rangle$和总能 E 有如下关系：

$$\boxed{\langle T\rangle_n = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\partial E_n}{\partial n}} \tag{3}$$

证 仔细观察量子化条件(1)，可知能级 E 是$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$的函数，即

$$E_n = E\left(\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\right) \tag{4}$$

总能量算符为

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$$

根据 F-H 定理，

$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \hbar}\right\rangle_n = \frac{2}{\hbar}\langle T\rangle_n \tag{5}$$

而由式(4)易见

$$\frac{1}{n+\frac{1}{2}}\frac{\partial E_n}{\partial \hbar} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n}{\partial\left(n+\frac{1}{2}\right)} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n}{\partial n}$$

代入式(5)，即得式(3).

8.3 质量为 m 的粒子在势场

$$V(x) = \lambda|x|^{\nu}\lambda, \qquad \nu > 0$$

中运动，求准经典近似条件下能级 E_n 和量子数 n 的函数关系.

解 上题已经证明

$$\langle T\rangle_n = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\partial E_n}{\partial n} \tag{1}$$

而由位力定理，

$$\langle T\rangle_n = \frac{\nu}{2}\langle V\rangle_n = \frac{\nu}{\nu+2}E_n \tag{2}$$

两式合并，可得

$$\frac{\partial E_n}{\partial n} = \frac{2\nu}{(\nu+2)\left(n+\frac{1}{2}\right)}E_n \tag{3}$$

解之，即得

$$E_n = C(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(2+\nu)}, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{4}$$

其中 $C(\nu)$ 为积分常数，它应具有能量的量纲.

本题特征能量的量纲构造式应该由 $\hbar$、m、λ 唯一地决定（参看题 5.9 和上册题 5.4），为

$$E \sim \lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)} \tag{5}$$

因此，E_n 必可表示成

$$E_n = A(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(\nu+2)}\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)} \tag{6}$$

其中 $A(\nu)$ 为无量纲纯数（ν 的函数）.

8.4 质量为 m 的粒子，在势场

$$V(x) = \lambda|x|^{\nu} \quad \lambda,\nu>0$$

中作一维运动，试根据量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(E-V)}\,\mathrm{d}x = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar$$

求准经典近似下的能级公式.

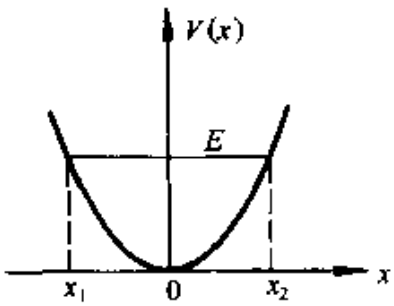


图 8.4

解 经典转折点 x_1、x_2 满足关系

$$x_1 = -x_2, \quad x_2 = \left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu} > 0 \tag{1}$$

量子化条件可以改写成

$$\int_0^{x_2} \sqrt{2m(E-\lambda x^\nu)}\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \tag{2}$$

$$n = 0,1,2,\cdots$$

作变换

$$\frac{\lambda}{E}x^\nu = \sin^2\theta \tag{3}$$

利用公式

$$\int_0^{\pi/2}(\sin\theta)^k\mathrm{d}\theta$$

$$= \sqrt{\pi}\,\Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)\Big/2\Gamma\left(1+\frac{k}{2}\right),\ k>-1$$

即可求出

$$\int_0^{x_2}\sqrt{1-\frac{\lambda}{E}x^\nu}\mathrm{d}x = \frac{2}{\nu}\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}\int_0^{\pi/2}(\sin\theta)^{\frac{2}{\nu}-1}\cos^2\theta\mathrm{d}\theta$$

$$= \left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}\sqrt{\pi}\,\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)/2\nu\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{\nu}\right) \tag{4}$$

代入式(2),即得能级公式

$$\boxed{E_n = \lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)} \cdot \left[\frac{\sqrt{\pi}\,\nu\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{\nu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2\nu/(\nu+2)}} \tag{5}$$

其形式和上题所得结果一致.

当 $\nu=1$，式(5)给出$\left[\text{注意 } \Gamma(1)=1,\ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}\right]$

$$E_n=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{4}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2/3},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{6}$$

当 $\nu=2$，令 $\lambda=m\omega^2/2$，就是一维谐振子，式(5)给出

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{7}$$

恰好和精确解相同.

8.5 试将一维问题的量子化条件推广应用于中心力问题中的 s 态，并就

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\quad \lambda,\nu>0 \tag{1}$$

的情形，求准经典条件下 s 态的能级公式.

解 粒子在中心力场中运动时，(H,l^2,l_z)的共同本征函数可以表示成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[E-V(r)-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3}$$

对于 s 态，$l=0$，离心势能等于 0，上式成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+[E-V(r)]u=0 \tag{3'}$$

边界条件为

$$u(0)=0,\quad u(\infty)=0 \tag{4}$$

易见 $u(r)$相当于一维问题中的能量本征函数 $\psi(x)$[边界条件为

$\psi(0)=0$，$\psi(\infty)=0$]，确切说，$u(r)$相当于一维问题中$V(x)$为偶函数时能量本征态中的奇宇称态. 后者在准经典近似下的量子化条件为

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2\mu[E-V(x)]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar$$

$$n=1,3,5,\cdots \tag{5}$$

x_1、x_2为经典转折点，$x_1=-x_2<0$. 令

$$n=2n'+1,\ \text{则}\ n'=0,1,2,\cdots$$

再将n'重新写成n，式(5)可以写成

$$\int_{0}^{x_2}\sqrt{2\mu[E-V(x)]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar$$

$$n=0,1,2,\cdots \tag{5'}$$

推广到中心力场的 s 态($l=0$)，量子化条件可以写成

$$\boxed{\int_{0}^{r_c}\sqrt{2\mu[E-V(r)]}\mathrm{d}r=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar\qquad n=0,1,2,\cdots} \tag{6}$$

n为 s 态能级编号数，即径向量子数，r_c为经典转折点，满足

$$V(r_c)=E \tag{7}$$

对于中心力场式(1)，式(6)左端和上题式(2)左端相当，因此，上题所得能级公式中将$\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$换成$\left(n+\frac{3}{4}\right)$，即得本题所求能级：

$$\boxed{E_n=\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu/(\nu+2)}\cdot\left[\frac{\sqrt{\pi}\,2\nu\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{\nu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2\nu/(\nu+2)}\qquad n=0,1,2,\cdots} \tag{8}$$

例如三维各向同性谐振子，

$$\nu = 2, \quad \lambda = \frac{1}{2}\mu\omega^2$$

上式给出准经典近似下的 s 态($l=0$)能级为

$$E_n = \left(2n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{9}$$

能级的精确解为

$$E_{n_r l} = \left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \; n_r, l = 0,1,2,\cdots \tag{10}$$

l 为角量子数，n_r 为径向量子数. 当 $l=0$ 时，将式(10)中 n_r 改写成 n，刚好就是式(9). ①

8.6 质量为 μ 的粒子在线性中心势场

$$V(r) = \lambda r, \qquad \lambda > 0 \tag{1}$$

中运动，求 s 态($l=0$)能级的准经典近似公式，并和精确解作比较.

解 s 态能级的准经典近似见上题的式(8)，$\nu=1$. 结果为

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n + \frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}$$

$$n = 0,1,2,\cdots \tag{2}$$

s 态能级的精确解为(参看 1.1 题，注意两题中能量本征方程的相似性.)

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}\right)^{1/3} x_n \tag{3}$$

---

① 谐振子能级公式(10)，参看曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1998)，§6.4. 本题和以下各题，参看 C. Quigg and J. L. Rosner, Physics Reports, **56** (1979), 167.

x_n 为 Airy 函数的零点，满足

$$J_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)+J_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)=0 \tag{4}$$

J_ν 为第一类 Bessel 函数. 经数值计算，式(2)和(3)给出的结果极其接近，如下表所示：

n	x_n	$\left[\frac{3\pi}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}$	相对偏差(%)
0	2.33811	2.32025	0.7639
1	4.08795	4.08181	0.1502
2	5.52056	5.51716	0.0616
3	6.78671	6.78445	0.0333
4	7.94413	7.94249	0.0206
5	9.02265	9.02137	0.0142
6	10.04017	10.03914	0.0103
7	11.00852	11.00767	0.0077
8	11.93602	11.93528	0.0062
9	12.82878	12.82814	0.0050

由表可以看出，当量子数 n 增大，能级的准经典近似值与精确值的相对偏差逐渐减小. 这是 Bohr 对应原理的具体表现.

8.7 质量为 μ 的粒子在中心势场

$$V(r)=\lambda r^\nu,\ \lambda<0,\ -2<\nu<0 \tag{1}$$

中运动，求 $E\to 0$ 时束缚态波函数的渐近形式.

解 按照通常习惯，(H, l^2, l_z) 的共同本征函数表示成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

$$l=0,1,2,\cdots;\quad m=0,\pm 1,\pm 2,\cdots\pm l$$

径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[E-\lambda r^\nu-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3}$$

作变换(参看上册题 5.4)

$$\rho = r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/(\nu+2)}, \quad u(r) = W(\rho) \tag{4}$$

并令 $E\to 0$，式(3)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2W}{\mathrm{d}\rho^2} + \left[\rho^\nu - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]W = 0 \tag{5}$$

再作变换

$$z = \frac{2}{\nu+2}\rho^{(\nu+2)/2}, \quad W(\rho) = z^{1/(\nu+2)}v(z) \tag{6}$$

式(5)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}z} + \left[1 - \left(\frac{2l+1}{\nu+2}\right)^2 z^{-2}\right]v = 0 \tag{7}$$

这正是$(2l+1)/(\nu+2)$阶的 Bessel 方程. 式(3)的边界条件为 $u(0)=0$，因此式(7)的边界条件为 $v(0)=0$. 式(7)满足这边界条件的解为第一类 Bessel 函数，即

$$v(z) = J_{(2l+1)/(\nu+2)}(z) \tag{8}$$

这样，我们已经求得 $E\to 0$ 时径向方程(3)的解为

$$u(r) = W(\rho) = z^{1/(\nu+2)}J_{(2l+1)/(\nu+2)}(z) \tag{9}$$

利用 Bessel 函数的渐近表示式，可以得出

当 $r\to 0$，即 $\rho\to 0, z\to 0$ 时，

$$u(r) \sim z^{1/(\nu+2)}z^{(2l+1)/(\nu+2)} \sim z^{(2l+2)/(\nu+2)} \sim r^{l+1} \tag{10}$$

当 $r\to\infty$，即 $\rho\to\infty, z\to\infty$ 时，

$$u(r) \sim z^{1/(\nu+2)}\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z - \frac{2l+1}{\nu+2}\cdot\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\sim \rho^{-\nu/4}\cos\left[\frac{2}{\nu+2}\rho^{(\nu+2)/2} - \frac{2l+1}{\nu+2}\cdot\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right] \tag{11}$$

考虑到 $E\to 0$ 时

$$\int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r=\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/2}\int_0^r r^{\nu/2}\mathrm{d}r$$

$$=\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/2}\frac{2}{\nu+2}r^{(\nu+2)/2}$$

$$=\frac{2}{\nu+2}\rho^{(\nu+2)/2} \tag{12}$$

所以式(11)可以写成如下形式：

$$E\to 0,\ r\to\infty$$

$$u(r)\sim r^{-\nu/4}\cos\left[\int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r-\frac{2l+1}{\nu+2}\cdot\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right]$$

$$\sim r^{-\nu/4}\sin\left[\int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r-\frac{2l+1}{2(\nu+2)}\pi+\frac{\pi}{4}\right] \tag{13}$$

其中 V 为势能，由式(1)表示.

8.8 质量为 μ 的粒子在中心势场

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\quad \lambda<0,\quad -2<\nu<0 \tag{1}$$

中运动，试建立准经典条件下确定束缚态能级的量子化条件，导出能级公式.

解 准经典近似亦即 $E\to 0$ 的情形.(根据上册 5.1 题的讨论，有无限多条能级密集在 $E\sim 0^-$ 附近.)上题已经证明，在 r 很大处径向波函数的渐近形式为

$$u(r)\sim r^{-\nu/4}\sin\left[\int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r-\frac{2l+1}{2(2+\nu)}\pi+\frac{\pi}{4}\right] \tag{2}$$

如取积分上限 r 为经典转折点 r_c，满足

$$V(r_c) = E \tag{3}$$

当 r 从 0 变到 r_c，$u(r)$ 已经振荡了 n 次，(准经典近似，$n \gg 1$)渐近形式(2)可以成立；另一方面，$r = r_c$ 处 $u(r)$ 的位相应该是[①]

$$u(r_c) \sim \cdots \sin\left[\left(n + \frac{3}{4}\right)\pi\right] \tag{4}$$

比较式(2)、(4)，即得量子化条件：

$$\boxed{\int_0^{r_c} \sqrt{2\mu[E - V(r)]}\,\mathrm{d}r = \left[n + \frac{2l + \nu + 3}{2(\nu + 2)}\right]\pi\hbar \qquad n = 0,1,2,\cdots} \tag{5}$$

n 为径向量子数.[式(2)是在 $E \to 0$ 的条件下得到的，因此式(5)本来只适用于 $n \gg 1$ 的情形，现在推广到 n 的所有可能取值. 这是建立量子化条件的一般方法.]

式(5)适用子角量子数 l 的一切值($l = 0,1,2,\cdots$)，它和题 8.5 式(6)相比，只是右端添加了 $(4l - \nu)\pi\hbar/4(\nu + 2)$. 但应注意题 8.5 只适用于 $\lambda、\nu > 0$，且限于 s 态，本题式(5)则对 $-2 < \nu < 0$ 情况下的所有束缚态均可适用.

式(5)左端积分可以表示成解析形式. 对于

$$\sqrt{2\mu[E - V(r)]} = \sqrt{2\mu|E|}\left(\frac{\lambda}{E}r^{\nu} - 1\right)^{1/2}$$

作变换

$$\frac{\lambda}{E}r^{\nu} = \csc^2\xi$$

则

---

① 参看题 8.5 所引文献.

$$\left(\frac{\lambda}{E}r^{\nu}-1\right)^{1/2}=\cot\xi$$

$$\int_0^{r_c}\sqrt{2\mu(E-V)}\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{2}{\nu}\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}\sqrt{2\mu|E|}\int_0^{\pi/2}\cos^2\xi(\sin\xi)^{-\frac{2}{\nu}-2}\mathrm{d}\xi$$

$$=-\frac{2}{\nu}\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}\sqrt{2\mu|E|}$$

$$\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{4}\frac{\Gamma\left(-\frac{1}{\nu}-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(1-\frac{1}{\nu}\right)} \tag{6}$$

计算中利用了公式

$$\int_0^{\pi/2}(\sin\theta)^k\mathrm{d}\theta=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{\Gamma\left(\frac{k}{2}+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{k}{2}+1\right)}$$

$$k>-1$$

将式(6)代入式(5),即得能级公式

$$E=-|\lambda|^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu/(\nu+2)}$$

$$\cdot\left[2|\nu|\sqrt{\pi}\left(n+\frac{2l+\nu+3}{4+2\nu}\right)\right.$$

$$\left.\cdot\frac{\Gamma\left(1-\frac{1}{\nu}\right)}{\Gamma\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{\nu}\right)}\right]^{2\nu/(\nu+2)} \tag{7}$$

$$\lambda,E<0,\ -2<\nu<0,\ n,l=0,1,2,\cdots$$

例如氢原子，$V(r)=-e^2/r$，相当于 $\lambda=-e^2$，$\nu=-1$ 式(7)给出(n 改写成 n_r)

$$E=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2(n_r+l+1)^2},\quad n_r,l=0,1,2,\cdots$$

和精确解恰好一致.

8.9 质量为 μ 的粒子在中心势场

$$V(r)=\lambda r^\nu,\quad \lambda,\nu>0 \tag{1}$$

中运动，求准经典近似下的能级公式.

解 s 态($l=0$)能级公式已在题 8.5 中求出，$l\neq 0$ 时的能级可以利用上题 λ、$\nu<0$ 的结果以及上册题 5.3 导出的对应关系加以导出. 本题 λ、ν、$E>0$，$l=0,1,2,\cdots$，按照上册题 5.3，相应的 λ'、E'、ν'、l' 为

$$\begin{aligned}&\nu=-\frac{2\nu}{\nu+2},\quad l'=\frac{2l+1}{\nu+2}-\frac{1}{2}\\&\lambda'=-\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2E,\ E'=-\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)\lambda\end{aligned} \tag{2}$$

显然 λ'、ν'、$E'<0$. 由上题，势场 $V'(r)=\lambda' r^{\nu'}$ 中与角量子数 l' 相应的准经典束缚态能级为

$$\begin{aligned}E'=&-|\lambda'|^{2/(\nu'+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu'/(\nu'+2)}\\&\cdot\left[2|\nu'|\sqrt{\pi}\left(n+\frac{2l'+\nu'+3}{4+2\nu'}\right)\right.\\&\left.\cdot\frac{\Gamma\left(1-\frac{1}{\nu'}\right)}{\Gamma\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{\nu'}\right)}\right]^{2\nu'/(\nu'+2)}\end{aligned}$$

以式(2)代入上式，经过整理、化简，即得

$$E=\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu/(\nu+2)}\left\{2\nu\sqrt{\pi}\left(n+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\left[\Gamma\left(\frac{1}{\nu}+\frac{3}{2}\right)\Big/\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)\right]\right\}^{2\nu/(\nu+2)} \tag{3}$$

$$\lambda,\nu>0,\quad n,l=0,1,2,\cdots$$

此即所求能级公式. 当 $l=0$,上式就成为题 8.5 式(8).

例如三维各向同性谐振子,相当于

$$\nu=2,\quad \lambda=\frac{1}{2}\mu\omega^2$$

式(3)给出(n 改写成 n_r)

$$E=\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad n_r,l=0,1,2,\cdots \tag{4}$$

和精确解恰好一致.

8.10 粒子在中心力场中运动,考虑准经典近似下的 s 态($l=0$). 定义经典径向动量

$$p(r)=[2\mu(E-V(r))]^{1/2},\quad r<r_c \tag{1}$$

r_c 为经典转折点,满足

$$V(r_c)=E,\quad \text{即 } p(r_c)=0 \tag{2}$$

由于粒子主要出现在 $r<r_c$ 范围内,如略去波函数中的振荡因子,则在 $r\sim r+\mathrm{d}r$ 内发现粒子的概率可以近似地取为

$$\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}\Big/\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)} \tag{3}$$

试证明

$$\boxed{\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}=\frac{\pi\hbar}{\mu}\Big/\frac{\partial E}{\partial n}} \tag{4}$$

证 准经典条件下 s 态的量子化条件(见题 8.5 及 8.8)可以表示为

$$\int_0^{r_c}p(r)\mathrm{d}r=(n+\alpha)\pi\hbar,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{5}$$

α 和 n 无关. 上式对 n 求导,即得

$$\begin{aligned}\pi\hbar&=p(r_c)\frac{\partial r_c}{\partial n}+\int_0^{r_c}\frac{\partial p(r)}{\partial n}\mathrm{d}r\\&=0+\int_0^{r_c}\frac{\partial E}{\partial n}\frac{\partial p(r)}{\partial E}\mathrm{d}r=\mu\frac{\partial E}{\partial n}\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}\end{aligned}$$

因此

$$\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}=\frac{\pi\hbar}{\mu}\Big/\frac{\partial E}{\partial n}$$

此即式(4).

如式(4)左端的积分容易计算,则可以利用此式求能级.

8.11 对于中心力场的 s 态($l=0$),粒子距力心的平均距离的准经典近似公式可以表示成

$$\langle r\rangle\approx\int_0^{r_c}\frac{r\mathrm{d}r}{p(r)}\Big/\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)} \tag{1}$$

$p(r)$为经典径向动量,r_c 为经典转折点(见上题). 试对类氢离子($V=-Ze^2/r$, 即 $\nu=-1$, $\lambda=-Ze^2$)计算$\langle r\rangle$,并和精确值比较.

解 本题 λ、$E<0$,作变换

$$r=\frac{\lambda}{E}\sin^2\xi \tag{2}$$

则 $p(r)$可以表示成

$$p(r)=\sqrt{2\mu(E-V)}=\sqrt{2\mu|E|\left(\frac{\lambda}{Er}-1\right)}$$

$$=\sqrt{2\mu|E|}\cot\xi \tag{3}$$

因此

$$\int_0^r\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}=\frac{2\lambda}{E\sqrt{2\mu|E|}}\int_0^{\pi/2}\sin^2\xi\mathrm{d}\xi$$

$$=\frac{\pi\lambda}{2E\sqrt{2\mu|E|}}, \tag{4}$$

$$\int_0^{r_c}\frac{r\mathrm{d}r}{p(r)}=\frac{2\lambda^2}{E^2\sqrt{2\mu|E|}}\int_0^{\pi/2}\sin^4\xi\mathrm{d}\xi$$

$$=\frac{3\pi\lambda^2}{8E^2\sqrt{2\mu|E|}} \tag{5}$$

代入式(1),即得

$$\langle r\rangle\approx\frac{3\lambda}{4E}=\frac{3Ze^2}{4|E|} \tag{6}$$

$\langle r\rangle$的精确值已在上册题 5.9 求出,为

$$\langle r\rangle_{nlm}=\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)]\frac{a_0}{Z}$$

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{7}$$

取 $l=0$,并利用能级公式

$$E_n=-Z^2e^2/2n^2a_0$$

即得

$$\langle r\rangle_{n00}=3n^2a_0/2Z=3Ze^2/4|E_n| \tag{8}$$

恰好和式(6)一致. 注意能级的准经典近似也和精确解一致.

8.12 用准经典近似公式

$$\langle r\rangle \approx \int_0^{r_c} \frac{r\mathrm{d}r}{p(r)} \Big/ \int_0^{r_c} \frac{\mathrm{d}r}{p(r)} \tag{1}$$

计算三维各向同性谐振子 s 态各能级的$\langle r\rangle$，并和精确值比较.

解 将谐振子势场写成

$$V(r) = \lambda r^2, \quad \lambda = \frac{1}{2}\mu\omega^2 \tag{2}$$

作变换

$$r = \sqrt{E/\lambda}\sin\xi \tag{3}$$

则

$$p(r) = \sqrt{2\mu[E - V(r)]} = \sqrt{2\mu E}\cos\xi \tag{4}$$

因此

$$\int_0^{r_c} \frac{\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{1}{\sqrt{2\mu\lambda}} \int_0^{\pi/2} \mathrm{d}\xi = \frac{\pi}{2\sqrt{2\mu\lambda}} \tag{5}$$

$$\int_0^{r_c} \frac{r\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{E}{\lambda\sqrt{2\mu E}} \int_0^{\pi/2} \sin\xi \mathrm{d}\xi = \sqrt{E/2\mu\lambda^2} \tag{6}$$

代入式(1)，即得 s 态各能级$\langle r\rangle$的准经典近似公式：

$$\langle r\rangle \approx \frac{2}{\pi}\sqrt{E/\lambda}$$

$$= \frac{4}{\pi}\sqrt{\left(n_r + \frac{3}{4}\right)\hbar/\mu\omega} \tag{7}$$

其中利用了 s 态($l=0$)能级公式

$$E = (2n_r + 3/2)\,\hbar\omega, \quad n_r = 0,1,2,\cdots \tag{8}$$

利用上册题 5.7 得到的公式

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi(0)|^2, \quad (l=0) \tag{9}$$

容易求得 s 态$\langle r\rangle$的精确值为[①]

$$\langle r\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu^2\omega^2}|\psi(0)|^2$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{(2n_r+1)!!}{(2n_r)!!}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

$$= \frac{4}{\pi}\frac{\Gamma\left(n_r+\frac{3}{2}\right)}{n_r!}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \tag{10}$$

式(7)和(10)的比较如下表所示：

n_r	0	1	2	3	4
$\frac{4}{\pi}\sqrt{n_r+\frac{3}{4}}$	1.1027	1.6843	2.1114	2.4656	2.7750
$\frac{4}{\pi}\frac{\Gamma(n_r+3/2)}{n_r!}$	1.1284	1.6926	2.1157	2.4683	2.7769
相对偏差(%)	2.28	0.49	0.20	0.11	0.068

由表可见，量子数 n_r 越大，准经典近似值与精确值的偏差越小.

8.13 质量为 μ 的粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动，设

$$V(0) = 0$$

对于准经典近似下的 s 态，求 $|\psi(0)|^2$ 的近似值.

解 s 态 $|\psi(0)|^2$ 的准确公式为(见上册题 5.7)

$$|\psi(0)|^2 = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle \tag{1}$$

---

① $\psi(0)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R(0)$，$R(r)$的函数形式，参见曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 6.4.

在准经典近似下，按照 8.10 题的分析，应有

$$\left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle \approx \int_0^{r_c} \frac{dV}{dr} \frac{dr}{p(r)} \Big/ \int_0^{r_c} \frac{dr}{p(r)} \tag{2}$$

其中 $p(r)$为 s 态经典径向动量，即

$$p(r) = \sqrt{2\mu[E - V(r)]} \tag{3}$$

因此

$$\begin{aligned} \int_0^{r_c} \frac{dV}{dr} \frac{dr}{p(r)} &= \int_0^{r_c} \frac{dV}{\sqrt{2\mu[E - V(r)]}} \\ &= -\left[\frac{2}{\mu}(E - V)\right]^{1/2} \Big|_{r=0}^{r=r_c} = \sqrt{2E/\mu} \end{aligned} \tag{4}$$

计算中利用了

$$V(r_c) = E, \quad V(0) = 0$$

在题 8.10 中已经证明

$$\int_0^{r_c} \frac{dr}{p(r)} = \frac{\pi\hbar}{\mu} \Big/ \frac{\partial E}{\partial n} \tag{5}$$

将式(4)、(5)代入式(2)，得到

$$\left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle \approx \frac{\sqrt{2\mu E}}{\pi\hbar} \frac{\partial E}{\partial n} \tag{6}$$

再代入式(1)，即得

$$|\psi(0)|^2 \approx \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} \frac{\partial E}{\partial n}, \quad (l = 0) \tag{7}$$

各式中 E 即 E_n. 推导过程中用到了条件 $V(0)=0$，故式(6)、(7)只适用于 $r=0$ 不是奇点的势场. 对于 $V=\lambda r^\nu$ 型的势场，相当于 λ、$\nu>0$ 的情形.

对于三维各向同性谐振子，式(6)给出

$$\langle r\rangle = \frac{4}{\pi}\sqrt{(n+3/4)\,\hbar/\mu\omega} \tag{8}$$

这正是题 8.12 式(7). 由本题式(7)得出的 $|\psi(0)|^2$ 则与精确值基本相符，略有偏差(见上题).

对于线性中心势场 $V=\lambda r$，精确公式(1)给出

$$|\psi(0)|^2 = \lambda\mu/2\pi\hbar^2 \tag{9}$$

准经典近似公式(7)恰好给出同样的结果. (能级公式见题 8.6.)

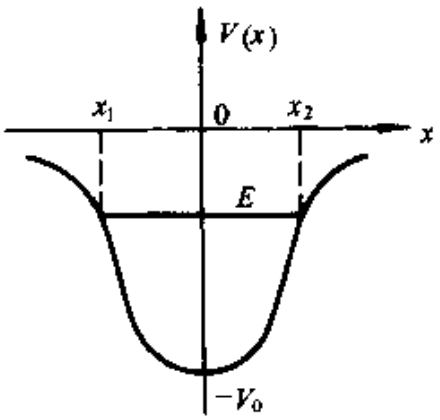


图 8.14

8.14 粒子在势场

$$V(x) = -V_0\left[\mathrm{ch}\left(\frac{x}{a}\right)\right]^{-2} \tag{1}$$

中运动，(a) 求势阱底部($x\sim 0$)粒子的经典振动频率；(b) 求可以应用准经典近似方法的条件；(c) 求准经典近似下束缚态能级公式；(d) 求能级总数.

解 在 $x\sim 0$ 附近，将 $V(x)$ 展开成 x 的幂级数，可得

$$V(x) = -V_0\left(\mathrm{ch}\,\frac{x}{a}\right)^{-2}$$

$$= -V_0\left[\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{x/a}+\mathrm{e}^{-x/a})\right]^{-2}$$

$$\approx -V_0\left(1+\frac{x^2}{2a^2}\right)^{-2}$$

$$\approx -V_0+\frac{V_0}{a^2}x^2$$

和谐振子势场 $\left(-V_0+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right)$ 比较，即得粒子在势阱底部的经典振动频率

$$\omega = \sqrt{2V_0/\mu a^2} \tag{2}$$

接近势阱底部的“低能级”，能级间距约为$\hbar\omega$，如$\hbar\omega \ll V_0$（势阱深度），就可以应用准经典近似，条件为

$$V_0 \gg \hbar\omega, \quad \text{即 } \mu a^2 V_0/2\hbar^2 \gg 1 \tag{3}$$

在准经典近似下，量子化条件为

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu[E-V(x)]}\,\mathrm{d}x = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \tag{4}$$

其中$p(x)=\sqrt{2\mu[E-V(x)]}$为经典动量，x_1、x_2为经典转折点. 由于$V(x)$是偶函数，上式可以改写成

$$I(E) \equiv \int_0^{x_2} \sqrt{2\mu[E-V(x)]}\,\mathrm{d}x = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar/2 \tag{4'}$$

直接计算$I(E)$稍有困难. 为此，先计算$\mathrm{d}I(E)/\mathrm{d}E$，得到

$$\frac{\mathrm{d}I(E)}{\mathrm{d}E} = \sqrt{2\mu[E-V(x_2)]}\,\frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}E} + \frac{\sqrt{2\mu}}{2}\int_0^{x_2} \mathrm{d}x/\sqrt{E-V(x)}$$

由于$V(x_2)=E$，上式中第一项为0，故得

$$\frac{\mathrm{d}I(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{\sqrt{2\mu}}{2}\int_0^{x_2}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{E-V(x)}} = \frac{\sqrt{2\mu}}{2}\int_0^{x_2}\frac{\mathrm{ch}\left(\frac{x}{a}\right)\mathrm{d}x}{\sqrt{V_0+E\mathrm{ch}^2\left(\frac{x}{a}\right)}} \tag{5}$$

为了计算上式右端的积分，只需作变换

$$\mathrm{sh}\left(\frac{x}{a}\right) = \sqrt{-\frac{V_0+E}{E}}\,\xi, \quad (E<0) \tag{6}$$

则

$$\left[\mathrm{ch}\left(\frac{x}{a}\right)\right]^2 = 1 + \left[\mathrm{sh}\left(\frac{x}{a}\right)\right]^2$$

$$= 1 - \frac{V_0 + E}{E}\xi^2$$

$$\frac{1}{a}\,\mathrm{ch}\left(\frac{x}{a}\right)\mathrm{d}x = \sqrt{-\frac{V_0 + E}{E}}\,\mathrm{d}\xi$$

当 $x = 0$, $\xi = 0$

当 $x = x_2$, $\xi = 1$

因此

$$\int_0^{x_2} \frac{\mathrm{ch}\left(\frac{x}{a}\right)\mathrm{d}x}{\sqrt{V_0 + E\mathrm{ch}^2\left(\frac{x}{a}\right)}}$$

$$= \frac{a}{\sqrt{-E}}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} = \frac{\pi a}{\sqrt{-4E}} \tag{7}$$

代入式(5),得到

$$\frac{\mathrm{d}I(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{\pi a\sqrt{2\mu}}{4\sqrt{-E}} \tag{8}$$

积分,即得

$$I(E) = -\frac{\pi a}{2}(\sqrt{-2\mu E} + C) \tag{9}$$

C 为积分常数. $E \to -V_0$ 时,显然 $x_2 \to 0$,因此 $I(-V_0) = 0$. 由此定出 $C = -\sqrt{2\mu V_0}$,代入式(9),得到

$$I(E) = \frac{\pi a}{2}\sqrt{2\mu}\,(\sqrt{V_0} - \sqrt{-E}) \tag{9'}$$

再利用量子化条件(4′),即得能级公式

$$\boxed{E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0} - \left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2 \quad n = 0,1,2,\cdots} \tag{10}$$

束缚态能级总数约为

$$N = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0} \tag{11}$$

因此准经典近似的适用条件也可以表示成 $N \gg 1$.

利用式(2),可以将式(10)写成

$$E_n = -V_0 + \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \left(n+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{10′}$$

其中第二项相当于谐振子能级,第三项为 $V(x)$ 中的非谐成分引起的能级修正. 请将本题和上册题 5.23 对照比较.

8.15 原子核发生 α 衰变时,α 粒子(电荷 $2e$)受到的作用势可以近似表示为

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R \\ \beta/r, & r > R \end{cases}$$

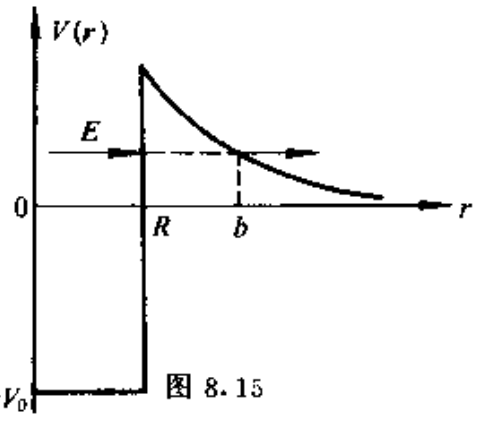


图 8.15

其中 $\beta = 2(Z-2)e^2$, Z 是衰变前原子核的原子序数,R 是"核半径". $r < R$ 区域为核力,$r > R$ 区域为 Coulomb 力. 试计算 α 粒子对 Coulomb 势垒的穿透概率,进而求出原子核 α 衰变的半衰期.

解 α 粒子撞击 Coulomb 势垒时，穿透概率约为[①]

$$D \approx \exp\left[-\frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_R^b \sqrt{V(r)-E}\,\mathrm{d}r\right] \tag{1}$$

其中 μ 为 α 粒子质量，b 为经典转折点，满足

$$E = V(b) = \beta/b \tag{2}$$

式(1)中的积分不难求出：作变换

$$\sin\theta = \sqrt{r/b} \tag{3}$$

则

$$\begin{aligned}\int_R^b \sqrt{V(r)-E}\,\mathrm{d}r &= \int_R^b \sqrt{\frac{\beta}{r}-E}\,\mathrm{d}r \\ &= \sqrt{\beta}\int_R^b \sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{b}}\,\mathrm{d}r \\ &= \sqrt{b\beta}\int_{\theta_0}^{\pi/2}(1+\cos 2\theta)\,\mathrm{d}\theta \\ &= \sqrt{b\beta}\left[\left(\frac{\pi}{2}-\theta_0\right)-\sin\theta_0\cos\theta_0\right]\end{aligned}$$

其中

$$\sin\theta_0 = \sqrt{R/b},\quad \cos\theta_0 = \sqrt{1-R/b}$$

$$\frac{\pi}{2}-\theta_0 = \arccos\sqrt{R/b},\quad R/b = RE/\beta$$

因此穿透概率为

$$D \approx \exp\left[-\frac{2\beta}{\hbar}\sqrt{\frac{2\mu}{E}}\cdot\left(\arccos\sqrt{\frac{RE}{\beta}}-\sqrt{\frac{RE}{\beta}\left(1-\frac{RE}{\beta}\right)}\right)\right] \tag{4}$$

---

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 1.3.

其中 $\beta=2(Z-2)e^2$，E 为 α 粒子逸出核外时的动能，即实验室中测得的 α 粒子动能."核半径"R 可以按照经验公式

$$R\approx A^{1/3}\times 1.4\text{fm},\quad (1\text{fm}=10^{-13}\text{cm}) \tag{5}$$

计算，A 为核的质量数(核子总数).

设 α 粒子在核内($r<R$)的速度为 v，则单位时间内撞击 Coulomb 势垒的次数为 $\nu\sim v/2R$，因此

$$\text{衰变常数 } \lambda=\nu D\approx\frac{v}{2R}D \tag{6}$$

$$\text{半衰期 } T_{1/2}=\frac{\ln 2}{\lambda}=\frac{0.693}{\lambda} \tag{7}$$

原子核中核子的平均动能约为 20MeV，相当于 $v\sim 0.2c$ (c 为光速)，α 粒子的速度 v 大致也是这个数量级.

例如^{238}U($Z=92$)核放射 $E=4.27$MeV 的 α 粒子，由式(4)～(7)算出以下结果：

$$R\approx 8.7\text{fm}$$

$$\arccos\sqrt{RE/\beta}-\sqrt{\frac{RE}{\beta}\left(1-\frac{RE}{\beta}\right)}=0.833$$

$$\frac{2\beta}{\hbar}\sqrt{\frac{2\mu}{E}}=4(Z-2)\frac{e^2}{\hbar c}\sqrt{\frac{2\mu c^2}{E}}=109.8$$

$$D\approx e^{-91.5}=1.9\times 10^{-40},$$

$$\lambda\approx\frac{v}{2R}D\approx\frac{c}{10R}D\approx 6.5\times 10^{-19}/\text{s}$$

$$T_{1/2}=\frac{0.693}{\lambda}\approx 1.1\times 10^{18}\text{s}\approx 3.4\times 10^{10}\text{ 年}$$

半衰期 $T_{1/2}$的实验值为 4.47×10^9 年.理论值和实验值基本符合.

又如^{222}Rn($Z=86$)核放射 $E=5.58$MeV 的 α 粒子，半衰期 $T_{1/2}$(实验)为 3.824 天，而由式(4)～(7)算出 $T_{1/2}\approx 17.3$ 天，二者大致一致.

8.16 讨论具有反射对称性的一维正幂次势阱

$$V(x)=\lambda|x|^{\nu},\ (\lambda,\nu>0) \tag{1}$$

以及不具有反射对称性的一维正幂次势阱

$$V(x)=\begin{cases}\lambda x^{\nu}, & x>0,\ (\lambda,\nu>0)\\ \infty, & x<0\end{cases} \tag{2}$$

中粒子能谱形状随幂次 ν 的变化规律.

解 对于 $\nu=1$(线性势),$\nu=2$(谐振子势)和 $\nu\to\infty$(无限深方势阱),已有解析解. 而对其它 ν 值,尚未见到解析解的报导,但可以用 WKB 近似求解.

先讨论最常见的谐振子势($\nu=2$). 对于势阱(1),粒子(设质量为 m)的能级为

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega,\ \omega=\sqrt{2\lambda/m},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

每条能级都不简并,相应的本征态具有确定的宇称,$\pi=(-)^n$。对于势阱(2),考虑到波函数 $\Psi(x)$ 的边条件 $\Psi(0)=0$,在(3)式的能级中只有奇宇称($n=$奇数)能级才存在,所以能级为

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega,\quad n=1,3,5,\cdots \tag{4}$$

令 $n=2k+1$,则 $k=0,1,2,\cdots$,而 $E_k=(k+3/4)2\hbar\omega$,可以改记为

$$E_n=(n+3/4)2\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{5}$$

对于线性势阱($\nu=1$),势阱(2)的能级为[①]

$$E_n=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\xi_n,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{6}$$

其中 ξ_n 为下列方程的第 n 个根

$$J_{1/3}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)+J_{-1/3}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)=0 \tag{7}$$

---

① 例如,见曾谨言,《量子力学》卷 I, p. 119(科学出版社,北京,1997).

$J_{\pm 1/3}$ 为 $\pm 1/3$ 阶的 Bessel 函数，$\xi_0 = 2.338$，$\xi_1 = 4.088$，$\xi_2 = 5.521$，….

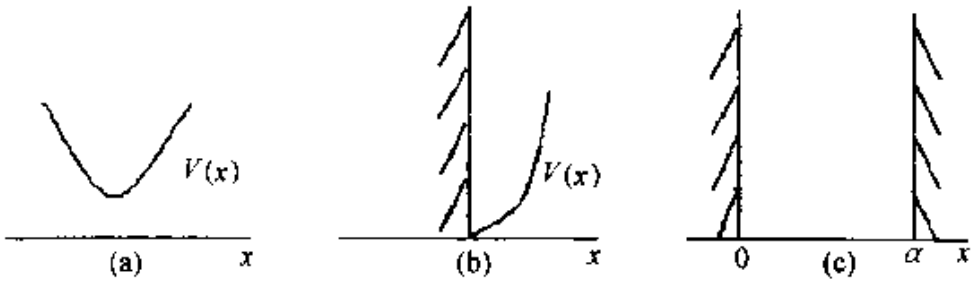


图 8.16

对于 ν 为其它有限值的情况，我们尚未见到 Schrödinger 方程的解析解的报导，但可用 WKB 近似求解，其结果与用下列量子化条件得出的结果一致. 按 WKB 法，对于图三种类型的势阱的量子化条件分别为①

$$\oint p\mathrm{d}x = (n + 1/2)h, \quad n = 0,1,2,\cdots, \text{对于图 1(a)} \tag{8}$$

$$\oint p\mathrm{d}x = (n + 3/4)h, \quad n = 0,1,2,\cdots, \text{对于图 1(b)} \tag{9}$$

$$\oint p\mathrm{d}x = (n + 1)h, \quad n = 0,1,2,\cdots, \text{对于图 1(c)} \tag{10}$$

式中 $p(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}$，$\oint \mathrm{d}x$ 表示对周期运动积分一个周期.

利用(8)式，可以得出势阱(1)中粒子的能级(见题 8.4，式(2))

$$E_n = \lambda^{\frac{2}{\nu+2}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}}\left[\frac{\sqrt{\pi}\,\nu\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{\nu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{2\nu}{\nu+2}} \tag{11}$$

① 参见曾谨言，《量子力学》卷 I，p. 22，或卷 I，p. 20(科学出版社，北京，1997)

不难验证，对于 $\nu=2$，上式给出的能级与严格解(3)式完全相同. 对于 $\nu=1$，上式给出势阱(1)的能级为

$$E_n=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{4}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2/3},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{12}$$

其中 $n=0,2,4,\cdots$ 为偶宇称能级，$n=1,3,5,\cdots$ 为奇宇称能级. 对于势阱(2)，$\nu=1$ 情况，只应保留奇宇称态，与(4)、(5)式的论证相同，可得出其能级为

$$E_n=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{13}$$

数值计算表明，(13)式给出的结果与由(6)，(7)式给出的精确解非常接近(特别是量子数 n 较大的情况). 因此可以相信，其它 ν 值的情况下的 WKB 近似解也是相当满意的.

把(11)式应用于无限深方势阱($\nu\to\infty$)时，需要把$(n+1/2)$换成$(n+1)$(参见(8)式和(10)式)，即 $E_n\propto(n+1)^2$，$n=0,1,2,\cdots$，或改记为 $E_n\propto n^2$，$n=1,2,3,\cdots$. 这与严格解(势阱宽度为 a)

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{14}$$

完全一致.

对于 $\nu=1/2$，势阱(1)的能级为

$$E_n=\lambda^{4/5}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/5}\left[\frac{15\pi}{16}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2/5},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{15}$$

而势阱(2)的能级为

$$E_n=\lambda^{4/5}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/5}\left[\frac{15\pi}{8}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/5},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{16}$$

以上分析可概括如下：

(1) 对于具有反射对称性的势阱(1)

$$E_n \propto \left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2\nu}{\nu+2}}, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{17}$$

(2) 对于无反射对称性的势阱(2)

$$E_n \propto \left(n+\frac{3}{4}\right)^{\frac{2\nu}{\nu+2}}, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{18}$$

(18)式与中心势 $V(r)=\lambda r^{\nu}(\lambda,\nu>0)$中的角动量 $l=0$(s 态)能级的公式相同.

(3) 对于无限深方势阱(相当于 $\nu\to\infty$)

$$E_n \propto n^2, \quad n=1,2,3,\cdots \tag{19}$$

总之,随 ν 增大,势能随$|x|$变化愈陡,能量随量子数 n 变化相应也愈快. 对于 $\nu=2$(谐振子),能级均匀分布(相邻能级的间距不变),这是体系的特有的动力学对称性的反映①,即 Hamilton 量在相空间中的各向同性所决定的. $\nu=2$ 是一个分界线,当 $\nu>2$ 时,相邻能级间距随 n 增大而增大,即能级愈来愈稀. 当 $\nu\to\infty$时,达到极限 $dE_n/dn\propto n$. 反之,当 $\nu<2$ 时,相邻能级间距随 n 增大而减小,当 $n\to\infty$时,能级极其密集. 这就是能谱形状随 ν 变化的规律.

顺便提到,对于一维氢原子②(负幂次型,$\nu=-1$,取自然单位)

$$V(x)=-\frac{1}{|x|} \tag{20}$$

束缚能级(基态 $E_0=-\infty$除外)为

$$E_n=-\frac{1}{2n^2}, \quad n=1,2,3,\cdots \tag{21}$$

能级是二重简并的(偶宇称态和奇宇称态简并). 而对于

---

① A. Royer, *American Journal of Physics*, **64**(1996),1393.

② 参见曾谨言,《量子力学》,卷 I, pp. 307～311, 或 R. Loudon, *American Journal of Physics*, **27**(1959),649.

$$V(x)=\begin{cases}-\dfrac{1}{x}, & x>0\\ \infty, & x<0\end{cases} \tag{22}$$

能级仍如(21)式所示，但能级不再简并. 在以上两种情况下，随 n 增大，能级密度愈来愈大，当 $n\to\infty$，即 $E_n\to 0$ 时，能级无限密集，这与上述 $\nu<2$ 情况相似. 在 $E>0$ 时，出现连续谱(非束缚态)，这是正幂势阱中所没有的.

8.17 讨论常见的正幂次中心势阱

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\ (\lambda,\nu>0) \tag{1}$$

和负幂次中心势阱(保证 $\lim\limits_{r\to 0}r^2V(r)=0$)

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\ (\lambda<0,\ -2<\nu<0) \tag{2}$$

中粒子的能谱形状随幂次 ν 变化的规律.

解 $\nu=2$(三维各向同性谐振子势)，$\nu=1$(线性中心势)$l=0$ 情况，和 $\nu\to\infty$(无限深球方势阱)以及 $\nu=-1$(Coulomb 势)，能量本征方程有解析解. 对于其它 ν 值，我们尚未见到解析解的报导，但可以用 WKB 近似求解. 这个近似解，在 $\nu=2,\infty$ 和 -1 三种情况下，与严格解完全一致. 在其它情况下，WKB 近似解与精确数值解也相当接近(特别是对于大量子数情况).

对于正幂中心势阱(1)，WKB 近似解给出能量本征值为(见题 8.9，式(3))

$$E_{n,l}=\lambda^{\frac{2}{\nu+2}}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}}\left[2\nu\sqrt{\pi}\,\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}+\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}\left(n_r+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2\nu}{\nu+2}} \tag{3}$$

$$n_r,l=0,1,2,\cdots$$

n_r 和 l 分别是径向量子数(径向波函数的节点数，$r=0$ 和 ∞ 点除外)和角动量量子数，μ 为粒子质量.

对于 $\nu=2$,(3)式化为

$$E_N = (N + 3/2)\,\hbar\omega,\ \omega = \sqrt{2\lambda/\mu},\ N = 2n_r + l = 0,1,2,\cdots \tag{4}$$

与严格解完全相同. 此时,能量只依赖于 n_r 和 l 的一种特殊组合,即 $N=2n_r+l$. 这是 $V(r)\propto r^2$ 这种特殊的中心力场所具有的高于其几何对称性(SO_3)的动力学对称性(SU_3)的反映. 此时能级出现 l 简并,即对于给定能级 E_N, $l=N,\ N-2,\cdots,1$(N 奇)或 0(N 偶),相应能级的简并度为 $f_N=\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$. 每条能级具有确定的宇称 $\pi=(-)^N$.

对于 $\nu=1$,WKB 近似给出的能级(3)式化为

$$E_{n_r l} = \left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n_r + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}\right)\right]^{2/3} \tag{5}$$

对于 $\nu=1, l=0$ 的能级,可以找到精确解①

$$E_{n_r 0} = \left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3} x_{n_r 0},\quad n_r = 0,1,2,\cdots \tag{6}$$

$x_{n_r 0}$是下列方程的第 n_r 个根

$$J_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) + J_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) = 0 \tag{7}$$

精确解 $x_{n_r 0}$与 WKB 近似解 $\left[\frac{3\pi}{2}\left(n_r+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}$ 非常接近. 可以相信,其它 l 值的 WKB 近似解也是相当满意的.

对于 $\nu=1/2$,(3)式给出

$$E_{n_r l} = \left(\frac{\lambda^4\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/5}\left[\frac{15\pi}{8}\left(n_r + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}\right)\right]^{2/5} \tag{8}$$

---

① 参阅曾谨言,《量子力学》卷 I, p. 119(科学出版社,1997).

对于 $\nu\to\infty$，(3)式给出(注意，$(n_r+l/2+3/4)$应换为$(n_r+l/2+1)$)

$$E_{n_r l}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left(n^r+\frac{1}{2}+1\right)^2 \tag{9}$$

在 $l=0$ 的情况下，上式可表示成

$$E_{n_r 0}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}n^2,\quad n=n_r+1=1,2,3,\cdots \tag{10}$$

与精确解一致.

对于负幂中心势(2)，WKB 近似解给出(见题 8.8，式(7))

$$E_{n_r l}=-|\lambda|^{\frac{2}{\nu+2}}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}}$$

$$\times\left[2|\nu|\sqrt{\pi}\,\frac{\Gamma\left(1-\frac{1}{\nu}\right)}{\Gamma\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{\nu}\right)}\left(n_r+\frac{2l+\nu+3}{4+2\nu}\right)\right]^{\frac{2\nu}{\nu+2}} \tag{11}$$

对于氢原子($\lambda=-e^2$，$\nu=-1$)，上式给出

$$E_n=-\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{2n^2},\ n=n_r+l+1=1,2,3,\cdots \tag{12}$$

与严格解一致. 这里能级 E_n 只依赖于 n_r 和 l 的一种特殊组合，即 $n=n_r+l+1$. 这是 $V(r)\propto-1/r$ 这种特殊的中心力场所具有的动力学对称性(O_4)所决定的①. 能级出现 l 简并，即对于给定能级 E_n，$l=0,1,\cdots,n-1$，能级简并度为 $f_n=n^2$.

幂次中心势阱中束缚能级的谱型可分下列几个方面来讨论.

对于所有中心力场中的粒子，最基本的共同点是角动量 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 守恒. 但守恒量 $\boldsymbol{l}$ 的三个分量(l_x,l_y,l_z)彼此不对易，所以能级一般是简并的. 因此，只给定能量 E，并不能把能量本征态确定下

① 参阅曾谨言，《量子力学》卷Ⅰ，第 7 章(科学出版社，1997).

来，而需要找一组守恒量完全集，并让能量本征态是它们的共同本征态. 通常选(H,l^2,l_z)为守恒量完全集，即取能量本征方程

$$H\Psi=\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right)\Psi=E\Psi \tag{13}$$

的解 Ψ 如下(采用球坐标)

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{\chi_l(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$
$$l=0,1,2,\cdots;\ m=l,l-1,\cdots,-l \tag{14}$$

$\chi_l(r)$满足下列径向方程

$$H_l\chi_l(r)=E\chi_l(r)$$
$$H_l=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \tag{15}$$

当 $l=0$ 时，方程(15)与一维势阱 $V(x)$中粒子的能量本征方程形式上相同. 但要注意两点：(1)r 的变化范围是$(0,\infty)$，而 x 的变化范围为$(-\infty,+\infty)$. (2) 由于统计诠释的要求，$\lim_{r\to 0}\chi_l(r)=0$.

可以看出，径向方程(15)中不出现磁量子数 m，所以能级与 m 无关(m 简并)，但依赖于 l. 与一维粒子能量本征方程相似，求解径向方程(15)的束缚态解时，要出现径向量子数 $n_r=0,1,2,\cdots,n_r$ 即径向波函数的节点数($r=0,\infty$点除外). 能量本征值，一般说来，既依赖依于 l，也依赖于 n_r，记为 E_{n_rl}. 即对于不同的(n_r,l)，能量本征值 E_{n_rl}是不同的. 能级简并度为$(2l+1)$，这是中心力场的各向同性(SO_3)的反映.

与一维粒子相似，对给定 l，E_{n_rl}随 n_r 单调增大，即

$$\frac{\partial E_{n_rl}}{\partial n_r}>0 \tag{16}$$

E_{n_rl}随 l 的变化规律，可利用 HF(Hellmann-Feynman)定理求出，按(15)式和 HF 定理，

$$\frac{\partial E_{n_rl}}{\partial l}=\left(\Psi_{n_rlm},\frac{\partial H_l}{\partial l}\Psi_{n_rlm}\right)$$

$$=\left\langle \Psi_{n_r lm}, \frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\Psi_{n_r lm}\right\rangle > 0 \tag{17}$$

总之，$E_{n_r l}$随 n_r 和 l 分别都单调增大. 因而基态必为 $n_r=l=0$. 但能谱的变化规律的细节则与幂次 ν 很有关系.

对于三维各向同性谐振子($\nu=2$)，按(4)式，可知

$$\frac{\partial E_N}{\partial l}=\hbar\omega \quad (常数), \frac{\partial^2 E_N}{\partial l^2}=0 \tag{18}$$

$$\frac{\partial E_N}{\partial n_r}=2\hbar\omega \quad (常数), \frac{\partial^2 E_N}{\partial n_r^2}=0 \tag{19}$$

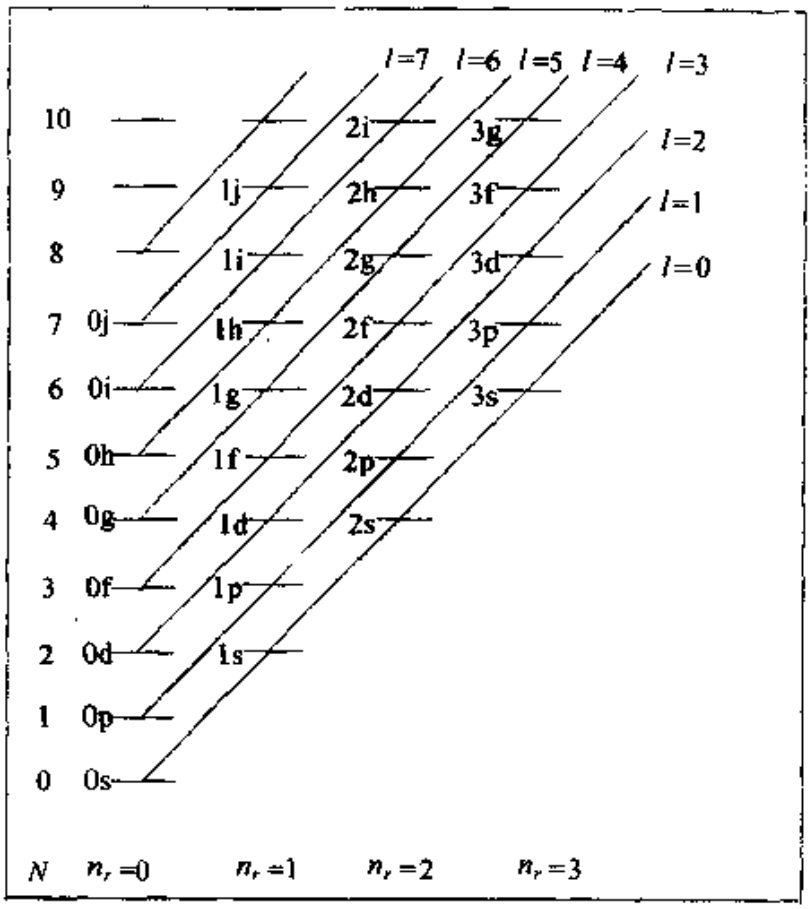


图 8.17(a) 三维各向同性谐振子能级随n_r、l变化的规律.
能级取自然单位($\hbar=\omega=1$)$E_N=N+3/2$，$N=2n_r+l$

即 E_N 随 n_r 和 l 增大而线性增大. 这表现在图 8.17(a)中 E_N 分别随 n_r 和 l 的变化都是一条直线.

对于氢原子($\nu=-1$),按(12)式(取自然单位,$\mu=c=\hbar=1$)可知

$$\frac{\partial E_n}{\partial l}=n^{-3},\ \frac{\partial^2 E_n}{\partial l^2}=-3n^{-4}<0 \tag{20}$$

$$\frac{\partial E_n}{\partial n_r}=n^{-3},\ \frac{\partial^2 E_n}{\partial n_r^2}=-3n^{-4}<0 \tag{21}$$

这表现在图 8.17(b)中 E_n 分别随 n_r 或 l 都是单调增大,但增长愈来愈慢,因此 E_n 分别随 n_r 或 l 变化的曲线是向下弯.

对于无限深球方势阱($\nu\to\infty$). 按 WKB 近似解(9)

$$\frac{\partial E_{n_r l}}{\partial l}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left(n_r+\frac{l}{2}+1\right),\ \frac{\partial^2 E_{n_r l}}{\partial l^2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{4\mu a^2}>0 \tag{22}$$

$$\frac{\partial E_{n_r l}}{\partial n_r}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}\left(n_r+\frac{l}{2}+1\right),\ \frac{\partial^2 E_{n_r l}}{\partial n_r^2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}>0 \tag{23}$$

即 $E_{n_r l}$ 分别随 n_r 或 l 都单调增大,但增长愈来愈快,表现为 $E_{n_r l}$ 分别随 n_r 或 l 变化的曲线是向上弯的,见图 8.17(c).

对于线性中心势($\nu=1$),按(5)式

$$\frac{\partial E_{n_r l}}{\partial l}=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3}\frac{\pi}{2}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n_r+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\right]^{-1/3}>0$$

$$\frac{\partial^2 E_{n_r l}}{\partial l^2}=-\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3}\frac{\pi^2}{8}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n_r+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\right]^{-1/3}<0$$

$$\frac{\partial E_{n_r l}}{\partial n_r}=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3}\pi\left[\frac{3\pi}{2}\left(n_r+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\right]^{-1/3}>0$$

$$\frac{\partial^2 E_{n_r l}}{\partial n_r^2}=-\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3}\frac{\pi^2}{2}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n_r+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\right]^{-1/3}<0$$

即 $E_{n_r l}$ 分别随 n_r 或 l 单调增大,但曲线向下弯,见图 8.17(d).

概括起来,幂次中心势中粒子能谱形状和简并度有如下规律:

(1) 一般说来,束缚能级既依赖于 n_r,也依赖于 l,能级简并度为$(2l+1)$. 能级分别随 n_r 或 l 单调上升.

(2) $\nu=2$ 情况,E 随 n_r 或 l 的变化,分别都呈直线关系. $\nu>2$ 时,$E_{n_r l}$ 随 n_r 或 l 变化的曲线向上弯,而 $\nu<2$ 时,曲线向下弯.

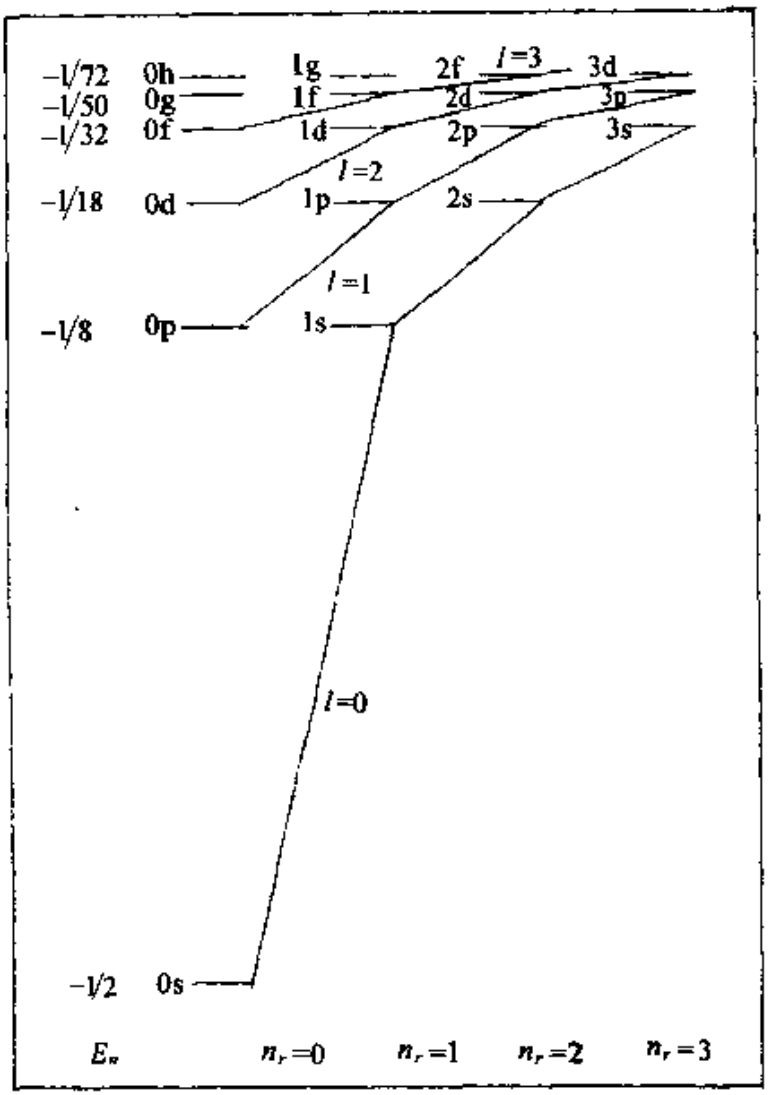


图 8.17(b)　氢原子能级随量子数 n_r 和 l 变化的规律

$$E_n=-\frac{1}{2n^2},(\text{原子单位}),n=n_r+l+1$$

(3) 当，而且只当 $\nu=2$ 和 $\nu=-1$ 情况，能级的严格解出现 l 简并. 这是由体系的动力学对称性所决定的. 经典力学中有一个著名的 Bertrand 定理[①]，即只当 $\nu=2$ 或 $\nu=-1$ 时，经典粒子的束缚运动轨道才是闭合的.

① H. Goldstein, *Classical Mehanics*, 2nd. ed. § 3.5 及附录 A(Addison-Wesley, New York, 1980).

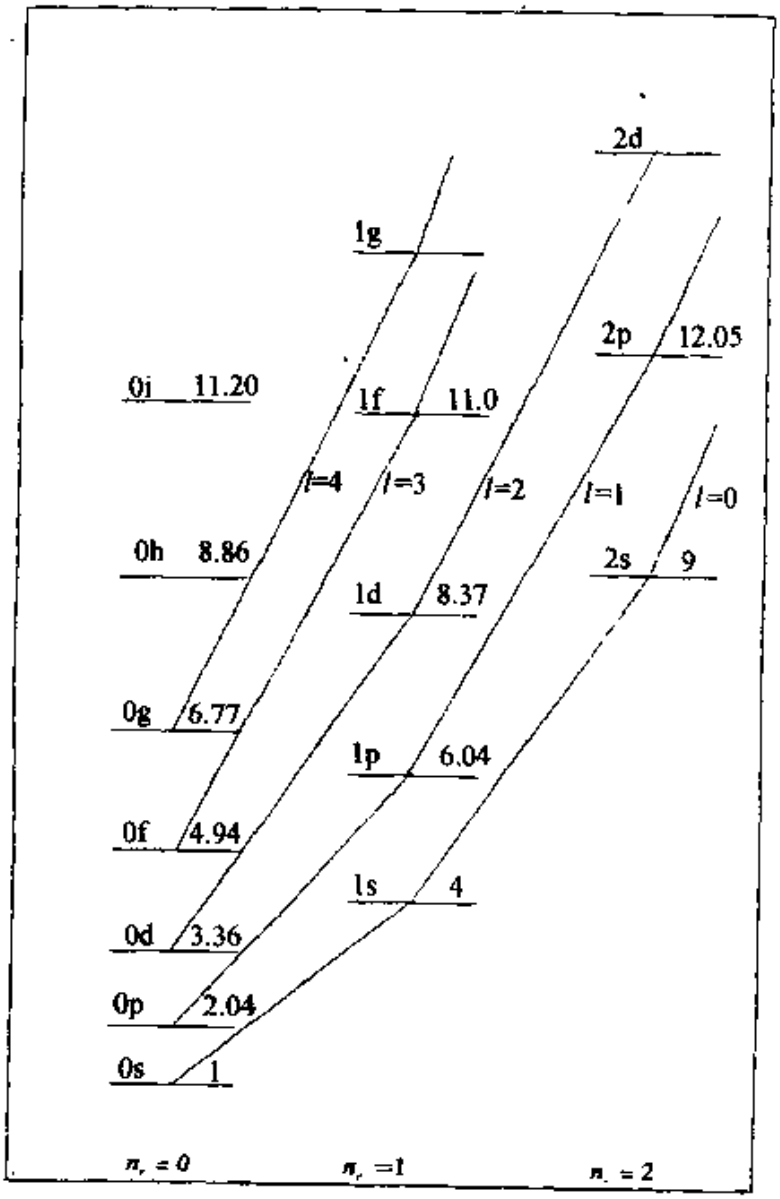


图 8.17(c) 无限深球方势阱的能级随 n_r 和 l 变化的规律.
以 E_{00}为单位，即 $E_{n_r l}/E_{00}$

(4) $\nu=2$ 情况下，能级的严格解有下列特点，$\partial E/\partial n_r : \partial E/\partial l = 2:1$. 这与经典粒子轨道的闭合性有密切关系[①]. 对于其它正幂次中心势，尽管在 WKB 近似下，$\partial E/\partial n_r : \partial E/\partial l = 2:1$ 成立，但对于

① A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, vol. Ⅰ, pp. 578～586. (W. A. Benjamin, Reading, Massachusetts. 1975).

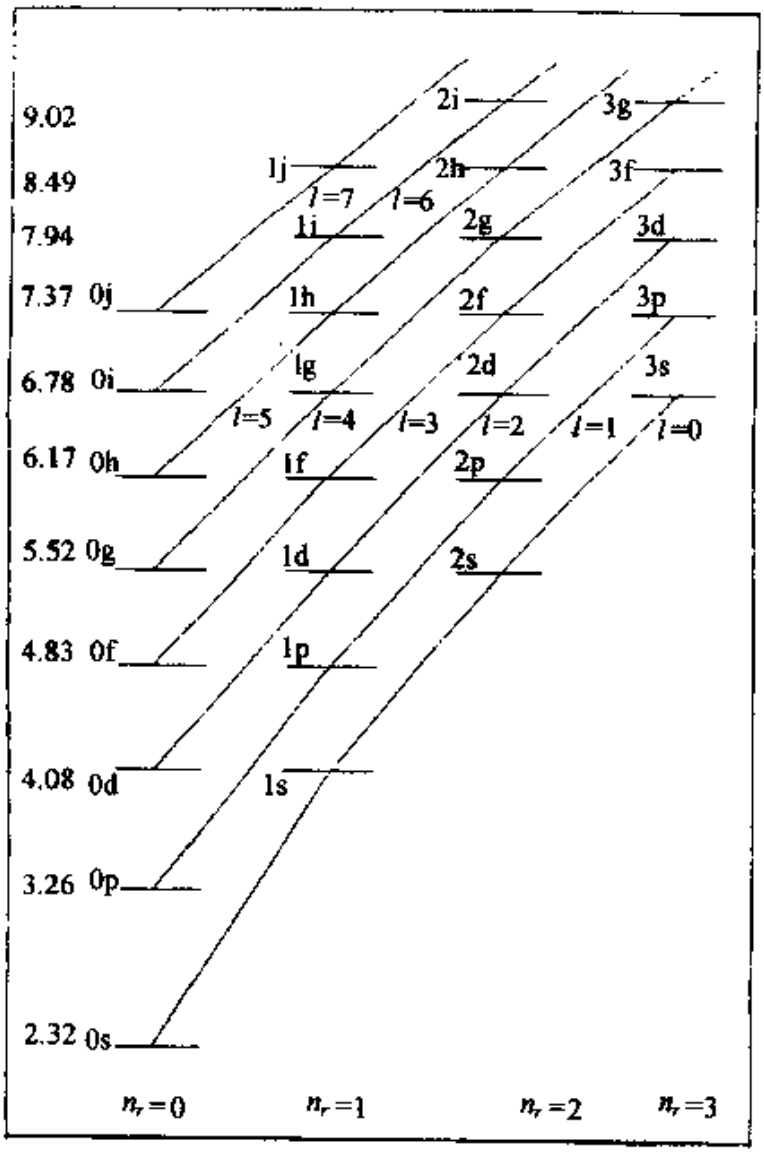


图 8.17(d)　线性中心势阱的能级随 n_r 和 l 变化的规律.

$$E_{n_r,l}=\left[\frac{3\pi}{2}\left(n_r+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3},$$

单位：$(\hbar^2\hbar^2/2\mu)^{1/3}$. 左侧一列给出的是 $l=0$ 能级的精确解

严格解，这关系并不成立.

(5) $\nu=-1$ 情况，能级的严格解有下列特点，$\partial E/\partial n_r:\partial E/\partial l=1$. 这与经典轨道闭合性密切相关. 对于其它负幂次中心势($-2<\nu<0$)，在 WKB 近似下，$\partial E/\partial n_r:\partial E/\partial l=2+\nu$ 是一个常数，但对于严格解，这关系并不成立.

第九章　二次量子化

9.1　考虑一个 Bose 子体系，其单粒子态记为 α、β、…，各态中的粒子数记为 n_α、n_β、…($n_\alpha, n_\beta = 0,1,2,\cdots$)，粒子数表象中归一化的本征态记为 $|n_\alpha\cdots\rangle$，简写成 $|n_\alpha\rangle$. 以 a_α^+ 和 a_α 表示 α 态的产生和消灭算符(即粒子数 n_α 的升、降算符)，a_α 和 a_α^+ 满足对易式

$$[a_\alpha, a_\alpha^+] \equiv a_\alpha a_\alpha^+ - a_\alpha^+ a_\alpha = 1 \tag{1}$$

(a)证明

$$\boxed{a_\alpha^+ |n_\alpha\rangle = \sqrt{n_\alpha+1}\,|n_\alpha+1\rangle} \tag{2}$$

$$\boxed{a_\alpha |n_\alpha\rangle = \sqrt{n_\alpha}\,|n_\alpha-1\rangle} \tag{3}$$

(b) 令 $\hat{n}_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha$，证明 $\hat{n}_\alpha |n_\alpha\rangle = n_\alpha |n_\alpha\rangle$.

(c) 证明

$$\boxed{|n_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_\alpha!}}(a_\alpha^+)^{n_\alpha}|0\rangle.\ \ n_\alpha = 0,1,2,\cdots} \tag{4}$$

证　为了方便，下标 α 略去. 由产生、消灭算符的物理意义，可令

$$a^+ |n\rangle = \nu(n)\,|n+1\rangle \tag{5a}$$

$$a\,|n\rangle = \lambda(n)\,|n-1\rangle \tag{5b}$$

$\lambda(n)$和 $\nu(n)$为粒子数 n(即 n_α)的函数，待定. 适当选择各 $|n\rangle$ 态($n = 0,1,2\cdots$)的相因子，总可以使 $\lambda(n)$、$\nu(n)$为非负实数. 以下求 $\lambda(n)$，$\nu(n)$. 首先，由子粒子数不能取负值，应有

$$a|0\rangle=0 \tag{6}$$

因此

$$\lambda(0)=0 \tag{7}$$

其次，将基本对易式(1)在“真空态”$|0\rangle$下求平均值，可得

$$\langle 0|[a,a^+]|0\rangle=\langle 0|aa^+|0\rangle-\langle 0|a^+a|0\rangle$$

$$=\langle 0|aa^+|0\rangle=1$$

而由式(5a)则有

$$\langle 0|aa^+|0\rangle=|a^+|0\rangle|^2=[\nu(0)]^2\langle 1|1\rangle$$

$$=[\nu(0)]^2$$

因此

$$[\nu(0)]^2=1,\text{即 } \nu(0)=1 \tag{8}$$

再来计算$|n\rangle$态下 aa^+和 a^+a 的平均值. 由式(5a)可得

$$\langle n|aa^+|n\rangle=|a^+|n\rangle|^2$$

$$=[\nu(n)]^2\langle n+1|n+1\rangle=[\nu(n)]^2 \tag{9}$$

另一方面，交替利用式(5a)、(5b)则得

$$\langle n|aa^+|n\rangle=\langle n|a\nu(n)|n+1\rangle$$

$$=\nu(n)\lambda(n+1)\langle n|n\rangle=\nu(n)\lambda(n+1)$$

所以

$$\lambda(n+1)=\nu(n) \tag{10}$$

类似地，可得

$$\langle n|a^+a|n\rangle=|\lambda(n)|n-1\rangle|^2$$

$$=[\lambda(n)]^2=[\nu(n-1)]^2 \tag{11}$$

式(9)减式(11)，并利用基本对易式(1)，即得

$$[\nu(n)]^2-[\nu(n-1)]^2=1 \tag{12}$$

上式中逐次令 $n=1,2,3,\cdots$，并利用式(8)，即得

$$[\nu(n)]^2=n+1,\ \nu(n)=\sqrt{n+1} \tag{13}$$

再利用式(10)，即得

$$\lambda(n)=\sqrt{n} \tag{14}$$

至此，已经证明

$$a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{15}$$

$$a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{16}$$

这就是式(2)和(3). 由此立即可得

$$\boxed{\hat{n}|n\rangle=a^+a|n\rangle=n|n\rangle} \tag{17}$$

亦即 $\hat{n}=a^+a$ 为粒子数算符.

重复利用式(15)，易得

$$\begin{aligned}(a^+)^n|0\rangle&=(a^+)^{n-1}|1\rangle=\sqrt{2}\,(a^+)^{n-2}|2\rangle\\&=\cdots=\sqrt{2}\cdots\sqrt{n-1}a^+|n-1\rangle\\&=\sqrt{n!}\ |n\rangle\end{aligned}$$

所以

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle.\ n=0,1,2,\cdots \tag{18}$$

此即式(4).

9.2 同上题，计算$[\hat{n},(a^+)^k]$和$[\hat{n},a^k]$，

$$k=1,2,3,\cdots$$

解 利用基本对易式$[a,a^+]=1$，易得

$$[\hat{n},a^+]=[a^+a,a^+]=a^+[a,a^+]=a^+ \tag{1}$$

$$[\hat{n},(a^+)^2]=[\hat{n},a^+]a^++a^+[\hat{n},a^+]=2(a^+)^2 \tag{2}$$

依次类推，即得

$$\begin{aligned}[\hat{n},(a^+)^k]&=(a^+)^{k-1}[\hat{n},a^+]+[\hat{n},(a^+)^{k-1}]a^+\\&=(a^+)^k+[\hat{n},(a^+)^{k-1}]a^+\\&=(a^+)^k+\{(a^+)^{k-1}+[\hat{n},(a^+)^{k-2}]a^+\}a^+\\&=2(a^+)^k+[\hat{n},(a^+)^{k-2}](a^+)^2\\&=\cdots=k(a^+)^k,\qquad k=1,2,\cdots\end{aligned} \tag{3}$$

上式取共轭，即得

$$ka^k=[a^k,\hat{n}]=-[\hat{n},a^k]$$

亦即

$$[\hat{n},a^k]=-ka^k,\qquad k=1,2,\cdots \tag{4}$$

结论：

$$\boxed{[\hat{n},(a^+)^k]=k(a^+)^k,[\hat{n},a^k]=-ka^k\quad k=1,2,\cdots}$$

9.3 以 a^+和 a 表示 Fermi 子体系的某个单粒子态的产生和消灭算符，满足基本对易式

$$\boxed{[a,a^+]_+\equiv aa^++a^+a=1} \tag{1}$$

$$\boxed{a^2=0,\qquad (a^+)^2=0} \tag{2}$$

以 $\hat{n}=a^+a$ 表示该单粒子态上的粒子数算符，求 $\hat{n}$ 的本征值，并计算对易式$[\hat{n},a^+]$、$[\hat{n},a]$.

解 利用基本对易式(1)、(2)，易得

$$\hat{n}^2=a^+aa^+a=a^+a(1-aa^+)$$

$$=a^+a-a^+a^2a^+=a^+a=\hat{n}$$

亦即

$$\hat{n}(\hat{n}-1)=0 \tag{3}$$

毫无疑问,这是算符 $\hat{n}$ 所能满足的最简单的代数方程,所以 $\hat{n}$ 的本征值为(参看题 3.13)

$$n=1,0 \tag{4}$$

这结果表明,Fermi 子体系的任何一种单粒子态最多只能容纳 1 个粒子,这正是 Pauli 原理.

利用对易式(1)、(2),容易求得

$$[\hat{n},a^+]=\hat{n}a^+-a^+\hat{n}=a^+aa^+-a^+a^+a$$

$$=a^+(1-a^+a)=a^+-a^+a^+a=a^+ \tag{5}$$

上式取共轭,可得

$$[a,\hat{n}]=-[\hat{n},a]=a \tag{6}$$

Bose 子也有类似的对易式(见上题).

9.4 设有两个独立的谐振子(即两类声子)组成一个体系,以 n_1、n_2 分别表示二者的量子数(声子数),以 a_1^+、a_1、a_2^+、a_2 表示量子数升、降算符(即两类声子的产生、消灭算符),$\hat{n}_1=a_1^+a_1$ 和 $\hat{n}_2=a_2^+a_2$ 表示粒子数算符. 粒子数表象中的归一化本征态记为 $|n_1n_2\rangle$. 令

$$a=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix},\quad a^+=(a_1^+\ a_2^+)$$

$$J=\frac{1}{2}a^+\sigma a,\ (\sigma \text{ 为 Pauli 矩阵})$$

即令

$$J_x=\frac{1}{2}(a_1^+\ a_2^+)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}(a_1^+a_2+a_2^+a_1)$$

$$J_y=\frac{1}{2}(a_1^+\ a_2^+)\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2\mathrm{i}}(a_1^+a_2-a_2^+a_1) \tag{1}$$

$$J_z=\frac{1}{2}(a_1^+\ a_2^+)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}(a_1^+a_1-a_2^+a_2)=\frac{1}{2}(\hat{n}_1-\hat{n}_2)$$

再令

$$\boxed{\begin{aligned}J_+&=J_x+\mathrm{i}J_y=a_1^+a_2\\ J_-&=J_x-\mathrm{i}J_y=a_2^+a_1=(J_+)^+\end{aligned}} \tag{2}$$

试证明这样定义的算符满足角动量算符的全部代数性质，并求出 J^2、J_z 的本征值和共同本征态[①].

解 容易看出 J_x、J_y、J_z 均为 Hermite 算符. 利用 Bose 子算符的基本对易式

$$[a_\alpha,a_\beta]=[a_\alpha^+,a_\beta^+]=0,\quad [a_\beta,a_\beta^+]=\delta_{\alpha\beta}$$

$$[\hat{n}_\alpha,a_\beta]=-a_\alpha\delta_{\alpha\beta},\qquad [\hat{n}_\alpha,a_\beta^+]=a_\alpha^+\delta_{\alpha\beta}$$

即得

$$[J_z,J_+]=\frac{1}{2}[\hat{n}_1,a_1^+a_2]-\frac{1}{2}[\hat{n}_2,a_1^+a_2]$$

$$=a_1^+a_2=J_+ \tag{3}$$

---

① 这种理论形式，称为角动量的 Schwinger 表象. 参阅 J. Schwinger, Quantum Theory of Angular Momentum, Academic Press, N. Y. (1965).

上式取共轭，得到

$$[J_-,J_z]=-[J_z,J_-]=J_- \tag{4}$$

将式(3)、(4)相加、相减，并利用

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),\qquad J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}[J_+-J_-]$$

即得

$$[J_y,J_z]=\mathrm{i}J_x,\qquad [J_z,J_x]=\mathrm{i}J_y \tag{5a}$$

再直接计算 J_+、J_-的对易式，得到

$$\begin{aligned}[J_+,J_-]&=[a_1^+a_2,a_2^+a_1]\\&=a_1^+[a_2,a_2^+]a_1+a_2^+[a_1^+,a_1]a_2\\&=a_1^+a_1-a_2^+a_2=2J_z\end{aligned} \tag{6}$$

由于

$$[J_+,J_-]=[J_x+\mathrm{i}J_y,J_x-\mathrm{i}J_y]=-2\mathrm{i}[J_x,J_y]$$

所以式(6)亦即

$$[J_x,J_y]=\mathrm{i}J_z \tag{5b}$$

式(5a)和(5b)就是角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 的基本对易式. 由此易证

$$[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}]=0 \tag{7}$$

式(3)至(7)包含了角动量的全部代数性质.

$\boldsymbol{J}^2$ 的具体表示式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2&=J_x^2+J_y^2+J_z^2=J_+J_-+J_z^2-J_z\\&=a_1^+a_2a_2^+a_1+\frac{1}{4}(\hat{n}_1-\hat{n}_2)^2-\frac{1}{2}(\hat{n}_1-\hat{n}_2)\end{aligned}$$

其中

$$a_1^+a_2a_2^+a_1=a_1^+(\hat{n}_2+1)a_1=\hat{n}_1\hat{n}_2+\hat{n}_1$$

因此

$$\boxed{\boldsymbol{J}^2=\frac{\hat{n}}{2}\left(\frac{\hat{n}}{2}+1\right)} \tag{8}$$

$$\boxed{\hat{n}=\hat{n}_1+\hat{n}_2=a_1^+a_1+a_2^+a_2} \tag{9}$$

$\hat{n}$ 为总粒子数算符.

由于 $\hat{n}_1$、$\hat{n}_2$ 可对易，显然$(\boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征态就是粒子数表象中的基矢$|n_1n_2\rangle$，本征值分别为

$$\boxed{\boldsymbol{J}^2=\frac{1}{2}(n_1+n_2)\left[\frac{1}{2}(n_1+n_2)+1\right]=j(j+1)} \tag{10}$$

$$\boxed{J_z=\frac{1}{2}(n_1-n_2)=m} \tag{11}$$

n_1、n_2、n 和 j 的取值为

$$\begin{aligned} &n_1, n_2=0,1,2,\cdots \\ &n=n_1+n_2=0,1,2,\cdots \\ &j=\frac{n}{2}=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\cdots \end{aligned} \tag{12}$$

给定 j 值后，(n_1, n_2)共有$(n+1)$种可能组合，所以

$$m=\frac{1}{2}(n_1-n_2)$$

共有$(n+1)=(2j+1)$种可能取值.

按照角动量理论的习惯，$(\boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征态记为$|jm\rangle$，在本题中就是$|n_1n_2\rangle$. 利用公式

$$\begin{aligned} &a_\alpha|n_\alpha\rangle=\sqrt{n_\alpha}\,|n_\alpha-1\rangle, \\ &a_\alpha^+|n_\alpha\rangle=\sqrt{n_\alpha+1}\,|n_\alpha+1\rangle, \end{aligned} \qquad (\alpha=1,2)$$

容易求得

$$J_+|jm\rangle=a_1^\dagger a_2|n_1n_2\rangle$$
$$=\sqrt{(n_1+1)n_2}\,|n_1+1,n_2-1\rangle$$
$$=\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,|j,m+1\rangle \qquad (13a)$$
$$J_-|jm\rangle=a_2^\dagger a_1|n_1n_2\rangle$$
$$=\sqrt{n_1(n_2+1)}\,|n_1-1,n_2+1\rangle$$
$$=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j,m-1\rangle \qquad (13b)$$

这些结果和角动量理论完全一致. 注意 $\boldsymbol{J}$ 的定义(1)中,任何一项均为一个产生算符和一个消灭算符的乘积,它们作用于$|n_1n_2\rangle$的结果,总粒子数 n 均不变,因此 j 不变.

9.5 同上题,试利用产生、消灭算符 $a_1^\dagger$、a_1、$a_2^\dagger$、a_2 构造出量子数 j 的升、降算符.

解 用产生、消灭算符作用于$|n_1n_2\rangle$态[即 $\boldsymbol{J}^2$,J_z 的共同本征态$|jm\rangle$,$j=\frac{1}{2}(n_1+n_2)$,$m=\frac{1}{2}(n_1-n_2)$.],其结果为

a_1——使 n_1 减 1,n_2 不变,即使 j 减 1/2,m 减 1/2

a_2——使 n_2 减 1,n_1 不变,即使 j 减 1/2,m 增 1/2

$a_1^\dagger$——使 n_1 增 1,n_2 不变,即使 j 增 1/2,m 增 1/2

$a_2^\dagger$——使 n_2 增 1,n_1 不变,即使 j 增 1/2,m 减 1/2

因此,如令

$$K_+=a_1^\dagger a_2,\quad K_-=(K_+)^\dagger=a_1a_2 \qquad (1)$$

则 K_+ 使 j 增 1,K_- 使 j 减 1. 二者均对 m 无影响. 计算结果如下:

$$K_+|jm\rangle=a_1^\dagger a_2^\dagger|n_1n_2\rangle$$

$$=\sqrt{(n_1+1)(n_2+1)}\,|n_1+1,n_2+1\rangle$$

$$=\sqrt{(j+m+1)(j-m+1)}\,|j+1,m\rangle \quad (2)$$

$$K_-|jm\rangle=a_1a_2|n_1n_2\rangle$$

$$=\sqrt{n_1n_2}\,|n_1-1,n_2-1\rangle$$

$$=\sqrt{(j+m)(j-m)}\,|j-1,m\rangle \quad (3)$$

注意，$K_\pm$独立于 $\boldsymbol{J}$，不能表示成 $\boldsymbol{J}$ 的函数，$\boldsymbol{J}$、$J_\pm$、$\boldsymbol{J}^2$ 均与总粒子数算符 $\hat{n}=\hat{n}_1+\hat{n}_2$ 对易，$K_\pm$则与 $\hat{n}$ 不对易.

9.6 某 Fermi 子体系的每个单粒子能级都是二重简并的，(例如在轴对称势场中运动的粒子，就是如此.)属子单粒子能级 ε_ν 的两个简并态用 ν、$\bar{\nu}$ 标记，相应的产生、消灭算符记为 a_ν^+、a_ν、$a_{\bar{\nu}}^+$、$a_{\bar{\nu}}$. 定义

$$S_\nu^+=a_\nu^+a_{\bar{\nu}}^+,\ S_\nu=(S_\nu^+)^+=a_{\bar{\nu}}a_\nu \quad (1)$$

$$\hat{n}_\nu=a_\nu^+\,a_\nu+a_{\bar{\nu}}^+a_{\bar{\nu}} \quad (2)$$

$S_\nu^+(S_\nu)$是能级 ε_ν 上产生(消灭)一对粒子的算符，$\hat{n}_\nu$ 是能级 ε_ν 上的粒子数算符. 证明

$$[S_\mu,S_\nu^+]=(1-\hat{n}_\nu)\delta_{\mu\nu} \quad (3)$$

$$[\hat{n}_\mu,S_\nu^+]=2S_\nu^+\delta_{\mu\nu} \quad (4a)$$

$$[\hat{n}_\mu,S_\nu]=-2S_\nu\delta_{\mu\nu} \quad (4b)$$

证 由 Fermi 子算符基本对易式

$$[a_\mu,a_\nu^+]_+=\delta_{\mu\nu}$$

$$[a_\mu,a_\nu]_+=[a_\mu^+,a_\nu^+]_+=0 \quad (5)$$

易知，任何两个属于不同单粒子态($\mu\neq\nu$)的产生、消灭算符是反对易的. 因此，当 $\mu\neq\nu$，S_μ 与 S_ν^+ 可对易，式(3)成立. 同样的结论也

适用于式(4).

以下讨论 $\mu=\nu$ 的情形. 利用恒等式

$$[AB,C]=A[B,C]_+-[A,C]_-B$$

$$[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]$$

并利用式(5),可得

$$\begin{aligned}[S_\nu,S_\nu^+]&=[a_\nu a_\nu,a_\nu^- a_\nu^+]\\&=[a_\nu a_\nu,a_\nu^+]a_\nu^+ +a_\nu^+[a_\nu a_\nu,a_\nu^+]\\&=a_\nu[a_\nu,a_\nu^+]_+a_\nu^+ -a_\nu^-[a_\nu,a_\nu^+]_+a_\nu\\&=a_\nu a_\nu^+ -a_\nu^+ a_\nu\\&=1-a_\nu^+ a_\nu-a_\nu^+ a_\nu=1-\hat{n}_\nu\end{aligned}$$

此即式(3). 类似地,

$$\begin{aligned}[\hat{n}_\nu,S_\nu^+]&=[a_\nu^+ a_\nu,a_\nu^+ a_\nu^+]+[a_\nu^+ a_\nu,a_\nu^+ a_\nu^+]\\&=[a_\nu^+ a_\nu,a_\nu^+]a_\nu^+ +a_\nu^+[a_\nu^- a_\nu,a_\nu^+]\\&=a_\nu^+[a_\nu,a_\nu^-]_+a_\nu^+ +a_\nu^+ a_\nu^+[a_\nu,a_\nu^+]_+\\&=2a_\nu^+ a_\nu^+ =2S_\nu^+\end{aligned}$$

此即式(4a). 上式取共轭,即得

$$[S_\nu,\hat{n}_\nu]=2S_\nu,\ \text{即}[\hat{n}_\nu,\ S_\nu]=-2S_\nu$$

此即式(4b).

9.7 同上题,设体系由两个 Fermi 子组成,粒子间有"对力"(pairing force)作用,体系 Hamilton 量表示成

$$H=\sum_\nu \varepsilon_\nu(a_\nu^+ a_\nu+a_\nu^+ a_\nu)$$

$$-G\sum_{\mu,\nu} a_\mu^+ a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\nu}} a_\nu$$

$$=\sum_\nu \epsilon_\nu \hat{n}_\nu - G\sum_{\mu,\nu} S_\mu^+ S_\nu \tag{1}$$

求体系的能级公式.

解 分两种情况讨论.

(a) 两个粒子"不配对",分别处于不同能级 ϵ_μ、ϵ_ν($\mu\neq\nu$). 体系状态的一般形式为

$$|\mu,\nu\rangle = a_\mu^+ a_\nu^+ |0\rangle, \qquad \mu\neq\nu \tag{2}$$

$|0\rangle$表示真空态(规定其能量为 0). 这种情况下,显然有

$$a_\mu^+ a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\nu}} a_\nu |\mu,\nu\rangle = 0$$

因此"对力"不起作用,体系能级为

$$E=\epsilon_\mu+\epsilon_\nu$$

(b) 两个粒子"配对". 例如

$$|\nu,\bar{\nu}\rangle = a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ |0\rangle \tag{3}$$

则

$$a_\mu^+ a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\nu}} a_\nu |\nu,\bar{\nu}\rangle = |\mu,\bar{\mu}\rangle \tag{4}$$

H 的本征态的一般形式为

$$\sum_\lambda C_\lambda |\lambda,\bar{\lambda}\rangle = \sum_\lambda C_\lambda a_\lambda^+ a_{\bar{\lambda}}^+ |0\rangle \equiv A^+ |0\rangle \tag{5}$$

满足能量本征方程

$$HA^+ |0\rangle = EA^+ |0\rangle \tag{6}$$

式(5)中 C_λ 为待定系数(即粒子数表象中的波函数). 利用上题证明的公式,可得

$$[H,A^+] = \sum_{\mu,\lambda} \epsilon_\nu C_\lambda [\hat{n}_\nu, S_\lambda^+] - G\sum_{\mu,\nu,\lambda} C_\lambda [S_\mu^- S_\nu, S_\lambda^+]$$

$$=2\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}C_{\nu}S_{\nu}^{+}-G\sum_{\mu,\nu}C_{\nu}S_{\mu}^{+}(1-\hat{n}_{\nu}) \tag{7}$$

由于 $H|0\rangle=0$，所以

$$\begin{aligned}H\sum_{\lambda}C_{\lambda}|\lambda,\bar{\lambda}\rangle&=HA^{+}|0\rangle=[H,A^{+}]|0\rangle\\&=2\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}C_{\nu}S_{\nu}^{+}|0\rangle-G\sum_{\mu,\nu}C_{\nu}S_{\mu}^{+}(1-\hat{n}_{\nu})|0\rangle\\&=2\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}C_{\nu}|\nu,\bar{\nu}\rangle-G\sum_{\mu,\nu}C_{\nu}|\mu,\bar{\mu}\rangle\\&=E\sum_{\nu}C_{\nu}|\nu,\bar{\nu}\rangle\end{aligned} \tag{8}$$

以$\langle\lambda,\bar{\lambda}|$左乘上式(取内积)，得到

$$(E-2\varepsilon_{\lambda})C_{\lambda}+G\sum_{\nu}C_{\nu}=0,\quad \lambda=1,2,\cdots \tag{9}$$

也可以写成

$$\sum_{\nu}[G+(E-2\varepsilon_{\nu})\delta_{\nu\lambda}]C_{\nu}=0,\quad \lambda=1,2,\cdots \tag{9'}$$

此即确定能级和波函数(C_{ν})的线性方程组. 上式存在非零解(C_{ν}不全为0)的条件为

$$\det|G+(E-2\varepsilon_{\nu})\delta_{\nu\lambda}|=0 \tag{10}$$

此即能级方程. 为方便起见，令

$$x_{\nu}=\frac{1}{G}(E-2\varepsilon_{\nu}) \tag{11}$$

式(10)可以化成

$$\det|1+x_{\nu}\delta_{\nu\lambda}|=0 \tag{10'}$$

可以证明(见本题末附注)式(10')可以化简成

$$\sum_{\nu}\frac{1}{x_{\nu}}=-1 \tag{12}$$

亦即

$$\boxed{\sum_{\nu}\frac{1}{E-2\varepsilon_{\nu}}=-\frac{1}{G}} \tag{12'}$$

体系能级可由此式解出(一般要用数值解法或近似解法),记为 $E_i, i=1,2,3,\cdots$. 将每个 E_i 代入式(9),就可以求出各个 C_λ 为

$$C_{i\lambda}=-G\sum_{\nu}C_{\nu}/(E_i-2\varepsilon_{\lambda})=C/(E_i-2\varepsilon_{\lambda})$$

$$\lambda, i=1,2,3,\cdots$$

C 为归一化常数. 利用归一化条件

$$\sum_{\lambda}|C_{i\lambda}|^2=1,\quad i=1,2,3,\cdots$$

即可求出

$$C_{i\lambda}=\frac{1}{E_i-2\varepsilon_{\lambda}}\left[\sum_{\nu}(E_i-2\varepsilon_{\nu})^{-2}\right]^{-1/2} \tag{13}$$

附注　式(12)的证明如下. 将式(10′)明显写出,即

$$\begin{vmatrix} 1+x_1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1+x_2 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1+x_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}=0 \tag{10'}$$

令 $\Delta(n)$表示 n 阶行列式,$\Delta(n-1)$表示其$(n-1)$阶子行列式,即

$$\Delta(n)=\begin{vmatrix} 1+x_1 & 1 & 1\cdots 1 \\ 1 & 1+x_2 & 1\cdots 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots\ \vdots \\ 1 & 1 & 1\cdots 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$\Delta(n-1)=\begin{vmatrix} 1+x_2 & 1\cdots 1 \\ 1 & \ddots \quad \vdots \\ \vdots & \\ 1 & \cdots\cdots 1+x_n \end{vmatrix}$$

$\Delta(n)$中第一行减第二行，变成

$$\Delta(n)=\begin{vmatrix} x_1 & -x_2 & 0 & 0\cdots 0 \\ 1 & 1+x_2 & 1 & 1\cdots 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots\cdots & 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$=x_1\Delta(n-1)+x_2\begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots 1 \\ 1 & 1+x_3\cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots \quad \vdots \\ 1 & 1 & \cdots\ 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$=x_1\Delta(n-1)+x_2\begin{vmatrix} 0 & -x_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1+x_3 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$=x_1\Delta(n-1)+x_2x_3\begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1+x_4\cdots & & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}=\cdots$$

$$=x_1\Delta(n-1)+x_2x_3\cdots x_n$$

亦即

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=\frac{\Delta(n-1)}{x_2x_3\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}$$

反复利用此式，可得

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=\frac{\Delta(n-1)}{x_2x_3\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}$$

$$=\frac{\Delta(n-2)}{x_3x_4\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}$$

$$=\cdots=\frac{\Delta(2)}{x_{n-1}x_n}+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_{n-2}}$$

其中

$$\Delta(2)=\begin{vmatrix}1+x_{n-1} & 1\\ 1 & 1+x_n\end{vmatrix}=x_{n-1}+x_n+x_{n-1}x_n$$

所以

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=1+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_n}$$

令 n 包括全部能级编号，并按照式(10′)令 $\Delta(n)\to 0$，即得

$$1+\sum_\nu\frac{1}{x_\nu}=0$$

此即式(12).

9.8 设 Fermi 子体系在中心力场中运动，单粒子能级与粒子的总角动量有关，记为 ϵ_j，其简并度为 $(2j+1)$，相应于单粒子态，$|jm\rangle=a_{jm}^{\dagger}|0\rangle$，$m=\pm j,\pm(j-1),\cdots,\pm\frac{1}{2}$. $|0\rangle$表示真空态；$a_{jm}^{\dagger}$为 $|jm\rangle$态上 Fermi 子产生算符. 考虑能级 ϵ_j 上一对 Fermi 子的角动量耦合为 0 的态，记为(耦合表象，$J=M=0$)$|jj00\rangle$. 试将$|jj00\rangle$用单粒子态的产生、消灭算符表示出来.

解 Fermi 子产生、消灭算符有下列基本性质：

$$a_{jm}^{\dagger}|0\rangle=|jm\rangle,\ a_{jm}|jm\rangle=|0\rangle \tag{1}$$

$$[a_{jm},a_{jm'}]_+=a_{jm}a_{jm'}+a_{jm'}a_{jm}=\delta_{mm'} \tag{2}$$

$$[a_{jm},a_{jm'}]_+=0,\ [a_{jm}^{\dagger},a_{jm'}^{\dagger}]_+=0$$

当$|jm\rangle$和$|jm'\rangle$态各有一个 Fermi 子时，体系状态为

$$a^{+}_{jm}a^{+}_{jm'}|0\rangle=|jm,jm'\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(|jm\rangle_1|jm'\rangle_2-|jm\rangle_2|jm'\rangle_1) \tag{3}$$

按照角动量耦合理论，$|jj00\rangle$态在无耦合表象中的表示式(参看题6.15)为

$$|jj00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_m(-1)^{j-m}|jm\rangle_1|j,-m\rangle_2 \tag{4}$$

由于 j,m 均为半奇数，当 $m<0$，如令 $m=-m'$，就有

$$(-1)^{j-m}|jm\rangle_1|j,-m\rangle_2=(-1)^{j+m'}|j,-m'\rangle_1|jm'\rangle_2$$

$$=-(-1)^{j-m'}|j,-m'\rangle_1|jm'\rangle_2$$

因此式(4)又可写成

$$|jj00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}(|jm\rangle_1|j,-m\rangle_2$$

$$-|jm\rangle_2|j,-m\rangle_1) \tag{4'}$$

再利用式(3)，上式可以进一步写成

$$|jj00\rangle=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}a^{+}_{jm}a^{+}_{j-m}|0\rangle \tag{5}$$

其中

$$\Omega_j=j+\frac{1}{2}$$

为能级 ε_j 上 $m>0$ 的状态数，即能容纳的粒子对的数目.

$|jm\rangle=a^{+}_{jm}|0\rangle$态的时间反演态为

$$|j\bar{m}\rangle=(-1)^{j-m}|j,-m\rangle=(-1)^{j-m}a^{+}_{j,-m}|0\rangle \tag{6}$$

将这个态上的产生、消灭算符记为 $a^{+}_{j\bar{m}}$、$a_{j\bar{m}}$，则

$$a_{jm}^{+}=(-1)^{j-m}a_{j\ m}^{+},\ a_{jm}=(-1)^{j-m}a_{j\ m} \tag{7}$$

这样，式(5)可以写成

$$|jj00\rangle=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a_{jm}^{+}a_{j\bar{m}}^{+}|0\rangle=C_j^{+}|0\rangle \tag{8}$$

其中

$$\boxed{C_j^{+}=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a_{jm}^{+}a_{j\bar{m}}^{-}} \tag{9}$$

C_j^{+} 是能级 ε_j 上角动量耦合为 0 的 Fermi 子对的产生算符. 式(8)称为“配对态”.

9.9 同上题，引入能级 ε_j 上总粒子数算符

$$\begin{aligned}\hat{N}_j&=\sum_{m>0}(a_{jm}^{+}a_{jm}+a_{j-m}^{+}a_{j-m})\\&=\sum_{m>0}(a_{jm}^{+}a_{jm}+a_{j\bar{m}}^{+}a_{j\bar{m}})\end{aligned} \tag{1}$$

计算$[\hat{N}_j,C_j^{+}]$、$[C_j,C_j^{+}]$、$[C_j^{+}C_j,C_j^{-}]$，并将 C_j^{+}，C_j 与 Bose 子的产生、消灭算符作比较.

解 由上题，C_j^{+}、C_j 的定义为

$$C_j^{+}=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}a_{jm}^{+}a_{j-m}^{+}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a_{jm}^{+}a_{j\bar{m}}^{+} \tag{2a}$$

$$C_j=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}a_{j-m}a_{jm}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a_{j\bar{m}}a_{jm} \tag{2b}$$

利用 Fermi 子产生、消灭算符的基本对易式和恒等式

$$[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]$$

$$[AB,C]=A[B,C]_+-[A,C]_+B$$

不难算出以下结果：

$$[\hat{N}_j,C_j^+]=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}\sum_{m'>0}[a_{jm}^+a_{jm}+a_{j\bar{m}}^+a_{j\bar{m}},a_{jm'}^+a_{j\bar{m}'}^+]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}\{[a_{jm}^+a_{jm},a_{jm}^+]a_{j\bar{m}}^+ +a_{jm}^+[a_{j\bar{m}}^+a_{j\bar{m}},a_{j\bar{m}}^+]\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}2a_{jm}^-a_{j\bar{m}}^+=2C_j^+ \tag{3}$$

（注意，$m\neq m'$时，$a_{jm}^+a_{jm}$和$a_{j\bar{m}}^+a_{j\bar{m}}$均与$a_{jm'}^+a_{j\bar{m}'}^+$对易。）

$$[C_j,C_j^+]=\frac{1}{\Omega_j}\sum_{m>0}\sum_{m'>0}[a_{j\bar{m}}a_{jm},a_{jm'}^+a_{j\bar{m}'}^+]$$

$$=\frac{1}{\Omega_j}\sum_{m>0}\{a_{jm}^+[a_{j\bar{m}}a_{jm},a_{j\bar{m}}^+]+[a_{j\bar{m}}a_{jm},a_{jm}^+]a_{j\bar{m}}^+\}$$

$$=\frac{1}{\Omega_j}\sum_{m>0}\{-a_{jm}^+[a_{j\bar{m}},a_{j\bar{m}}^+]a_{jm}+a_{jm}[a_{jm},a_{jm}^+]a_{j\bar{m}}^+\}$$

$$=\frac{1}{\Omega_j}\sum_{m>0}\{-a_{jm}^+a_{jm}+a_{j\bar{m}}a_{j\bar{m}}^+\}$$

$$=\frac{1}{\Omega_j}\sum_{m>0}\{1-(a_{jm}^+a_{jm}+a_{j\bar{m}}^+a_{j\bar{m}})\}$$

$$=1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j \tag{4}$$

亦即

$$C_jC_j^+=C_j^+C_j+1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j \tag{4'}$$

利用式(3)、(4)，易得

$$[C_j^+ C_j, C_j^+]=C_j^+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right) \tag{5}$$

$$[C_j^+ C_j, (C_j^+)^2]=2(C_j^+)^2\left(1-\frac{1}{\Omega_j}-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right) \tag{6}$$

C_j^+、C_j 是能级 ε_j 上角动量耦合为 0 的一对 Fermi 子的产生、消灭算符. 能否将这对 Fermi 子看成一个 Bose 子呢？亦即 C_j^+、C_j 是否相当于 Bose 子的产生、消灭算符？式(4)表明，只有当 $N_j\ll\Omega_j$ 时(能级简并度很大，而粒子数又很小)才可以近似地这样看. 这种条件在实际的原子或原子核中是很难成立的，这反映出在原子结构和原子核结构中 Pauli 原理是十分重要的.

将式(4′)作用于真空态 $|0\rangle$，得到

$$\langle 0|C_jC_j^+|0\rangle=\langle 0|\left(C_j^+C_j+1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)|0\rangle$$

$$=\langle 0|0\rangle=1 \tag{7}$$

这表明 $C_j^+|0\rangle$ 是归一化的一对 Fermi 子的波函数.

利用式(3)，可得

$$\hat{N}_jC_j^+|0\rangle=(C_j^+\hat{N}_j+2C_j^+)|0\rangle=2C_j^+|0\rangle$$

$$\hat{N}_j(C_j^+)^2|0\rangle=(C_j^+\hat{N}_j+2C_j^+)C_j^+|0\rangle=4(C_j^+)^2|0\rangle$$

$$\vdots$$

$$\hat{N}_j(C_j^+)^k|0\rangle=(C_j^+\hat{N}_j+2C_j^+)(C_j^+)^{k-1}|0\rangle=2k(C_j^+)^k|0\rangle \tag{8}$$

以上结果表明，$(C_j^+)^k|0\rangle$ 是能级 ε_j 上 k 对 Fermi 子的波函数(未归一化). 式(8)限于 $k\leqslant\Omega_j$；如 $k>\Omega_j$，则 $(C_j^+)^k|0\rangle=0$，读者试自证明之.

这里特别讨论一下两对 Fermi 子的情形. 利用式(4′)和(8)，可得

$$\langle 0|(C_j)^2(C_j^+)^2|0\rangle=\langle 0|C_j\left(C_j^+C_j+1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)C_j^+|0\rangle$$

$$=1-\frac{2}{\Omega_j}+\langle 0|(C_jC_j^+)^2|0\rangle=2-\frac{2}{\Omega_j}$$

所以，归一化的两对 Fermi 子波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{2(1-1/\Omega_j)}}(C_j^+)^2|0\rangle \tag{9}$$

当 $j=5/2$，上式就是 $\frac{\sqrt{3}}{2}(C_j^+)^2|0\rangle$. 作为对照，归一化的两个 Bose 子的波函数为 $\frac{1}{\sqrt{2!}}(B^+)^2|0\rangle$. ($B^+$ 为 Bose 子产生算符.) 上述讨论在计算矩阵元时也很重要，它反映了 Pauli 原理的重要性.

9.10 同上题，设 ε_j 能级上有 k 对 Fermi 子 ($k\leqslant\Omega_j$)，证明归一化的波函数可以表示成

$$\left[k!\prod_{i=0}^{k-1}\left(1-\frac{i}{\Omega_j}\right)\right]^{-1/2}(C_j^+)^k|0\rangle$$

证 上题已经证明

$$\langle 0|C_jC_j^+|0\rangle=1 \tag{1}$$

现在需要证明

$$\langle 0|(C_j)^k(C_j^+)^k|0\rangle=k!\prod_{i=0}^{k-1}\left(1-\frac{i}{\Omega_j}\right) \tag{2}$$

利用上题证明的公式

$$C_jC_j^+=C_j^+C_j+1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j \tag{3}$$

可得

$$C_j(C_j^+)^k=C_j^+C_j(C_j^+)^{k-1}+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-1}$$

$$=(C_j^+)^2C_j(C_j^+)^{k-2}+C_j^+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-2}$$

$$+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-1}$$

$$=\cdots=(C_j^+)^k C_j+(C_j^+)^{k-1}\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)$$

$$+(C_j^+)^{k-2}\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)C_j^+$$

$$+\cdots+C_j^+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-2}$$

$$+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-1}$$

将上式作用于真空态$|0\rangle$，利用$C_j|0\rangle=0$及上题式(8)，第一项贡献为0，其它各项中$\hat{N}_j$分别变成本征值，

$$\hat{N}_j=0,2,4,\cdots,2(k-1)$$

因此得到

$$C_j(C_j^+)^k|0\rangle=\left[1+\left(1-\frac{2}{\Omega_j}\right)+\left(1-\frac{4}{\Omega_j}\right)\right.$$

$$\left.+\cdots+\left(1-\frac{2k-2}{\Omega_j}\right)\right](C_j^+)^{k-1}|0\rangle$$

$$=k\left(1-\frac{k-1}{\Omega_j}\right)(C_j^+)^{k-1}|0\rangle \tag{4}$$

由此立刻得到

$$\langle 0|(C_j)^k(C_j^+)^k|0\rangle$$

$$=k\left(1-\frac{k-1}{\Omega_j}\right)\langle 0|(C_j)^{k-1}(C_j^+)^{k-1}|0\rangle \tag{5}$$

利用此式依次递推，并在最后利用式(1)，即得式(2). 证毕.

作为对照，处于相同单粒子态的k个Bose子，其归一化波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{k!}}(B^+)^k|0\rangle$$

B^+为Bose子产生算符.

9.11 同题 9.8，令

$$s_{m+}=a^{+}_{jm}a^{-}_{j\bar{m}}=(-1)^{j-m}a^{+}_{jm}a^{+}_{j-m},\ (m>0,\text{下同})$$

$$s_{m-}=(s_{m+})^{+}=a_{j\bar{m}}a_{jm}=(-1)^{j-m}a_{j-m}a_{jm}$$

$$s_{m0}=\frac{1}{2}(a^{+}_{jm}a_{jm}+a^{+}_{j\bar{m}}a_{j\bar{m}}-1) \tag{1}$$

$$=\frac{1}{2}(a^{+}_{jm}a_{jm}+a^{+}_{j-m}a_{j-m}-1)$$

证明

$$[s_{m+},s_{m-}]=2s_{m0} \tag{2}$$

$$[s_{m0},s_{m+}]=s_{m+},\quad [s_{m0},s_{m-}]=-s_{m-} \tag{3}$$

并与角动量的对易式比较.

证 利用 Fermi 子产生、消灭算符的基本对易式

$$[a_\alpha,a^{+}_\beta]_+=\delta_{\alpha\beta},\qquad [a_\alpha,a_\beta]_+=[a^{+}_\alpha,a^{+}_\beta]_+=0$$

$$[a^{+}_\alpha a_\alpha,a^{+}_\beta]=a^{+}_\alpha\delta_{\alpha\beta}$$

及恒等式

$$[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]$$

$$[AB,C]=A[B,C]_+-[A,C]_+B$$

容易算出

$$[s_{m+},s_{m-}]=(-1)^{2j-2m}[a^{+}_{jm}a^{+}_{j-m},a_{j-m}a_{jm}]$$

$$=[a^{+}_{jm}a^{+}_{j-m},a_{j-m}]a_{jm}+a_{j-m}[a^{+}_{jm}a^{+}_{j-m},a_{jm}]$$

$$=a^{+}_{jm}[a^{+}_{j-m},a_{j-m}]_+a_{jm}-a_{j-m}[a^{+}_{jm},a_{jm}]_+a^{+}_{j-m}$$

$$=a^{+}_{jm}a_{jm}-a_{j-m}a^{+}_{j-m}$$

$$=a^{+}_{jm}a_{jm}+a^{+}_{j-m}a_{j-m}-1=2s_{m0}$$

此即式(2). 类似地可得

$$[s_{m0}, s_{m+}] = (-1)^{j-m}\frac{1}{2}[a^+_{jm}a_{jm} + a^-_{j-m}a_{j-m}, a^+_{jm}a^+_{j-m}]$$

$$= (-1)^{j-m}\frac{1}{2}\{[a^+_{jm}a_{jm}, a^+_{jm}]a^+_{j-m}$$

$$+ a^+_{jm}[a^-_{j-m}a_{j-m}, a^+_{j-m}]\}$$

$$= (-1)^{j-m}a^+_{jm}a^+_{j-m} = s_{m+}$$

此即式(3)中第一式. 再取共轭,即得第二式. 证毕.

式(2)和(3)完全类似于角动量的对易式

$$[J_+, J_-] = 2J_z,\ [J_z, J_\pm] = \pm J_+$$

所以(s_{m+}, s_{m-}, s_{m0})相当于(J_+, J_-, J_z),因此称为准自旋(quasi-spin)[1].

现在讨论s_{m0}的本征值. 由定义式(1)易知:如已有 Fermi 子对占据$|jm\rangle$、$|j\bar{m}\rangle$态,则$s_{m0} = 1/2$;如$|jm\rangle$、$|j\bar{m}\rangle$态中没有粒子,则

$$s_{m0} = -\frac{1}{2}$$

所以,当能级ϵ_j上粒子成对出现时,这种准自旋相当于自旋 1/2. 如仅$|jm\rangle$态中有一个粒子,$|j\bar{m}\rangle$态中没有粒子,则$s_{m0} = 0$,这种情况下的准自旋相当于自旋 0.

相应于不同 m 的准自旋算符显然是互相对易的. 如令

$$S_+ = \sum_{m>0} s_{m+},\ S_- = \sum_{m>0} s_{m-},\ S_0 = \sum_{m>0} s_{m0} \tag{4}$$

利用式(2)、(3)易证

$$[S_+, S_-] = 2S_0,\ [S_0, S_\pm] = \pm S_+ \tag{5}$$

如再令

---

[1] 参看 A. K. Kerman, Annals of Physics, **12**(1961), 300.

$$S_{\pm}=S_x\pm iS_y,\ S_0=S_z \tag{6}$$

即得

$$\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S}=i\boldsymbol{S} \tag{7}$$

即 $\boldsymbol{S}=(S_x,S_y,S_z)$也是准自旋.

9.12 同题 9.8,设能级 ϵ_j(为了方便,取 $\epsilon_j=0$)上有 N 个粒子,粒子间有"对力"(pairing force)作用,总 Hamilton 量为

$$H=-G\sum_{\substack{m>0\\ m'>0}}a_{jm}^{+}a_{j\bar{m}}^{+}a_{j\bar{m}'}a_{jm'},\ G>0 \tag{1}$$

其中 $a_{jm}^{\dagger}a_{j\bar{m}}^{\dagger}$是"对产生算符"(pair creation operator),$a_{j\bar{m}}a_{jm}$是"对消灭算符",$a_{j\bar{m}}^{+}|0\rangle$是 $a_{jm}^{\dagger}|0\rangle$的时间反演态.

试求这 N 个粒子体系的能谱.

解 利用能级 ϵ_j 上总粒子数算符

$$\hat{N}=\sum_m a_m^{\dagger}a_m=\sum_{m>0}(a_m^{+}a_m+a_{\bar{m}}^{+}a_{\bar{m}}) \tag{2}$$

和准自旋算符(见上题,以下略去量子数 j)

$$S_{+}=\sum_{m>0}s_{m+}=\sum_{m>0}a_m^{\dagger}a_{\bar{m}}^{+} \tag{3}$$

$$S_{-}=\sum_{m>0}s_{m-}=\sum_{m>0}a_{\bar{m}}a_m=(S_{+})^{\dagger}$$

$$S_0=\sum_{m>0}s_{m0}=\sum_{m>0}\frac{1}{2}(a_m^{+}a_m+a_m^{+}a_{\bar{m}}-1)$$

$$=\frac{1}{2}(\hat{N}-\Omega) \tag{4}$$

$$S_{\pm}=S_x\pm iS_y,\qquad S_0=S_z \tag{5}$$

Hamilton 量可以写成

$$H=-GS_{+}S_{-}=-G(\boldsymbol{S}^2-S_0^2+S_0) \tag{6}$$

粒子数 N 给定后，S^2，S_0 的本征值为

$$S^2=S(S+1),\ S_0=\frac{1}{2}(N-\Omega) \tag{7}$$

其中 $\Omega=j+1/2$.

根据 Pauli 原理，粒子数 N 不能超过 $2\Omega=2j+1$. 当 $N=2\Omega$，能级 ϵ_j 上各 $|jm\rangle$ 态均已填满粒子，各 s_{m0} 均等于 1/2，各准自旋互相平行，总 S、S_0 均取最大值

$$S_{max}=(S_0)_{max}=\Omega/2 \tag{8}$$

根据角动量理论，$S\geqslant|S_0|$，故 S 的取值范围是

$$\frac{\Omega}{2}\geqslant S\geqslant\frac{1}{2}(N-\Omega) \tag{9}$$

引入量子数 ν(seniority 数)以代替 S，即令

$$\nu=\Omega-2S,\qquad S=\frac{1}{2}(\Omega-\nu) \tag{10}$$

则利用式(6)和(7)，即可写出能谱公式：

$$E=-G\left[S(S+1)-\frac{1}{4}(N-\Omega)^2+\frac{1}{2}(N-\Omega)\right] \tag{11}$$

$$=-G\left[\frac{\Omega-\nu}{2}\left(\frac{\Omega-\nu}{2}+1\right)-\frac{\Omega-N}{2}\left(\frac{\Omega-N}{2}+1\right)\right]$$

$$=-\frac{G}{4}(N-\nu)(2\Omega+2-N-\nu)=E_\nu^{(N)} \tag{12}$$

当 N 为偶数，$\nu=0,2,4,\cdots,N$

当 N 为奇数，$\nu=1,3,5,\cdots,N$

N 为偶数时，基态和第一激发态能级为

$$E_0^{(N)}=-\frac{G}{4}N(2\Omega+2-N)$$

$$E_2^{(N)}=-\frac{G}{4}(N-2)(2\Omega-N)$$

间距为

$$\boxed{E_2^{(N)}-E_0^{(N)}=\Omega G} \tag{13}$$

这个能级间距与粒子数 N 无关，称为能隙(energy gap).

9.13 同上题，求 H 与 S_+的对易式，分别就 $N=2$、4 的情况求能级公式，再进而求出 N 为偶数时能级的一般公式.

解 利用题 9.11 得到的公式

$$[S_+,S_-]=2S_0$$

容易求出

$$\begin{aligned}[H,S_+]&=-G[S_+S_-,S_+]=GS_+[S_+,S_-]\\&=2GS_+S_0=-GS_+(\Omega-\hat{N})\end{aligned} \tag{1}$$

注意 S_+即题 9.8 中$\sqrt{\Omega_j}C_j^+$.

(a)粒子数 $N=2$.

将式(1)作用于真空态$|0\rangle$，由于 $H|0\rangle=0$，故得

$$HS_+|0\rangle=-GS_+(\Omega-\hat{N})|0\rangle=-\Omega GS_+|0\rangle \tag{2}$$

这表明 $S_+|0\rangle$是 H 的本征态，本征值为$(-\Omega G)$.

另一方面，由 H 的定义[见上题式(1)]可知，H 的对角矩阵元之和为

$$\mathrm{Tr}H=-\Omega G \tag{3}$$

($m=m'$项贡献 1，$m\neq m'$项贡献 0.)由于$(-H)$是正定的，H 的本征值只能取 0 和负数. TrH 应等于 H 的各本征值之和. 由此可知，除本征值$(-\Omega G)$以外，H 的其它本征值均为 0，相应的本征态记为 $B_i|0\rangle$，即

$$HB_i|0\rangle=0. \qquad i=1,2,\cdots,(\Omega-1) \tag{4}$$

这样，$N=2$ 时共有 2 个能级，$E=-\Omega G, 0$.

(b) 粒子数 $N=4$.

将式(1)作用于 $S_+|0\rangle$ 态，并利用式(2)，可得

$$\begin{aligned} H(S_+)^2|0\rangle &= S_+HS_+|0\rangle - GS_+(\Omega-\hat{N})S_+|0\rangle \\ &= -[\Omega G+(\Omega-2)G](S_-)^2|0\rangle \\ &= -(2\Omega-2)G(S_+)^2|0\rangle \end{aligned} \tag{5}$$

这表明 $(S_+)^2|0\rangle$ 是 H 的本征态，本征值为 $-(2\Omega-2)G$.

将式(1)作用于 $B_i|0\rangle$ 态，并利用式(4)，则得

$$\begin{aligned} HS_+B_i|0\rangle &= -GS_+(\Omega-\hat{N})B_i|0\rangle \\ &= -(\Omega-2)GS_+B_i|0\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

这表明 $S_+B_i|0\rangle$ 是 H 的本征态，本征值为 $-(\Omega-2)G$.

以上两条能级(注意第二条能级的简并度为 $\Omega-1$)对于 $\mathrm{Tr}H$ 的贡献为

$$\begin{aligned} &-(2\Omega-2)G-(\Omega-1)(\Omega-2)G \\ &=-\Omega(\Omega-1)G \end{aligned}$$

$N=4$ 时共有 $\Omega(\Omega-1)/2$ 种配对态，每种对于 $\mathrm{Tr}H$ 贡献 $(-2G)$，所以

$$\mathrm{Tr}H=-\Omega(\Omega-1)G$$

由此可见，除了以上两条能级外，还应有

$$\frac{1}{2}\Omega(\Omega-1)-\Omega=\frac{1}{2}\Omega(\Omega-3)$$

种配对态的能级为 0. 总之，$N=4$ 时共有 3 条能级，

$$E=-(2\Omega-2)G, \qquad -(\Omega-2)G, \qquad 0 \tag{7}$$

例如，$N=4, j=9/2, \Omega=5$，能级及其简并度如图 9.13 所示.

(c) 粒子数 $N=2k$.

依次类推，$N=2k$ 时，共有$(k+1)$条能级，记为 $E_\nu^{(N)}$，其中 $\nu=0,2,4,\cdots,N$，称为 seniority 数. 基态能级为 $E_0^{(N)}$，最高能级为 $E_N^{(N)}=0$. 以下求 $E_\nu^{(N)}$.

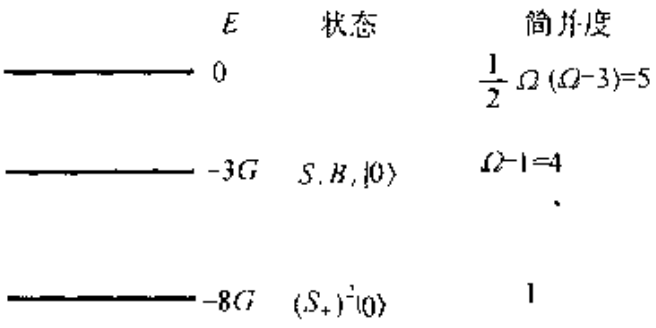


图 9.13

以 $|E_\nu^{(N-2)}\rangle$ 表示属于能级 $E_\nu^{(N-2)}$（粒子数 $N-2$）的任何一个能量本征态，将式(1)作用之，得到

$$\begin{aligned} ES_+|E_\nu^{(N-2)}\rangle &= \{S_+H-GS_+(\Omega-\hat{N})\}|E_\nu^{(N-2)}\rangle \\ &= \{E_\nu^{(N-2)}-(\Omega+2-N)G\}S_+|E_\nu^{(N-2)}\rangle \end{aligned} \tag{8}$$

这表明 $S_+|E_\nu^{(N-2)}\rangle$ 是 H 的本征态，本征值为

$$E_\nu^{(N)}=E_\nu^{(N-2)}-(\Omega+2-N)G \tag{9}$$

反复利用此式，并注意 $E_\nu^{(\nu)}=0$，即得

$$\begin{aligned} E_\nu^{(N)}=-G[&(\Omega+2-N)+(\Omega+4-N)+\cdots \\ &+(\Omega+N-\nu-N)] \end{aligned}$$

上式为等差级数，共$(N-\nu)/2$项，其和为

$$\boxed{E_\nu^{(N)}=-\frac{1}{4}G(N-\nu)(2\Omega+2-N-\nu)} \tag{10}$$

这和上题所得结果完全符合.

基态$(S_+)^{N/2}|0\rangle$，能级

$$E_0^{(N)}=-\frac{G}{4}N(2\Omega+2-N)$$

第一激发能级

$$E_2^{(N)}=-\frac{G}{4}(N-2)(2\Omega-N)$$

能隙

$$E_2^{(N)}-E_0^{(N)}=\Omega G$$

最高能级($\nu=N$ 或 $\nu=2\Omega+2-N$),$E=0$,对力无贡献.

第十章　相对论量子力学

10.1　试证明自由粒子(自旋为 0)的 Klein-Gordon 方程

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi=(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\psi \tag{1}$$

可以表示成类似于 Schrödinger 方程的形式：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi \tag{2}$$

其中

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\nabla^2+mc^2\tau_3 \tag{3}$$

Ψ 是重新定义的二分量波函数，$\tau_i(i=1,2,3)$是 Pauli 矩阵：

$$\tau_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\qquad \tau_2=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}$$

$$\tau_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

试找出 Ψ 和 ψ 的关系，并通过 Ψ 来表示连续性方程中的 ρ、j.

证　设 $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$，则式(2)化成

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-mc^2\right)\varphi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)\\ \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+mc^2\right)\chi&=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)\end{aligned} \tag{4}$$

而式(1)显然可以表示成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\pm mc^2\right)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mp mc^2\right)\psi=-\hbar^2c^2\nabla^2\psi \tag{5}$$

除以 $2mc^2$，即得

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-mc^2\right)\left(1+\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\\ \frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+mc^2\right)\left(1-\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi&=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\end{aligned} \tag{6}$$

如式(1)和(2)等价，则式(6)和(4)等价. 显然这是可能的，只要令

$$\begin{aligned}\varphi&=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi\\ \chi&=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi\end{aligned} \tag{7}$$

亦即令

$$\psi=\varphi+\chi,\qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=mc^2(\varphi-\chi) \tag{8}$$

式(6)就和式(4)等价.

由 Klein-Gordon 方程(1)导出的连续性方程为[1]

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0 \tag{9}$$

其中

$$\rho=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right) \tag{10}$$

$$\boldsymbol{j}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*) \tag{11}$$

---

[1] 参看曾谨言，《量子力学》卷Ⅰ(科学出版社，1997)， p343.

将式(8)代入式(10)、(11)，可得

$$\rho=\varphi^{*}\varphi-\chi^{*}\chi=\Psi^{*}\tau_{3}\Psi \tag{12}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\varphi^{*}\nabla\varphi+\chi^{*}\nabla\chi+\varphi^{*}\nabla\chi+\chi^{*}\nabla\varphi)+\text{c.c.}\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\Psi^{+}(1+\tau_{1})\nabla\Psi-(\nabla\Psi^{+})(1+\tau_{1})\Psi]\end{aligned} \tag{13}$$

式(12)和(13)就是用 Ψ 来表示的 ρ 和 $\boldsymbol{j}$ 的公式，如再乘以基本电荷 e，则 $e\rho$ 和 $e\boldsymbol{j}$ 可以解释为电荷密度和电流密度. 式(9)乘 e 后可以理解成电荷守恒定律的表现形式. 二分量波函数

$$\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$$

的意义则是：φ 表示粒子的正电荷态，χ 表示粒子的负电荷态.

如定义速度算符

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\quad\boldsymbol{r}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]\\&=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar m}(\tau_{3}+\mathrm{i}\tau_{2})[\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}^{2}]\\&=\frac{\hbar}{\mathrm{i}m}(\tau_{3}+\mathrm{i}\tau_{2})\nabla\end{aligned} \tag{14}$$

则电流密度可以表示成

$$\boldsymbol{j}_{e}=e\boldsymbol{j}=\frac{e}{2}\Psi\tau_{3}\boldsymbol{v}\Psi+\text{c.c.} \tag{15}$$

讨论 式(3)中 $(\tau_{3}+\mathrm{i}\tau_{2})^{+}=(\tau_{3}-\mathrm{i}\tau_{2})$，因此

$$H^{+}=-(\tau_{3}-\mathrm{i}\tau_{2})\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}+mc^{2}\tau_{3}\neq H$$

从表面上看，似乎未能保证 H 的 Hermite 性；与此相关，必然导致 $\int\Psi^{*}\Psi\mathrm{d}^{3}x$ 不守恒，因此似乎也不能保证电荷守恒. 其实不然. 首

先，既有连续性方程(9)，当然就能保证电荷守恒，只是其表现形式不是$\int \Psi^{+}\Psi \mathrm{d}^{3}x=1$，而是

$$\int \rho \mathrm{d}^{4}x=\int \Psi^{-}\tau_{3}\Psi \mathrm{d}^{3}x=1 \tag{16}$$

在一般的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$$

中，$H^{\dagger}=H$，两个波函数 ψ、ϕ 的“标积”定义为

$$(\psi,\phi)=\int \psi^{\dagger}\phi\, \mathrm{d}^{3}x$$

波函数的归一化条件为

$$\int \psi^{+}\phi \mathrm{d}^{3}x=(\psi,\psi)=1$$

它保证概率守恒和电荷守恒. 现在，如定义波函数 Ψ、Φ 的“标积”为

$$(\Psi,\Phi)\equiv\int \Psi^{\dagger}\tau_{3}\Phi \mathrm{d}^{3}x \tag{17}$$

则式(16)就是波函数的归一化条件，即

$$(\Psi,\Psi)=\int \Psi\tau_{3}\Psi=1 \tag{16'}$$

在一般的量子力学中，算符$\hat{O}$的 Hermite 性条件是

$$(\psi,\hat{O}\,\phi)=(\hat{O}\,\psi,\phi)$$

亦即

$$\int \psi^{+}\hat{O}\,\phi \mathrm{d}^{3}x=\int (\hat{O}\,\psi)^{\dagger}\phi \mathrm{d}^{3}x=\int \psi^{\dagger}\hat{O}^{\dagger}\phi \mathrm{d}^{3}x$$

亦即$\hat{O}=\hat{O}^{+}$. 现在，在标积新的定义下，算符的 Hermite 性条件仍可写成

$$(\Psi,\hat{O}\Phi)=(\hat{O}\Psi,\Phi) \tag{18}$$

亦即

$$\int \Psi^{+}\tau_3\hat{O}\Phi \mathrm{d}^3x=\int(\hat{O}\Psi)^{+}\tau_3\Phi \mathrm{d}^3x$$

$$=\int \Psi^{\dagger}\hat{O}^{\dagger}\tau_3\Phi \mathrm{d}^3x$$

亦即

$$\tau_3\hat{O}=\hat{O}^{+}\tau_3$$

亦即

$$\hat{O}^{+}=\tau_3\hat{O}\tau_3,\ \text{或}\ \hat{O}=\tau_3\hat{O}^{+}\tau_3 \tag{19}$$

此即算符的 Hermite 性条件. 由于

$$\tau_3(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)^{\dagger}\tau_3=\tau_3(\tau_3-\mathrm{i}\tau_2)\tau_3=\tau_3+\mathrm{i}\tau_2$$

容易验证,由式(3)定义的$\hat{H}$是满足 Hermite 性条件(19)的. 因此,可以保证$\hat{H}$的本征值为实数等性质.

10.2 将上题推广到带电粒子在电磁场中运动.

解 自旋为 0 电荷为 q 的粒子在电磁场中运动时,K-G 方程应推广成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\right)^2\psi=c^2\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi+m^2c^4\psi \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$是正则动量算符,$\phi$ 和 $\boldsymbol{A}$ 是电磁场的标势和矢势. 上式相当于自由粒子的 K-G 方程中作下列替换:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\to\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi$$

$$\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}$$

式(1)可以写成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\pm mc^2\right)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\mp mc^2\right)\psi$$

$$=c^2\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi$$

除以 $2mc^2$，成为

$$\frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\pm mc^2\right)\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{q\phi}{mc^2}\mp 1\right)\psi$$

$$=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi \tag{2}$$

如令

$$\begin{cases}\psi=\varphi+\chi\\ \left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-q\phi\right)\psi=mc^2(\varphi-\chi)\end{cases} \tag{3}$$

亦即

$$\begin{cases}\varphi=\dfrac{1}{2}\left(1+\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\dfrac{\partial}{\partial t}-\dfrac{q\phi}{mc^2}\right)\psi\\ \chi=\dfrac{1}{2}\left(1-\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\dfrac{\partial}{\partial t}+\dfrac{q\phi}{mc^2}\right)\psi\end{cases} \tag{4}$$

则式(2)可以写成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi-mc^2\right)\varphi=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi+\chi)$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi+mc^2\right)\chi=-\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi+\chi) \tag{5}$$

如定义二分量波函数

$$\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{6}$$

并引入 Pauli 矩阵 τ_1、τ_2、τ_3，方程(5)就可以表示成 Schrödinger 方程的形式：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi \tag{7}$$

其中

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\phi+mc^2\tau_3 \tag{8}$$

下面建立连续性方程. 以 $\Psi^+\tau_3$ 左乘式(7)，得到

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\Psi^+\tau_3\frac{\partial}{\partial t}\Psi=&\frac{1}{2m}\Psi^+(1+\tau_1)\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\Psi\\&+q\phi\Psi^+\tau_3\Psi+mc^2\Psi^+\Psi\\=&\frac{1}{2m}\Psi^+(1+\tau_1)\left\{-\hbar^2\nabla^2\Psi+\frac{q^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\Psi\right.\\&\left.+\mathrm{i}\hbar\frac{q}{c}[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi)+\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\Psi)]\right\}\\&+q\phi\Psi^+\tau_3\Psi+mc^2\Psi^+\Psi\end{aligned}$$

上式取共轭，成为

$$\begin{aligned}-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^+\right)\tau_3\Psi=&q\phi\Psi^+\tau_3\Psi+mc^2\Psi^+\Psi\\&+\frac{1}{2m}\left\{-\hbar^2(\nabla^2\Psi^+)+\frac{q^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\Psi^+\right.\\&\left.+\mathrm{i}\hbar\frac{q}{c}[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi^+)+\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\Psi^+)]\right\}(1+\tau_1)\Psi\end{aligned}$$

二式相减，得到

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\tau_3\Psi)\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}[\Psi^+(1+\tau_1)\nabla^2\Psi-(\nabla^2\Psi^+)(1+\tau_1)\Psi]\end{aligned}$$

$$+\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2mc}\{\Psi^{+}(1+\tau_1)[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi)+\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\Psi)]$$

$$+[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi^{+})+\nabla\cdot(\Psi^{+}\boldsymbol{A})](1+\tau_1)\Psi\}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot[\Psi^{+}(1+\tau_1)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^{+})(1+\tau_1)\Psi]$$

$$+\frac{\mathrm{i}\hbar q}{mc}\nabla\cdot[\Psi^{+}(1+\tau_1)\boldsymbol{A}\Psi]$$

上式即连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_e+\nabla\cdot\boldsymbol{j}_e=0 \tag{9}$$

其中

$$\rho_e=q\Psi^{+}\tau_3\Psi=q(\varphi^{*}\varphi-\chi^{*}\chi) \tag{10}$$

$$\boldsymbol{j}_e=-\mathrm{i}\hbar\frac{q}{2m}[\Psi^{+}(1+\tau_1)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^{+})(1+\tau_1)\Psi]$$

$$-\frac{q^2}{mc}\Psi^{+}(1+\tau_1)\boldsymbol{A}\Psi$$

$$=\frac{q}{2m}\Psi^{+}(1+\tau_1)\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi+\mathrm{c.c.} \tag{11}$$

ρ_e 可以解释成电荷密度，$\boldsymbol{j}_e$ 为电流密度. 如引入速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]$$

$$=\frac{1}{m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \tag{12}$$

$\boldsymbol{j}_e$ 可以表示成

$$\boldsymbol{j}_e=\frac{q}{2}\Psi^{+}\tau_3\boldsymbol{v}\Psi+\mathrm{c.c.}=q\mathrm{Re}(\Psi^{+}\tau_3\boldsymbol{v}\Psi) \tag{13}$$

二分量波函数 $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ 的意义已在上题说明，φ 表示粒子的正

电荷(q)态,χ 表示负电荷($-q$)态.

如果用方程(1)中的波函数 ψ 来表示,式(10)和(11)变成

$$\rho_c=\frac{q}{2mc^2}\psi^*\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\right)\psi+\text{c.c.} \tag{14}$$

$$\boldsymbol{j}_c=\frac{q}{2m}\psi^*\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi+\text{c.c.} \tag{15}$$

这两个公式也可以直接由方程(1)导出.

如写成协变形式,连续性方程(9)可以表示成

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}j_\mu=0 \tag{16}$$

式(14)、(15)可以合并表示成

$$j_\mu=\frac{q}{2m}\psi^*\left(p_\mu-\frac{q}{c}A_\mu\right)\psi+\text{c.c.} \tag{17}$$

其中

$$x_\mu=(\boldsymbol{x},\mathrm{i}ct),\qquad A_\mu=(\boldsymbol{A},\mathrm{i}\phi),\qquad j_\mu=(\boldsymbol{j}_c,\mathrm{i}c\rho_c)$$

$$\begin{aligned}p_\mu&=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu}=\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla,-\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)\\&=\left(\boldsymbol{p},\frac{\mathrm{i}}{c}E\right)\end{aligned} \tag{18}$$

10.3 π^- 介子在原子核(视为质量无限大的点电荷 Ze)的 Coulomb 场作用下运动,形成介原子. 在轨道半径远大于核半径的情形下,核力的影响可以忽略不计. 试求 π 介原子的能级公式.

解 π^- 介子所受 Coulomb 作用势为

$$V(r)=-Ze^2/r \tag{1}$$

π^- 介子自旋为 0,波函数应该满足 K-G 方程. 定态 K-G 方程为

$$(E-V)^2\psi=(c^2\boldsymbol{p}^2+m^2c^4)\psi=(m^2c^4-\hbar^2c^2\nabla^2)\psi \tag{2}$$

即

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{E}{mc^2}V-\frac{V^2}{2mc^2}\right)\psi$$

$$=\left(\frac{E^2}{2mc^2}-\frac{1}{2}mc^2\right)\psi \tag{2'}$$

其中 m 为 π^- 介子质量，E 为总能（包含静止质量所相应的 mc^2 在内）. 由于 $V(r)$ 为中心势，轨道角动量 l 守恒，取 ψ 为守恒量完全集 (E,l^2,l_z) 的共同本征态，则 ψ 可以表示成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3}$$

代入式(2')，得到径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-\frac{Z^2e^4}{2mc^2r^2}-\frac{E}{mc^2}\frac{Ze^2}{r}\right]u$$

$$=\left(\frac{E^2}{2mc^2}-\frac{1}{2}mc^2\right)u \tag{4}$$

上式和非相对论的类氢离子的径向方程结构相似，后者为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]u=Eu \tag{5}$$

式(4)和(5)中的参量有如下对应关系：

式(5)	式(4)
E	$\frac{E^2}{2mc^2}-\frac{1}{2}mc^2$
Ze^2	Ze^2E/mc^2
$l(l+1)$	$l(l+1)-Z^2\alpha^2\equiv l'(l'+1)$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c$ 为精细结构常数. l' 和 l 的关系也可以写成

$$\left(l'+\frac{1}{2}\right)^2=\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2$$

即

$$l'=\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2\right]^{1/2}-\frac{1}{2} \tag{6}$$

众所周知,由式(5)得到能量本征值为

$$E=E_n=-\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2},\quad n=n_r+l+1$$

其中 n_r 为径向量子数,n_r 和 l 互相独立.利用上述参数对应关系,易见式(4)中能级 E_{nl} 满足关系

$$\frac{1}{2mc^2}(E_{nl})^2-\frac{1}{2}mc^2=-\frac{m}{2\hbar^2(n')^2}\left(\frac{Ze^2E_{nl}}{mc^2}\right)^2 \tag{7}$$

其中

$$\boxed{n'=n_r+l'+1} \tag{8}$$

由式(7)容易解出

$$\boxed{\begin{aligned}E_{nl}&=mc^2\left[1+\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^2\right]^{-1/2}\\&=mc^2\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{\left(n_r+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2}\right)^2}\right]^{-1/2}\end{aligned}} \tag{9}$$

此即所求能级公式.

由于 $\alpha=e^2/\hbar c\approx 1/137$,如

$$Z\alpha\ll l+\frac{1}{2}$$

可将式(6)和(9)展开成 α 的幂级数,得到

$$l' \approx l - \frac{Z^2\alpha^2}{2l+1} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} n' &= n_r + l' + 1 \approx n_r + l + 1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2l+1} \\ &= n - \frac{Z^2\alpha^2}{2l+1} \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} E_{nl} &= mc^2\left[1+\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^2\right]^{-1/2} \\ &\approx mc^2\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^2+\frac{3}{8}\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^4\right] \\ &\approx mc^2\left[1-\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}-\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\right] \end{aligned} \tag{12}$$

其中

$$n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \cdots, \qquad n_r, l = 0, 1, 2, \cdots$$

式(12)中第一项为粒子的静能，第二项相当于非相对论类氢离子的能级 E_n，第三项为相对论效应，相当于能级的精细结构. 能级 E_{nl} 与磁量子数(l_z 的量子数)无关，故能级 E_{nl} 的简并度为 $(2l+1)$. 给定 n 后，l 的可能取值为

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

共 n 种取值，所以对应同一个 n 值的 E_{nl} 共包含 n 个能级，其高低次序和 l 的大小次序一致. 这组能级的总裂距为

$$\Delta E_n = E_{n,n-1} - E_{n0} \approx \frac{n-1}{\left(n-\frac{1}{2}\right)n^3} mc^2 Z^4 \alpha^4 \tag{13}$$

其值约为由 Dirac 方程求得的相应裂距的 2 倍(参看题 10.7).

10.4 对于自由电子，求 $(H, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p})$ 的共同本征函数.

解 自由电子的 Hamilton 算符为[①]

① 参看曾谨言，《量子力学》卷Ⅰ(科学出版社，1997)，§ 9.2.

$$H=c\alpha\cdot p+mc^2\beta=c\sigma\cdot p\begin{bmatrix}0 & I\\ I & 0\end{bmatrix}+mc^2\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{bmatrix} \tag{1}$$

其中 $p=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 为动量算符，I 为二阶单位矩阵，σ 为 Pauli 矩阵，

$$\sigma_x=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix},$$

$$\sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} \tag{2}$$

$\frac{\hbar}{2}\Sigma$ 为自旋角动量算符，Σ 的定义为

$$\Sigma=\sigma\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sigma & 0\\ 0 & \sigma\end{bmatrix} \tag{3}$$

因此

$$\Sigma\cdot p=\sigma\cdot p\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix} \tag{4}$$

由式(1)、(4)显然可见，$(H,p,\Sigma\cdot p)$互相对易，是守恒量完全集.

动量 p 的本征值写成

$$p=\hbar k=(\hbar k_1,\hbar k_2,\hbar k_3) \tag{5}$$

由于(参看上册题 6.19)

$$(\sigma\cdot p)^2=p^2$$

$$(\Sigma\cdot p)^2=(\sigma\cdot p)^2\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix}=p^2\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix}$$

所以 $\Sigma\cdot p$ 的本征值为

$$\Sigma\cdot p=\pm\hbar|k|=\pm\hbar k \tag{6}$$

$(H,p,\Sigma\cdot p)$的共同本征函数显然可以表示成

$$\psi=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix}e^{ik\cdot r}=\begin{bmatrix}\varphi\\\chi\end{bmatrix}e^{ik\cdot r} \tag{7}$$

其中

$$\varphi=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix},\quad \chi=\begin{pmatrix}u_3\\u_4\end{pmatrix} \tag{8}$$

式(7)已经满足动量本征方程

$$p\psi=\hbar k\psi$$

将式(7)再代入 $\Sigma\cdot p$ 的本征方程

$$\Sigma\cdot p\psi=\lambda\psi,\quad \lambda=\pm\hbar k \tag{9}$$

可得

$$\begin{cases}\hbar\sigma\cdot k\varphi=\lambda\varphi\\ \hbar\sigma\cdot k\chi=\lambda\chi\end{cases} \tag{10}$$

φ 和 χ 各自满足同样的方程，所以 φ 和 χ 只相差一个常系数. 先求 φ. 式(10)中，$\sigma\cdot k$ 是二阶矩阵，具体表达式为

$$\sigma\cdot k=\begin{pmatrix}k_3 & k_1-ik_2\\ k_1+ik_2 & -k_3\end{pmatrix} \tag{11}$$

因此式(10)的第一式即

$$\begin{bmatrix}k_3-\dfrac{\lambda}{\hbar} & k_1-ik_2\\ k_1+ik_2 & -k_3-\dfrac{\lambda}{\hbar}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}=0$$

其解为

$$\lambda=\hbar k,\qquad \frac{u_1}{u_2}=\frac{k+k_3}{k_1+\mathrm{i}k_2}=\frac{k_1-\mathrm{i}k_2}{k-k_3} \tag{12a}$$

$$\lambda=-\hbar k,\quad \frac{u_1}{u_2}=-\frac{k-k_3}{k_1+\mathrm{i}k_2}=-\frac{k_1-\mathrm{i}k_2}{k+k_3} \tag{12b}$$

再将式(7)代入能量本征方程 $H\psi=E\psi$,得到

$$\begin{cases}(E-mc^2)\varphi-c\hbar\sigma\cdot k\chi=0\\ -c\hbar\sigma\cdot k\varphi+(E+mc^2)\chi=0\end{cases} \tag{13}$$

上式存在非平庸解(φ,χ 不全为 0)的条件为

$$\begin{vmatrix}E-mc^2 & -c\hbar\sigma\cdot k\\ -\hbar c\,\sigma\cdot k & E+mc^2\end{vmatrix}=0 \tag{14}$$

即

$$E^2-m^2c^4-c^2\hbar^2k^2=0 \tag{14'}$$

因此,能量本征值为

$$E=\pm\sqrt{m^2c^4+c^2\hbar^2k^2}=E_\pm \tag{15}$$

其中 E_+相当于经典关系 $E=\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}$,而 $E_-=-E_+$.

当 $E=E_\pm$,式(13)给出 φ 与 χ 关系如下:

$$\boxed{\begin{aligned}&\chi=\frac{c\hbar}{E+mc^2}\sigma\cdot k\varphi\\ &\text{或}\quad \varphi=\frac{c\hbar}{E-mc^2}\sigma\cdot k\chi\end{aligned}} \tag{16}$$

对于 $E=E_+$和 $E=E_-$,上式中$\sigma\cdot k$ 均可取本征值$\pm k$.

给定动量本征值 $p=\hbar k$ 后,由式(12)和(15),(16)就可得出$(H,p,\Sigma\cdot p)$的共同本征函数,共 4 种,如下所示(均未归一化).

(a) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$，$E=E_+$，$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\hbar k$

$$\psi=\begin{pmatrix} k+k_3 \\ k_1+\mathrm{i}k_2 \\ c\,\hbar k(k+k_3)/(mc^2+E_+) \\ c\,\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix} k_1-\mathrm{i}k_2 \\ k-k_3 \\ c\,\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \\ c\,\hbar k(k-k_3)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

(b) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$，$E=E_+$，$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=-\hbar k$

$$\psi=\begin{pmatrix} -(k-k_3) \\ k_1+\mathrm{i}k_2 \\ c\,\hbar k(k-k_3)/(mc^2+E_+) \\ -c\,\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix} k_1-\mathrm{i}k_2 \\ -(k+k_3) \\ -c\,\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \\ c\,\hbar k(k+k_3)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

(c) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$，$E=E_-$，$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\hbar k$

$$\psi=\begin{pmatrix} -c\hbar k(k+k_3)/(mc^2+|E|) \\ -c\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|) \\ k+k_3 \\ k_1+\mathrm{i}k_2 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix} -c\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|) \\ -c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+|E|) \\ k_1-\mathrm{i}k_2 \\ k-k_3 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

(d) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$, $E=E_-$, $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=-\hbar\boldsymbol{k}$

$$\psi=\begin{pmatrix} -c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+|E|) \\ c\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|) \\ -(k-k_3) \\ k_1+\mathrm{i}k_2 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix} c\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|) \\ -c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+|E|) \\ k_1-\mathrm{i}k_2 \\ -(k-k_3) \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

注意，$E=E_+$时，ψ中前两个分量(φ)为大分量，后两个分量(χ)为小分量；其中大分量相当于非相对论情形下 $\boldsymbol{p}$ 和$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ 的共同本征函数.

$E=E_-$时，ψ中φ为小分量，χ为大分量.

如$\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$指向$(\theta,\varphi)$方向，则以上各式中

$$k\pm k_3=k(1\pm\cos\theta),\ k_1\pm ik_2=\sin\theta e^{\pm i\varphi} \tag{17}$$

特别是式(12)可以表示成

$$\sigma\cdot\boldsymbol{p}=\lambda=\hbar k,\ \frac{u_1}{u_2}=\frac{1+\cos\theta}{\sin\theta e^{i\varphi}}=\frac{\cos\dfrac{\theta}{2}}{\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}} \tag{18}$$

$$\sigma\cdot\boldsymbol{p}=\lambda=-\hbar k,\ \frac{u_1}{u_2}=-\frac{\sin e^{-i\varphi}}{1+\cos\theta}=-\frac{\sin\dfrac{\theta}{2}}{\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}}$$

请将这结果和上册题 6.12 参照比较.

10.5 证明在非相对论极限下，Dirac 方程的一级近似即为 Pauli 方程.

解 电子在电磁场中运动时，Dirac 方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi \tag{1}$$

其中

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)-e\phi+mc^2\beta \tag{2}$$

其中$\boldsymbol{A}$、ϕ为电磁场的矢势和标势.$\boldsymbol{\alpha}$、β为 4×4 矩阵：

$$\beta=\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix} \tag{3}$$

I为 2×2 单位矩阵，$\boldsymbol{\sigma}$为 2×2 Pauli 矩阵.

式(1)中，ψ为 4 分量波函数.令

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}e^{mc^2t/i\hbar} \tag{4}$$

φ和χ均为2分量波函数.上式中列入因子$e^{mc^2t/i\hbar}$,是为了从能量中去掉静止质量项mc^2.将式(4)代入式(1),得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi-e\phi\varphi \tag{5a}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi=c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi-e\phi\chi-2mc^2\chi \tag{5b}$$

由于能量中已经不包含静止质量项,在非相对论极限下,各算符代表的数量级为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sim E\sim mv^2$$

$$e\phi\sim E\sim mv^2$$

$$c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\sim cmv\sim mv^2\cdot\frac{c}{v}$$

由此可见,φ是波函数ψ的"大分量",χ为"小分量",其数量级比为

$$\chi/\varphi\sim v/c$$

作为一级近似,可略去式(5b)两项小项,而取

$$\boxed{\chi\approx\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi} \tag{6}$$

代入式(5a),即得

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2\varphi-e\phi\varphi} \tag{7}$$

利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b})=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+i\,\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})$$

可得

$$\left[\sigma\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2$$
$$+\mathrm{i}\sigma\cdot\left[\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]$$
$$=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{\mathrm{i}e}{c}\sigma\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p})$$
$$=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{e\hbar}{c}\sigma\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A})$$
$$=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{e\hbar}{c}\sigma\cdot\boldsymbol{B} \tag{8}$$

$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 为磁场，代入式(7)，即得

$$\boxed{\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=&\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\varphi\\&-e\phi\varphi+\frac{e\hbar}{2mc}(\sigma\cdot\boldsymbol{B})\varphi\end{aligned}} \tag{9}$$

此即 Pauli 方程. 上式中最后一项代表电子的内禀磁矩

$$\mu_s=-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s} \tag{10}$$

和外磁场的作用.

10.6 试从描述电子在电磁场中运动的 Dirac 方程出发，导出反映概率守恒的连续性方程，并求其在非相对论极限下的表现形式，和从 Pauli 方程得到的结果比较.

解 电子在电磁场中运动时，Dirac 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+mc^2\beta-e\phi\right]\psi \tag{1}$$

左乘 $\psi^{\dagger}$，并将算符 $\boldsymbol{p}$ 明显写出，得到

$$\mathrm{i}\hbar\psi^{+}\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\mathrm{i}\hbar c\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\cdot(\nabla\psi)$$

$$+\psi^{\dagger}(e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}+mc^{2}\beta-e\phi)\psi$$

取共轭，即得

$$-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial\psi^{+}}{\partial t}\right)\psi=\mathrm{i}\hbar c(\nabla\psi^{+})\cdot\boldsymbol{\alpha}\psi$$

$$+\psi^{\dagger}(e\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{\alpha}+mc^{2}\beta-e\phi)\psi$$

两式相减，即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^{+}\psi)=-\mathrm{i}\hbar c[\psi^{\dagger}\boldsymbol{\alpha}\cdot(\nabla\psi)+(\nabla\psi^{\dagger})\cdot\boldsymbol{\alpha}\psi]$$

$$=-\mathrm{i}\hbar c\ \nabla\cdot(\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi)$$

亦即

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0 \tag{2}$$

其中

$$\rho=\psi^{+}\psi,\qquad \boldsymbol{j}=c\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi \tag{3}$$

ρ 为概率密度，$\boldsymbol{j}$ 为概率流密度. 式(2)、(3)形式上和自由电子的公式相同.

令

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^{2}t/\hbar} \tag{4}$$

则

$$\rho=\varphi^{+}\varphi+\chi^{+}\chi \tag{5}$$

$$\boldsymbol{j}=c(\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\chi+\chi^{+}\boldsymbol{\sigma}\varphi) \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为2阶 Pauli 矩阵，φ 及 χ 均为2分量波函数，φ 是 ψ 的大分量，χ 是 ψ 的小分量. 在非相对论极限下(见题10.5)，

$$\chi\approx\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi \tag{7}$$

χ 的数量级为 φ 的 v/c 倍，因此，如略去 v^2/c^2 项，式(5)中可以略去 $\chi^+\chi$，而成为

$$\rho\approx\varphi^+\varphi \tag{8}$$

将式(7)代入式(6)，有

$$c\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\chi=\frac{1}{2m}\left[\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi+\frac{e}{c}\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\varphi\right]$$

$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)\varphi+\frac{e}{2mc}\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\varphi$$

由于 ∇ 和 $\boldsymbol{A}$ 均与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，根据上册题6.21，有下列公式：

$$\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}-\mathrm{i}\,\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)=\nabla-\mathrm{i}\,\boldsymbol{\sigma}\times\nabla$$

因此

$$c\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\,\chi=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\varphi^+(\nabla\varphi)-\frac{\hbar}{2m}\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\times(\nabla\varphi)$$

$$+\frac{e}{2mc}\varphi^+\boldsymbol{A}\varphi-\frac{\mathrm{i}e}{2mc}\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}\varphi \tag{9}$$

上式取共轭，即得

$$c\chi^+\boldsymbol{\sigma}\,\varphi=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\nabla\varphi^+)\varphi+\frac{\hbar}{2m}(\nabla\varphi^+)\times\boldsymbol{\sigma}\,\varphi$$

$$+\frac{e}{2mc}\varphi^+\boldsymbol{A}\varphi+\frac{\mathrm{i}e}{2mc}\varphi^+\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}\varphi \tag{9'}$$

将式(9)、(9')代入式(6)，并注意到

$$\boldsymbol{\sigma}\times(\nabla\varphi)=-\nabla\times(\boldsymbol{\sigma}\varphi)$$

即得

$$\boldsymbol{j}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[(\nabla\varphi^+)\varphi-\varphi^+(\nabla\varphi)]+\frac{e}{mc}\varphi^+\boldsymbol{A}\varphi$$

$$+\frac{\hbar}{2m}[(\nabla\varphi^+)\times(\sigma\varphi)+\varphi^+(\nabla\times\sigma\varphi)]$$

$$=\frac{1}{2m}\left[\varphi^+\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi+\text{c. c.}\right]$$

$$+\frac{\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^+\sigma\varphi)$$

$$=\text{Re}\left[\frac{1}{m}\varphi^+\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi\right]$$

$$+\frac{\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^+\sigma\varphi) \tag{10}$$

如再乘以$(-e)$(电子电荷),即得电流密度公式:

$$\boxed{\begin{aligned} j_e &= -\frac{e}{2m}\left[\varphi^+\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi+\text{c. c.}\right] \\ &\quad -\frac{e\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^+\sigma\varphi) \\ &=\text{Re}\left[-\frac{e}{m}\varphi^+\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi\right] \\ &\quad +c\,\nabla\times(\varphi^+\mu\varphi) \end{aligned}} \tag{11}$$

其中$\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)$是非相对论极限下的速度算符,而

$$\boxed{\mu=-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}} \tag{12}$$

是电子的内禀磁矩.式(11)中$\varphi^\dagger\mu\varphi$相当于经典电动力学中的磁化强度(磁矩密度),$c\,\nabla\times(\varphi^+\mu\varphi)$相当于磁化电流密度.

如所周知,如果从 Pauli 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\varphi$$

$$-e\phi\varphi+\frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\varphi$$

出发建立连续性方程,所得电流密度刚好等于式(11)中第一项.由

此可见，Dirac 方程所包含的物理内容比 Pauli 方程更丰富，更全面.

10.7 求定态 Dirac 方程在非相对论极限下的二级近似，确定电子在中心力场中运动时 Hamilton 算符的具体形式.

解 电子在中心力场中运动，可取矢势 $\boldsymbol{A}=0$，而

$$\phi=\phi(r), \qquad -e\phi(r)=V(r) \tag{1}$$

定态 Dirac 方程为

$$[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r)]\psi=E\psi \tag{2}$$

令

$$E=mc^2+E', \qquad \psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{3}$$

式(2)成为

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\chi=(E'-V)\varphi \tag{4a}$$

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi=(2mc^2+E'-V)\chi \tag{4b}$$

φ 为波函数的大分量，χ 为小分量. 将式(4b)写成

$$\chi=(2mc^2+E'-V)^{-1}c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi$$

代入式(4a)，得到

$$\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi=(E'-V)\varphi \tag{5}$$

至此是严格的. 作为非相对论极限下的一级近似，取

$$\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}\sim 1$$

再利用公式$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2=\boldsymbol{p}^2$，即得定态 Schrödinger 方程

$$\left(\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+V\right)\varphi\approx E'\varphi \tag{6}$$

作为二级近似，取

$$\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}\approx 1+\frac{V-E'}{2mc^2} \tag{7}$$

这时式(5)变成

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-E'\right)\varphi$$

$$+\frac{1}{4m^2c^2}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})-E'\boldsymbol{p}^2]\varphi=0 \tag{8}$$

其中

$$V\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{\sigma}\cdot(V\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})V+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla V) \tag{9}$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})&=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2V+\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla V)\\&=\boldsymbol{p}^2V+\mathrm{i}\hbar\{\boldsymbol{p}\cdot(\nabla V)+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot[\boldsymbol{p}\times(\nabla V)]\}\\&=\boldsymbol{p}^2V+\mathrm{i}\hbar\Big\{(\nabla V)\cdot\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar(\nabla^2V)\\&\quad+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left[\boldsymbol{p}\times\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\right]\Big\}\\&=\boldsymbol{p}^2V+\hbar^2\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}+\nabla^2V\right)+\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\,\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\end{aligned} \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 为轨道角动量算符. 将式(10)代入式(8)，得到

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-E'\right)\varphi+\frac{1}{4m^2c^2}\boldsymbol{p}^2(V-E')\varphi\\&\quad+\frac{1}{4m^2c^2}\left[\frac{1}{r}\,\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\hbar^2\nabla^2V\right.\\&\quad\left.+\hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right]\varphi=0\end{aligned} \tag{11}$$

和式(6)比较，上式中后两项是与 c 有关的修正项，代表自旋及相对论效应，对于第二项，可再用式(6)作近似，从而得到

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r)-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\nabla^2V+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]\varphi=E'\varphi \tag{12}$$

其中第三项为动能的相对论修正，第四项为自旋轨道耦合作用. 第五、六项没有经典解释.

上式虽然可以解出能级，但左端最后一项不是 Hermite 算符，所以上式还不能作为 Hamilton 算符的非相对论近似.

问题的关键首先在于：非相对论近似下的波函数 Ψ（两个分量）是否即是 Dirac 波函数 ψ 的“大分量”φ？作为波函数，应保证总概率守恒，即

$$\langle\Psi|\Psi\rangle=\langle\psi|\psi\rangle=\langle\varphi|\varphi\rangle+\langle\chi|\chi\rangle \tag{13}$$

准确到 v^2/c^2，可取

$$\begin{aligned}\langle\chi|\chi\rangle&\approx\left\langle\varphi\left|\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{2mc}\right)^2\right|\varphi\right\rangle\\&=\left\langle\varphi\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right|\varphi\right\rangle\\\langle\psi|\psi\rangle&\approx\left\langle\varphi\left|\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\right|\varphi\right\rangle\end{aligned} \tag{14}$$

由此可见，非相对论近似波函数 Ψ 和 Dirac 波函数的大分量 φ 是有区别的，关系为（作为一种可能的选择）

$$\Psi\approx\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi,\quad\varphi\approx\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\Psi \tag{15}$$

将式(15)代入式(12)，略去 $1/c^4$ 项，即得 Ψ 满足的方程：

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-\left(\frac{1}{8}+\frac{1}{16}\right)\frac{\boldsymbol{p}^4}{m^3c^2}+\frac{(E'-V)\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\right.$$

$$+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\nabla^2 V+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\Big]\Psi=E'\Psi \quad (16)$$

利用公式

$$\begin{aligned}[V,\boldsymbol{p}^2]&=[V,\boldsymbol{p}]\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot[V,\boldsymbol{p}]\\&=\mathrm{i}\hbar(\nabla V)\cdot\boldsymbol{p}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot(\nabla V)\\&=\hbar^2(\nabla^2 V)+2\hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\end{aligned} \quad (17)$$

并取

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2c^2}(E'-V)\Psi\approx\frac{\boldsymbol{p}^4}{2m^3c^2}\Psi$$

式(16)可以化成

$$\boxed{\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V\right]\Psi=E'\Psi} \quad (18)$$

这正是我们希望得到的非相对论极限下的定态波动方程,左端括弧中五项即是 Hamilton 算符的表达式,注意它是 Hermite 的. 后面三项是相对论修正和自旋效应,数量级相同,为前两项的 v^2/c^2 倍,这三项决定能级的精细结构[①].

如引入自旋角动量算符 $\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$,可将自旋轨道耦合能写成

$$\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}=\xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l} \quad (19)$$

如电子在原子核的 Coulomb 场中运动,$V=-Ze^2/r$,则

---

① 参看 А. А. Соколов 等,《量子力学原理及其应用》(上海科学技术出版社,1983),§19.

$$\zeta(r)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}=\frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \tag{20}$$

$$\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V=-\frac{\hbar^2Ze^2}{8m^2c^2}\nabla^2\frac{1}{r}=\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r}) \tag{21}$$

后一项称为"接触作用势".这是一种相对论量子效应,没有经典对应.注意,除 s 态($l=0$)外,"接触"势实际上不起作用.自旋轨道耦合能则与此相反,它对 s 态不起作用,仅对 $l\neq0$的态有意义.

10.8 同上题,用微扰论计算类氢离子能级的精细结构,并和由 Dirac 方程得到的能级公式作比较.

解 根据上题,Hamilton 算符可以写成

$$H=H_0+H' \tag{1}$$

其中

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r} \tag{2}$$

$$H'=-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})$$

$$=H_{mv}+H_{sl}+H_D \tag{3}$$

("接触"作用势也称 Darwin 项.)H'可以当作微扰.

以 $\boldsymbol{s}$、$\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{J}$ 表示电子的自旋、轨道、总角动量.如以(H_0,$\boldsymbol{l}^2$,$\boldsymbol{J}^2$,J_z)的共同本征态 Ψ_{nljm_j}作为微扰论的零级波函数,零级近似能量仅取决于主量子数 n,而与 l、j、m_j 无关.

$$E_n^{(0)}=-mc^2Z^2\alpha^2/2n^2,\ n=1,2,3,\cdots \tag{4}$$

其中

$$\alpha=e^2/\hbar c\approx1/137(\text{精细结构常数})$$

能级 $E_n^{(0)}$的简并度为$2n^2$.

由于 H' 和 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 对易，在同能级各简并态之间，H' 只有对角矩阵元才可能不等于0. 因此能级的一级微扰修正等于 H' 在 Ψ_{nljm_j} 态中的平均值. 下面分别计算 H' 中三项的平均值. Ψ_{nljm_j} 可以表示成

$$\Psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{5}$$

其中 ϕ_{ljm_j} 为 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态.

$\langle H_{mv}\rangle$ 的计算见上册题8.12，它仅和 n、l 有关，结果为

$$\langle H_{mv}\rangle_{nljm_j}=-mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{2n^4}\left\{\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right\} \tag{6}$$

自旋-轨道耦合能的计算见上册题5.8，结果为（$l\neq0$时）

$$\begin{aligned}\langle H_{sl}\rangle_{nljm_j}&=\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\,\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\langle r^{-3}\rangle\\&=mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{4n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\\&\quad\times\begin{cases}l, & j=l+\frac{1}{2}\\ -(l+1), & j=l-\frac{1}{2}\end{cases}\end{aligned} \tag{7}$$

“接触”势的平均值为

$$\begin{aligned}\langle H_D\rangle_{nljm_j}&=\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\langle nljm_j|\delta(\boldsymbol{r})|nljm_j\rangle\\&=\begin{cases}\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}|\psi_{n00}(0)|^2, & l=0\\ 0, & l\neq0\end{cases}\end{aligned} \tag{8}$$

再利用上册题5.7和5.8结果，可得

$$\langle H_D\rangle_{l=0}=\frac{Z^2e^4}{4mc^2}\langle r^{-2}\rangle=mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{2n^3} \tag{9}$$

注意，$l=0$时，$\langle H_{sl}\rangle=0$，式(7)仅当$l>0$才成立. 但如将式(7)形式地推广到$l=0$的情形$\left(\text{取 } j=l+\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\right)$，刚好就是式(9). 在这个意义上，可以将“接触”势形式地当作$l=0$时的自旋轨道耦合能. 总之，对于$l=0,1,2,\cdots$，均有以下结果：

$$\langle H_{sl}+H_D\rangle_{nljm_j}=mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{4n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)}\cdot\begin{cases}1/j, & j=l+\frac{1}{2}\\ -1/(j+1), & j=l-\frac{1}{2}\end{cases}\tag{10}$$

将式(6)中的l改用j来表示，式(6)可以改写成

$$\langle H_{mv}\rangle_{nljm_j}=mc^2Z^4\alpha^4\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{2n^3}\cdot\begin{cases}1/j, & j=l+\frac{1}{2}\\ 1/(j+1), & j=l-\frac{1}{2}\end{cases}\right]\tag{6'}$$

将式(10)、(6′)相加，即得

$$\begin{aligned}\langle H'\rangle_{nljm_j}&=mc^2Z^4\alpha^4\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{n^3(2j+1)}\right]\\&=-mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{2n^4}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\end{aligned}\tag{11}$$

此即能级的一级微扰修正. 和$E_n^{(0)}$相加，即得

$$\boxed{E_{nj}=E_n^{(0)}+\langle H'\rangle=-mc^2\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}\cdot\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right]}\tag{12}$$

能级的j简并已经消除，l和m_j简并依然存在. 给定n后，

$$j+\frac{1}{2}=1,2,\cdots,n$$

共 n 种取值，故 $E_n^{(0)}$ 分裂成 n 条能级，j 大者在上，j 小者在下. 这组能级的总裂距为

$$\Delta E_n=E_{n,n-\frac{1}{2}}-E_{n,\frac{1}{2}}=mc^2Z^4\alpha^4(n-1)/2n^4 \tag{13}$$

这已为实验证实.

由 Dirac 方程求得的能级精确解为($E>0$)[①]

$$E_{nj}=mc^2\left\{1+\frac{Z^2\alpha^2}{\left[n'+\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2}\right]^2}\right\}^{-1/2} \tag{14}$$

$$n=n'+j+\frac{1}{2}=1,2,3,\cdots,\ n'=0,1,2,\cdots$$

如将式(14)按 α 的幂次展开，并减去 mc^2，所得结果到 α^4 为止和式(12)完全一致.

10.9 对于自旋$\hbar/2$的三维各向同性谐振子，试计算能级的相对论-自旋修正.

解 谐振子的运动应满足 Dirac 方程，Hamilton 算符为

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r) \tag{1}$$

其中

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{2}$$

根据题10.7，在非相对论近似下，H 可以化成

$$H=H_0+H' \tag{3}$$

---

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 9.5.

其中

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{4}$$

$$H'=-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$$

$$+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V(r) \tag{5}$$

将式(2)代入式(5),即得

$$H'=-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar\omega^2}{4mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3\hbar^2\omega^2}{8mc^2}$$

$$=H_{mv}+H_{sl}+\frac{3\hbar^2\omega^2}{8mc^2} \tag{6}$$

其中第一项为动能的相对论修正,第二项为自旋-轨道耦合能,最后的常数项是对零点能的相对论修正. H' 可以视为微扰.

能级的零级近似为 H_0的本征值:

$$E_N^{(0)}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=0,1,2,\cdots \tag{7}$$

如取零级波函数为(H_0,l^2,J^2,J_z)的共同本征函数 ψ_{Nljm_j},则 H'已经"对角化",H'的平均值就是能级的一级微扰修正.

计算 H_{mv}的平均值时,可以利用能量本征方程

$$H_0\psi_N=E_N^{(0)}\psi_N$$

即

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\psi_N=[E_N^{(0)}-V(r)]\psi_N$$

因此

$$\langle H_{mv}\rangle=-\frac{1}{2mc^2}\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^4}{4m^2}\right\rangle$$

$$=-\frac{1}{2mc^2}\langle\psi_N|(E_N^{(0)}-V)^2|\psi_N\rangle$$

$$=-\frac{1}{2mc^2}[E_N^{(0)2}-2E_N^{(0)}\langle V\rangle+\langle V^2\rangle]$$

对于谐振子，$\langle V\rangle=\frac{1}{2}E_N^{(0)}$，因此

$$\langle H_{mv}\rangle=-\frac{1}{2mc^2}\langle V^2\rangle=-\frac{m\omega^4}{8c^2}\langle r^4\rangle$$

根据上册题5.11的计算，

$$\langle r^4\rangle=\frac{1}{8}[3(2N+3)^2-(2l+3)(2l-1)]\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

因此

$$\langle H_{mv}\rangle=-\frac{1}{64}[3(2N+3)^2-(2l+3)(2l-1)]\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2}\qquad(8)$$

上述 ψ_{Nljm_j} 也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征函数，本征值为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=\begin{cases} l\hbar, & j=l+\frac{1}{2} \\ -(l+1)\hbar, & j=l-\frac{1}{2},\ l\neq 0 \end{cases}$$

因此，自旋轨道耦合能为

$$\langle H_{sl}\rangle=\frac{\hbar^2\omega^2}{4mc^2}\times\begin{cases} l, & j=l+\frac{1}{2} \\ -(l+1), & j=l-\frac{1}{2},\ l\neq 0 \end{cases}\qquad(9)$$

式(8)加式(9)，再加$3\hbar^2\omega^2/8mc^2$，就是能级的相对论-自旋修正.

对于基态$\left(N=l=0, j=\frac{1}{2}\right)$，能级修正为$-\frac{3}{32}\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2}$.

10.10 对于满足 Dirac 方程的粒子，求总角动量 J^2、J_z 以及

$\hat{K}$、α_r 的共同本征函数.

解 以 $\boldsymbol{l}$ 表示轨道角动量算符，$\boldsymbol{\sigma}$ 表示2×2Pauli 矩阵. 在 Pauli-Dirac 表象中，各算符为

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix} \tag{1}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2&=\boldsymbol{l}^2+\frac{3}{4}\hbar^2+\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{l}\\ &=\boldsymbol{l}^2+\frac{3}{4}\hbar^2+\hbar\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2}$$

$$\hbar\hat{K}=\beta(\hbar+\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{l})=\begin{pmatrix}\hbar+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} & 0\\ 0 & -\hbar-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\end{pmatrix} \tag{3}$$

$$\alpha_r=\frac{1}{r}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r} & 0\end{pmatrix} \tag{4}$$

不难证明，$\boldsymbol{J}$、$\hat{K}$、α_r 互相对易. 因此 $\boldsymbol{J}^2$、J_z、$\hat{K}$、α_r 互相对易. 设它们的共同本征函数为

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{5}$$

$$\varphi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix},\ \chi=\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}$$

算符 $\boldsymbol{J}$、$\hat{K}$ 的宇称为偶，α_r 的宇称为奇，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$ 的宇称亦为奇. 由于

$$\alpha_r\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\frac{1}{r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix} \tag{6}$$

因此，φ 和 χ 的宇称应该相反. 显然，φ 和 χ 可由上册题6.33中的 $\phi^A_{jm_j}$ 和 $\phi^B_{jm_j}$ 构成，它们是

$$\phi^A_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1} & Y_{l_m}\\ \sqrt{l-m} & Y_{l_{m+1}}\end{pmatrix} \tag{7a}$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+3}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l-m+1} & Y_{l+1_m}\\ \sqrt{l+m+2} & Y_{l+1_{m+1}}\end{pmatrix} \tag{7b}$$

二者均为($\boldsymbol{J}^2, J_z$)的二分量本征函数，本征值为

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2=j(j+1)\hbar^2, \quad j=l+\frac{1}{2}\\ &J_z=m_j\hbar, \qquad\qquad m_j=m+\frac{1}{2}\end{aligned} \tag{8}$$

它们也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征函数，即

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi^A_{jm_j}=l\hbar\phi^A_{jm_j}=\left(j-\frac{1}{2}\right)\hbar\phi^A_{jm_j}\\ &\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi^B_{jm_j}=-(l+2)\hbar\phi^B_{jm_j}=-\left(j+\frac{3}{2}\right)\hbar\phi^B_{jm_j}\end{aligned} \tag{9}$$

因此，如取

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_1\,\phi^A_{jm_j}\\ C_2\,\phi^B_{jm_j}\end{pmatrix}$$

就有

$$\hat{K}\psi=\left(j+\frac{1}{2}\right)\psi$$

利用上册题6.33结果，还可得到

$$\alpha_r\psi=\sigma_r\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_2\sigma_r\phi^B_{jm_j}\\ C_1\sigma_r\phi^A_{jm_j}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-C_2\phi^A_{jm_j}\\ -C_1\phi^B_{jm_j}\end{pmatrix}$$

如取 $C_1=C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=-\psi$

如取 $C_1=-C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=\psi$

类似地，如取

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_1\phi^B_{jm_j}\\ C_2\phi^A_{jm_j}\end{pmatrix}$$

就有

$$\hat{K}\psi=-\left(j+\frac{1}{2}\right)\psi$$

当 $C_1=C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=-\psi$

当 $C_1=-C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=\psi$

总结一下，$(J^2,J_z,\hat{K},\alpha_r)$的共同本征函数有以下几种类型：

1. $\varphi=\phi^A_{jm_j}$，　$\chi=\phi^B_{jm_j}$　(10)

$\hat{K}=j+\frac{1}{2}$，$\alpha_r=-1$

2. $\varphi=\phi^A_{jm_j}$，　$\chi=-\phi^B_{jm_j}$　(11)

$\hat{K}=j+\frac{1}{2}$，$\alpha_r=1$

3. $\varphi=\phi^B_{jm_j}$，　$\chi=\phi^A_{jm_j}$　(12)

$\hat{K}=-\left(j+\frac{1}{2}\right)$，$\alpha_r=-1$

4. $\varphi=\phi^B_{jm_j}$，　$\chi=-\phi^A_{jm_j}$　(13)

$\hat{K}=-\left(j+\frac{1}{2}\right)$，$\alpha_r=1$

以上四种波函数，J^2本征值均为 $j(j+1)\hbar^2$，J_z 本征值均为 $m_j\hbar$. 如再考虑波函数的径向部分，φ 和 χ 还可以乘一个共同的径向波函数 $R(r)$.

如不管 α_r，则$(\boldsymbol{J}^2, J_z, \hat{K})$的共同本征函数只需分成两种类型：

$$\text{a}\quad \psi=\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j} f(r)\\ \phi^B_{jm_j} g(r)\end{pmatrix},\quad \hat{K}=j+\frac{1}{2} \tag{14}$$

$$\text{b}\quad \psi=\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j} f(r)\\ \phi^A_{jm_j} g(r)\end{pmatrix},\quad \hat{K}=-\left(j+\frac{1}{2}\right) \tag{15}$$

$f(r)$和 $g(r)$是任意径向函数，前者属于 φ，后者属于 χ.

10.11 电子在原子核(电荷 Ze)的 Coulomb 场中运动，求束缚态能级$(0<E<mc^2)$以及$(H, \hat{K}, \boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征函数.

解 Hamilton 算符为

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta-\frac{Ze^2}{r} \tag{1}$$

其中

$$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$$

$$\alpha=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix},\ \beta=\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix} \tag{2}$$

σ 和 I 为二阶 Pauli 矩阵和单位矩阵. 令

$$\alpha_r=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}/r=\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\begin{pmatrix}0 & I\\ I & 0\end{pmatrix}=\sigma_r\begin{pmatrix}0 & I\\ I & 0\end{pmatrix} \tag{3}$$

$$\hbar\hat{K}=\beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\hbar)=(\hbar+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix} \tag{4}$$

其中 $\boldsymbol{l}$ 为轨道角动量算符，$\hbar\boldsymbol{\Sigma}/2$为自旋角动量算符，即

$$\boldsymbol{\Sigma}=\sigma\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{pmatrix} \tag{5}$$

利用 α、β、$\boldsymbol{\Sigma}$ 的代数关系，可将式(1)化成[①]

$$H=ca_r\hat{p}_r+\mathrm{i}\hbar c\frac{1}{r}\alpha_r\hat{K}\beta+mc^2\beta-\frac{Ze^2}{r} \tag{6}$$

其中 $\hat{p}_r$ 为径向动量算符，

$$\hat{p}_r=\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar)=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{7}$$

如再定义总角动量算符

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}=\left(\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\sigma\right)\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{pmatrix} \tag{8}$$

可以证明 H、$\hat{K}$、$\boldsymbol{J}^2$、J_z 互相对易. 它们的本征值为

$$\boxed{\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2=j(j+1)\hbar^2,\ j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots\\ &J_z=m_j\hbar,\ m_j=j,j-1,\cdots,(-j)\\ &\hat{K}=K=\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)=\pm1,\pm2,\cdots\end{aligned}} \tag{9}$$

$H=E$，待定.

根据题10.10，$(H、\hat{K}、\boldsymbol{J}^2、J_z)$的共同本征函数可分两种类型：

(a) $K=j+\frac{1}{2}$

① 参看曾谨言，《量子力学》卷Ⅰ(科学出版社，1997)，§9.5.

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}g(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}\dfrac{F(r)}{r}\\ \mathrm{i}\phi^B_{jm_j}\dfrac{G(r)}{r}\end{pmatrix} \tag{10a}$$

(b) $K=-\left(j+\dfrac{1}{2}\right)$

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}g(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j}\dfrac{F(r)}{r}\\ \mathrm{i}\phi^A_{jm_j}\dfrac{G(r)}{r}\end{pmatrix} \tag{10b}$$

其中令

$$f(r)=\frac{F(r)}{r},\qquad g(r)=\mathrm{i}\frac{G(r)}{r} \tag{11}$$

是为了运算方便. $\phi^A_{jm_j}$和 $\phi^B_{jm_j}$是二分量的(J^2,J_z)的本征函数(θ,φ的函数,与 r 无关). 利用上册题6.33得到的结果

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j}=-\phi^B_{jm_j},\qquad \sigma_r\phi^B_{jm_j}=-\phi^A_{jm_j} \tag{12}$$

容易验证以下各式[以式(10a)中的波函数为例,式(10b)的结果类似.]

$$\alpha_r\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}F(r)\\ \mathrm{i}\phi^B_{jm_j}G(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\phi^A_{jm_j}G(r)\\ -\phi^B_{jm_j}F(r)\end{pmatrix}$$

$$\alpha_r\beta\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}F(r)\\ \mathrm{i}\phi^B_{jm_j}G(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{i}\phi^A_{jm_j}G(r)\\ -\phi^B_{jm_j}F(r)\end{pmatrix}$$

这些结果等价于不考虑波函数的(θ,φ)部分而令

$$\alpha_r \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -\mathrm{i}G(r) \\ \mathrm{i}F(r) \end{pmatrix}, \text{ 即 } \alpha_r \to \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

将式(10)代入能量本征方程

$$H\psi = E\psi$$

并利用公式

$$\hat{p}_r \frac{F(r)}{r} = -\mathrm{i}\hbar \frac{1}{r} \frac{dF}{dr}$$

即得 $F(r)$、$G(r)$的联立方程：

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r} - \dfrac{K}{r}F = \left(\dfrac{mc^2+E}{\hbar c} + \dfrac{\alpha Z}{r} \right) G & (13a) \\ \dfrac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} + \dfrac{K}{r}G = \left(\dfrac{mc^2-E}{\hbar c} - \dfrac{\alpha Z}{r} \right) F & (13b) \end{cases}$$

其中 $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$，为精细结构常数.

下面先研究在奇点 $r=0,\infty$附近 F 和 G 的行为.

$r\to\infty$，式(13)可近似取为

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r} \approx \frac{mc^2+E}{\hbar c}G, \quad \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} \approx \frac{mc^2-E}{\hbar c}F$$

因此，

$$\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}r^2} \approx \frac{m^2c^4-E^2}{\hbar^2c^2}F$$

$$\frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}r^2} \approx \frac{m^2c^4-E^2}{\hbar^2c^2}G$$

可见，物理上允许的 F、G 的渐近行为是

$$r\to\infty, \qquad F, G \sim \mathrm{e}^{-\sqrt{m^2c^4-E^2}r/\hbar c} \qquad (14)$$

$r\to 0$，由式(13)易见 F、G 应属同级大小，即

$$F\to C_1 r^s,\quad G\to C_2 r^s \tag{15}$$

代入式(13),得到

$$\begin{cases}(s-K)C_1-\alpha ZC_2=0\\ \alpha ZC_1+(s+K)C_2=0\end{cases} \tag{16}$$

C_1、C_2不能全为0,因此必须

$$\begin{vmatrix}s-K & -\alpha Z\\ \alpha Z & s+K\end{vmatrix}=0$$

由此解出

$$s=\pm\sqrt{K^2-\alpha^2Z^2}$$

为了保证电子在$r\sim 0$附近出现概率是有限的,当$r\to 0$,$(F^2+G^2)r$必须$\to 0$,即$s>-\frac{1}{2}$;为了保证势能$(-Ze^2/r)$平均值是有限值,当$r\to 0$,(F^2+G^2)必须$\to 0$,即$s>0$. 因此s应取正值:

$$\boxed{s=\sqrt{K^2-\alpha^2Z^2}=\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2Z^2}} \tag{17}$$

引入无量纲变量

$$\rho=2r\sqrt{m^2c^4-E^2}/\hbar c \tag{18}$$

根据以上分析,可令

$$\begin{aligned}F(r)&=\sqrt{mc^2+E}\,[u(\rho)+v(\rho)]\rho^s e^{-\rho/2}\\ G(r)&=\sqrt{mc^2-E}\,[u(\rho)-v(\rho)]\rho^s e^{-\rho/2}\end{aligned} \tag{19}$$

其中u、v均可表示成ρ的正幂级数. 引入这个变换后,可将式(13)变成合流超几何方程. 将式(18)、(19)代入式(13),并将二式合并,经过化简,得到

$$\rho v' + (s - \alpha Z\lambda E)v = (K + \alpha Z\lambda mc^2)u \tag{20a}$$

$$\rho u' + [(s + \alpha Z\lambda E) - \rho]u = (K - \alpha Z\lambda mc^2)v \tag{20b}$$

其中

$$\lambda = (m^2c^4 - E^2)^{1/2} \tag{21}$$

将式(20a)再微分一次，并利用式(20a)和(20b)消去 u，可得 v 的二阶微分方程. 如微分式(20b)并消去 v，可得 u 的方程. 结果是

$$\rho v'' + (2s + 1 - \rho)v' - (s - \alpha Z\lambda E)v = 0 \tag{22a}$$

$$\rho u'' + (2s + 1 - \rho)u' - (s + 1 - \alpha Z\lambda E)u = 0 \tag{22b}$$

这正是合流超几何方程，这种方程的标准形式是

$$\rho W'' + (c - \rho)W' - aW = 0 \tag{23}$$

当 c 不是负整数时，式(23)的两个独立解为

$$W_1 = F(a, c, \rho) \equiv 1 + \frac{a}{c}\rho + \frac{a(a+1)}{2!c(c+1)}\rho^2 + \frac{a(a+1)(a+2)}{3!c(c+1)(c+2)}\rho^3 + \cdots,$$

$$W_2 = \rho^{1-c}F(a - c + 1, 2 - c, \rho)$$

式(22a)相当于 $a = s - \alpha Z\lambda E$，$c = 2s + 1$，符合物理要求的解为 W_1，即

$$v = F(s - \alpha Z\lambda E, 2s + 1, \rho) \tag{24}$$

[式(22a)的另一解，即 W_2，当 $\rho \to 0$ 时 $W_2 \to \rho^{-2s}$，结果导致 $F, G \to \rho^{-s}$，相当于 s 取负值的解，应予舍弃.]

当合流超几何级数 $F(a, c, \rho)$ 为无穷级数时，其渐近行为和 e^{ρ} 相似，即 $v \sim e^{\rho}$，结果导致 $F, G \sim e^{\rho/2}$，为了避免 $\rho \to \infty$ 处 F, G 发散，由式(24)表示的 $v(\rho)$ 必须中断成 n' 次多项式，$n' = 0, 1, 2, \cdots$，其条件是

$$s-\alpha Z\lambda E=s-\frac{\alpha ZE}{\sqrt{m^2c^4-E^2}}=-n' \tag{25}$$

由此容易解出

$$E=mc^2\left[1+\frac{\alpha^2Z^2}{(s+n')^2}\right]^{-\frac{1}{2}}. \qquad n'=0,1,2,\cdots \tag{26}$$

式(24)可以重新表示成

$$v(\rho)=F(-n',2s+1,\rho) \tag{24'}$$

代入式(20a),并利用递推公式

$$\rho\frac{d}{d\rho}F(a,c,\rho)$$
$$=aF(a+1,c,\rho)-aF(a,c,\rho)$$

即得

$$\left[K+(s+n')\frac{mc^2}{E}\right]u=-n'F(1-n',2s+1,\rho) \tag{27}$$

只要左端的常数因子不为0,用它除上式,即得 $u(\rho)$,这和式(22b)所给结果一致. 注意 $n'=0$时 $u=0$,而 n'为正整数时,u 为$(n'-1)$次多项式.

讨论 1°能级 E 取决于量子数 j 和 n',后者即径向量子数,将式(17)代入式(26),即得

$$\boxed{E=mc^2\left\{1+\left[\frac{\alpha Z}{n'+\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2Z^2}}\right]^2\right\}^{-1/2}} \tag{28}$$

可以记为 $E_{n'j}$或 E_{nj},n 为"主量子数",即

$$\boxed{n=n'+|K|=n'+j+\frac{1}{2}} \tag{29}$$

当给定 n 后,j 和 n'的不同组合给出一组数值很接近的能级,它们

的差异是由于公式中 α^2Z^2 的存在而造成的，这就是能级的精细结构. n、n'、j 的取值为

$$\boxed{\begin{aligned} &n=1,2,3,\cdots \\ &n'=0,1,\cdots,n-1 \\ &j=n-\frac{1}{2},n-\frac{3}{2},\cdots,\frac{1}{2} \end{aligned}} \tag{30}$$

2°波函数取决于四个量子数：n'（或 n），j，m_j，K. 当 $n'\neq 0$，$u(\rho)$、$v(\rho)$可由式(24′)、(27)决定. 这时与每个 j 值相应，K 有两种值，即 $K=\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)$，$m_j$ 则有$(2j+1)$种取值. 因此能级 $E_{n_j}(n'\neq 0)$的简并度为$(4j+2)$.

当 $n'=0$，由式(25)、(26)易得

$$\alpha Z\lambda E=s,\qquad \alpha Z\lambda mc^2=|K|=j+\frac{1}{2}$$

如 K 取正值，即 $K=j+\frac{1}{2}$，只需取

$$v=1,u=0 \tag{31}$$

即可满足式(20)及(22). 但如 K 取负值，即

$$K=-\left(j+\frac{1}{2}\right)$$

这时，式(31)之选择已经不能符合式(20b). 但如 $u\neq 0$，它的函数形式只能由式(22b)决定，即

$$u\sim F(1,2s+1,\rho)$$

这是无穷级数，当 $\rho\to\infty$，$u\sim e^{\rho}$，不合物理要求.

由此可知，$n'=0$时，K 必须取正值，$K=j+\frac{1}{2}$，亦即 $j=n-\frac{1}{2}$（最大值）时，能级 E_{n_j}的简并度为$(2j+1)=2n$.

3°主量子数 n 对应的状态总数为

$$N_n=2n+\sum_{|K|=1}^{n-1}4|K|=2n^2 \tag{32}$$

这个结果和非相对论的 Schrödinger 理论(计及自旋自由度)给出的结果一致.

4°波函数 ψ 的4个分量中,前两个分量(即含有 F 的分量)为大分量,后两个分量(即含有 G 的分量)为小分量. 大分量相当于非相对论近似下的波函数,因此 $F(r)/r$ 相当于非相对论近似下的径向波函数. 大分量所含球谐函数(Y_{lm})的阶 l,常被用作谱项的标记. 由式(10)可知,对于

$$K=j+\frac{1}{2},\qquad l=j-\frac{1}{2}$$

对于

$$K=-\left(j+\frac{1}{2}\right),\qquad l=j+\frac{1}{2}$$

故正 K 值相当于非相对论近似下 $\boldsymbol{l},\boldsymbol{s}$"平行"的情况,负 K 值相当于 $\boldsymbol{l},\boldsymbol{s}$"反平行"的情况.

以 $n=3$ 为例,各量子数的组合及谱项表记如下:

n	n'	j	K	l	谱项
3	0	5/2	3	2	$3d_{5/2}$
3	1	3/2	−2	2	$3d_{3/2}$
3	1	3/2	2	1	$3p_{3/2}$
3	2	1/2	−1	1	$3p_{1/2}$
3	2	1/2	1	0	$3s_{1/2}$

基态:$n=1,n'=0,j=\frac{1}{2},K=1,l=0$,谱项 $1s_{1/2}$.

10.12 氢原子由能级 E_n 跃迁至 $E_{n'j}$($n'<n$),求自发跃迁速率公式及选择定则.(只考虑电偶极跃迁.)

解 在非相对论问题中，电子和光波的电偶极作用取为

$$H'=e\mathscr{E}(t)\cdot\boldsymbol{r} \tag{1}$$

由 $\psi_n\to\psi_{n'}$ 自发跃迁速率为[①]

$$A_{n\to n'}=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{n'n}|^2 \tag{2}$$

其中 $\omega=(E_n-E_{n'})/\hbar$.

按照相对论的 Dirac 方程，光波(频率 ω)对电子的作用势为

$$H'=e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}(t) \tag{3}$$

光波的电、磁场为

$$\mathscr{E}(t)=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=\frac{\mathrm{i}\omega}{c}\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$$

因此，式(3)可以写成

$$H'=\frac{ec}{\mathrm{i}\omega}\mathscr{E}(t)\cdot\boldsymbol{\alpha} \tag{3'}$$

和式(1)相比，相当于式(1)中作下列替换：

$$\boldsymbol{r}\to\frac{c}{\mathrm{i}\omega}\boldsymbol{\alpha}$$

因此，自发跃迁速率公式可在式(2)中作同样替换而得出，

$$A_{n\to n'}=\frac{4e^2\omega}{3\hbar c}|\boldsymbol{\alpha}_{n'n}|^2 \tag{4}$$

如再利用公式

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=c\boldsymbol{\alpha} \tag{5}$$

---

① 参看曾谨言.《量子力学》卷Ⅰ(科学出版社，1997)，§ 12.3.3.

则

$$c\alpha_{n'n}=\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)n'n=\mathrm{i}\omega_{n'n}\boldsymbol{r}_{n'n}=-\mathrm{i}\omega\boldsymbol{r}_{n'n} \tag{6}$$

因此式(2)和(4)等价.

如以$(H,\hat{K},\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征函数$\phi_{nKm_j}$作为束缚态波函数(见上题),利用式(2)或(4),以及上册题10.7结果,容易求得选择定则为

(a) K,K'同号

$$\Delta j=\pm1,\quad \Delta K=\pm1,\quad \Delta m_j=0,\pm1 \tag{7}$$

(b) K,K'异号

$$\Delta j=0,\quad \Delta|K|=0,\quad \Delta m_j=0,\pm1 \tag{8}$$

前者相应于上册题10.7中$\phi^A\to\phi^A$和$\phi^B\to\phi^B$型,后者相应于上册题10.7中$\phi^A\to\phi^B$和$\phi^B\to\phi^A$型.

10.13 碱金属原子的低激发能谱来自最外层价电子的激发.价电子所受到的电势可近似表示成

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}\left(1-\frac{b}{r/a}\right)$$

式中右边第一项为原子核的Coulomb引力势能,a为Bohr半径,$0<b\ll1$,b无量纲,第二项描述内层满壳电子的斥力.求解此$V(r)$势阱中电子的能级.

提示

(1) $V(r)$已不是纯Coulomb势,纯Coulomb势的动力学对称性已破缺,所以能级的l简并消失.可解出能级为

$$E_{nl}=-E_0/2[n+\sqrt{(l+1/2)^2+2b}-(l+1/2)]^2$$

($E_0=mc^2(Z\alpha^2)^2$),它既依赖于主量子数n,也依赖于角动量l.

(2) 与氢原子能级的Bohr公式比较,令

$$E_{nl}=-E_0/2n^{*2},$$

$$n^*=n+\sqrt{(l+1/2)^2+2b}-(l+1/2)$$

考虑到 $b/l^2\ll 1$，$n^*\approx n+\delta_l$，$\delta_l\approx b/(l+1/2)$，称为量子亏损(quantam defect)．此式表明，对于角动量较小的量子态($l=0,1$)，δ_l 较大，而对于 l 较大的态($l\geqslant 2$)，δ_l 就很小．在物理上可如下理解，对于 l 小的 s 轨道和 p 轨道，电子有很大的几率贯穿到内层电子的轨道内部区域，能级偏离纯 Coulomb 势的能级就很明显(δ_l 较大)．而对于 $l\geqslant 2$的轨道，电子贯穿到内层的几率小，能级偏离纯 Coulomb 势就很小，(δ_l 很小)．

10.14 设不考虑电子自旋，求解氢原子的 Klein-Gordon 方程，求出能级公式．

提示

(1) $V(r)=-Ze^2/r$，Klein-Gordon 方程表示为

$$(\hat{p}^2c^2+m^2c^4)\phi(r)=(E+Ze^2/r)^2\phi(r)$$

取 $\phi(r)$为能量和角动量($\hat{l}^2$，$\hat{l}_z$)的共同本征态，

$$\phi(r)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

则径向方程为

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left(\frac{B}{r}-\frac{C}{r^2}-|A|\right)R(r)=0$$

式中

$$|A|=|E^2-m^2c^4|/\hbar^2c^2,\qquad B=2EZe^2/\hbar^2c^2$$

$C=l(l+1)-(Z\alpha)^2$，$\alpha=e^2/\hbar c$(精细结构常数)$=1/137$.

(2) 考虑 $R(r)$在 $r\to 0$和 $r\to\infty$的渐近行为，令 $R(r)=r^\gamma e^{-r/\beta}G(r)$，$\beta=1/|A|$，$\gamma=\sqrt{(l+1/2)^2-Z^2\alpha^2}-1/2$．求出 $G(r)$满足的方程式．

(3) $G(r)$中断为一个多项式的条件为

$$\frac{B}{2\sqrt{|A|}}=(n_r+l+1)+r-l=n+r-l$$

n_r 和 $n=n_r+l+1$是通常的径向量子数和主量子数.

(4) 能级公式为

$$E_{nl}=mc^2\left\{1+\frac{(Z\alpha)^2}{[(n+\sqrt{(l+1/2)^2-(Z\alpha)^2}-(l+1/2)]}\right\}^{-1/2}$$

(5) 按$(Z\alpha)^2$展开,证明

$$E_{nl}=mc^2\left\{1-\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\left[1+\frac{(Z\alpha)^2}{n}\left(\frac{1}{l+1/2}-\frac{3}{4n}\right)+\cdots\right]\right\}$$