教学研究

二维氢原子

北京大学　曾谨言　万唯实

摘要　二维氢原子具有 SO_3 动力学对称性．本文给出了能量本征值和本征态的简单而漂亮的代数解法．讨论了通常教科书中关于薛定谔方程边条件的不恰当的提法．

三维氢原子是大家都很熟悉的．一维氢原子也有人做过详细的分析[1]．本文将系统讨论二维氢原子问题．首先分析一下二维氢原子的动力学对称性及其代数解法．三维氢原子的代数解法早由 Pauli 给出[2]．本文还同时给出微分方程解法，并涉及一般教材中关于边条件问题的提法．

一、二维氢原子的 SO_3 动力学对称性及其代数解法

在质心系中，二维氢原子的哈密顿量表为

$$H=p^2/2\mu-k/\rho \tag{1}$$

其中 μ 为约化质量，$k=Ze^2$，$\rho=\sqrt{x^2+y^2}$，$\boldsymbol{p}=p_x\boldsymbol{i}+p_y\boldsymbol{j}$．与三维氢原子类似[3]，定义矢量算子（厄密）

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

其中 $\boldsymbol{e}_\rho=(x\boldsymbol{i}+y\boldsymbol{j})/\rho$ 是径向单位矢量，$\boldsymbol{l}=l_z\boldsymbol{k}=(xp_y-yp_x)\boldsymbol{k}$ 代表轨道角动量，垂直于 xy 平面．利用坐标与动量的对易关系，可以写出

$$\begin{aligned}a_x&=\frac{1}{\mu k}l_zp_y+\frac{i\hbar}{2\mu k}p_x-\frac{x}{\rho}\\a_y&=-\frac{1}{\mu k}l_zp_x+\frac{i\hbar}{2\mu k}p_y-\frac{y}{\rho}\end{aligned} \tag{3}$$

容易证明

$$[H,l_z]=0 \tag{4}$$

$$[H,\boldsymbol{a}]=0 \tag{5}$$

因此，除了轨道角动量 $\boldsymbol{l}=l_z\boldsymbol{k}$ 之外，$\boldsymbol{a}=a_x\boldsymbol{i}+a_y\boldsymbol{j}$ 也是体系的守恒量．显然

$$\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{a}=0 \tag{6}$$

即 $\boldsymbol{a}$ 处于 xy 平面内．在经典力学中，守恒量 $\boldsymbol{a}$ 的存在保证了粒子轨道为一条封闭曲线．$\boldsymbol{a}$ 的方向即椭圆轨道的长轴方向[3]．经过仔细计算，可以证明

$$\begin{aligned}&[l_z,a_x]=i\hbar a_y\\&[l_z,a_y]=-i\hbar a_x\\&[a_x,a_y]=\left(-\frac{2H}{\mu k^2}\right)i\hbar l_z\end{aligned} \tag{7}$$

可以看出，三个算子 a_x,a_y,l_z 彼此的对易式中出现了另外的算子 H，所以是不封闭的．但如局限于二维氢原子的具有一定能量本征值 E（$E<0$）的子空间来讨论问题，则它们构成封闭的李代数．此时，令

$$A_x=\sqrt{-\frac{\mu k^2}{2E}}\,a_x,\quad A_y=\sqrt{-\frac{\mu k^2}{2E}}\,a_y,\quad A_z=l_z \tag{8}$$

则

$$[A_\alpha,A_\beta]=i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,\ (\alpha,\beta,\gamma=x,y,z) \tag{9}$$

即与角动量的三个分量的对易式相同．所以二维氢原子具有 SO_3 动力学对称性．这与三维氢原子具有 SO_4 对称性相类似．

可以证明

$$a_x^2+a_y^2=\frac{2}{\mu k^2}(l_z^2+\hbar^2/4)H+1 \tag{10}$$

由(8)，(10)式可得

$$A^2=A_x^2+A_y^2+A_z^2=-\frac{\hbar^2}{4}-\frac{\mu k^2}{2E} \tag{11}$$

利用角动量代数的结果可知，算子 A^2 的本征值为 $L(L+1)\hbar^2$，$L=0,1,2,\cdots$．（注意，因 $A_z=l_z$ 为轨道角动量，L 只能取非负整数）这样，我们就求出了二维氢原子的束缚态能级公式

$$E=E_L=-\frac{\mu k^2}{2\hbar^2(L+1/2)^2}=-\frac{\mu Z^2e^4}{2\hbar^2n_2^2},$$

$$n_2=(L+1/2)=1/2,3/2,5/2,\cdots \tag{12}$$

与著名的三维氢原子能级的 Bohr 公式相比

$$E=E_n=-\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2},\ n=1,2,3,\cdots \tag{13}$$

不同仅在于正整数主量子数 n 换成半奇数量子数 .在大量子数极限 ($n>>1$,L 或 $n_2>>1$) 下,两公式趋于相同 .在经典力学中,无论是三维氢原子,还是二维氢原子,都是平面运动 .对于束缚态 ($E<0$),又都是椭圆轨道 .所以上述结果与对应原理不违背.

对于不熟悉李代数概念的读者,还可如下来推导二维氢原子的能级公式 (其实质与上面论证相同) .定义[4]

$$a_{\pm}=a_x\pm i a_y \tag{14}$$

容易证明

$$[l_z,a_{\pm}]=\pm\hbar a_{\pm} \tag{15}$$

$$a_-a_+=\frac{H}{2\mu k^2}(2l_z+\hbar)^2+1 \tag{16}$$

可见 $a_+(a_-)$ 相当于 l_z 本征值的升(降)算子 .设守恒量完全集 (H,l_z) 的共同本征态记为 $|Em>$,即

$$\begin{aligned} H|Em> &= E|Em> \\ l_z|Em> &= m\hbar|Em> \end{aligned} \tag{17}$$

利用 (5) ,(15) 式,易于得出

$$\begin{aligned} Ha_{\pm}|Em> &= Ea_{\pm}|Em> \\ l_z a_{\pm}|Em> &= (m\pm 1)\hbar a_{\pm}|Em> \end{aligned} \tag{18}$$

即 $a_{\pm}|Em>$ 仍为 (H,l_z) 的本征态,相应的能量本征值 E 不变,但 l_z 的本征值增、减 $\hbar$.当能量本征值 E 给定时,角动量不能无限大,(否则离心势趋于 ∞,与 E 有限是矛盾的) .设 l_z本征值上界为L (L 必为非负整数) ,则

$$a_+|EL>=0 \tag{19}$$

再利用 (16) 式可求出

$$\frac{E}{2\mu k^2}(2L+1)^2\hbar^2+1=0,\ L=0,1,2,\cdots \tag{20}$$

由此也得出能量本征值 (12) 式 .

由上述推导还可看出,对给定能级 E_L, l_z 可以取 $(2L+1)$ 个本征值,所以能级简单度为 $f_L=(2L+1)=1,3,5,\cdots(L=0,1,2,\cdots)$. 这些简并态可表为 (未归一化)

$$(a_-)^k|EL>,k=0,1,\cdots,2L \tag{21}$$

在空间反射 $P:(x\to -x,y\to -y)$ 下,

$$P\boldsymbol{a}P^{-1}=-\boldsymbol{a},\qquad Pl_zP^{-1}=l_z \tag{22}$$

即 $\mathbf{a}$ 为极矢量, l_z 为轴矢量 .由此可以理解,属于能级E_L的诸简并态中为什么有一部分是偶宇称态,另一部分则为奇宇称态[视($L-k$)的偶,奇而定] .

二 微分方程解法

二维氢原子的 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)-\frac{k}{\rho}\right]\psi=E\psi \tag{23}$$

取ψ 为(H,l_z)共同本征态,即令

$$\psi(\rho,\varphi)=e^{im\varphi}R(\rho),\ m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{24}$$

则径向方程表为(取自然单位 ,$\mu=\hbar=k=1$)[5]

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}+\left(2E+\frac{2}{\rho}\right)\right]R(\rho)=0,(E<0) \tag{25}$$

$\rho=0,\infty$ 为方程的两个奇点.不难看出 ,$\rho\to\infty$ 时 $R(\rho)$ 渐近解为 $e^{\pm\sqrt{-2E}\rho}$.考虑到无穷远处波函数的有界条件,只能取 $R(\rho)\sim e^{-\sqrt{-2E}\rho}$.令

$$R(\rho)=e^{-\sqrt{-2E}\rho}u(\rho) \tag{26}$$

则(25)式化为

$$u''+\left(\frac{1}{\rho}-2\sqrt{-2E}\right)u'+\left[\left(2-\sqrt{-2E}\right)\frac{1}{\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right]u=0 \tag{27}$$

用级数解法求解;在 $0<\rho<\infty$ 中做展开,

$$u(\rho)=\rho^s\sum_{k=0}^{\infty}a_k\rho^k,\ (a_0\neq 0) \tag{28}$$

代入 (27) 式,得

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{\left[(s+k)^2-m^2\right]\rho^{s+k-2}+\left[-2\sqrt{-2E}(s+k)+(2-\sqrt{2E})\right]\rho^{s+k-1}\right\}a_k=0 \tag{29}$$

比较最低幂次项,得

$$s^2-m^2=0 \quad (\text{指标方程})$$

解出两个根为

$$s=\pm|m| \tag{30}$$

对应于根 $s=+|m|$,由 (29) 式可求出

$$a_{k+1}=\frac{2-\sqrt{-2E}(2|m|+2k+1)}{(k+1)(2|m|+k+1)}a_k,k=0,1,2\cdots \tag{31}$$

为保证 $R(\rho)$ 在 $\rho\to\infty$ 时有界 ,$u(\rho)$ 必须截断为一多项式,即当 $k=n_r$ ($n_r=0,1,2,\cdots$)时,

$$2-\sqrt{-2E}(2|m|+2n_r+1)=0$$

由此得出

$$E=-\frac{1}{2(L+1/2)^2},L=n_r+|m|=0,1,2,\cdots \tag{32}$$

刚体绕不同轴的有限角位移的合成

同济大学　　陆培荣

摘要 本文从正交变换观点出发，采用简单的张量代数方法来研究角位移的合成问题，得到了一个计算合成角位移的简明公式．

一、引言

一般的理论力学教科书[1]－[8]，在刚体运动学有关刚体定点运动的章节中，往往只讨论刚体绕两个不同轴的角速度的合成，而不讨论刚体绕不同轴的两个有限角位移的合成．在参考文献［1］—［4］中都明确指出了角位移是有大小、有方向的一个量，但不是矢量．只有对无穷小角位移，在略去二阶微量时才是矢量，才可按平行四边形法则相加．在［2］［3］［6］中，还用球面三角方法证明了欧拉定理：绕定点运动的刚体从某一位置到另一位置的任何角位称可以通过绕过定点的某一轴转动一次来实现．然而，这些书中并未提到怎样计算两个已知角位移的合成角位移．文献［5］为了避开有限角位移的非矢量性质，特意直接从定轴转动角速度矢量出发来定义定点运动的角速度矢量．这样做法在数学上是完备的，但由于没有把定点

****

添上自然单位，即

$$E=E_L=-\frac{\mu k^2}{2\hbar^2(L+1/2)^2} \tag{32}$$

与代数解法结果［见(12)式］完全相同．

对于 $s=-|m|$ 根，可求出

$$a_{k+1}=\frac{2-\sqrt{-2E}(-2|m|+2k+1)}{(k+1)(-2|m|+k+1)}a_k \tag{33}$$

当 $k=2|m|-1$ 时，上式右边分母为 0．为使展开系数不为 ∞，必要求 $a_{2|m|-1}=0$，因而

$$a_0=a_1=\cdots=a_{2|m|-1}=0 \tag{34}$$

这与假设 $a_0\neq 0$ 矛盾．这说明方程的另一个线性无关解不能表成(28)式形式，而需另法求之*．按照微分方程理论，另一个线性无关解的形式可表为[6]

$$u_2(\rho)=g\,u_1(\rho)\ln\rho+\rho^{-|m|}\sum_{k=0}^{\infty}{}' a_k'\rho^k \tag{35}$$

式中 $u_1(\rho)$ 即 $s=|m|$ 根相应的解，g 为常数．(35)式解不满足束缚态平方可积条件，吴大猷先生首先指出[7]，应予以抛弃．通常教材中，认为 $s=-|m|$ 根所相应的解在 $\rho=0$ 点是奇异的，不满足波函数在物理上的要求，因而被排除．这种论证是不大清楚的．这里要注意两点：

(1)当指标方程的两根之差为整数时，相应的形式如(28)式的解可能是线性相关的（例如吴大猷先生分析过的氢原子[7]以及本文的二维氢原子），但也可能是线性独立的（例如三维各向同性谐振子，见[5]．

(2)关于什么样的解才是物理上可以接受的问题，通常教材中大多未做明确交待．就是说，根据波函数的统计诠释，对波函数应提出哪些要求？详细分析见[5]．

参考文献

[1] R.Loudon, *American Journal of Physics*, 27(1959), 649.
[2] W.Pauli, *Zeit, Physik* 36 (1926), 336.
[3] 例如，见曾谨言 《大学物理》1986 年第 4 期．
[4] J.H.Van Vleck, *Central Fields in Two vis－a－vis Three Dimensions, An Historical Divertissement*，载于 *Wave Mechanics, the first fifty years*.(W.C.Price 等主编，University of London King's College, 1973年．
[5] 曾谨言，钱伯初，《量子力学专题分析》，高教出版社，即将出版．
[6] 王竹溪，郭敦仁，《特殊函数概论》科学出版社，1979
[7] 吴大猷，《量子力学》(甲部)，科学出版社，1984．

* 如与吴大猷先生书中一样论证[7]，即认可(34)式成立，级数从 $a_{2|m|}$ 项开始不为 0，则在(33)式中，令 $k=2|m|+v$，$v=0,1,2,\cdots$，则

$$a_{2|m|+v+1}=\frac{2-\sqrt{-2E}\,(2|m|+2v+1)}{(v+1)(2|m|+v+1)}a_{2|m|+v},\quad v=0,1,2,\cdots$$

此式与(31)式实质上完全相同，而级数展开中不为0的首项 $\sim\rho^{-|m|+2|m|}=\rho^{|m|}$，因此得出的解与 $s=|m|$ 根相应的解 $u_1(\rho)$ 是同一个解．