12-1

2023年11月26日 17:19

CH12 中心势场问题

(对 Shankar 的 CH12 有重新整理，小节编号和教材中编号不一致)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + V(r)$$，其中 $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$

此类 $V(x,y,z) = V(r)$ 的问题统称为中心力场问题或中心势场问题

§12.1 三维欧氏空间的旋转矩阵

回忆 homework 2.

$$R_1(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \quad R_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$R_3(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

为三维欧氏空间中绕 $x.y.z$ 轴旋转 θ 角的矩阵

我们进一步定义了"生成元"

$$\Omega_1 = i\frac{dR_1}{d\theta}\Big|_{\theta=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Omega_2 = i\frac{dR_2}{d\theta}\Big|_{\theta=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Omega_3 = i\frac{dR_3}{d\theta}\Big|_{\theta=0} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

其对易关系为 $[\Omega_1, \Omega_2] = i\Omega_3$，$[\Omega_1, \Omega_3] = -i\Omega_2$

$[\Omega_2, \Omega_3] = i\Omega_1$

$$\Rightarrow [\Omega_i, \Omega_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\Omega_k. \quad (i,j,k = 1,2,3)$$

12-2

2023年11月26日 17:35

$$\Omega^2 \equiv \Omega_1^2+\Omega_2^2+\Omega_3^2 = 2I$$

并且我们证明了 $R_i(\theta) = e^{i\theta\Omega_i}$ (Ex. 1.47)

对于中心势场问题，可以利用旋转对称性简化计算

12-3

2023年11月26日 17:38

§12.2 Hilbert空间中的角动量算符

经典物理中的角动量为矢量：$\vec{L} = \vec{x}\times\vec{p}$ $\Rightarrow L_i = \varepsilon_{ijk}x^j p^k$

$$L_1 = \varepsilon_{1jk}x^j p^k = x^2p^3 - x^3p^2$$
$$L_2 = \varepsilon_{2jk}x^j p^k = -x^1p^3 + x^3p^1$$
$$L_3 = \varepsilon_{3jk}x^j p^k = x^1p^2 - x^2p^1$$

也常写为
$$L_x = yp_z - zp_y$$
$$L_y = zp_x - xp_z$$
$$L_z = xp_y - yp_x$$

升级成算符，
$$\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_Y$$
$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z$$
$$\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_Y - \hat{Y}\hat{P}_x$$
没有算符顺序问题

Ex 12.1 证明 (1) $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$

(2) $\hat{L}_i$为厄米算符

- $\hat{L}^i$ $(i=1,2,3)$的对易关系和 $\hat{J}^i$ $(i=1,2,3)$相同

Ex 12.2 (1) 求 $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

(2) 证明 $[\hat{L}^2, \hat{L}^i] = 0$

12-4

2023年11月26日 19:59

- $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$，这点和 $[\hat{\Omega}^2, \hat{\Omega}_i]$ 也相同

前面证明了 $R_i(\theta) = e^{i\theta\Omega_i}$ 为绕 i 轴转 θ 角，
那么 $e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_i}$ 有什么物理意义

由于 $\hat{L}_i$ 为 $[x\cdot p]$ 量纲，所以分母有 $\hbar$

Ex 12.3 在坐标表象下求 $e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_i}|\psi\rangle$

- $e^{\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{L}_3}$ 在坐标空间中将 $\psi(\rho,\theta,z)$ 绕 z 轴旋转 $-\varphi$ 角

同理 $e^{\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{L}_1}$ 和 $e^{\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{L}_2}$ 为绕 x 轴和 y 轴的相应转动

- $e^{\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{L}_i}$ 也有转动的物理含义，不过是在函数空间中的转动

  $\hat{L}_i$ 即为函数空间中绕 i 轴的无穷小转动

  (回忆：三维欧氏空间中的转动)

- 由 $\hat{L}_i$ 的物理含义，若 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$，有

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$$

和 $[\hat{L}^2, \hat{H}] = [\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2, \hat{H}] = 0$

- 一般用 $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$ 标记共同的本征态.

Ex 12.4 数学上证明 $[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$

12-5

2023年11月27日 12:04

§12.3 $\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同本征态

$\hat{L}_i$和$\hat{S}_i$虽然具体形式不同，但都有相同的对易关系，在这一节中，我们仅从对易关系出发，看看能得到关于本征值和本征态的哪些信息

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$$

• 取$\hat{L}^2$和$\hat{L}_3$的共同本征态 $|\alpha, \beta\rangle$，有

$$\hat{L}^2|\alpha\beta\rangle = \alpha|\alpha\beta\rangle$$

$$\hat{L}_3|\alpha\beta\rangle = \beta|\alpha\beta\rangle$$

由于 $[\hat{L}_1, \hat{L}_3] = i\hbar\varepsilon_{132}\hat{L}_2 = -i\hbar\hat{L}_2$

$[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar\varepsilon_{231}\hat{L}_1 = i\hbar\hat{L}_1$

所以该本征态不可能是$\hat{L}_1$和$\hat{L}_2$的本征态.

Ex 12.5 def $\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2$

证明 $[\hat{L}_3, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$

回忆一维谐振子 $[\hat{a}, \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}] = \hat{a}$，$[\hat{a}^+, \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}] = -\hat{a}^+$
然后我们用梯算符得到了清晰的本征值和本征态结构

Ex 12.6 (1) 计算 $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$

(2) 计算 $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm]$

2023年11月27日 12:45

下面研究 $\hat{L}_\pm|\alpha\beta\rangle$ 是否是 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_3$ 的本征态.

Ex 12.7 计算 $\hat{L}^2\hat{L}_\pm|\alpha\beta\rangle$ 和 $\hat{L}_3\hat{L}_\pm|\alpha\beta\rangle$

- 可以证明 $|\alpha\beta\rangle$ 没有简并，所以

$$\hat{L}_\pm|\alpha\beta\rangle = C_\pm(\alpha,\beta)|\alpha,\beta\pm\hbar\rangle$$

可见 $\hat{L}_\pm$ 可以看成升降算符，将 $\hat{L}_3$ 的本征值改变 $\hbar$

- 和谐振子类似，升降不能无休止进行

$\forall\ |\alpha\beta\rangle \quad \langle\alpha\beta|\hat{L}^2-\hat{L}_3^2|\alpha\beta\rangle = (\alpha-\beta^2)|\alpha\beta\rangle$

另一方面 $\langle\alpha\beta|\hat{L}^2-\hat{L}_3^2|\alpha\beta\rangle = \langle\alpha\beta|\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2|\alpha\beta\rangle$

≥ 0

$\Rightarrow \quad \alpha > \beta^2$

$\Rightarrow$ 给定 α，$\hat{L}_+$ 和 $\hat{L}_-$ 都不能无休止地进行

Ex 12.8 给定 $\alpha>0$，有 β_{max} 和 β_{min}，满足

$$\hat{L}_+|\alpha,\beta_{max}\rangle = 0$$

$$\hat{L}_-|\alpha,\beta_{min}\rangle = 0$$

研究 $|\alpha\beta\rangle$ 的本征值和本征态.

总结，$\hat{L}^2$和$\hat{L}_3$的共同本征态$|\alpha\beta\rangle$：

$$\hat{L}^2|\alpha\beta\rangle=\alpha|\alpha\beta\rangle$$

$$\hat{L}_3|\alpha\beta\rangle=\beta|\alpha\beta\rangle$$

其中α只能取$\hbar^2\frac{k}{2}(\frac{k}{2}+1)$ $(k=0,1,2\dots)$

给定α后，β只能取 $\underbrace{-\frac{k\hbar}{2},(-\frac{k}{2}+1)\hbar\dots\frac{k\hbar}{2}}_{\text{共}(k+1)\text{个}}$

习惯上用 $|l=\frac{k}{2},m=\frac{\beta}{\hbar}\rangle$ 取代$|\alpha\beta\rangle$

$$\hat{L}^2|l,m\rangle=l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle$$

$$\hat{L}_z|l,m\rangle=m\hbar|l,m\rangle$$

$l=\frac{k}{2}$为整数或半整数，$m=-\frac{k}{2},-\frac{k}{2}+1\dots\frac{k}{2}$

即为 $m=-l,-l+1\dots l-1,l$，共$2l+1$个

由 $\hat{L}_\pm|\alpha\beta\rangle=C_\pm(\alpha,\beta)|\alpha,\beta\pm\hbar\rangle$ 可得

$$\hat{L}_\pm|l,m\rangle=C_\pm(l,m)|l,m\pm1\rangle$$

所以 $\hat{L}_\pm$只能联系相同l，但不同m的态

Ex 12.9 计算归一化因子 $C_\pm(l,m)$

12-8

2023年11月27日 19:55

总结：在这一节，我们仅利用 $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$，即得到了关于本征值和本征态大量的信息

$\hat{L}^2, \hat{L}_3$ 的共同本征态可写成 $|l,m\rangle$ 的形式

$$\hat{L}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle$$

$$\hat{L}_3|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle$$

其中 $l \geq 0$ 可取整数或半整数

$m = -l, -l+1 \ldots l-1, l$ 共 $2l+1$ 个取值

$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ 可作为升降算符连接相同 l 但不同 m 的态

$$\hat{L}_+|l,m\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,\hbar\,|l,m+1\rangle$$

$$\hat{L}_-|l,m\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,\hbar\,|l,m-1\rangle$$

$$\hat{L}_+|l,l\rangle = 0$$

$$\hat{L}_-|l,-l\rangle = 0$$

12-9

2023年11月27日 20:06

Ex 12.10 三维欧氏空间中的转动矩阵的"生成元" Ω_i 也满足

$$[\Omega_i, \Omega_j] = i\,\varepsilon_{ijk}\,\Omega_k$$

所以 $\Omega^2 = \Omega_1^2 + \Omega_2^2 + \Omega_3^2$ 和 Ω_3 的本征矢量也可写成 $|l,m\rangle$ 的形式

(1) 求 l 的取值.

(2) 求 $|l,-l\rangle \cdots |l,l\rangle$ 的列向量形式

(3) 定义 $\Omega_\pm = \Omega_1 \pm i\Omega_2$, 写出 $\Omega_\pm$ 的矩阵表示,

并用矩阵计算表明

$$\Omega_+ |l,l\rangle = 0$$

$$\Omega_- |l,-l\rangle = 0$$

$$\Omega_+ |l,m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\ |l,m+1\rangle$$

$$\Omega_- |l,m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\ |l,m-1\rangle$$

12-10

2023年11月27日 20:16

§12.4 角动量算符本征态波函数

在本节中，我们进一步利用角动量算符 $\hat{L}_i$ 的具体形式，

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$$

计算 $|l,m\rangle$ 在坐标空间中的波函数.

§12.4 角动量算符本征态波函数

在本节中，我们进一步利用角动量算符 $\hat{L}_i$ 的具体形式，

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k$$

计算 $|l,m\rangle$ 在坐标空间中的波函数.

思路：给定 l，先求 $|l,l\rangle$ 在坐标表象下的波函数，再用 L_- 求其他的 $|l,m\rangle$

Ex 12.11 求 $\hat{L}_3$, $\hat{L}_1$, $\hat{L}_2$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_\pm$ 在坐标表象下的表示（用球坐标）

Ex 12.12 利用 Ex 12.11 的结果，计算 $\langle xyz|ll\rangle$

Ex 12.13 利用 Ex 12.11 和 Ex 12.12 的结果，计算 $\langle xyz|l,l-1\rangle$

Ex 12.14 考虑 $l=2$ 的态，从 $Y_{22}(\theta,\varphi)$ 开始，用 $\hat{L}_-$ 得到所有 $|2,m\rangle$ 在坐标表象下的波函数，验证得到的结果即为球谐函数

讨论：

(1) 在上一节里，我们推导出 $|l,m\rangle$ 中的 l 可以取 $\frac{k}{2}$ $(k=0,1,2\ldots)$ 而 m 可以取 $-l, -l+1 \ldots l-1, l$

在本节推导中，我们得到 $\psi_{ll}(r,\theta,\varphi) \propto e^{il\varphi}$. 从物理图像上考虑，必须有 $\psi_{ll}(r,\theta,\varphi+2\pi) = \psi_{ll}(r,\theta,\varphi)$. 由此可得 l 必为整数，$m=-l\ldots l$ 也必为整数.

12-12

2023年12月2日 21:59

(2) 在 Ex. 12.12 和 Ex 12.13 的推导中，可知 $\psi_{lm}(r,\theta,\varphi)$ 可写成分离变量的形式 $R_l(r)\,g_{lm}(\theta)\,e^{im\varphi}$ 的形式，每个函数均为一维，因为一维问题没有简并，所以 $|l,m\rangle$ 没有简并

(3) 由 Ex 12.13 的推导，可知径向波函数 $R(r)$ 不依赖于 m 的取值，所以可记 $R_{lm}(r)=R_l(r)$

(4) 球谐函数的几何图像

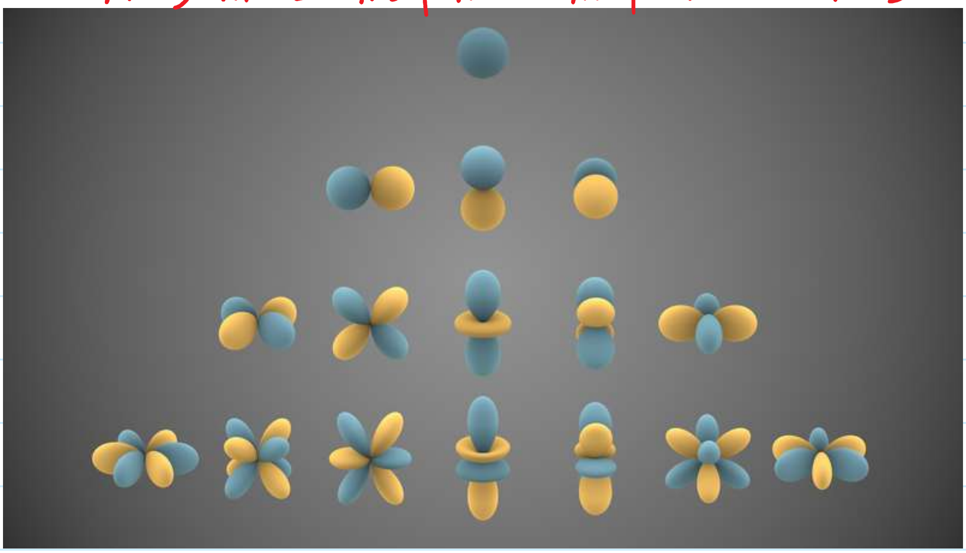
$m=-3$ $m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$ $m=3$

$l=0$

$l=1$

$l=2$

$l=3$



球谐函数

$m\geqslant 0$

$$Y_l^m(\theta,\phi)=(-1)^l\left[\frac{(2l+1)!}{4\pi}\right]^{1/2}\frac{1}{2^l l!}\left[\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}\right]^{1/2}e^{im\phi}(\sin\theta)^{-m}$$

$$\times\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(\sin\theta)^{2l}\qquad(12.5.35)$$

12-13

2023年12月3日 9:18

对于 $m<0$，有 $Y_{lm}(\theta,\varphi)=(-1)^m\left(Y_{l,-m}(\theta,\varphi)\right)^*$

正交关系为

$$\int d\Omega\, Y_{lm}(\theta,\varphi)\, Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)$$

$$=\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\ \sin\theta\, Y_{lm}(\theta,\varphi)\, Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi)$$

$$=1$$

由 $\psi_{lm}(r,\theta,\varphi)=R_l(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$，可得

$$R_l(r)=\int d\Omega\ \psi_{lm}(r,\theta,\varphi)\, Y^*_{lm}(\theta,\varphi)$$

(5) $|lm\rangle$ 在坐标表示下的波函数也可直接用

$$\hat{L}^2|lm\rangle=l(l+1)\hbar^2|lm\rangle$$

和 $\hat{L}_3|lm\rangle=m\hbar|lm\rangle$

以及 Ex 12.11 的结果得到，见如下练习

2023年12月3日 9:43

Ex 12.15 (1) 用 $\hat{L}_3|lm\rangle=m\hbar|lm\rangle$ 证明
$$\langle xyz|lm\rangle\propto e^{im\varphi}$$

(2) 设 $\langle xyz|lm\rangle=f_{lm}(r,\theta)e^{im\varphi}$，代入
$$\hat{L}^2|lm\rangle=l(l+1)\hbar^2|lm\rangle,$$
求关于 $f_{lm}(r,\theta)$ 的微分方程.

(3) 该微分方程与 r 无关，所以可以令 $f_{lm}(r,\theta)=R_{lm}(r)P_{lm}(\theta)$

求关于 $P_{lm}(\theta)$ 的微分方程

设 $u=\cos\theta$，将 $P_{lm}(\theta)$ 的微分方程中的 θ 换成 u

(4) 令 $P_{lm}(u)=\sum_{n=0}^{+\infty}C_n^{lm}u^n$

代入(3)中得到的微分方程，求 C_n^{lm} 的递推关系

(5) 证明 $\lim_{u\to1}\frac{C_{n+2}^{lm}}{C_n^{lm}}=1$，所以为了让 $P_{lm}(u)$ 有限，

$P_{lm}(u)=\sum_{n=0}^{+\infty}C_n^{lm}u^n$ 必须在某个 n 处截断.

求出最前面几项的表达式，验证其是否为连带勒让德函数.