

目录

第四章	几个简单而重要的系统	3
4.1	两自旋耦合系统	4
4.1.1	泡利算符回顾	5
4.1.2	求解与讨论	6
4.1.3	习题	10
4.2	反射与透射	10
4.2.1	势散射的简单例子	10
4.2.2	散射态与束缚态	15
4.2.3	习题	16
4.3	单自由度线性谐振子	16
4.3.1	单自由度线性谐振子的量纲分析	17
4.3.2	求解与讨论	18
4.3.3	位力定理	23
4.3.4	习题	24
4.4	氢原子	25
4.4.1	角动量算符	27
4.4.2	能级和径向波函数	30
4.4.3	球谐函数	35
4.4.4	理解元素周期表的神秘规律	39
4.4.5	习题	41
4.5	朗道能级	42
4.5.1	朗道能级	42
4.5.2	习题	45
4.6	量子霍尔效应	46
4.6.1	经典霍尔效应	46

4.6.2	整数量子霍尔效应	48
4.6.3	量子力学的分析	52
4.6.4	无序—最终的解释	56
4.6.5	分数量子霍尔效应	60

第四章 几个简单而重要的系统

陈童

本章主要讨论几个简单而又重要的量子力学系统。它们包括，两自旋耦合系统、一维势散射的一个简单例子、单自由度线性谐振子、氢原子、以及均匀磁场中的电子，最后这个系统也就是著名的朗道能级。这些系统都精确可解。我们介绍的求解方法是多样的：对于两自旋耦合系统我们介绍了矩阵对角化的求解方法；对于一维势散射和氢原子问题，我们介绍了解波动力学的定态薛定谔方程；对于单自由度线性谐振子，我们介绍了算符代数的方法；而对于均匀磁场中的电子，我们结合了代数法和求解波函数的方法。

当然，每一个例子的求解方法往往都不唯一，比如单自由度线性谐振子也可以通过定态薛定谔波动方程来求解，而氢原子问题也可以利用它隐藏的 $SO(4)$ 动力学对称性进而用算符代数的方法求解。在每一个例子中，我们都仅仅是介绍更简洁同时相对来说更重要的求解方法。

作为朗道能级的一个重要物理应用，在本章的最后一节我们讨论了在凝聚态物理领域极其重要的量子霍尔效应，主要是讨论了整数量子霍尔效应的物理机制。当然，量子霍尔效应本身是一个很大的课题，我们只可能作一个初步的介绍。

4.1 两自旋耦合系统

铁，钴，镍等物质在很小的外磁场影响下，就能产生远大于其他物质的磁化效应，这就是铁磁性。这些物质之所以有铁磁性，是因为在它们的每一个小区域之内都会自发磁化形成磁畴。而自发磁化的原因，是因为铁磁物质不同原子的磁矩产生了相互平行的指向，就像这样(↑↑↑↑↑↑↑↑↑↑↑↑)。这些原子的磁矩从哪儿来呢？来自于铁磁原子未配对的核外电子的自旋，已经配对的那些电子由于泡利不相容原理，它们的自旋一定是相反的，因而磁矩总是抵消为0。那么不同原子的这些未配对电子的自旋为什么会平行地指向呢？为什么只有铁磁性物质会这样平行指向呢？为了对这一问题进行理论研究，海森堡提出，这是因为铁磁性物质邻近原子的未配对电子存在自旋与自旋间的相互作用，为了反映这种自旋相互作用是如何导致自发磁化的，海森堡提出了一个简单的模型，这就是今天依然有大量研究者在研究的著名的海森堡模型，这个模型对于铁磁性的研究，甚至对于整个凝聚态物理来说都非常重要，因此我们想介绍一下。海森堡模型的哈密顿算符是下面这样的

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (4.1)$$

式中的 $\langle i, j \rangle$ 表示两个邻近格点位置 i 和 j ， \vec{S}_i, \vec{S}_j 分别表示格点位置 i, j 上的原子的自旋，式中的求和表示将每一对相互邻近的原子的贡献都加起来，另外， J 的大小表示两自旋之间的耦合强度，更常见的是将之写成 $-J$ ，不过后面我们对 J 取正和取负两种情况都会进行讨论。

对于一个任意的二维或三维格点，求解海森堡模型不是一件容易的事情，因此我们当然不可能在这里讨论这样的课题。以上所说主要是给我们提供一个物理背景，我们真正将要研究的，是只考虑两个原子，每个原子只有一个未配对电子，这两个电子的自旋之间按照海森堡模型的形式进行耦合。这时候，由于电子的自旋算符可以用泡利算符来进行表达，所以我们可以将相应的模型写成下面的形式，

$$H = J(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_1^z \sigma_2^z). \quad (4.2)$$

(4.2)才是我们这一节将要进行求解的问题。我们将会看到，即使这样简单的一个模型也能告诉我们，什么时候系统会出现铁磁性，也就是两电子的自旋相平行，什么时候系统又会出现反铁磁性，也就是两电子的自旋

反平行。不过，首先我们想说一下，什么是求解出这个系统？我们这里所谓的求解出哈密顿算符(4.2)，实际上指的是求解出它的本征值，也就是系统的本征能量 $\{E_n\}$ ，以及相应的本征态 $\{|\psi_n\rangle\}$

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (4.3)$$

正如我们已经知道的，由于在哈密顿算符的本征态 $|\psi_n\rangle$ 上，系统有确定的能量取值 E_n ，所以这样的本征态也叫做定态，相应的本征能量的集合也称作系统的能谱或者能级。

4.1.1 泡利算符回顾

为了求解出上面的两电子自旋耦合系统的能谱，这一小节让我们先回顾一下关于泡利算符的一些相关知识。首先，泡利算符具有下面的基本代数关系，

$$[\sigma^x, \sigma^y] = 2i\sigma^z, [\sigma^y, \sigma^z] = 2i\sigma^x, [\sigma^z, \sigma^x] = 2i\sigma^y. \quad (4.4)$$

并且三个泡利算符的平方均等于1，即 $(\sigma^x)^2 = (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = 1$ 。由这两组基本代数关系可以进一步导出三个泡利算符是两两反对易的。

在第二章中我们还曾经引入 $\sigma = \frac{1}{2}(\sigma^x - i\sigma^y)$, $\sigma^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma^x + i\sigma^y)$ ，并且我们也知道 $\sigma^2 = (\sigma^\dagger)^2 = 0$ 。另外，利用对易子代数关系(4.4)，我们可以得到

$$[\sigma^z, \sigma] = -2\sigma, \quad [\sigma^z, \sigma^\dagger] = 2\sigma^\dagger, \quad [\sigma^\dagger, \sigma] = \sigma^z. \quad (4.5)$$

设 $|s\rangle$ 为 σ^z 的本征值为 s 的本征态，满足本征方程 $\sigma^z|s\rangle = s|s\rangle$ 。由 $[\sigma^z, \sigma^\dagger] = 2\sigma^\dagger$ 可以知道 $\sigma^z\sigma^\dagger = \sigma^\dagger(\sigma^z + 2)$ ，因此 $\sigma^z(\sigma^\dagger|s\rangle) = \sigma^\dagger(\sigma^z + 2)|s\rangle = (s + 2)(\sigma^\dagger|s\rangle)$ ，也就是说， $\sigma^\dagger|s\rangle$ 如果非0，则必为 σ^z 的本征值为 $s + 2$ 的本征态，即必有

$$\sigma^\dagger|s\rangle = a_s|s + 2\rangle, \quad (4.6)$$

其中 a_s 为一个待定复数。类似的，由 $[\sigma^z, \sigma] = -2\sigma$ 可以知道，必有

$$\sigma|s\rangle = b_s|s - 2\rangle, \quad (4.7)$$

其中 b_s 为待定复数。正因为如此， σ 通常被称作自旋降算符，因为它作用在 σ^z 的本征态上时，会把本征值 s 降2，变成 $s - 2$ ，相反 σ^\dagger 称为自旋升算符，因为它作用在 σ^z 的本征态上时，会把本征值升2。

由于 $(\sigma^z)^2 = 1$, 所以其本征值必为 ± 1 , 即 $s = \pm 1$ 。设相应的本征态分别为 $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$, 其中 $|\downarrow\rangle$ 的本征值为 -1 , $|\uparrow\rangle$ 的本征值为 $+1$, 并且我们假定它们都已经归一化了, 因而是正交归一的。由于 $|\downarrow\rangle$ 具有最低的本征值 -1 , 所以它不能再降了, 再降就必定为 0 , 因此我们必有

$$\sigma|\downarrow\rangle = 0. \quad (4.8)$$

类似的, $|\uparrow\rangle$ 具有最高的本征值 $+1$, 所以它不能再升了, 再升必定等于 0 , 即有

$$\sigma^\dagger|\uparrow\rangle = 0. \quad (4.9)$$

另外, 我们已经知道 $\sigma^\dagger|\downarrow\rangle = a_{-1}|\uparrow\rangle$, $\sigma|\uparrow\rangle = b_{+1}|\downarrow\rangle$ 。为了求出 a_{-1} 和 b_{+1} , 我们将这两个结果厄米共轭就得到 $\langle\downarrow|\sigma = \langle\uparrow|a_{-1}^*$, $\langle\uparrow|\sigma^\dagger = \langle\downarrow|b_{+1}^*$ 。利用 $|a_{-1}|^2\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\sigma\sigma^\dagger|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|[\sigma, \sigma^\dagger]|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|-\sigma^z|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1$ (其中第二个等号利用了 $\sigma|\downarrow\rangle = 0$), 因此就有 $|a_{-1}|^2 = 1$, 类似的我们也可以得到 $|b_{+1}|^2 = 1$ 。由于现在我们有二个本征态 $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$, 同时有二个不为零的复系数 a_{-1}, b_{+1} , 因此我们总是可以通过分别将这两个本征态乘上合适的复相位, 从而使得 a_{-1}, b_{+1} 都成为正实数。如此一来 $|a_{-1}|^2 = 1$ 和 $|b_{+1}|^2 = 1$, 就意味着 $a_{-1} = b_{+1} = 1$, 从而我们就得到

$$\sigma^\dagger|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \sigma|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle. \quad (4.10)$$

公式(4.8)、(4.9)以及公式(4.10), 再加上下面的二个本征方程, 就是我们后面会用到的一些基本结论,

$$\sigma^z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \sigma^z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle. \quad (4.11)$$

4.1.2 求解与讨论

下面我们就可以开始求解(4.2)给出来的两自旋耦合系统了。首先, 二个不同电子的自旋当然是相互独立的, 因此任何二个属于不同电子的泡利算符都必定相互对易。其次, 类似于上一小节的做法, 我们分别引入二个不同电子的自旋降算符和自旋升算符, $\sigma_1 = \frac{1}{2}(\sigma_1^x - i\sigma_1^y)$, $\sigma_2 = \frac{1}{2}(\sigma_2^x - i\sigma_2^y)$, $\sigma_1^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma_1^x + i\sigma_1^y)$, $\sigma_2^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma_2^x + i\sigma_2^y)$ 。则很容易验证, 原来的哈密顿量(4.2)可以重写成

$$H = 2J(\sigma_1\sigma_2^\dagger + \sigma_1^\dagger\sigma_2) + J(\sigma_1^z\sigma_2^z). \quad (4.12)$$

现在, 我们给系统选定四个正交归一基矢量 $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ (请注意这四个基矢量的排列顺序, 后面的处理要与这个顺序一致), 以基矢量 $|\downarrow\uparrow\rangle$ 为例, 它两个标记符号的前一个 \downarrow 表示第1个电子的自旋状态, 后一个符号 \uparrow 表示第2个电子的自旋状态, 其余三个基矢量也是用类似办法进行标记的。

为了求解我们的系统, 我们需要将哈密顿算符在这四个基矢量构成的矢量基中表示出来。为了做到这一点, 让我们首先注意一个简单的数学事实, 即, 如果有归一化的量子态 $|u\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle$, 并且 $|v_1\rangle$ 和 $|v_2\rangle$ 正交, 若某算符 A 将 $|u\rangle$ 映射到 $|v_1\rangle$ 和 $|v_2\rangle$ 的某个叠加态, 比如 $A|u\rangle = \alpha_1|v_1\rangle + \alpha_2|v_2\rangle$ (α_1, α_2 为叠加系数), 那么利用 $|v_1\rangle$ 和 $|v_2\rangle$ 的正交关系可知必有 $\langle v_1|A|u\rangle = \alpha_1, \langle v_2|A|u\rangle = \alpha_2$ 。因此为了求出哈密顿算符在我们的矢量基中的表示矩阵, 我们只需要求出它对四个基矢量的作用。为了求出这样的作用, 我们只需要反复利用上一节中的简单公式(4.8)、(4.9)、(4.10)以及(4.11)。比如, $H|\uparrow\uparrow\rangle = 2J(\sigma_1\sigma_2^\dagger + \sigma_1^\dagger\sigma_2)|\uparrow\uparrow\rangle + J(\sigma_1^z\sigma_2^z)|\uparrow\uparrow\rangle = J|\uparrow\uparrow\rangle$ (注意, $\sigma^\dagger|\uparrow\rangle = 0$), 即 $H|\uparrow\uparrow\rangle = J|\uparrow\uparrow\rangle$ 。类似的可以求出, $H|\downarrow\uparrow\rangle = 2J|\uparrow\downarrow\rangle - J|\downarrow\uparrow\rangle$, $H|\uparrow\downarrow\rangle = 2J|\downarrow\uparrow\rangle - J|\uparrow\downarrow\rangle$, 以及 $H|\downarrow\downarrow\rangle = J|\downarrow\downarrow\rangle$ 。因此就容易写出 H 在矢量基 $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ 中的表示矩阵 \hat{H} ,

$$\hat{H} = J \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

很容易求出这个矩阵的四个本征值, 分别为 $J, J, J, -3J$, 分别对应下面的四个归一化本征矢量

$$\psi_{1,+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_{1,-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

分别以这四个本征矢量作为叠加系数, 相应的就有原来的哈密顿算符 H 的四个本征态

$$|1, +1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (4.15)$$

以及

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (4.16)$$

其中前面三个本征态是简并的，对应的本征值都为 J ，这三个简并态称作两 $1/2$ 自旋耦合系统的自旋三重态，最后一个本征态 $|0, 0\rangle$ 对应的本征能量是 $-3J$ ，它称作两自旋耦合系统的自旋单态。

人们很容易看到，自旋三重态的三个态有一个共同点，那就是它们对于两个电子来说是对称的，即如果把电子1和电子2进行交换，那么这三个态都将保持不变，而且下一节我们将看到它们的总自旋大小是两电子贡献相加的，是1，因此我们常常称三重态为自旋平行态。相反，自旋单态关于两个电子是反对称的，如果将电子1和电子2进行交换，那相应的自旋单态就会出一个负号，而且它的总自旋两电子抵消为0了，因此我们常常称单态为自旋反平行态。

在量子力学中，一个系统的能量最低的本征态又称作系统的基态，基态的能量就是量子系统可能具有的最低能量，比基态能量更高的定态就称作激发态。基态(有时候也包括低激发态)对于研究一个系统的性质而言尤其重要，原因在于，对于一个宏观系统而言，只要环境的温度足够低，那么它就会处在基态附近，因此基态和低激发态往往决定了一个系统的宏观行为。

那么我们的两电子自旋耦合系统的基态是什么呢？很显然，答案依赖于 J 是正还是负。如果 J 大于0，那么由于自旋单态的能量为 $-3J$ ，为最低能量，因此系统的基态就将是这样一个自旋反平行态，这时我们称系统处在反铁磁相。想反，如果 $J < 0$ ，那么能量为 J 的自旋三重态就将是系统的基态，注意，这时候系统的基态是简并的， $|1, +1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ 张成了一个简并子空间，任何一个给定的系统当然不可能同时处在这三个态，所以它就必须从这三个简并基态所张成的简并子空间中随机选取一个态。另一方面，从我们原来的哈密顿算符(4.2)来看，三个空间方向地位完全平等，因此我们的系统当然是空间旋转不变的。但是，这个简并子空间中的任意一个态都有一个特定的总自旋方向，比方说， $|1, +1\rangle$ 态总自旋沿着 z 轴向上， $|1, -1\rangle$ 态总自旋反着 z 轴向下，因此不管系统从简并子空间中选择了哪个态，都意味着它选定了了一个特定的空间方向，因此就破坏了空间旋转不变性，由于这种对空间旋转不变性的破坏完全是系统自发的，而不是因为我们在系统的哈密顿算符中引入了某个特定指向的磁场之类的东西，所以我们常常称这种旋转对称性的自发破坏为自发破缺(注意我们不用破坏这个词，而是用自发破缺)！但是，不管系统破缺到简并子空间中的哪一个态，它都是一个自旋平行态(比如， $|1, 0\rangle$ 态的两电子也是自旋平行的，只不过平行的方向不是在 z 轴上而已)，这时候我们就称系统处在铁磁相。

从这个例子我们可以想见，更具一般性的海森堡模型(4.1)到底是铁磁的还是反铁磁的，这取决于 J 的符号，要从理论上解释某个材料的铁磁性，那我们就必须从理论上计算出一个小于0的 J 。但这是一件相当困难的事情，很少有人能从理论上计算出某个材料的 J 。因此人们通常采用的理论方案是，从某一个对系统的更基本描述出发，然后看看有没有一个机制能够让这个系统的有效描述可以是一个 J 为负的海森堡铁磁模型。如果理论上找到了一个这样的机制，那么人们就会设计实验来实现这样的机制，并看它是否能和理论推导一样使得系统处于铁磁相。总之，即使从海森堡提出他的模型到现在已经有很长时间了，关于铁磁性的研究依然一直是理论凝聚态的前沿领域之一，就是因为这种研究并不容易。

两自旋耦合系统的总自旋

让我们再次回到两自旋耦合的哈密顿算符(4.2)，很显然，我们可以用泡利算符的矢量形式将它重写成 $H = J\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ 。而且，我们可以引入一个总泡利算符 $\vec{\sigma} = \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2$ ，它和系统总自旋 \vec{S} 之间的关系是 $\vec{S} = \hbar\vec{\sigma}/2$ ，所以研究总泡利算符等价于研究系统总自旋。让我们先来考察一下 $(\vec{\sigma})^2 = (\vec{\sigma}_1)^2 + (\vec{\sigma}_2)^2 + 2\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ ，而由于 $(\vec{\sigma}_1)^2 = (\sigma_1^x)^2 + (\sigma_1^y)^2 + (\sigma_1^z)^2 = 3$ ，同样 $(\vec{\sigma}_2)^2 = 3$ ，所以我们可以知道 $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = (\vec{\sigma})^2/2 - 3$ ，因此原来的哈密顿算符就可以重写成 $H = J[(\vec{\sigma})^2/2 - 3]$ 。

显然，算符 $(\vec{\sigma})^2$ 和哈密顿算符 H 的本征态是一样的，由前面求出来的 H 的本征值和本征态我们容易知道，自旋三重态 $|1, +1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ 和自旋单态 $|0, 0\rangle$ 分别是 $(\vec{\sigma})^2$ 的本征值为8和本征值为0的本征态。如果用总自旋 $(\vec{S})^2 = (\vec{\sigma})^2\hbar^2/4$ 来考虑的话，那么自旋三重态就是 $(\vec{S})^2$ 的本征值为 $2\hbar^2$ 的本征态，通常我们说这种态的总自旋为1，这就是三重态的记号中前一个1所代表的含义，不过，我们暂时不用管为什么把这样的量子态称之为自旋为1，暂时我们只需要将它理解成一个约定，其含义就是，这种态对应于 $(\vec{S})^2 = 2\hbar^2$ ，也就是说，这三个态的总自旋大小是一样的，都是 $\sqrt{2}\hbar$ 。当然，用 $(\vec{S})^2$ 来考虑，自旋单态就对应于 $(\vec{S})^2 = 0$ ，也即是说，自旋单态是总自旋为0的态，这就是 $|0, 0\rangle$ 这个记号中前一个0的含义。

很明显， $(\vec{S})^2$ 的本征值不足以将两自旋耦合系统的四个本征态都区分出来，因为自旋三重态的那三个态对于 $(\vec{S})^2$ 来说是简并的。因此，人们通常进一步考察总自旋的 z 分量 $S_z = \sigma^z\hbar/2$ 。由于 $(\vec{\sigma})^2 = 6 + 2\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 6 + 2(\sigma_1^x\sigma_2^x + \sigma_1^y\sigma_2^y + \sigma_1^z\sigma_2^z)$ ，我们很容易利用泡利算符的代数关系(4.4)验

证 $[\sigma^z, (\vec{\sigma})^2] = 0$, 这也即是说, S_z 和 $(\vec{S})^2$ 对易,

$$[(\vec{S})^2, S_z] = 0. \quad (4.17)$$

因此, S_z 和 $(\vec{S})^2$ 可以有共同的本征态, 实际上, 由于 $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma^z = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1^z + \sigma_2^z)$, 人们很容易验证: $S_z|1, +1\rangle = \hbar|1, +1\rangle$ (即 $|1, +1\rangle$ 是 S_z 的本征值为1倍 \hbar 的本征态, 这就是 $|1, +1\rangle$ 记号中后一个+1的含义), $S_z|1, 0\rangle = 0|1, 0\rangle$ (这就是本征态记号中的那个0的含义), $S_z|1, -1\rangle = -\hbar|1, -1\rangle$ (即本征值为-1倍的 \hbar , 这就是记号 $|1, -1\rangle$ 中那个-1的含义), 类似的, $S_z|0, 0\rangle = 0|0, 0\rangle$ (这就是本征态记号中第二个0的含义)。简单归纳一下, 即, 自旋单态总自旋大小为0, 当然 S_z 也为0, 自旋三重态总自旋为1, 其 S_z 的值分别为+1, 0, -1(以 \hbar 为单位)。

4.1.3 习题

1. 请求解 $H = J(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \Delta \sigma_1^z \sigma_2^z)$ 这样一个 XXZ 模型并对结果进行讨论, 式中 Δ 是一个实参数。

4.2 反射与透射

根据波动力学的观点, 微观粒子也是波, 而从波动光学的研究我们了解到波有一些非常典型的现象, 比方说反射和透射。让一束波从真空向一块材料入射, 我们可以预期有一部分波会被材料反射, 产生反射波, 也可能有一部分波会进入材料内部, 成为透射波。既然微观粒子也是波, 那假如我们将一束粒子向一块材料入射, 也将会有一些粒子被材料反射, 而另一些粒子则进入材料内部。那么, 对于单个入射粒子而言, 它被材料反射的概率是多少呢? 它透射的概率又是多少呢? 这一节我们将通过一个最简单的数学模型来研究这些问题。

4.2.1 势散射的简单例子

为了简单起见, 我们假设所考察的是垂直入射, 因此只需要考察粒子在垂直于材料表面的方向上的运动, 问题将简化为一个一维问题。进一步, 我们用一个常数势垒 V_0 来模拟整块材料。如此一来, 问题就变成粒子在如图(4.1)所示的一维势场 $V(x)$ 中运动的问题。图中的区域I就对应真空, 区

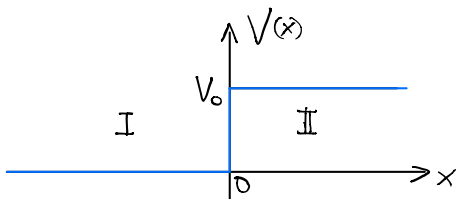


图 4.1: 一维势能台阶。

域II对应材料，势能函数 $V(x)$ 可以写成

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}. \quad (4.18)$$

而我们需要求解的就是一维定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad (4.19)$$

式中的 E 也就是入射粒子能量。

由于势能函数 $V(x)$ 是一个分段函数。所以我们要分I、II两个区域分别求解方程(4.19)，然后再将两个区域的解拼接起来。我们记I、II两个区域的解分别为 $\psi_I(x)$ 和 $\psi_{II}(x)$ 。稍微整理一下，人们就能看出， $\psi_I(x)$ 和 $\psi_{II}(x)$ 分别满足如下方程

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_I(x) &= 0. \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi_{II}(x) &= 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

$E > V_0$ 情形

首先，假设 $E > V_0$ 。这时候可以令 $\frac{2mE}{\hbar^2} = k_1^2$ 、 $\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = k_2^2$ 。从而方程(4.20)变成

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) + k_1^2 \psi_I(x) &= 0. \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) + k_2^2 \psi_{II}(x) &= 0. \end{aligned} \quad (4.21)$$

很显然，这两个方程的解可以写成

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}. \\ \psi_{II}(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x}.\end{aligned}\quad (4.22)$$

注意到 e^{ikx} 这样的波函数描述的是一个右行波，而 e^{-ikx} 这样的波函数描写的是左行波。如果粒子是从 $x = -\infty$ 处入射，那I区域的 $A_1 e^{ik_1 x}$ 描写的就是入射波，而 $A'_1 e^{-ik_1 x}$ 描写的就是左行的反射波。类似的，II区域的 $A_2 e^{ik_2 x}$ 描写的就是右行的透射波。但是，由于II区域上没有粒子入射，所以II区域上的左行波 $A'_2 e^{-ik_2 x}$ 必定为零，即

$$A'_2 = 0. \quad (4.23)$$

我们可以分别计算I、II两个区域上的概率流密度 J_I 、 J_{II} ，并得到

$$\begin{aligned}J_I &= |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m} - |A'_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \\ J_{II} &= |A_2|^2 \frac{\hbar k_2}{m}.\end{aligned}\quad (4.24)$$

局域概率守恒意味着，通过I区域的概率流必定要和通过II区域的概率流相等，从而必定有

$$(|A_1|^2 - |A'_1|^2) k_1 = |A_2|^2 k_2. \quad (4.25)$$

待会儿我们可以验证这个结果是否成立。

很显然， J_I 表达式中的 $|A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ 代表的是入射粒子概率流密度， $-|A'_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ 代表的是反射粒子概率流密度。我们可以定义反射概率 R 为 $|A'_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ 比上 $|A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ ，从而

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2. \quad (4.26)$$

从这个定义可以看出 R 其实就是反射粒子流强与入射粒子流强的比值，也就是单位时间之内反射粒子数在单位时间入射粒子总数中的比例。类似的，我们可以定义透射概率 T 为透射粒子概率流密度与入射粒子概率流密度的比值，从而

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2. \quad (4.27)$$

R 和 T 就是我们最终要计算的物理可观测量。很显然，概率守恒的要求(4.25)其实就等价于

$$R + T = 1. \quad (4.28)$$

待会儿我们可以验证这个结果。

下面，我们将两个不同区域的解(4.22)拼接起来。为此我们需要注意到，在任意空间点 x ，波函数必然都连续。这是因为，波函数的模方反映的是粒子在空间的概率分布，它没有理由不连续，而要在所有情况下都保证波函数模方连续，那只有波函数本身连续。特别的，在 $x = 0$ 点，波函数连续，即 $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ ，利用解(4.22)，我们即有

$$A_1 + A'_1 = A_2. \quad (4.29)$$

但是，我们三个未定常数 A_1, A'_1, A_2 ，而我们要决定两个物理量 R, T 。所以这一个拼接条件还不够，我们还得找一个拼接条件。

这另一个解的拼接条件就是波函数的一阶导数要连续。在我们这一例子中，这其实可以证明。为此，我们任取一点 x ，然后在 x 附近对定态薛定谔方程(4.19)的表达式进行积分，从 $x^- = x - \epsilon$ 积到 $x^+ = x + \epsilon$ ， ϵ 为一个正的无穷小量。从而就可以得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(x^+) - \psi'(x^-)] = \int_{x^-}^{x^+} dx(E - V(x))\psi(x), \quad (4.30)$$

式中 $\psi'(x) = \partial_x \psi(x)$ 。注意到，波函数 $\psi(x)$ 连续，因此只要 $V(x)$ 不太奇异，那么 $(E - V(x))\psi(x)$ 也必定连续。特别的，对于我们这里涉及到的阶跃势能， $(E - V(x))\psi(x)$ 是连续的。从而 $\int_{x^-}^{x^+} dx(E - V(x))\psi(x) \rightarrow 0$ 。从而由(4.30)可知，在 $\epsilon \rightarrow 0$ 时必有

$$\psi'(x^+) = \psi'(x^-). \quad (4.31)$$

这就意味着波函数的一阶导数在任意 x 都连续。

根据 $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$ ，由分段解(4.22)，我们可以得到

$$k_1(A_1 - A'_1) = k_2 A_2. \quad (4.32)$$

结合拼接条件(4.29)和拼接条件(4.32)，我们就可以得到

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (4.33)$$

代入(4.26)式和(4.27)式，我们就可以得到

$$R = 1 - \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (4.34)$$

显然满足 $R + T = 1$ ，因此的确概率守恒。

$E < V_0$ 情形

假设入射粒子能量不够， $E < V_0$ 。由于入射粒子能量 E 总大于0，所以这时候I区域内的解形式上还与之前的情形一样。但是对于II区域，由于这时候 $\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} < 0$ ，我们不妨令 $\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = -\kappa_2^2$ 。因此这时候II区域的解就将变成

$$\psi_{II}(x) = B_2 e^{-\kappa_2 x} + B'_2 e^{\kappa_2 x}. \quad (4.35)$$

但是，由于 $x \rightarrow +\infty$ 时波函数得保持有限，从而这个解的指数增长部分必定要为零，即

$$B'_2 = 0. \quad (4.36)$$

这时候我们很容易算得II区域的概率流密度 $J_{II} = 0$ 。从而由局域概率守恒，也有 $J_I = J_{II} = 0$ 。根据(4.24)式，我们必有 $|A'_1|^2 = |A_1|^2$ ，或者说

$$R = 1. \quad (4.37)$$

也即是说，这时候粒子必定全反射，稍后我们会验证这个结果。

对 $E < V_0$ 这种情形的求解其实和 $E > V_0$ 情形一样。实际上，我们只需要将 $E > V_0$ 情形的 k_2 替换成 $i\kappa_2$ 就会过渡到 $E < V_0$ 情形。所以现在的解其实很简单，为

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2}, \quad \frac{B_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa_2}. \quad (4.38)$$

很显然，我们的确有 $R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = 1$ 。而且，注意到 $\frac{A'_1}{A_1}$ 是一个相位因子，我们不妨将之记为 $\frac{A'_1}{A_1} = e^{i\delta}$ ，

$$e^{i\delta} = \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2}. \quad (4.39)$$

因此这时候I区域的波函数可以写成

$$\psi_I(x) = A_1(e^{ik_1x} + e^{i\delta}e^{-ik_1x}). \quad (4.40)$$

可见，反射波相对于入射波发生了 δ 的相位移动。特别的，如果势垒趋于无穷高，即 $V_0 \rightarrow +\infty$ ，从而 $\kappa_2 \rightarrow +\infty$ ，那由(4.39)式可知，这时候的相移为

$$\delta = \pm\pi. \quad (4.41)$$

这就是半波损失。

4.2.2 散射态与束缚态

在上一小节的例子中，对于任何大于零的能量 E ，我们都可以找到相应定态薛定谔方程的物理解。并没有出现能量量子化，系统的能谱 E 依然连续可变。并且我们还看到，无论是 $E > V_0$ 还是 $E < V_0$ ，相应的定态波函数 $\psi(x)$ 在 $x \rightarrow -\infty$ 时都不趋于零，在物理上，它代表粒子可以从 $x = -\infty$ 处入射，也可以反射到 $x = -\infty$ 处去，总之，粒子可以出现在 $x = -\infty$ 处。像这样的，能谱连续，粒子可以出现在空间无穷远处的定态，我们通常称之为散射态。我们可以将散射态的能量解释成粒子在无穷远处的能量，在物理上，无穷远处的粒子可以认为远离了一切相互作用势，从而是自由粒子，从而散射态的能量就等于无穷远处的这个自由粒子的能量，它当然是一个大于0的连续谱。

之所以称这样的态为散射态，是因为粒子在无穷远处是自由的，而入射到势场区以后就会被势场散射。一般来说，散射态正是描述了粒子从无穷远处入射，最后又被散射到无穷远处去的这样一个量子态。就好比上一小节的例子中，粒子从 $-\infty$ 处入射最终被 $V(x)$ 散射到 $-\infty$ (对应反射波)或者 $+\infty$ 处(对应透射波)。

与散射态相对的，定态薛定谔方程还可能出现另一类不同的解，称之为束缚态。它描述的是粒子被束缚在一个有限的区域内，无法到达空间无穷远处的情形。因此，与散射态不同，束缚态要求波函数 $\psi(\mathbf{x})$ 在空间无穷远处以足够快的速度趋于零。如果无穷远处势能为0的话，那通常来说束缚态的能量本征值必然要小于0，因为否则的话粒子就可能有一定的概率隧穿到无穷远处去。由于束缚态的粒子总是被束缚在一个区域之内，因此它就会在这个区域内形成某种“驻波”，但并非任意 $E < 0$ 都能满足“驻波”条件，因此束缚态的能量通常是量子化的，对应分立的能量本征值。本章后

面几节将研究一些束缚态的具体例子。下面的图(4.2)示意性地画出了束缚在一个势阱中的粒子的三个束缚态能级, E_0, E_1, E_2 , 其中, E_0 是基态。

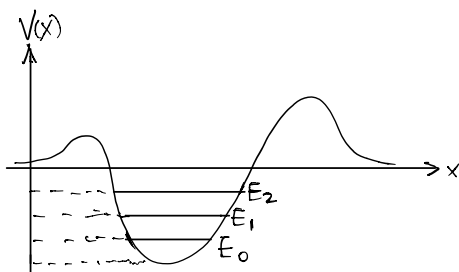


图 4.2: 束缚态能级

4.2.3 习题

1. 粒子在一维势场 $V(x) = -A\delta(x)$ 中运动, 假定 $A > 0$ 。(1). 请问粒子波函数的一阶导数是否连续, 为什么? (2). 请问这个系统有没有束缚态, 如果有, 请求出束缚态能级。

2. 某一维系统的势能函数 $V(x)$ 如下,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a \\ V_0, & 0 < x < a \end{cases}. \quad (4.42)$$

其中 $V_0 > 0$ 为势垒的高度。假设粒子从势垒左边 $x \rightarrow -\infty$ 的地方入射, 能量 $0 < E < V_0$ 。请求出粒子隧穿过势垒的概率, 也即粒子的透射概率。并验证在 \hbar 很小的半经典近似下, 结果和第三章中用 WKB 近似得到的结果吻合。

4.3 单自由度线性谐振子

线性谐振子的研究在量子物理中的重要性怎么强调都不过分。首先, 最早普朗克在推导他的黑体辐射公式的时候, 就假定辐射电磁波的是谐振子(这是由于黑体辐射结果的普适性, 它并不依赖于具体是什么物质在辐射电磁波), 为了推导出黑体辐射公式, 普朗克假设这些谐振子的能量是量

子化的, 只能取 $n\hbar\omega$ 这样的量子化值。随后, 爱因斯坦的光量子理论紧接着说, 其实电磁场本身就是量子化的, 电磁场的量子叫做光子, 一个角频率为 ω 的光子其能量是 $\hbar\omega$, n 个相同的光子能量就是 $n\hbar\omega$ 。从我们今天的观点来看, 爱因斯坦的电磁场量子化假设和普朗克的谐振子量子化假设其实密切相关, 原因在于, 我们可以把任何电磁波分解成平面波(或者空腔里的驻波)的线性叠加, 任何电磁场都由这种平面波叠加的叠加系数唯一性地决定, 代入麦克斯韦方程人们就能发现, 这些叠加系数所满足的方程就是标准的线性谐振子方程, 所以, 电磁场可以看成是一个多自由度的谐振子系统, 每一个波模式对应一个谐振自由度。但是, 无论普朗克也好还是爱因斯坦也好, 他们都没有从理论上解释为什么线性谐振子的能量会量子化为 $n\hbar\omega$ 这样的形式, 首先用量子力学理论推导出这个结论的是海森堡。用量子力学推导出这个结论就是我们这一节的主要内容, 我们将要给出来的推导方法是相当标准的, 而且类似的方法在量子理论中应用非常广泛。

爱因斯坦不仅提出了电磁场的光量子, 他还将类似的观念应用于固体里面的声波, 因为声波的每一个模式同样是一种简谐振动, 声波的量子就叫声子, 正是因为考虑了声波的量子化, 爱因斯坦才能成功地解释固体在低温下的比热容, 而这是此前的经典理论无法解释的。类似的, 在铁磁体和反铁磁体这些自旋相互作用的体系中还存在自旋波, 自旋波的量子通常叫做磁振子(Magnon), 等等。总之, 谐振子的概念无论是在量子场论中还是在凝聚态物理中都是基础性的。

不仅如此, 任何力学系统在其稳定平衡位置附近的运动都是一种简谐振动, 而组成一个分子的若干原子在通常的温度下就是在其平衡位置附近来回振动, 因此谐振子的研究同样可以应用于诸如分子振动光谱之类的原子分子物理问题。关于线性谐振子的更多讨论, 我们推荐读者参考Cohen-Tannoudji的《量子力学》第一卷。

4.3.1 单自由度线性谐振子的量纲分析

所谓的单自由度线性谐振子, 我们指的是问题中只涉及一个力学变量 X (以及和它相应的正则动量 P), 并且哈密顿量为 $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ 的系统, 这里 ω 就是这个线性谐振子的角频率, $\frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ 当然就是线性谐振子的弹性势能。从这个哈密顿量我们可以看到, 单自由度线性谐振子只涉及 m, ω 这两个物理常量, 当然由于我们将要进行的是一个量子力学分析, 所以我们还需要加上普朗克常量 \hbar 。因此整个问题只涉及 m, ω, \hbar 这三个有量

纲的物理常量，也即是说，所有我们将要分析的物理量，能级也好， X 的方差也好，最终都应该是仅涉及这三个物理常量的某个表达式。在具体求解问题之前，我们不妨先对这样的表达式进行一下量纲分析。首先我们注意到， m, ω, \hbar 这三个量无法构造出任何无量纲的量(因为它们实际上对应于三个相互独立的基本量纲，比方说 $1/\omega$ 有时间量纲， m 有质量量纲)，这就告诉我们用量纲分析的方法得出来的表达式将是唯一的(除了未定的数值系数以外)，因为没有任何未定的无量纲因子可以再乘上去。

很显然， m, ω, \hbar 能够构造出来的有能量量纲的表达式是 $\hbar\omega$ ，也就是说，线性谐振子的能级将有 $E \sim \hbar\omega$ 的形式。其次我们注意到 $[\hbar\omega] = [P^2/m]$ (符号 $[]$ 表示取一个表达式的量纲)具有能量量纲，因此 $[P^2] = [m\hbar\omega]$ ，这也即是说， $\sqrt{m\hbar\omega}$ 有动量量纲。类似的， $[\hbar\omega] = [m\omega^2 X^2]$ 也具有能量量纲，因此 $[X^2] = [\hbar/(m\omega)]$ ，这也即是说， $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$ 具有长度量纲。有了这些量纲表达式以后，我们就可以将所有的力学变量都无量纲化，完成这一步的最简单办法是直接令 $\hbar = 1, m = 1, \omega = 1$ ，这样我们的哈密顿算符就变成，

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + X^2), \quad (4.43)$$

现在 X, P, H 都已经无量纲了，因此我们求解这个无量纲问题(4.43)最终得出来的就是一些数值。而恢复量纲的办法也很简单，比如，对于(4.43)的本征值你直接乘上量纲表达式 $\hbar\omega$ 就得到原来谐振子的能级了，再比如对于(4.43)的本征波函数 $\psi(x)$ 里面的 x ，你直接替换成 $\psi(\frac{x}{\sqrt{\hbar/(m\omega)}})$ ，那替换以后的 x 就不再是无量纲，而是有通常的长度量纲了。事先进行量纲分析的好处在于，作了无量纲化处理以后，我们就只需要求解一个数学上更简洁的无量纲哈密顿量(4.43)，最后再将得到的结果恢复量纲就可以了。

4.3.2 求解与讨论

下面我们来具体求解算符(4.43)的本征值和本征态。我们用到的关键算符代数关系就是 $[X, P] = i\hbar$ 这样一个基本对易关系，当然由于作了无量纲化处理 $\hbar = 1$ ，所以现在这个代数关系应该写成

$$[X, P] = i. \quad (4.44)$$

观察一下我们要求解的哈密顿量 $H = \frac{1}{2}(X^2 + P^2)$ ，你会发现，如果我们处理的不是算符，而是普通的数，那很显然我们可以引入复变量，将这个

二次型的哈密顿量写成某个复数的模方的形式, 即 $H = \frac{1}{2}(X - iP)(X + iP)$ 。这就启发我们引入两个新的算符 a 和 a^\dagger , 它们的定义是

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP), a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP), \quad (4.45)$$

注意这两个算符都不是厄米算符, 而是互为厄米共轭的。利用代数关系(4.44), 我们很容易得到 $[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}[X + iP, X - iP] = \frac{1}{2}([X, -iP] + [iP, X]) = 1$, 即

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (4.46)$$

另外, 由于 $a^\dagger a = \frac{1}{2}(X - iP)(X + iP) = \frac{1}{2}(X^2 + P^2 + iXP - iPX) = \frac{1}{2}(X^2 + P^2) - \frac{1}{2}$, 所以我们知道原来的哈密顿算符(4.43)可以写成

$$H = a^\dagger a + \frac{1}{2}, \quad (4.47)$$

式中多出来的这个 $1/2$ 就是因为我们处理的是相互不对易的算符, 而不是普通的数。算符 a 和 a^\dagger 通常分别称作湮灭算符和产生算符, 它们的典型特征就是满足代数关系(4.46)。

不妨记 $a^\dagger a = N$, 很显然, 算符 N 和哈密顿算符 H 有完全一样的本征态, 而且 N 的本征值加上 $1/2$ 就是 H 的本征值。我们很容易论证 N 的本征值一定大于或者等于 0 。这是因为, 任给一个量子态 $|\psi\rangle$, 假设我们记 $|\phi\rangle = a|\psi\rangle$, 则有 $\langle\phi| = \langle\psi|a^\dagger$, 因此 $\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle = \langle\psi|N|\psi\rangle$, 而很显然 $\langle\phi|\phi\rangle \geq 0$, 之所以这里允许 $\langle\phi|\phi\rangle$ 等于 0 , 是因为可能出现 $a|\psi\rangle = 0$ 的情况, 这时候 $|\phi\rangle$ 本身就是 0 。这就告诉我们, 对于任意量子态 $|\psi\rangle$, 我们总有 $\langle\psi|N|\psi\rangle \geq 0$, 因此 N 的本征值总是大于等于 0 的, 并且等于 0 的情况仅在 $a|\psi\rangle = 0$ 时才会出现。

为了下面的推导, 我们介绍一个算符恒等式, 假设有三个算符 A, B, C , 那么我们将有下面的恒等式

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C], \quad (4.48)$$

把两边按照对易子的定义展开, 人们就能很容易地验证这个恒等式。在计算算符对易子的时候这样的恒等式非常有用。

利用上面的恒等式和(4.46), 人们很容易算出 $[a, N] = a, [a^\dagger, N] = -a^\dagger$, 也常常写作

$$[N, a] = -a, [N, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (4.49)$$

假设我们有厄米算符 N 的某个本征值为 λ 的本征态 $|\lambda\rangle$, 即

$$N|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle. \quad (4.50)$$

则由于(4.49)式, 我们可以知道, $N(a|\lambda) = (Na)|\lambda\rangle = (aN - a)|\lambda\rangle = (\lambda - 1)(a|\lambda\rangle)$ (注意由 $[N, a] = -a \Rightarrow Na = aN - a$), 即, 如果 $a|\lambda\rangle \neq 0$, 那它必定是 N 的本征值为 $\lambda - 1$ 的本征态, 即有

$$a|\lambda\rangle = \alpha_\lambda|\lambda - 1\rangle, \quad (4.51)$$

式中 α_λ 为某个复系数。也即是说, a 作用在 N 的本征态上, 可以得到一个本征值降低1的新本征态。为了看清楚什么情况下 $a|\lambda\rangle$ 等于0, 我们不妨记 $a|\lambda\rangle = |\varphi\rangle$, 则有 $\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle = \langle\lambda|N|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle$, 很显然, 只要 $\lambda \neq 0$, 那么 $a|\lambda\rangle$ 就不等于0, 反过来 $\lambda = 0$ 就一定意味着 $a|\lambda\rangle = 0$ 。

上面的分析有一个很重要的推论, 即 N 的任何本征值 λ 都必须是非负整数。因为否则的话我们就可以不断重复地用 a 作用在相应的本征态上, 得到一串新的本征态, 它们的本征值分别为 $\lambda, \lambda - 1, \lambda - 2, \lambda - 3, \dots$ 。如果 λ 不是非负整数, 那这一串本征值都将不为0, 那么由上一段的分析就有, a 作用在这一串本征态的任何一个上面都将不是0。因此用 a 进行作用的这个过程就可以无限地重复下去, 这样一来, 给定任何一个初始的 λ , 我们总能作用任意 m 个 a 在其本征态上, 得到一个本征值为 $\lambda - m$ 的本征态, 只要 m 足够大, $\lambda - m$ 就必定为负数。但这是不可能的, 因为前面我们已经证明过了, N 的本征值必须大于等于0。因此, λ 必须为非负整数, 我们记为 $\lambda = n$ 。

类似的, 利用(4.49)式我们还可以得到, a^\dagger 作用在 N 的某个本征态 $|n\rangle$ 上将会得到一个本征值为 $n + 1$ 的本征态。归纳一下即有

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad a|n\rangle = \alpha_n|n - 1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \beta_{n+1}|n + 1\rangle, \quad (4.52)$$

这里 $n \geq 0$, α_n, β_{n+1} 为待定复系数。同时, 由于 $n|n\rangle = a^\dagger a|n\rangle = \alpha_n a^\dagger|n - 1\rangle = \alpha_n \beta_n|n\rangle$, 所以必有

$$\alpha_n \beta_n = n. \quad (4.53)$$

我们已经得到了第一个重要结论, 即哈密顿算符(4.47)的本征谱为 $n + 1/2$, 如果恢复量纲, 那么我们就有, 单自由度线性谐振子的本征谱为

$$(n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad (4.54)$$

可见,除了多出来一个 $(1/2)\hbar\omega$ 之外,这个结果正符合普朗克最初的假设。

多出来的这个 $(1/2)\hbar\omega$ 其实有重要的效应:首先,它意味着即使对于 $n = 0$ 的基态,线性谐振子的能量也不为0,所以这个能量通常叫做零点能。之所以有零点能,是因为量子力学的不确定关系 $\delta x \delta p \sim \hbar$,所以即使在基态,谐振子的坐标和动量也不能同时确定为0,而是有涨落,零点能就是这个涨落的能量。其次,按照当前的观点,一切物质最终都是由基本粒子组成的,而所有的基本粒子都可以用场来描述,在忽略相互作用的时候,场可以看成是许许多多的谐振子,因此,即使所有的场都处在基态,它们也还是有零点能。基本粒子场活动的舞台当然就是我们的时空,所有基本粒子都处在基态所对应的就是真空态,因此场的零点能的存在就告诉我们,真空其实并不真正空,而是总有基本粒子场的涨落,这些涨落表现出来的零点能就叫作真空能。所以,真空其实充满能量,并且人们已经测到了真空的能量,这就是所谓的卡西米尔效应。另一方面,宇宙的大部分区域当然是真空,因此按照道理来说,宇宙中应该充满了真空能,它的一个效应就是会使得宇宙加速膨胀,今天的天文学观测的确发现我们的宇宙在加速膨胀,但是,宇宙学观测计算出来的使得宇宙加速膨胀的这个能量虽然占了宇宙总能量的大部分,但却还是比量子场论计算出来的真空能小太多太多,这到底是怎么回事现在还没有人搞清楚,这个问题就是著名的暗能量问题,它问的就是,第一,使得宇宙加速膨胀的暗能量的来源到底是什么,第二,为什么量子场论计算出来的宇宙真空能不对。

下面我们接着来研究线性谐振子的本征态 $|n\rangle$,我们还是采用无量纲化的处理,只在最后才进行量纲恢复。假定所有的这些本征态 $|n\rangle$ 都已经正交归一了,因此我们首先要做的就是确定(4.52)式中的待定系数 α_n, β_n 。为此,我们注意到由 $a^\dagger|n\rangle = \beta_{n+1}|n+1\rangle$ 可以得到, $|\beta_{n+1}|^2 \langle n+1|n+1\rangle = \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle$ (注意由 $[a, a^\dagger] = 1 \Rightarrow aa^\dagger = a^\dagger a + 1$),进一步利用本征态的归一性就有 $|\beta_{n+1}|^2 = (n+1)$ 。同时,在假定 $|n\rangle$ 态的相位已经设定的前提下,我们总是可以合适地调节 $|n+1\rangle$ 态的相位,使得由方程 $a^\dagger|n\rangle = \beta_{n+1}|n+1\rangle$ 定义出来的 β_{n+1} 变成一个正实数。如此一来,我们就有 $\beta_{n+1} = \sqrt{n+1}$,代入(4.53)式就可以进一步得到 $\alpha_n = \sqrt{n}$ 。因此我们有

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (4.55)$$

特别的,对于 $n = 0$ 的基态,我们有

$$a|0\rangle = 0. \quad (4.56)$$

另外, 将(4.55)式进行递推, 我们可以得到

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle. \quad (4.57)$$

到此为止实际上我们已经完成了所有的求解过程, 但有时候人们还是希望得到坐标表象下的本征波函数。不妨让我们先来求坐标表象下的基态波函数, 首先由(4.56)式, 我们有 $\langle x|a|0\rangle = 0$, 进一步由产生湮灭算符的定义式(4.45)可知 $\langle x|X + iP|0\rangle = 0$ 。最后, 将坐标表象下的基态波函数记为 $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$, 并利用动量算符在坐标表象下的表示 $\hat{P} = -i\partial_x$ (已经作了 $\hbar = 1$ 的无量纲化), 我们就有 $0 = \langle x|X + iP|0\rangle = (x + \partial_x)\langle x|0\rangle$, 即

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + x\right)\psi_0(x) = 0, \quad (4.58)$$

求解这个微分方程并将结果进行归一化就可以得到

$$\psi_0(x) = \left(\frac{1}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right). \quad (4.59)$$

为了求激发态波函数, 我们记 $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$ 。由(4.57)式我们可以知道 $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^\dagger)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\langle x|(X - iP)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(x - \partial_x)^n\langle x|0\rangle$, 即

$$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{\pi^{1/2} 2^n n!}\right)^{1/2} (x - \partial_x)^n \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right). \quad (4.60)$$

如果人们将这个式子中的 $(x - \partial_x)^n$ 的作用结果算出来, 就会发现它对应于一个 n 次多项式 $H_n(x)$, 通常称作厄米多项式。最后, 让我们恢复量纲, 从而就有

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\kappa}{\pi^{1/2} 2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\kappa x) \exp\left(-\frac{1}{2}\kappa^2 x^2\right), \quad (4.61)$$

式中 $\kappa = 1/\sqrt{\hbar/(m\omega)} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ 是长度的负一次方量纲。值得注意的是, 由波函数归一化 $\int dx |\psi(x)|^2 = 1$ 可以知道, 波函数本身也是有量纲的, 在一维是长度的 $-1/2$ 次方量纲, 这就是为什么在最后恢复量纲的时候(4.61)式的前面会多出一个 $\kappa^{1/2}$ 因子的原因。下面的图(4.3)示意性地画出了一些线性谐振子的定态波函数, 以及相应的概率分布。从这幅图中可以清楚地看到, 线性谐振子的定态 $\psi_n(x)$ 都是一些束缚态。实际上, 由于线性谐振子的势能在无穷远处趋于无穷大, 因此任何情况下粒子都不可能出现在无穷远处, 所以线性谐振子系统没有散射态。

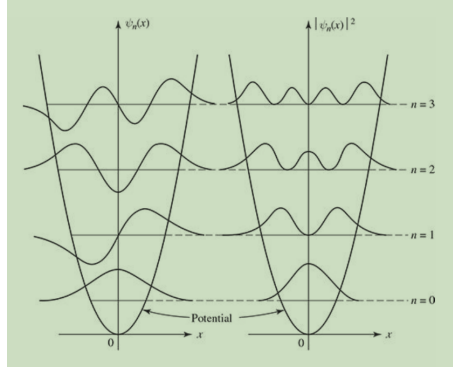


图 4.3: 线性谐振子波函数以及概率分布

4.3.3 位力定理

利用上一小节的求解结果，让我们来作一些简单的计算，我们的计算都将采用先无量纲化下处理，最后再恢复量纲的办法。

先让我们计算在定态 $|n\rangle$ 上，谐振子坐标的平均值 $\langle n|X|n\rangle$ 。利用产生湮灭算符的定义式我们显然有 $\langle n|X|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle n|a + a^\dagger|n\rangle$ ，进一步利用(4.55)式以及不同本征态的正交性很容易得到最终结果为0。类似的，我们也可以得到动量的平均值也为0，即有

$$\langle n|X|n\rangle = \langle n|P|n\rangle = 0. \quad (4.62)$$

下面我们来计算 X^2 的平均值。由 $\langle n|X^2|n\rangle = \frac{1}{2}\langle n|(a+a^\dagger)^2|n\rangle = \frac{1}{2}\langle n|a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a|n\rangle = \frac{1}{2}\langle n|2a^\dagger a + 1|n\rangle = (n + \frac{1}{2})$ ，式中我们利用了(4.55)式以及不同本征态的正交性。类似的我们也可以计算出 $\langle n|P^2|n\rangle = (n + \frac{1}{2})$ 。由此我们就可以得到一个重要的结论，即在定态上，谐振子动能 $\frac{1}{2}P^2$ 的平均值和势能 $\frac{1}{2}X^2$ 的平均值相等，都等于相应能级的一半。恢复量纲即有

$$\langle n|\frac{P^2}{2m}|n\rangle = \langle n|\frac{1}{2}m\omega^2 X^2|n\rangle = \frac{1}{2}(n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \quad (4.63)$$

上面的这个结论其实是所谓的位力定理的一个特殊情况，下面我们就以一维问题为例来推导一下位力定理。假设我们考虑的系统哈密顿算符为 $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$ ， $|n\rangle$ 为它的第 n 个定态，相应的能级为 E_n ，即

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (4.64)$$

那么我们容易有 $\langle n|[PX, H]|n\rangle = \langle n|PXH - HPX|n\rangle = E_n\langle n|PX|n\rangle - E_n\langle n|PX|n\rangle = 0$, 式中最后一个等号我们利用了 $\langle n|H = E_n\langle n|$ 。然而在另一方面, $[PX, H] = [PX, \frac{P^2}{2m}] + [PX, V(X)] = P[X, \frac{P^2}{2m}] + [P, V(X)]X = i\hbar\left(\frac{P^2}{m} - X\frac{\partial}{\partial X}V(X)\right)$, 式中我们利用了公式(4.48)以及基本对易关系 $[X, P] = i\hbar$ 。将这两个计算结合起来, 即有

$$2\langle n|T|n\rangle = \langle n|\frac{P^2}{m}|n\rangle = \langle n|X\frac{\partial}{\partial X}V(X)|n\rangle. \quad (4.65)$$

这就是位力定理, 式中的 T 就表示动能算符。特别的, 对于线性谐振子, $V(X) = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$, 因此 $X\frac{\partial}{\partial X}V(X) = 2V(X)$, 如此一来即有

$$\langle n|T|n\rangle = \langle n|V|n\rangle. \quad (4.66)$$

这正是我们前面通过具体计算发现的结论。

4.3.4 习题

1. 对于线性谐振子, 人们可以定义一种特殊的量子态, 叫做相干态。任给复数 z , 没有归一化的相干态 $|z\rangle$ (我们用右括号而不是 \rangle 来强调这个量子态没有归一化) 可以定义为 $|z\rangle = e^{za^\dagger}|0\rangle$ 。

(1). 请证明 $|z\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$ 。

(2). 请证明 $|z\rangle$ 是湮灭算符 a 的本征态, 满足 $a|z\rangle = z|z\rangle$ 。请注意, 由于 a 不是一个厄米算符, 因此其本征值可以是复数 z 。

(3). 请将 $|z\rangle$ 归一化, 并计算相干态 $|z\rangle$ 与相干态 $|w\rangle$ 的内积为 $\langle w|z\rangle$ 。

(4). 假设记归一化以后的相干态为 $|z\rangle$ 。请证明 $|z\rangle$ 可以取为 $|z\rangle = D(z)|0\rangle$, 式中 $D(z) = e^{za^\dagger - za}$ 为么正算符。提示: 可以应用第二章习题中证明的算符恒等式 $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}$ 。

(5). 假设记复数 $z = u + iv$, 记 $d^2z = dudv$ 。请证明 $\frac{1}{\pi} \int d^2z e^{-|z|^2} |z\rangle \langle z| = 1$, 这里的积分是对整个复平面积分, 最后的结果 1 表示的是恒等算符。

(6). 请计算相干态 $|z\rangle$ 上, 位置算符 X 以及动量算符 P 的不确定度 δX 和 δP , 并证明 $\delta X \delta P$ 取最小值, 即 $\delta X \delta P = \hbar/2$ 。

(7). 请求出相干态 $|z\rangle$ 在坐标空间的波函数 $\psi_z(x) = \langle x|z\rangle$, 从而证明相干态在坐标空间的概率分布 $|\psi_z(x)|^2$ 是高斯分布。

(8). 假设 $t = 0$ 时刻, 线性谐振子处在相干态 $|z\rangle$, 请证明 t 时刻它将处在相干态 $e^{-i\omega t/2}|ze^{-i\omega t}\rangle$ 。

(9). 请研究处在相干态上的谐振子其在坐标空间的概率分布如何随时间演化, 即研究概率分布 $|\psi_{ze^{-i\omega t}}(x)|^2$ 。请将结果与谐振子的经典振动行为进行比较, 进而领会为什么相干态是一种准经典态。

2. 超导LC振荡电路和普通的经典LC振荡电路不同, 它是量子的, 也即是说超导LC电路电容器上的电荷 Q , 以及电路中的电流都是量子算符。超导LC振荡电路的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{Q^2}{2C} + \frac{1}{2}LI^2. \quad (4.67)$$

但是可以论证, 电流算符 I 和电荷算符 Q 必定不对易。

论证方式有两种: 第一种方式是通过利用 $I = -\dot{Q}$, 进而将哈密顿量写成 $H = \frac{1}{2}L\dot{Q}^2 + \frac{Q^2}{2C}$, 很显然这样写以后, 我们可以将 Q 类比成粒子坐标, \dot{Q} 类比成速度, L 类比成质量, 从而磁场能量 $\frac{1}{2}L\dot{Q}^2$ 就可以类比成动能, 而电场能量 $\frac{Q^2}{2C}$ 就可以类比成势能。当然, 在这样的类比之下 $L\dot{Q} = -LI = -\Phi$ 就应该类比成粒子动量(这里 $\Phi = LI$ 表示电感线圈的磁通, 它同样是算符)。那么根据位置坐标和动量之间的基本对易关系我们就应该有 $[Q, -\Phi] = i\hbar$ 。

第二种论证方式是, 利用 $-\dot{\Phi}$ 是电感线圈两端的电压(电磁感应定律), 从而 $\dot{\Phi}$ 等于电容器两端的电压, 从而 $C\dot{\Phi} = Q$, 进而将电路的哈密顿量重写为 $H = \frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2 + \frac{1}{2}\frac{\Phi^2}{L}$ 。很显然, 这样重写哈密顿量以后就可以将 Φ 类比成粒子坐标, $\dot{\Phi}$ 类比成速度, 从而电场能量 $\frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2$ 就类比成动能, 磁场能量 $\frac{1}{2}\frac{\Phi^2}{L}$ 就应该类比成势能。当然, 这时候 $C\dot{\Phi} = Q$ 就应该类比成粒子动量, 因此同样应该有

$$[\Phi, Q] = i\hbar. \quad (4.68)$$

很明显, 在这两种不同的论证方式中, 电场能量和磁场能量的角色刚好互换了, 但是, 结果是一样的, 即都有

$$[I, Q] = i\hbar/L. \quad (4.69)$$

这种结果的一致性反映了电和磁的相互对偶。我们的问题是, 请根据 Q, I 之间的对易关系求出超导LC振荡电路的量子化能级。

4.4 氢原子

玻尔的氢原子模型成功地解释了氢原子的光谱。但是玻尔的模型还只是一个半经典的理论, 因此从物理理论的逻辑来说依然需要发展一个关于

氢原子的更基本的理论。薛定谔正是通过解决这个问题证明了其薛定谔方程的威力。我们这里正是要仿照当年的薛定谔，通过求解薛定谔方程来得到一个氢原子的量子力学理论。

其实玻尔的氢原子模型更令人不满意的地方在于，它只适用于氢原子，对于其它原子光谱的解释都很不成功。尤其是，玻尔的理论作为一个关于原子的理论，它却完全无法解释元素周期表。比方说，我们知道元素周期表的排布规律中出现了几个神秘的数字2, 8, 18, 32....。玻尔等人的原子模型完全无法解释这几个神秘的数字。但是，正如我们将要看到的，对氢原子的量子力学研究不仅能让我们得到正确的氢原子能级，而且只要作一个很平凡的推广就几乎能解释这些数字。这里说几乎是因为，正如我们即将看到的，通过求解薛定谔方程，我们的确能得到一串神奇的数字，但它们是1, 4, 9, 16, ...。你已经发现了，这和元素周期表的数字规律正好差2倍。正是为了解释这个两倍，泡利提出电子还有一个内部自由度，这内部自由度只有两种可能的取值，对应电子的两个不同内部状态，这刚好带来一个2倍，这样从数字上来说就完全对得上。电子的这个内部自由度当然就是人们发现的电子自旋。所以你看，通过用薛定谔方程来研究氢原子我们不光能得到氢原子能级，还能解释元素周期表，不仅如此，我们还能预言电子有自旋。

不仅如此，如果我们足够小心，其实还能发现其它伟大的隐藏秘密。正如我们将会看到的，加上电子自旋以后，我们的确得到了正确的数字2, 8, 18, 32....，但它是能级简并度，也即是说，是每一个能级可以有多少个完全不同的量子态。但是，元素周期表的2, 8, 18, 32....似乎是核外电子数目呈现出来的排布规律。你想想，这是不是意味着每一个量子态里面只能排一个电子。如果你这么想，你就和当年的泡利一样发现了自然界的一个伟大的秘密。为什么每一个量子态最多只能排一个电子呢？对于当年的泡利来说，这也许是完全不可思议的，因为你想光子就不是这样， n 个光子可以处在一个完全相同的量子态，给出 $n h \nu$ 的能级，这几乎是爱因斯坦提出光量子的时候就已经知道的事情(当然这本身也是一件神奇的事情，第一个研究光子这个神奇特性的人是印度物理学家玻色，所谓的玻色-爱因斯坦凝聚就是爱因斯坦在玻色工作的基础上提出来的)。所以，泡利为此专门提出了一条物理学原理，就是泡利不相容原理，它即是说，任何两个电子都不能处在完全相同的量子态上。泡利不相容原理是我们这个世界的深层秘密之一，可以说没有这条原理，就不可能有我们的世界。当然，这不是我们这里要讨论的话题，这里提到这个只是想表明我们即将进行的数学推导

的背后隐藏着多少自然界的秘密。

要求解的方程

对于氢原子来说，我们要考虑的就是一个核外电子围绕原子核运动的问题。由于原子核比核外电子重1千多倍，因此为了使得分析简单一点，我们可以假设原子核处在坐标原点不动，要考虑的只是核外电子在原子核所产生的库伦场中的量子力学。当然，核外电子和原子核之间有库伦势能 $V(r)$ ，它由下面的式子给出

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\alpha c \hbar}{r}, \quad (4.70)$$

式中我们已经引入了无量纲的精细结构常数 $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq 1/137$ ，其中 c 是光速，但是我们即将要求解的是非相对论量子力学，所以从根本上来说应该是和 c 无关的，正因为如此 αc 必须作为一个整体出现，因为很显然 αc 中的 c 其实消掉了。如果我们记核外电子的质量为 m_e ，那简单的量纲分析就可以使得我们引入一个长度量纲的量， $a_0 = \frac{\hbar}{m_e \alpha c}$ ，这就是所谓的玻尔半径，另外，我们还常常构造一个能量量纲的量 $\frac{1}{2} m_e \alpha^2 c^2$ ，很显然只要将 αc 理解成衡量了电子的速度我们很快就能理解这两个量。

我们要求解的就是核外电子的定态薛定谔方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}). \quad (4.71)$$

使得这个方程有符合物理要求的非零解的 E 就是氢原子的能级。当然，我们关心的是核外电子被原子束缚围绕原子核运动的情形，也即是所谓的束缚态。束缚态上的电子当然不可能出现在空间无穷远处，因此我们的定态波函数必须满足下面的物理要求

$$r = |\mathbf{x}| \rightarrow +\infty : \psi(\mathbf{x}) \rightarrow 0. \quad (4.72)$$

4.4.1 角动量算符

由于我们要求解的是电子绕核运动，这种问题根据我们在经典力学里的经验，角动量将是一个至关重要的物理量，因为在这种问题中角动量是守恒的。而且，开普勒三定律告诉我们，行星绕太阳运动只取决于两个物理量，那就是角动量和能量，开普勒第二定律告诉了我们角动量的重要性，

第三定律实际上进一步告诉了我们能量的重要性，给定了角动量和能量，行星绕太阳运动的轨道就定了。当然，我们这里的电子绕核运动不是一个经典运动，而是一个量子力学问题，所以当然不可能照搬经典物理的分析，但是经典物理的分析至少告诉我们，在这样的问题中，真正重要的物理量就是角动量和能量。能量的算符当然就是哈密顿算符，这已经反映在我们要求解的定态薛定谔方程中了。我们这一小节就是要对角动量算符进行一些研究。

我们用 \mathbf{x} 标记三维坐标矢量，它的三个分量 x_1, x_2, x_3 分别对应通常的 x, y, z 分量。假设我们记 $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ ，那么角动量算符 $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{P} = -i\hbar \mathbf{x} \times \nabla$ 的三个分量就可以写成

$$L_1 = -i\hbar(x_2\partial_3 - x_3\partial_2), L_2 = -i\hbar(x_3\partial_1 - x_1\partial_3), L_3 = -i\hbar(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) \quad (4.73)$$

或者，我们也可以利用列维-西维塔符号 ϵ_{ijk} 将这些表达式统一写成

$$L_i = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \partial_k, \quad (4.74)$$

式中 i, j, k 的取值范围都是 $\{1, 2, 3\}$ ，并且在这里和本节后面我们都约定对表达式中重复出现两次的指标默认求和。

为了研究角动量的大小，我们常常需要考察角动量算符的平方 $\mathbf{L}^2 = L_i L_i$ 。为此我们注意到 $L_i^2 = -\hbar^2 (\epsilon_{ijk} x_j \partial_k) (\epsilon_{ij'k'} x_{j'} \partial_{k'}) = -\hbar^2 (\delta_{jj'} \delta_{kk'} - \delta_{jk'} \delta_{kj'}) x_j \partial_k x_{j'} \partial_{k'} = -\hbar^2 (x_j \partial_k x_j \partial_k - x_j \partial_k x_k \partial_j) = -\hbar^2 (x_j x_j \partial_k \partial_k + \delta_{kj} x_j \partial_k - x_j x_k \partial_k \partial_j - 3x_j \partial_j) = -\hbar^2 (x_j^2 \partial_k^2 - x_k x_j \partial_k \partial_j - 2x_j \partial_j) = -\hbar^2 (x_j^2 \partial_k^2 - x_k \partial_k x_j \partial_j - x_j \partial_j)$ (式中，第二个等号我们利用了 $\epsilon_{ijk} \epsilon_{ij'k'} = \delta_{jj'} \delta_{kk'} - \delta_{jk'} \delta_{kj'}$ ，这个等式读者可以直接验证，注意到列维-西维塔符号的全反对称性，以及所有指标只能在1, 2, 3中进行取值，这个等式其实不难验证。前面推导中的第四个等号我们利用了 $\partial_k x_j = x_j \partial_k + \delta_{kj}$ 和 $\partial_k x_k = x_k \partial_k + 3$ ，之所以出现3是因为要对指标 k 的三个取值进行求和。推导中的最后一个等号我们再次利用了 $x_j \partial_k = \partial_k x_j - \delta_{kj}$)，因此我们最终得到

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 (x_j^2 \partial_k^2 - x_k \partial_k x_j \partial_j - x_j \partial_j) \quad (4.75)$$

$$= -\hbar^2 [r^2 \nabla^2 - (r \partial_r)^2 - r \partial_r] \quad (4.76)$$

$$= -\hbar^2 [r^2 \nabla^2 - r \partial_r^2 r], \quad (4.77)$$

这里我们进一步利用了 $x_j^2 = r^2, \partial_k^2 = \nabla^2$ ，以及 $x_j \partial_j = \mathbf{x} \cdot \nabla = r \partial_r$ ， r 表示位置矢量的长度，在球坐标系中它就是径向坐标。有时候我们也会将上面这

个式子重写成

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \partial_r^2 r - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}, \quad (4.78)$$

后面我们会用这个表达式将球坐标中的动能算符表示成径向的动能算符和由角动量平方提供的转动动能算符之和。

但是, 除了角动量算符的平方以外, 我们还常常需要关心角动量算符的各个分量在不同坐标系中的形式。比方说, 引入下面的复坐标常常是很有用的,

$$x_{\pm} = x_1 \pm ix_2. \quad (4.79)$$

假设我们记 $\partial_{\pm} = \frac{\partial}{\partial x_{\pm}}$, 则很显然 $\partial_1 = \partial_+ + \partial_-$, $\partial_2 = i(\partial_+ - \partial_-)$, 因此 $L_z = L_3 = -i\hbar(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) = -i\hbar[i(x_+ + x_-)(\partial_+ - \partial_-) + i(x_+ - x_-)(\partial_+ + \partial_-)]/2 = \hbar[x_+\partial_+ - x_-\partial_-]$, 即

$$L_z = \hbar[x_+\partial_+ - x_-\partial_-]. \quad (4.80)$$

另外, 注意到 ∂_+ 和 ∂_- 的相互独立性, 也就是两者的相互对易性, 我们还可以很容易地得到

$$\partial_1^2 + \partial_2^2 = 4\partial_+\partial_-. \quad (4.81)$$

另外, 由于我们要求解的问题(4.71)是球对称的, 即 $V(r)$ 是球对称的, 因此球坐标也将会非常有用, 它的定义是 $x_1 = r \sin \theta \cos \phi$, $x_2 = r \sin \theta \sin \phi$, $x_3 = r \cos \theta$ 。很显然我们有 $x_{\pm} = x_1 \pm ix_2 = r \sin \theta e^{\pm i\phi}$ 。这些就是我们将要用到的几种坐标之间的联系。

下面让我们来考察因为 ϕ 的无穷小改变 $\delta\phi$ 所引起来的坐标改变 δx_{\pm} , 由 x_{\pm} 的球坐标表达式, 很显然结果是 $\delta x_+ = ix_+ \delta\phi$, $\delta x_- = -ix_- \delta\phi$, 也即是说 $\delta\phi$ 既会引起 x_+ 的无穷小改变, 又会引起 x_- 的无穷小改变(但显然 $\delta\phi$ 与 x_3 无关)。因此假设有一个函数 $f(x_+, x_-, x_3)$, 我们考虑它在 $\delta\phi$ 的改变下所产生的无穷小改变 δf , 那就必然有 $\frac{\partial f}{\partial \phi} = \frac{\delta f}{\delta \phi} = \frac{\delta x_+}{\delta \phi} \frac{\partial f}{\partial x_+} + \frac{\delta x_-}{\delta \phi} \frac{\partial f}{\partial x_-} = i(x_+ \frac{\partial}{\partial x_+} - x_- \frac{\partial}{\partial x_-})f$, 注意到函数 f 是任意的, 因此我们可以将这个结果应用到(4.80)式, 就会得到

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (4.82)$$

从这个式子我们可以看到, 在球坐标中 L_z 只和角度坐标有关, 而和径向坐标 r 无关。然而, 在角动量的三个分量中, L_z 在物理上并没有任何特殊的地方, 因此这也就告诉我们, 在球坐标中, 另外两个分量的角动量算符 L_x, L_y 同样也只会和角度坐标 θ, ϕ 有关, 而和径向坐标 r 必然是无关的。当然由于球坐标的具体定义式对于 x, y, z 三个分量的不对称性, 所以算符 L_x 和 L_y 在球坐标中的具体表达式可能会比 L_z 的表达式复杂一些, 但是这并不意味着它们在物理上有什么不平等性, 正因为如此, 我们只需要选择 L_z 来研究通常就够了。

4.4.2 能级和径向波函数

下面我们开始具体的求解过程。首先利用(4.78)式, 我们可以将要求解的定态薛定谔方程(4.71)重写为,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \partial_r^2 r + \frac{\mathbf{L}^2}{2m_e r^2} + V(r) \right) \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}). \quad (4.83)$$

这个方程的下面这一等价形式也将是有用的,

$$\mathbf{L}^2 \psi(\mathbf{x}) = 2m_e r^2 (E - V(r)) \psi(\mathbf{x}) + \hbar^2 r \partial_r^2 r \psi(\mathbf{x}). \quad (4.84)$$

让我们首先来考察波函数在坐标原点附近的行为。很显然, 核外电子出现在坐标原点处的概率必定是有限的, 而且由于 $V(r) \sim 1/r$, 从而 $r^2 V(r) \sim r$, 因此对于核外电子来说, 坐标原点并不存在什么根本的奇异性, 所以波函数 $\psi(\mathbf{x})$ 在坐标原点附近必然是有限且光滑的。因此, 我们可以在直角坐标中将波函数 $\psi(\mathbf{x})$ 在坐标原点处进行泰勒展开, 假设领头阶是 l 阶小量($l \geq 0$ 且是整数), 这也即是说, 我们假设在泰勒展开的领头阶, 波函数是三个直角坐标分量 $x_i, i = 1, 2, 3$ 的 l 阶齐次函数, 之所以得是齐次当然是因为所有的领头阶小量都得有相同的阶(比方说 $ax_1^2 + bx_1x_2 + cx_2x_3 + dx_3^2$ 就是一个2阶齐次函数), 在球坐标中由于每一个 x_i 的球坐标表达式中都含有一个 r , 因此我们可以将这个 l 阶齐次函数记为 $Cr^l Y(\theta, \phi)$ (C 是一个常数)。

为了考察方程(4.84)在坐标原点附近, 即当 $r \rightarrow 0$ 时的行为。我们注意到 $V(r) \sim 1/r$, 而能量 E 是一个常数, 因此当 $r \rightarrow 0$ 时, $2m_e r^2 (E - V(r)) \psi(\mathbf{x})$ 将是一个 $l + 1$ 阶小量, 而 $r \partial_r^2 r \psi(\mathbf{x}) \sim (r \partial_r^2 r)(Cr^l Y(\theta, \phi)) = C \cdot l(l + 1) r^l Y(\theta, \phi) + O(r^{l+1})$ ($O(r^{l+1})$ 表示更高阶的小量)。因此, 保留到领头

的 l 阶而忽略所有的更高阶小量，我们可以看到方程(4.84)在原点附近将变成 $\mathbf{L}^2(r^l Y(\theta, \phi)) = l(l+1)\hbar^2 r^l Y(\theta, \phi)$ ，同时，由于角动量算符只和角度坐标有关，而和径向坐标 r 无关，所以我们可以将这个等式两边的 r^l 消去，从而得到

$$\mathbf{L}^2 Y(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y(\theta, \phi). \quad (4.85)$$

这个方程意味着， \mathbf{L}^2 的本征值为 $l(l+1)\hbar^2$ ， l 是非负整数，而且前面通过直角坐标分量的 l 阶齐次函数所引入的 $Y(\theta, \phi)$ 正是 \mathbf{L}^2 的本征函数。由于 l 是非负整数，所以这里隐含着一个重要的物理结论，即角动量的大小是量子化的，但是具体的量子化形式和玻尔在其氢原子模型中所假设的形式有所不同。而这里的 l ，就称为角量子数，因为它决定了角动量的大小。

现在我们考察方程(4.84)在任意位置的一般行为。注意到方程(4.84)等号左边的算符只涉及到角度坐标而与径向坐标无关，而等号右边的算符只涉及到径向坐标而与角度坐标无关，因此我们可以知道，这个方程必定可以分离变量，即必有 $\psi(\mathbf{x}) = R(r)A(\theta, \phi)$ 的形式。但是由于 $r \rightarrow 0$ 时， $\psi(\mathbf{x}) = R(r)A(\theta, \phi) \rightarrow Cr^l Y(\theta, \phi)$ ，因此必有 $A(\theta, \phi) = Y(\theta, \phi)$ ，即

$$\psi(\mathbf{x}) = R(r)Y(\theta, \phi), \quad (4.86)$$

而且径向波函数 $R(r)$ 在 $r \rightarrow 0$ 时的渐进行为是

$$R(r) \rightarrow Cr^l + \dots \quad (4.87)$$

另外，由于我们考察的是束缚态，因此由通常的波函数归一化条件 $\int_{S^2} \sin \theta d\theta d\phi \int_0^\infty r^2 dr R^2 |Y|^2 = 1$ 可以知道，径向波函数和角度部分波函数分别都得归一化，而且在径向波函数的归一化中，由于 $\int_0^\infty dr r^2 R^2(r)$ 在无穷远处的积分贡献必须有限，这就意味着当 $r \rightarrow +\infty$ 时，必有

$$rR(r) \rightarrow 0. \quad (4.88)$$

将波函数的表达式(4.86)代入定态的薛定谔方程(4.83)，并利用 \mathbf{L}^2 的本征方程(4.85)，进而将方程(4.83)两边的角度部分波函数 $Y(\theta, \phi)$ 消掉，我们就可以得到径向波函数 $R(r)$ 所满足的方程，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \partial_r^2 r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r). \quad (4.89)$$

下面我们令 $rR(r) = u(r)$, 则方程(4.89)可以转化为一个关于 $u(r)$ 的方程,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \partial_r^2 u(r) + \left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} + V(r) \right) u(r) = Eu(r). \quad (4.90)$$

如果我们将 r 看作是定义在 $[0, +\infty)$ 区间上的一维坐标变量, 那么这个方程(4.90)就是一个标准的一维定态薛定谔方程, 其中有效的势能为 $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{\alpha \hbar}{r}$. 而且由原来的径向波函数渐进条件(4.87)和(4.88)可以知道, $u(r)$ 必定满足如下渐进条件

$$r \rightarrow 0 : \quad u(r) \rightarrow Cr^{l+1} \quad (4.91)$$

$$r \rightarrow +\infty : \quad u(r) \rightarrow 0. \quad (4.92)$$

我们可以引入无量纲的坐标 ρ 以及无量纲的能量 ϵ ,

$$\rho = r/a_0, \quad \epsilon = E / \left(\frac{1}{2} m_e \alpha^2 c^2 \right). \quad (4.93)$$

从而可以将方程(4.90)变成,

$$\partial_\rho^2 u(\rho) + \left(\epsilon + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0. \quad (4.94)$$

考虑这个方程在 $\rho \rightarrow +\infty$ 时的渐进形式, 会得到 $\partial_\rho^2 u(\rho) + \epsilon u(\rho) = 0$, 如果 $\epsilon > 0$, 那么这个方程的解是 \cos 和 \sin 形式的振荡解, 因此不可能满足无穷远处的衰减型边界条件(4.92)。这也即是说, 仅当 $\epsilon < 0$ 时才可能有束缚态的存在。为此我们令 $\epsilon = -\gamma^2 (\gamma > 0)$, 因此渐进方程就是 $\partial_\rho^2 u(\rho) - \gamma^2 u(\rho) = 0$, 渐进解就是 $u(\rho) \rightarrow e^{-\gamma\rho}$ (还有一个指数增长的特解由于不满足无穷远处的衰减边界条件而必须抛弃)。因此, 令 $u(\rho) = e^{-\gamma\rho} f(\rho)$, 代入方程(4.94), 就可以得到一个关于函数 $f(\rho)$ 的微分方程

$$\left(\partial_\rho^2 - 2\gamma \partial_\rho + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f(\rho) = 0. \quad (4.95)$$

由于在 $\rho \rightarrow 0$ 处的边界条件(4.91), 我们可以知道 $f(\rho)$ 在原点附近泰勒展开的领头阶一定有 ρ^{l+1} 这样的形式。不妨设整个 $f(\rho)$ 可以写成级数形式

$$f(\rho) = \sum_{k=l+1}^{+\infty} a_k \rho^k, \quad (4.96)$$

注意由于渐进条件, 这个级数必然是从 $l+1$ 阶开始的。将这个级数代入方程(4.95), 并比较所得结果每一个 ρ^k 项的系数, 我们可以得到, 对于领头

阶 $k = l + 1$, 方程给出来的是一个恒等式, 这是不出意外的, 因为在我们求解整个问题的一开始我们就已经考察过方程在坐标原点处的领头阶了, 我们的边界条件(4.91)就是这样导出来的。对于 $k \geq l + 2$ 阶, 方程给出来的是一个递推关系

$$a_k = 2 \frac{\gamma(k-1) - 1}{k(k-1) - l(l+1)} a_{k-1}. \quad (4.97)$$

因此给定 a_{l+1} 我们就能递推出后面所有的 a_k , 这也就是说, 我们能够将整个函数 $f(\rho)$ 确定到只剩下一个整体的未定常数 a_{l+1} 。到此为止好像我们已经完成所有的求解了。

但, 还是让我们来检验一下这个解不符合物理要求, 为此我们取 $k \rightarrow \infty$, 则根据递推关系(4.97)就有

$$\frac{a_k}{a_{k-1}} \rightarrow \frac{2\gamma}{k}. \quad (4.98)$$

注意到 $e^{2\gamma\rho} = \sum_k \frac{(2\gamma)^k}{k!} \rho^k$, 其相邻两个展开项系数之比正好是 $\frac{2\gamma}{k}$, 因此这就意味着当 $\rho \rightarrow +\infty$ 时(这时候级数展开的高阶项是绝对主导的), 我们解出来的 $f(\rho) \rightarrow e^{2\gamma\rho}$ 。而这又进一步意味着原来的 $u(\rho) = e^{-\gamma\rho} f(\rho) \rightarrow e^{\gamma\rho}$, 显然不满足无穷远处的衰减性边界条件。因此, 我们找到的这个解实际上不符合物理要求。

那这是不是意味着这个问题没有解呢? 不是的, 问题在于我们刚才的分析中其实有一个漏洞, 如果 γ 是一个任意的大于0的实数, 那我们刚才的分析没有任何问题, 这时候的确不存在满足物理要求的解。但是, 如果

$$\gamma = \frac{1}{n}, \quad (4.99)$$

这里 n 是某个正整数(即 $n \geq 1$), 那我们的递推关系(4.97)就会在 $k = n + 1$ 的地方截断。也就是说我们将有 $a_{n+1} = 0$, 那么根据递推公式(4.97), 此后所有 $k > n + 1$ 的系数 a_k 也都会等于0。因此这时候我们解出来的 $f(\rho)$ 其实是一个 n 次多项式(这时候我们不能再任意取 $k \rightarrow +\infty$ 了, (4.98)式的分析也就不再适用了), 它在无穷远处当然不会指数增长, 那这时候关于 $u(\rho) = e^{-\gamma\rho} f(\rho)$ 在无穷远处的衰减性边界条件(4.92)就能够得到满足, 相应的解就是符合物理要求的。当然, 需要注意的是, 由于 n 次多项式 $f(\rho)$ 的所有级数阶都必须大于等于 $l + 1$, 所以我们有

$$l + 1 \leq n. \quad (4.100)$$

也就是说, 对于任意正整数 n , 任意非负整数 l , 只要它们满足 $l \leq n-1$, 那就有一个符合物理要求的解, 我们记为 $f_{nl}(\rho)$ 。利用 $f_{nl}(\rho)$ 我们最终就能得到相应的径向波函数, 为了强调它依赖于 n 和 l , 现在我们将之记为 $R_{nl}(r)$,

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r} = N_{nl} e^{-\frac{r}{na_0}} F_{nl}(r/a_0), \quad (4.101)$$

其中 $F_{nl}(\rho) = f_{nl}(\rho)/\rho$ 是一个 $n-1$ 次多项式, 其最低次项为 ρ^l 项, 式中 N_{nl} 为归一化系数。对于这种符合物理要求的解, 我们的无量纲能量 $\epsilon = -\gamma^2 = -1/n^2$, 因此也就意味着最初的能量本征值 E 必须满足

$$E = -\frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{2} m_e \alpha^2 c^2 \right). \quad (4.102)$$

这正是完全正确的能够成功解释氢原子光谱数据的能级公式。

但是, 现在我们已经比玻尔多得到一些东西了, 注意到能级公式(4.102)只依赖于 n , 而和角量子数 l 无关, 因此通常将 n 称为主量子数。也就是说, 给定主量子数 n , 我们不只会有一个本征态的解, 而是所有满足 $l \leq n-1$ 的解 $R_{nl}(r)$ 都对应相同的能量本征值, 这些不同 l 的解是简并的。能级简并这是玻尔模型不可能描述的。

实际上, 径向波函数可以用标准的特殊函数表达出来, 为了方便读者查阅, 我们将结果写在下面

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l e^{-r/na_0} \left[\left(\frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \\ &\times F(-n+l+1; 2l+2; 2r/na_0). \end{aligned} \quad (4.103)$$

式中 $F(a; b; x)$ 为合流超几何函数。这个径向波函数已经归一化了, 满足归一化条件 $\int_0^{+\infty} u_{nl}^2(r) dr = \int_0^{+\infty} R_{nl}^2(r) r^2 dr = 1$ 。

散射态

以上我们关心的都是束缚态, 因为我们是在研究氢原子, 假设认为原子核近似不动, 那氢原子的定义就是一个电子在库伦势场 $V(r) = -\frac{\alpha c \hbar}{r}$ 中的束缚态。但是, 电子在库伦势场中除了有束缚态, 其实还有散射态, 对应于电子被库伦势场 $V(r) = -\frac{\alpha c \hbar}{r}$ 散射的问题。假设电子距离原子核无穷远时的动量大小为 $\hbar k$, 那么这种散射态的能量就应该是连续谱 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$, 因为距离无穷远时, 电子当然可以看成是自由粒子。

我们可以这样来得到散射态的径向波函数: 首先, 我们注意到氢原子的能级为 $E = -\frac{1}{2}m_e(\alpha c)^2/n^2$, 因此 $\frac{1}{n} = \sqrt{\frac{-2E}{m_e(\alpha c)^2}}$ 当然, 这里 E 是小于 0 的。现在, 假设我们将 E 解析延拓到 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} > 0$ 的散射态情形, 那这时候 $\frac{1}{n}$ 就应该延拓成

$$\frac{1}{n} = ik \frac{\hbar}{m_e \alpha c} = ika_0. \quad (4.104)$$

最后, 我们将这个新的解析延拓后的 n 值代入径向波函数(4.103), 从而就可以得到散射态的径向波函数 $R_{kl}(r)$

$$R_{kl}(r) = C_{kl}(2kr)^l e^{-ikr} F\left(\frac{i}{ka_0} + l + 1; 2l + 2; 2ikr\right). \quad (4.105)$$

这里我们已经注意到, 由于散射态波函数在无穷远处不趋于零, 无法进行通常的归一化, 所以我们干脆保留了一个整体常数 C_{kl} 。

4.4.3 球谐函数

上一节的求解过程虽然得到了一些最重要的物理结论, 但是我们仅仅只求出了径向波函数的具体形式, 对于角度部分的波函数 $Y(\theta, \phi)$, 我们只有两个一般性的结论: 第一, 当把 $r^l Y(\theta, \phi)$ 用直角坐标来表达时, 它是三个直角坐标分量的齐次度为 l 的齐次函数, 也就是我们上一节所谓的 l 阶齐次函数, 这里我们将把它记为 $G_l(\mathbf{x})$, 当然这个记号和原来的 $r^l Y(\theta, \phi)$ 仅仅只有坐标系的不同, 因此

$$G_l(\mathbf{x}) = r^l Y(\theta, \phi), \quad (4.106)$$

第二, $r^l Y(\theta, \phi)$ 满足 \mathbf{L}^2 的本征方程(4.85)。但是, 我们还没有解出 $Y(\theta, \phi)$ 的具体表达式, 这一节我们就来完成这件事情。

为了具体解出 $r^l Y(\theta, \phi)$, 关键就是要求解本征方程(4.85)。最简单地做到这一点的办法是, 注意到 \mathbf{L}^2 和拉普拉斯算符 ∇^2 之间的关系式(4.77)和(4.78), 我们很容易验证, \mathbf{L}^2 的本征方程(4.85)其实等价于下面的方程

$$\nabla^2(r^l Y(\theta, \phi)) = \nabla^2 G_l(\mathbf{x}) = 0. \quad (4.107)$$

这个方程在直角坐标中是最容易求解的, 或者等价地说在 $\{x_+, x_-, x_3\}$ 坐标中是最容易求解的, 原因在于, 首先, 拉普拉斯算符在直角坐标中的形式远比球坐标简单, 更重要的原因是, 我们已经知道了 $r^l Y(\theta, \phi)$ 在直角坐标,

或者等价的在 $\{x_+, x_-, x_3\}$ 坐标中是一个齐次函数 $G_l(\mathbf{x})$, 而这样的函数在数学上处理起来比其它函数远为简单。

下面我们将主要采用 $\{x_+, x_-, x_3\}$ 坐标, 这其实是因为一会儿我们还要接着研究 L_z 的本征波函数, 而 L_z 在 $\{x_+, x_-, x_3\}$ 坐标中的表达形式(4.80)比它在更通常的直角坐标中的表达形式还要容易处理一些。

由于公式(4.81), 我们容易知道 $\nabla^2 = \partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2 = 4\partial_+\partial_- + \partial_3^2$, 所以我们可以将方程(4.107)改写成

$$(4\partial_+\partial_- + \partial_3^2)G_l(x_+, x_-, x_3) = 0. \quad (4.108)$$

注意这个方程是一个线性方程, 所以所有可能解所构成的解空间一定是一个线性空间, 再加上 G_l 是齐次函数, 那这个方程其实就很容易求解。比方说, 对于 $l = 2$ 的情况, $G_2(x_+, x_-, x_3)$ 有如下五个线性无关的特解

$$x_+^2, x_+x_3, x_+x_- - 2x_3^2, x_-x_3, x_-^2. \quad (4.109)$$

人们很容易验证这五个解都满足方程(4.108), 因此它们的任意线性叠加也都是(4.108)的解。找到这些解的方法很简单, 比方说, 由于 G_2 的齐次度是2, 你可以假设 $G_2 = ax_+x_- + bx_3^2$, 代进方程(4.108), 你很容易发现仅当 $b = -2a$ 时, 方程(4.108)才能满足, 这就得到了特解 $x_+x_- - 2x_3^2$, 你作其它的不同假设就会得到不同的特解。如果你一开始假设一个最一般性的2阶齐次函数, 那代入方程(4.108), 你将得到所有上面5个特解的线性组合, 这也就是 $l = 2$ 时的通解。这种方法显然可以推广到任意 l 的情形。

(4.109)式给出来的这个例子足以说明, 给定一个 l , G_l 有多个线性无关的可能解, 由于方程(4.108)与 \mathbf{L}^2 的本征方程等价, 这也就是说, \mathbf{L}^2 对应同一个本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 的本征态是简并的, 有多个可能性。那么如何进一步区分这些简并的解呢? 这就要用到角动量算符的 z 分量 L_z , 尤其是用到它的 $L_z = \hbar(x_+\partial_+ - x_-\partial_-)$ 的形式, 简单来说就是, 我们可以取方程(4.108)的每一个线性独立的特解同时为 L_z 的本征波函数。比方说, 由 $L_z = \hbar(x_+\partial_+ - x_-\partial_-)$ 人们很容易验证, 上面式子(4.109)给出来的5个 $l = 2$ 的特解在 L_z 的作用下分别具有如下本征值

$$2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar. \quad (4.110)$$

所以我们常将这5个解分别记作

$$G_{22} \sim x_+^2, G_{21} \sim x_+x_3, G_{20} \sim x_+x_- - 2x_3^2, G_{2-1} \sim x_-x_3, G_{2-2} \sim x_-^2 \quad (4.111)$$

很容易看出来, 这里我们给齐次函数 G 添上的第2个指标是用来标记 L_z 的不同本征值相对应的量子数的。

其实人们很容易验证, 对于任何变量 x , 如果将算符 $x\partial_x$ 作用在 x 的某个 p 次齐次函数上 x^p 上, 那么得到的就是 px^p , 即 $x\partial_x(x^p) = px^p$. 也即是说, $x\partial_x$ 这样的算符的作用效果其实就相当于数一个表达式关于 x 的齐次度。

很显然, 算符 $L_z/\hbar = x_+\partial_+ - x_-\partial_-$ 就是由两个这样的数齐次度的算符相减而构成的, $x_+\partial_+$ 数的是一个表达式中含有 x_+ 因子的多少次方, $x_-\partial_-$ 数的是同一个表达式中含有 x_- 因子的多少次方, 假设某一个表达式为 $x_+^{\nu_+}x_-^{\nu_-}$, 那么这个表达式对应的 L_z/\hbar 的本征值就是 $\nu_+ - \nu_-$, 通常记为 m , 即

$$m = \nu_+ - \nu_- \quad (4.112)$$

而所谓我们取方程(4.108)的解同时是 L_z 的本征态, 也就是要求任何一个给定解中的每一项都有相同的 $\nu_+ - \nu_- = m$, 这时候这个 $\nu_+ - \nu_- = m$ 就是这个解在 L_z/\hbar 作用下的本征值, 我们就是利用不同的 m 来区分方程(4.108)的那些相互简并的解。

那么给定一个 l , 有多少个不同的 $m = \nu_+ - \nu_-$ 呢? 由于 l 是 G_l 总的齐次度数, 其中除了 x_+, x_- 的贡献之外还要包括 x_3 的贡献, 所以很显然, 任何解中的所有项都得满足

$$\nu_+ + \nu_- \leq l. \quad (4.113)$$

满足这个约束的 $\nu_+ - \nu_-$ 有多少可能取值呢? 稍微想一下就能发现(你可以注意 $\nu_+ - \nu_-$ 必然是整数, 而且 $-\nu_+ - \nu_- \leq \nu_+ - \nu_- \leq \nu_+ + \nu_-$), 只有下面这些可能取值

$$l, l-1, l-2, \dots, -l+1, -l, \quad (4.114)$$

即一共有 $2l+1$ 个不同的可能性。

(4.114)式给出来的就是在给定 l 的前提下, L_z/\hbar 的本征值 m 的所有可能性, 通常我们把每一个可能性所对应的本征波函数记为 G_{lm} , 因此通过引入量子数 m , 我们就可以将 L^2 的所有简并本征态一一区分开来。也就是说, G_{lm} 同时满足如下本征方程

$$\mathbf{L}^2 G_{lm} = l(l+1)\hbar^2 G_{lm}, \quad L_z G_{lm} = m\hbar G_{lm}, \quad (4.115)$$

其中, m 的 $2l+1$ 个不同取值由(4.114)式给出。

解出来所有的 G_{lm} 以后, 利用 $x_{\pm} = r \sin \theta e^{\pm i\phi}$, $x_3 = r \cos \theta$ 变换到球坐标中, 再根据定义(4.106), 我们就能得到角度部分的波函数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$,

$$G_{lm} = r^l Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (4.116)$$

通常人们称 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ 为球谐函数, 它显然满足

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}, \quad L_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}. \quad (4.117)$$

比方说, 对于前面给出来的5个 $l=2$ 的本征函数(4.109), 我们很容易变换到球坐标中得到5个相应的球谐函数

$$Y_{22} \sim \sin^2 \theta e^{i2\phi}, \quad Y_{21} \sim \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}, \quad Y_{20} \sim \sin^2 \theta - 2 \cos^2 \theta, \quad (4.118)$$

$$Y_{2-1} \sim \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}, \quad Y_{2-2} \sim \sin^2 \theta e^{-i2\phi}, \quad (4.119)$$

当然, 我们没有对这些球谐函数进行归一化, 不过人们很容易将它们在单位球面上进行归一化。

由于球谐函数是角度部分的波函数, 它所对应的量子态由量子数 l, m 标记, 因此可以记为 $|l, m\rangle$, 根据(4.117), 它将同时是 \mathbf{L}^2 和 L_z 的本征态, 满足

$$\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle, \quad L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle. \quad (4.120)$$

作为厄米算符的不同本征态, $|l, m\rangle$ 当然是正交归一的, 满足

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (4.121)$$

另外, 利用波函数与狄拉克符号的关系, 我们也可以将球谐函数写成

$$\langle \theta, \phi | l, m \rangle = Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (4.122)$$

作为球面上的位置本征态, $|\theta, \phi\rangle$ 当然满足

$$\int d\Omega |\theta, \phi\rangle \langle \theta, \phi| = 1. \quad (4.123)$$

式中的积分是在整个单位球面上积分, Ω 为立体角, $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$, 因此通过插入(4.123)式, 我们就可以将正交归一关系(4.121)转化为球谐函数的正交归一关系

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (4.124)$$

我们正是利用这个式子来将球谐函数归一化的。

有时候我们也会将球坐标中的 θ, ϕ 角的方向用某个单位矢量 \mathbf{n} 来表示, 这时 $|\theta, \phi\rangle$ 态就可以记为 $|\mathbf{n}\rangle$, 球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ 就可以记为 $Y_{lm}(\mathbf{n})$ 。而球谐函数与相应狄拉克符号之间的关系就可以重写成

$$\langle \mathbf{n} | l, m \rangle = Y_{lm}(\mathbf{n}). \quad (4.125)$$

当然, 人们容易按照我们这一小节的方法求出任意球谐函数的表达式, 并将它们归一化。不过, 其实数学家们早就得到球谐函数的统一表达式了, 对于 $m \geq 0$, 它可以由下式给出

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{(-)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}, \quad (4.126)$$

另外还有

$$Y_{l-m}(\theta, \phi) = (-)^m Y_{lm}^*(\theta, \phi). \quad (4.127)$$

这两个式子就统一给出了所有的球谐函数。特别的, 从这些式子我们可以知道, 对于 $m = 0$ 的球谐函数 $Y_{l0}(\theta, \phi)$, 我们有

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta), \quad (4.128)$$

式中 $P_l(x)$ 为勒让德多项式。

4.4.4 理解元素周期表的神秘规律

到此为止就已经完成了我们对氢原子的量子力学研究。但是, 前面我们说过, 关于氢原子的这个研究只要作一个很平凡的推广, 就能用来理解元素周期表所呈现出来的2, 8, 18, 32...这样的规律。为此, 让我们来考察一个原子序数为 Z 的原子, 暂时让我们假设只有一个电子在围绕它的原子核运动, 我们来看一下这样一个系统会有什么样的能级和什么样的定态波函数。很显然, 现在的情况和氢原子其实是完全类似的, 只不过现在的库伦势能为

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\alpha\hbar}{r}. \quad (4.129)$$

很显然, 关于氢原子的所有推导和求解都可以照搬, 只需要将氢原子问题中出现的 αc 替换成 $Z\alpha c$ 就可以了。因此这也就意味着, 氢原子解中的 a_0 要替换成 a_0/Z , 而所得到的单电子能级现在应该是

$$-\frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{2} m_e Z^2 \alpha^2 c^2 \right). \quad (4.130)$$

相应的定态波函数 $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ 也完全类似于氢原子, 都可以写成径向波函数 $R_{nl}(r)$ 和球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ 的乘积,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (4.131)$$

也即是说, 每一个量子态要由三个量子数 (n, l, m) 来刻画, 当然 $0 \leq l \leq n-1$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, 而相同 n 不同 l, m 的所有量子态都是简并的。我们可以计算一下, 给定 n 的简并度是多少, 首先 m 有 $2l+1$ 种可能性, 其次 l 可以从0取到 $n-1$, 所以这个简并度就是

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (4.132)$$

对于 $n = 1, 2, 3, 4, \dots$, n^2 的简并度将给出1, 4, 9, 16..., 正如泡利所注意到的, 这串数字正好是元素周期表的2, 8, 18, 32...的一半。如果我们考虑到电子自旋, 由于自旋有自旋向上和自旋向下两种可能性, 那最终的简并度将正好是 $2n^2$, 与元素周期表的规律完全一致。

之所以单电子量子态的简并度能与元素周期表相吻合, 是因为我们可以设想, 核外电子是一个接着一个地加入到原子核外面的。作为一个初步的近似, 我们可以忽略不同电子之间的相互作用, 这样, 每一个新加进来的电子的量子力学处理都可以看是上面所论述的单电子问题。先加进来的电子会占据能量较低的那些量子态, 而由于泡利不相容原理, 一个量子态上只能占据一个电子, 后加进来的电子就只能占据其它的未被占据的量子态。电子就这样一个接着一个地从低能级填充到高能级, 直至填满 Z 个电子。根据这样的理解, 元素周期表的电子排布规律和单电子的量子态之间就能一一对应, 因此 $2n^2$ 的简并度正好对应元素周期表的规律也就不难理解了。

当然, 上面这幅物理图像在细节上有很多不对的地方。问题之一在于我们忽略了电子与电子之间的相互作用, 基于此人们不难想见, 即使我们只关心每一个核外电子所带来的能量增量, 由公式(4.130)所给出来的结果

肯定也是不对的, 因此根据这个结果而把每一个电子的贡献加起来得到的整个原子的能级也不会对。更何况, 除了电子间的相互作用之外, 还有一个严重的物理问题我们也没有考虑, 那就是全同性原理, 也就是说, 所有的电子是完全全同完全不可区分的。因此, 一个原子所有的核外电子之间也完全不可区分, 这一点也会给原子最终的能级带来不小的修正。当然, 怎么正确地算出任意一个原子的能级是原子物理学的专门研究课题, 所以我们还是到此为止吧。

4.4.5 习题

1. 请按照本节的方法计算出 $l = 3$ 时的7个球谐函数 $Y_{3\pm3}$ 、 $Y_{3\pm2}$ 、 $Y_{3\pm1}$ 、 $Y_{3\pm0}$, 并请将它们归一化。

2. 设 $|\psi_n\rangle$ 为某个系统 H 的束缚态, 满足定态薛定谔方程 $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ 。请证明

$$\frac{\partial E_n}{\partial g} = \langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial g} | \psi_n \rangle. \quad (4.133)$$

其中 g 为系统的某个任意参数, 也就是哈密顿量 H 中的某个任意参数。这个结果有时候也被称作 Hellmann-Feynman 定理。

3. 请利用上一题证明的 Hellmann-Feynman 定理, (1). 证明对于线性谐振子, 必有 $\langle n | T | n \rangle = \langle n | V | n \rangle$ 。(2). 对于氢原子的任何一个本征态 $|nlm\rangle$ (波函数为 ψ_{nlm}), 请计算 $\langle nlm | \frac{1}{r} | nlm \rangle$ 。(3). 对于氢原子定态 $|nlm\rangle$, 证明 $\langle nlm | T | nlm \rangle = -\frac{1}{2} \langle nlm | V | nlm \rangle$, 式中 $T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}$ 为动能算符。

4. 一量子的刚性转子, 转动惯量为 I , 哈密顿量为 $H = \frac{\mathbf{L}^2}{2I}$ 。求下列情况下的定态能量和定态波函数。(1). 转子绕一固定转轴转动。(2). 转子绕一固定点转动。

5. 假设用一半径为 R 的球形空腔将粒子束缚起来, 系统的势能为

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ +\infty, & r \geq R \end{cases}. \quad (4.134)$$

求粒子的能级和定态波函数。

4.5 朗道能级

4.5.1 朗道能级

让我们来考察一个在两维 $x - y$ 平面内运动的电子，电荷为 e (对于电子 e 当然为负，但为了公式简单，下面我们不妨默认 $e > 0$)，假设我们在垂直的 z 方向加上一个均匀磁场 B ，朗道发现，虽然并没有施加一个势阱将电子约束在有限的区域内，这个系统依然出现了能量量子化现象，这就是所谓的朗道能级。另外，这个系统的每一个量子化能级都有很高的简并度，包括基态能级。而且，这样一个两维系统并不是理论家们的虚构之物，实际上，后面我们将看到，它和所谓的量子霍尔效应密切相关。

根据我们在第三章中所学的知识，上面所说的这样一个系统的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{\Pi^2}{2m} = \frac{\Pi_x^2}{2m} + \frac{\Pi_y^2}{2m}. \quad (4.135)$$

式中 $\Pi = \mathbf{P} - e\mathbf{A}$ 就是所谓的力学动量，现在它当然只有 x, y 两个分量。根据第三章的知识我们知道， Π_x 和 Π_y 不对易，它们的对易子为

$$[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar e B_z = i\hbar e B. \quad (4.136)$$

不妨引入一个特征长度 l_B ，称之为磁长度，其定义是

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (4.137)$$

对于处于强度为1特斯拉的磁场中的电子，其磁长度约为 $2.5 \times 10^{-8}m$ 。因此，在 $2\pi l_B^2$ 面积上的磁通为 $B(2\pi l_B^2) = 2\pi\hbar/e = \Phi_0$ ，即刚好为一个磁通量子。

这个二次型的哈密顿量(4.135)和相应的对易关系(4.136)都很容易使我们想起线性谐振子。因此，下面我们引入产生湮灭算符 a 和 a^\dagger ，其定义是(注意到根据德布罗意关系， \hbar 除以长度将具有动量纲)

$$\left(\frac{\hbar}{l_B}\right)a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Pi_x + i\Pi_y), \quad \left(\frac{\hbar}{l_B}\right)a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Pi_x - i\Pi_y). \quad (4.138)$$

则根据(4.136)式可以验证， $[a, a^\dagger] = 1$ ，因此它们的确是产生湮灭算符。而且由这个产生湮灭算符的定义式(4.138)可以知道

$$\left(\frac{\hbar}{l_B}\right)^2 \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \left(\frac{\hbar}{l_B}\right)^2 \frac{1}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger) = \frac{1}{2} (\Pi_x^2 + \Pi_y^2). \quad (4.139)$$

从而我们就可以把系统的哈密顿量(4.135)重写成标准的谐振子形式

$$H = \hbar\omega_B \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \quad (4.140)$$

式中 $\hbar\omega_B = (\frac{\hbar}{l_B})^2/m$, 从而 $\omega_B = eB/m$, 称为回旋频率, 因为它就是经典物理里电荷受磁场洛伦兹力而作回旋运动的角频率。

因此, 由单自由度线性谐振子一节的推导可以知道, 产生湮灭算符的代数关系将意味着哈密顿量(4.140)的本征值是量子化的, 从而系统的能量是量子化的, 为

$$E_n = \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.141)$$

这就是朗道能级。很显然, 朗道能级的能级差 $\hbar\omega_B$ 正比于磁场强度, 磁场不强朗道能级的量子化效应就无法体现出来, 这就是量子霍尔效应为什么需要强磁场的原因之一。

为了进一步看清楚朗道能级的简并, 下面我们来求解一下定态波函数。我们首先关心的是基态波函数 $\psi_0 = \langle x, y|0 \rangle$ 。由基态的定义, 它得满足微分方程

$$a\psi_0 = 0. \quad (4.142)$$

为了求解上面这个方程, 我们需要选择一个确定的规范, 我们将选取 $(A_x, A_y) = \frac{B}{2}(-y, x)$ 的对称规范。从而 $\Pi_x = -i\hbar D_x = -i\hbar(\partial_x - i\frac{e}{\hbar}A_x) = -i\hbar(\partial_x + i\frac{1}{2}y/l_B^2)$ 。类似的, $\Pi_y = -i\hbar D_y = -i\hbar(\partial_y - i\frac{1}{2}x/l_B^2)$ 。则, 根据产生湮灭算符的定义式(4.138), 我们有

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hbar}{l_B}\right)a = -i\hbar \left[\frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y) + (x + iy)\frac{1}{4l_B^2} \right]. \quad (4.143)$$

在 $x - y$ 平面内引入复坐标 $w = x + iy$ 、 $\bar{w} = x - iy$ 。则有

$$a = -i\sqrt{2}l_B \left(\bar{\partial} + \frac{w}{4l_B^2} \right), \quad (4.144)$$

式中 $\bar{\partial} = \frac{\partial}{\partial \bar{w}} = \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y)$ 。同样的, 我们也有

$$a^\dagger = -i\sqrt{2}l_B \left(\partial - \frac{\bar{w}}{4l_B^2} \right), \quad (4.145)$$

式中 $\partial = \frac{\partial}{\partial w} = \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y)$ 。

因此，我们要求解的基态波函数方程(4.142)就等价于

$$\left(\bar{\partial} + \frac{w}{4l_B^2}\right)\psi_0(w, \bar{w}) = 0. \quad (4.146)$$

令 $\psi_0(w, \bar{w}) = e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}} f(w, \bar{w})$ ，则由这个 ψ_0 的方程可以得到

$$\bar{\partial} f(w, \bar{w}) = 0, \quad (4.147)$$

从而 $f(w, \bar{w})$ 是一个任意的全纯函数，记为 $f(w)$ 。因此，朗道能级的基态波函数为

$$\psi_0(w, \bar{w}) = f(w) e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}}. \quad (4.148)$$

由于任意全纯函数都可以给出一个基态，所以朗道能级的基态高度简并。

将产生算子 a^\dagger 不断作用在基态 ψ_0 上就可以得到其它的激发态。由产生算子的表达式(4.145)可知，朗道第 n 能级的波函数 $\psi_n(w, \bar{w})$ 将为

$$\begin{aligned} \psi_n(w, \bar{w}) &\sim \left(\partial - \frac{\bar{w}}{4l_B^2}\right)^n \left(e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}} f(w)\right) \\ &= e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}} \left[e^{\frac{|w|^2}{4l_B^2}} \left(\partial - \frac{\bar{w}}{4l_B^2}\right) e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}}\right]^n f(w) \\ &= e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}} \left(\partial - \frac{\bar{w}}{2l_B^2}\right)^n f(w). \end{aligned} \quad (4.149)$$

可见任意朗道能级波函数中都包含一个和基态波函数一样的未定全纯函数 $f(w)$ ，因此任意朗道能级都高度简并，并且简并度和基态一模一样。

那么，基态朗道能级的简并度是多少呢？为了确定这一点，我们可以将全纯函数 $f(w)$ 展开成级数形式 $f(w) = \sum_{m=0}^{+\infty} c_m w^m$ ，很显然，这个级数的每一项都给出一个基态，因此任意基态应该记成

$$\psi_{0,m} \sim w^m e^{-\frac{|w|^2}{4l_B^2}}. \quad (4.150)$$

实际上， $\psi_{0,m}$ 同时是角动量算符 L_z 的本征态，本征值为 $m\hbar$ 。这是因为，在2维复坐标中， L_z 可以写成 $L_z = \hbar(w\partial - \bar{w}\bar{\partial})$ (前面在处理氢原子时，我们实际上已经知道这个结果了，只不过在那里， w 记作 x_+ ， \bar{w} 记作 x_-)。很容易验证 $(w\partial - \bar{w}\bar{\partial})\psi_{0,m} = m\psi_{0,m}$ ，所以 $\psi_{0,m}$ 的角动量量子数为 m 。

波函数 $\psi_{0,m}$ 呈环状，其概率密度 $|\psi_{0,m}|^2$ 最大的地方为一个半径 r_m 的圆周，

$$r_m = \sqrt{2m}l_B. \quad (4.151)$$

因此 $\psi_{0,m}$ 包围的面积为 $\pi r_m^2 = 2\pi l_B^2 m$ 。当然， $\psi_{0,m-1}$ 的半径要小一些，它所包围的面积是 $2\pi l_B^2 (m-1)$ 。这相邻两个态的面积差为 $2\pi l_B^2$ ，这个面积上的磁通正好是一个磁通量子 Φ_0 。因此，这也就是说，面积每增加一个磁通量子就增加了一个量子态，即每一个磁通量子对应一个量子态。所以简并基态的总数目其实就等于 $x-y$ 平面上能通过的磁通量子数 N_Φ ，假设整个材料平面的面积是 S ，由于它的每一个 $2\pi l_B^2$ 面积的磁通为一个磁通量子，所以

$$N_\Phi = \frac{S}{2\pi l_B^2} = \frac{eBS}{2\pi\hbar}. \quad (4.152)$$

显然，每一个朗道能级都高度简并！而电子的量子态要用两个量子数 n 和 m 来标记，其中 n 标记朗道能级， m 标记轨道角动量量子数，这样的量子态可以记作 $|n, m\rangle$ ，相应的波函数可以记为 $\psi_{n,m}$ ， n 相同 m 不同的所有量子态都是简并的。

值得注意的是，朗道能级是指单个电子的能级，而不是整个二维材料的能级，前面所说的基态简并也是指单电子的基态简并，而不是整个二维材料的基态简并。整个二维材料里面有大量的电子，它的最低能态不见得简并。比方说假如这些电子间没有相互作用，因此每一个电子都独立的在填充朗道能级，考虑到泡利不相容原理，一个单电子量子态上只能填充一个电子，假如所有的电子刚好填充完某一个朗道能级，那这就没有任何自由度留下了，填充方法唯一，因此整个材料系统的基态(最低能态)反而没有任何简并。一块材料的基态是否有简并是一种很重要的特性，因为如果一个没有对称性保护的系统基态有简并，那它就很可能有长程量子纠缠，有拓扑序(否则的话这种简并早就被相互作用微扰破坏掉了)，这是人们正在研究的前沿课题之一。

4.5.2 习题

1. 请在 $A_x = -By$, $A_y = 0$ 的规范下重新求解朗道能级的本征波函数。由于这一规范有明显的沿着 x 轴的平移不变性，所以用来讨论长方形的二维材料薄片更为方便一些。现在假设一个这样的薄片长为 L_x 宽为 L_y ，请用

这个新规范下求解出来的波函数重新讨论朗道能级的简并度，并和文中对称规范下的结果相比较。

4.6 量子霍尔效应

4.6.1 经典霍尔效应

1879年Edwin Hall做了一个经典的实验，它让电流沿着 x 方向通过一个二维薄片(即片的厚度相对可以忽略)，然后在垂直于薄片平面的 z 方向加上一个均匀磁场 B ，如图(4.4)所示。霍尔发现，在薄片的 y 方向出现

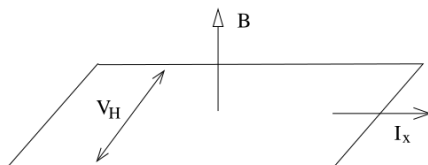


图 4.4: 经典霍尔效应

了电势差 V_H ，而且 V_H 与电流强度 I 成正比。这个实验的不寻常之处在于电压和电流不在一个方向上，因此意味着出现了一种新的横向电阻 ρ_{xy} ，它把 x 方向的电流和 y 方向的压降 V_H 联系起来， $V_H = \rho_{xy}I$ 。或者用电导率 $\sigma_{xy} = 1/\rho_{xy}$ 来写即是

$$I = \sigma_{xy}V_H. \quad (4.153)$$

这就是经典霍尔效应，它的解释并不难。实际实验中载流子往往是电子，它们的电荷 e 当然是负的，不过下文的推导中我们都默认 $e > 0$ 来进行分析， $e < 0$ 情形的推导我们留给读者。经典霍尔效应的原因是，电子在磁场中受洛伦兹力的作用会发生偏转，从而在材料薄片 y 方向两个平行于 x 轴的侧面上就会积累正负电荷(注意整个材料是电中性的，载流子的电荷要与背景离子的电荷相平衡)，从而在 y 方向产生一个电场 E 。当达到稳定时，电子受到的洛伦兹力会和这个电场力相平衡，从而有

$$vB = E, \quad (4.154)$$

式中 v 是电子沿着 x 轴的漂移速度。另外，我们知道 x 方向的电流密度 J_x 为

$$J_x = nev, \quad (4.155)$$

式中 n 为电子数密度，即每单位体积内的电子数。因此我们即有

$$J_x = \frac{ne}{B} E, \quad (4.156)$$

将这个式子沿着 y 轴积分(注意 x 方向的电流密度按照定义是每单位横截线上的电流强度，因此 J_x 沿着横向的 y 轴积分就得到电流强度 I)，就会得到 $I = \frac{ne}{B} V_H$ ，这也即是说

$$\sigma_{xy} = \frac{ne}{B}. \quad (4.157)$$

从而我们知道横向电阻 $\rho_{xy} \propto B$ 。

我们知道，通常的电阻会引起能量的耗散，也就是发热。这种能量耗散主要是因为传导电子不断被背景离子散射而引起的，因为这种散射的结果是使得传导电子的运动方向发生随机的改变，从而将定向运动的能量转化为无规热运动的能量。很显然，这样的电阻将反比于电子在两次散射之间的平均飞行时间 τ (也称为散射时间)，或者说通常的电导应该正比于 τ 。但是从公式(4.157)我们清楚地看到，霍尔效应的横向电导 σ_{xy} 与散射时间 τ 无关。这就意味着，霍尔电阻根本不会带来能量的耗散！因此如果一块材料通常的电阻(我们称之为纵向电阻，电阻率记为 ρ_{xx})为零，而只有霍尔电阻的话，那它根本就不会消耗能量，因此也就不需要持续的能量输入！

在霍尔效应中，洛伦兹力不做功，因此当然不会输入能量，而横向的电场由于和电子运动的 x 方向相垂直，因此做功也为零，也不会输入能量。不过，在经典霍尔效应中，纵向电阻实际上并不为零，沿着霍尔薄片的纵向 x 方向实际上也要加一个电场，这个纵向电场的电能输入最终转化为了纵向电阻的能量耗散。

而且，似乎我们可以论证，在霍尔效应中纵向电阻不可能为零。这是因为，考虑到纵向和横向两种不同的电阻以后，电阻率就应该推广成一个 2×2 的矩阵，同样电导率也应该推广成一个 2×2 的矩阵，而电流密度和电场强度之间的关系式就应该推广成

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ -\rho_{xy} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}. \quad (4.158)$$

很显然，电导率矩阵和电阻率矩阵互为逆矩阵。通过求逆矩阵，我们可以得到

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}. \quad (4.159)$$

很显然，如果横向电阻率是零，那我们就有通常的 $\sigma_{xx} = 1/\rho_{xx}$ 。但是我们已经看到了，在霍尔效应中，横向电阻 $\rho_{xy} \neq 0$ 。根据(4.159)式，如果这时候 $\rho_{xx} = 0$ ，那么将有 $\sigma_{xx} = 0$ ，即纵向电导也等于0。因此这时候沿着纵向材料实际上是绝缘的，根本不会有纵向电流。而在霍尔效应中，沿着纵向 x 轴当然有电流，这就说明 $\sigma_{xx} \neq 0$ ，从而 $\rho_{xx} \neq 0$ 。

然而，下面我们将会看到，在量子霍尔效应中，一切都将变得不同！

4.6.2 整数量子霍尔效应

前面我们看到，在经典霍尔效应中，横向电阻 $\rho_{xy} \propto B$ 。然而1980 von Klitzing做了一个实验，它在很低的温度($\sim 1K$)下测量了一个比较干净的样品的霍尔电阻 ρ_{xy} ，实验结果如图(4.5)所示。从图中可以看到，当磁场

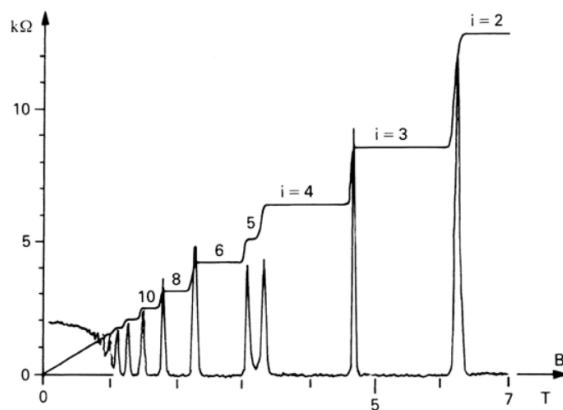


图 4.5: 整数量子霍尔效应。图中的两条曲线分别对应横向电阻率 ρ_{xy} 和纵向电阻率 ρ_{xx} 。

比较弱时，的确有 $\rho_{xy} \propto B$ 的线性关系。但是，当磁场变得很强时， ρ_{xy} 出现了量子化的台阶，也即是说，当磁场在一些合适的区域内变动时， ρ_{xy} 可以保持在一个平台值不变，然后随着磁场进一步增加到一定时候，它再迅

速地跳到下一个平台。而且仔细的研究发现, ρ_{xy} 的各个平台值刚好与正整数 $\nu \in \mathbb{Z}$ 成反比, 或者, 用霍尔电导 σ_{xy} 来说即是

$$\sigma_{xy} \propto \nu. \quad (4.160)$$

这是一种典型的量子化现象, 但是, 霍尔电阻或者霍尔电导的量子化是非常不同寻常的, 因为它们并不是一个微观系统的物理量, 而是一个宏观系统的物理量, 其中涉及到了大量电子的行为, 所以这是一种非常独特的现象, 问题是这一现象的物理解释是什么呢?

很快人们就意识到, 霍尔电导 σ_{xy} 的量子化可以用朗道能级来初步解释。首先, 在很低的温度下, 量子力学效应将变得重要, 因此通过霍尔薄片的电子气要用量子力学来描述。其次, 假设忽略电子间的相互作用, 那就可以近似将薄片中的每一个电子看成是独立的, 而单个电子在磁场中的量子力学行为就是我们上一小节研究过的朗道能级。因此我们可以将霍尔薄片中的电子气的量子态看成是在填充朗道能级, 从低能级逐渐往高能级填充, 由于泡利不相容原理, 每一个单电子量子态上只能填充一个电子, 因此每一个朗道能级都可以填充 $N_\Phi = \frac{eBS}{2\pi\hbar}$ 个电子, 假设每一个填满的朗道能级都会贡献一个单位的霍尔电导的话, 那如果有 ν 个朗道能级被填充, 最后的霍尔电导就将是 ν 单位, 这样就可以解释 $\sigma_{xy} \propto \nu$ 的量子化现象。

而且以上并不是一种牵强的解释。为了看清楚这一点, 我们可以将经典理论中的霍尔电导公式(4.157)作如下改写

$$\sigma_{xy} = \frac{neS}{BS} = \frac{eN}{\Phi} = \frac{eN}{N_\Phi \Phi_0} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{N}{N_\Phi}. \quad (4.161)$$

式中 S 是霍尔薄片的面积, 因此 $nS = N$ 是霍尔片内的电子总数, Φ 是霍尔片上的总磁通, 它当然等于 $N_\Phi \Phi_0$ 。由于每个朗道能级有 N_Φ 个量子态, 所以上面公式最终的 N/N_Φ 就是霍尔片内的电子总共能够填充的朗道能级数, 也就是 ν , 从而我们就得到

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \nu. \quad (4.162)$$

正好解释了 von Klitzing 发现的霍尔电导量子化现象。而且, 仔细检验人们还发现, 公式(4.162)给出的电导量子单位 $\frac{e^2}{2\pi\hbar} = \frac{e^2}{h}$ 也和实验值完全吻合。

由于朗道能级的简并度 $N_\Phi \propto B$, 所以当磁场较小时, 每个朗道能级的态数目就比较小, 这样电子就可以填充较多的朗道能级, 每一个被填充的朗道能级都贡献一个 $\frac{e^2}{2\pi\hbar}$ 的量子化霍尔电导, 从而磁场较小时的霍尔电导

就较大，霍尔电阻 ρ_{xy} 就较小。随着磁场的增加，每个朗道能级上的态数目 N_Φ 会逐步增加，从而原来占据在更高朗道能级的电子就会跃迁到低朗道能级多出来的态上，这样被电子占据的朗道能级数就会变少，霍尔电导就变小，而霍尔电阻 ρ_{xy} 就会跳跃到更高的台阶。这和实验(4.5)也完全吻合。

但是，von Klitzing的实验除了发现霍尔电导的量子化以外，它还发现，在霍尔电阻的每一个平台区，纵向电阻 $\rho_{xx} = 0$ ，如图(4.5)中的另一条实验曲线所显示。但，之前在讨论经典霍尔效应时我们已经论证过了，这似乎是不可能的！因为这将意味着纵向电导也是零，即 $\sigma_{xx} = 0$ ，从而意味着当磁场处在平台区的时候，霍尔片沿着纵向实际上是绝缘的，因此根本就不会有纵向电流。但纵向电流在实验中当然存在，我们就是利用纵向电流强度与横向电压的比值来测量霍尔电导 σ_{xy} 的。看起来我们的结果自相矛盾了。

对上面这个矛盾的解答揭示了量子霍尔效应的另一个重要特性。结果人们发现，的确，霍尔薄片的体内是绝缘的，没有纵向电流，纵向电流实际上沿着霍尔片的边缘流动，是一种新奇的边缘态。我们可以用如图(4.6)所示的经典图像来直观地理解这个物理机制。如这幅图所显示的，

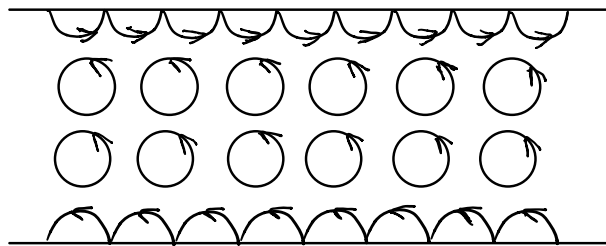


图 4.6: 量子霍尔效应的手性边缘态。

在磁场中，电子将作回旋运动，在霍尔薄片的体内，相邻电子的回旋运动刚好抵消，所以宏观上并没有电流，因此是绝缘的。但是，在靠近霍尔薄片的边缘处，电子的回旋运动会被边缘挡住，从而不能完成一个完整的回旋，这样的电子碰到边缘以后只能反弹，但是由于电子的回旋方向固定，所以最终靠近边缘的这个电子就会像图(4.6)中所示的那样运动。从这幅图中我们可以看得很清楚，从宏观上看，上边缘处的电子只能向右行，而下边缘处的电子只能向左行！这些右行和左行的电子就分别构成上下边缘上的边缘电流。所以在量子霍尔效应中，纵向电流沿着边缘流动。从图(4.6)中我们可以看得很清楚，上下边缘的电流流向相反。如果这两个边

缘没有电势差，那这两个流向相反的电流强度将刚好相等，从而纵向的总电流就是零，但是如果上下边缘有一个电势差，那它们的电流强度就不能完全抵消，从而会有一个净的纵向电流，它的强度正比于横向的这个电势差，比例系数就是霍尔电导 σ_{xy} 。

边缘电子只能沿着一个方向运动是一个很奇妙的性质。因为通常导线中的电子不是这样的，通常电子可以前进也可以后退，它的运动方向可以向正方向，也可以向负方向。这样的电子碰到障碍物(比方说碰到背景离子)的时候就可以被散射回来，从而失去原来的运动方向，因此它的能量就被耗散掉了，这种能量耗散的宏观表现就是一个非零的纵向电阻。但是，由于霍尔薄片边缘上的电子只能沿着一个方向运动，这样，即使它碰到障碍物，它也不能被散射回反方向，它只能绕过去，如图(4.7)所示。因此，

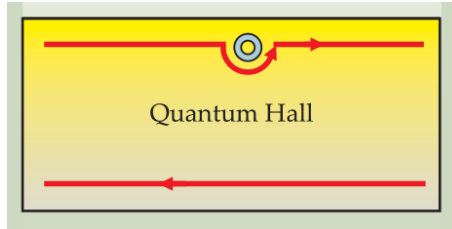


图 4.7: 手性电流不会有能量耗散。图片来自论文 “The quantum spin Hall effect and topological insulators”, Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang

量子霍尔效应的这种边缘态在输运电流的时候就没有能量的耗散，从而纵向电阻就为零。这就解释了实验中观测到的 $\rho_{xx} = 0$ 。

由于量子霍尔效应的边缘态只能沿一个方向运动，所以人们常常称之为手性边缘态。手性边缘态有不会耗散能量的奇妙性质，然而它并不能在通常的导线中实现。因为有一个定理叫Nielsen-Ninomiya theorem告诉我们，通常导线中的电子一定既有左行波态又有右行波态，无法限制它只取一种手性(用量子场论的话来说，是因为否则就会有手征反常，它会破坏规范对称性)。不过，这与量子霍尔效应中出现手性边缘态并不矛盾，因为在量子霍尔效应中这种一维的手性边缘态是出现在一个两维系统的边缘上，而这是允许的(因为霍尔薄片体内的物理也是反常的，而这种反常刚好可以和边缘态的手征反常抵消掉，这也是为什么量子霍尔效应中必须有手性边缘态的原因之一，因为否则体内的规范不变性就会因为反常而破坏掉)。

4.6.3 量子力学的分析

然而以上对整数量子霍尔效应的分析应用了很多经典物理的东西。比方说，我们在解释霍尔电导的量子化时其实是从经典的霍尔电导公式出发的。而我们在解释手性边缘态时也用了经典物理的图像。完全用量子力学该如何分析上面的问题呢？

为了更好地应用我们在朗道能级那一节中的量子力学结果来分析整数量子霍尔效应。现在假设我们的样品霍尔薄片是如图(4.8)(a)所示的圆环(这种具有旋转对称性的情形能够使得我们更好地利用朗道能级一节中求出的角动量本征态 $\psi_{n,m}$)。除了和磁场相互作用以外，样品中的电子还会感受到一个由背景离子和其它电子共同产生的势场，尤其是在样品边缘处，为了阻止电子从边缘逸出样品，那里一定有一个很高的势垒，最终势能作为径向坐标 r 的函数 $V(r)$ 大致会如图(4.8)(b)所示。考虑到这个势能 $V(r)$ 以

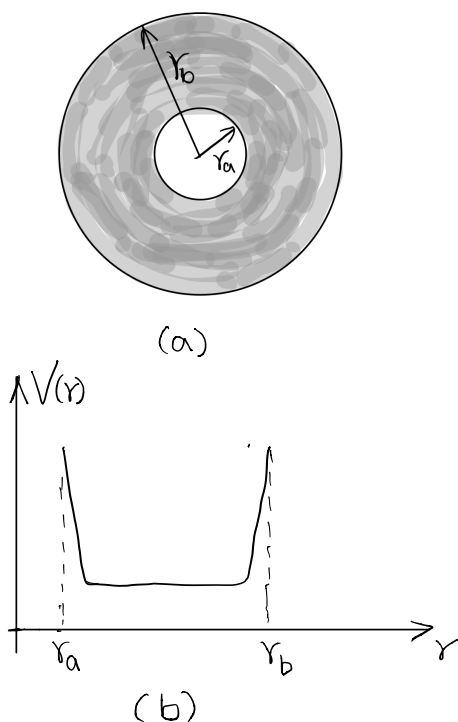


图 4.8: (a)圆环状霍尔片，磁场垂直于这个薄片。(b)样品内的势能曲线。

后朗道能级就需要作适当的修正。不过我们也不必重新求解带势能 $V(r)$ 的带电粒子定态薛定谔方程，简单的分析就能告诉我们大致应该怎样修正。

首先, 由(4.151)式可以知道, 一个绕圆心的轨道角动量为 $m\hbar$ 的电子大体上会分布在半径 $r_m = \sqrt{2ml_B}$ 处, 这个地方的势能为 $V(r_m)$, 它要加到原来的朗道能级上去, 所以一个 $|n, m\rangle$ 态的电子, 其能量 $E_{n,m}$ 大约为

$$E_{n,m} = \hbar\omega_B(n + \frac{1}{2}) + V(r_m). \quad (4.163)$$

我们可以将 $E_{n,m}$ 重写成 $E_n(r_m)$, 并将之看成是不同朗道能级的能量曲线, 大致如图(4.9)所示。我们可以看到, 这些能量曲线在样品的内外两个边

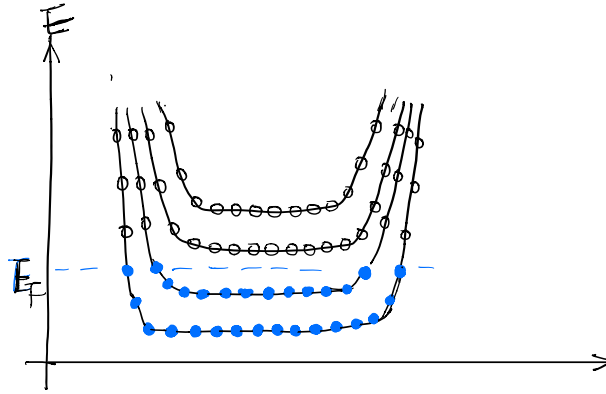


图 4.9: 不同朗道能级的能量曲线, 水平坐标是 r , 每一条曲线代表一个朗道能级。每一个点都代表一个量子态, 同一朗道能级上不同的点有不同的 m 量子数, 相应即有不同的径向坐标 r_m 。蓝色的实心点代表填充了电子的量子态, 空心点代表未被占据的量子态。

缘处相互趋近。而且, 由于 m 和 r_m 之间的一一对应关系, 同一个朗道能级, 不同 m 的那些量子态就落在不同的径向坐标处。

由于能量最低原理, 电子当然是按从低能到高能顺序填充这些能量曲线的。填充进来的电子的最高能量就叫费米能, 记作 E_F 。也即是说, 能量比费米能更低的量子态都已经填充了电子, 如图(4.9)所示。在这幅图中, 我们假定费米能是落在两个朗道能级之间, 下面我们的推导也是基于这种情况。但是, 如果费米能落在某个朗道能级的底部, 那情况就会比较复杂, 因为它可能意味着最上面的这个朗道能级只被填充了一部分, 如图(4.10)所示, 这种情况我们后面再来讨论。

现在, 在样品圆环上取极坐标, 以 ϕ 表示极角, 我们来计算整个样品围绕圆环环流的电流强度 I_ϕ 。首先, 样品内一个在 T 秒内围着圆心转一

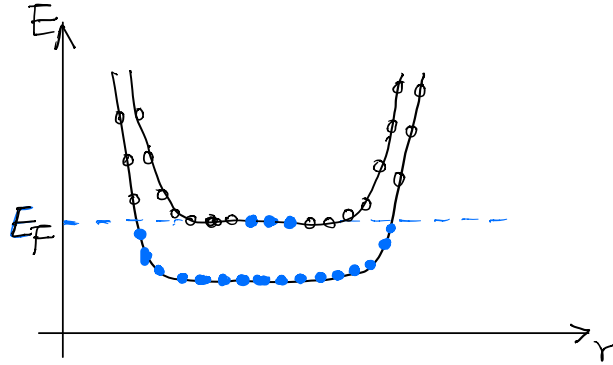


图 4.10: 最上面的朗道能级只部分填充的情况。当然这朗道能级上面还有更多完全未填充的朗道能级。

圈的电子贡献的电流强度将是 $I_\phi = e/T$, 用电子的旋转角速度 ω 来表达即是 $I_\phi = \frac{e}{2\pi}\omega$ 。不过在量子力学层次, 角速度 ω 将是一个算符, 我们计算的其实是它的期望值。因此, 一个填充在 $|n, m\rangle$ 态上的电子贡献的电流强度将是 $I_\phi = \frac{e}{2\pi} \langle n, m | \omega | n, m \rangle$ 。由于角速度是 ϕ 角对时间的导数, 因此我们可以记 $\langle n, m | \omega | n, m \rangle = (\dot{\phi})_{n, m}$ 。另外, 在经典物理中角动量 L_z 和角度 ϕ 是一对正则变量, 满足正则方程 $\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial L_z}$ (H 为哈密顿量)。而哈密顿量就是能量, 而且一个 $|n, m\rangle$ 态的电子, 其角动量 $L_z = m\hbar$, 能量为 $E_{n, m}$, 因此可以想见, 在量子力学层次, 近似地应该有 $(\dot{\phi})_{n, m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{n, m}}{\partial m}$ 。所以, 一个填充在 $|n, m\rangle$ 态上的电子贡献的电流强度为 $I_\phi = \frac{e}{2\pi} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{n, m}}{\partial m} = \frac{e}{2\pi\hbar} \frac{\partial E_{n, m}}{\partial m}$ 。而每一个已经填充了电子的量子态都会贡献类似的电流强度, 所以最终总的电流强度就是

$$I_\phi = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{(n, m) \in F} \frac{\partial E_{n, m}}{\partial m}. \quad (4.164)$$

式中 F 表达已经填充了电子的量子态集合。

为了计算出(4.164)式, 现在我们来考察如上面图(4.9)所示的情形, 假设费米能落在第 ν 个朗道能级和第 $\nu + 1$ 个朗道能级之间。公式(4.164)实际上是对 m 的差分进行求和, 我们近似地可以替换成积分, 从而将公式(4.164)改写成

$$\begin{aligned} I_\phi &= \frac{e}{2\pi\hbar} \sum \int_{(n, m) \in F} dm \frac{\partial E_{n, m}}{\partial m} \\ &= \frac{e}{2\pi\hbar} \sum \int_{(n, r_m) \in F} dr_m \frac{\partial E_n(r_m)}{\partial r_m}. \end{aligned} \quad (4.165)$$

式中的第二个等号是从 m 到 r_m 的一个变量代换。

显然，对于每一个被填充的朗道能级，公式(4.165)关于 r_m 的积分结果都是内外两个边缘上的能量差，当然也就是内外两个边缘上的费米能之差 ΔE_F ，它当然和 m 没什么关系，所以(4.165)式其实就是

$$I_\phi = \frac{e}{2\pi\hbar} \sum_{n=0}^{\nu-1} \Delta E_F = \frac{e}{2\pi\hbar} \nu (\Delta E_F). \quad (4.166)$$

对于如图(4.9)所示的这种情况，最后结果实际上是零，因为两个边缘上的费米能是一样的。不过，如果内外两个边缘上有电势差，那由于不同的电势能，填充在不同边缘上的电子最高能量也会不同，也就是说，这时候内外两个边缘上的费米能就会有差别，如图(4.11)所示，这个费米能的差别当然就等于电子的电势能之差 eV_H ， V_H 就是内外两个边缘上的电势差。因此这时候我们就有

$$I_\phi = \left(\frac{e^2}{2\pi\hbar} \nu \right) V_H. \quad (4.167)$$

这正好是我们想要推导出来的霍尔电导公式。不过这一次，我们基本上是用量子力学推导出来的。

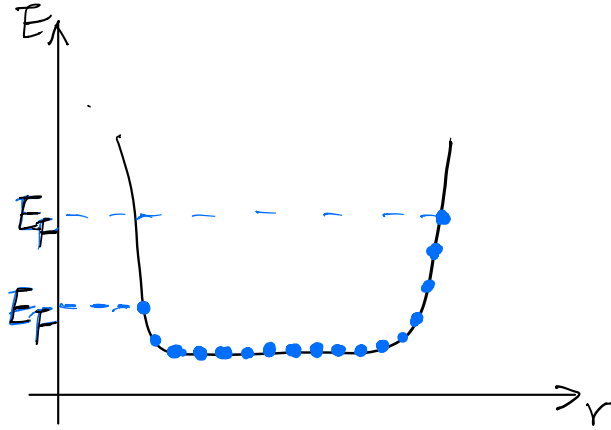


图 4.11: 电势差导致内外两个边缘的费米能有差别。注意我们只示意性地画了一条朗道能级，并且我们只画了占据态，没画空态。

不光如此，公式(4.165)还告诉我们一些额外的信息。由于电流强度是电流密度沿着横截方向的积分，即 $I_\phi = \int dr J_\phi$ ，与(4.165)式比较，我们可

以看到，第 n 朗道能级在半径 r 处贡献的电流密度 $J_{\phi,n}(r)$ 其实应该是

$$J_{\phi,n}(r) = \frac{e}{2\pi\hbar} \frac{\partial E_n(r)}{\partial r}. \quad (4.168)$$

但是，在前面的图形中我们清楚地看到，能量曲线 $E_n(r)$ 在样品体内是平坦的，对 r 的导数是零，因此，在样品体内将没有环绕样品圆环的电流！但是，在样品边缘附近，能量曲线 $E_n(r)$ 对 r 的导数不等于零，所以样品边缘才有电流！而且，从能量曲线可以清楚地看到，在外边缘， $\frac{\partial E_n(r)}{\partial r} > 0$ ，而在内边缘 $\frac{\partial E_n(r)}{\partial r} < 0$ ，因此公式(4.168)就告诉我们，内外两个边缘的电流方向相反，一个顺时针，一个逆时针，如图(4.12)所示，这当然就是我们上一小节通过经典图像发现的手性边缘态。

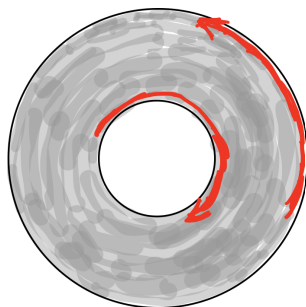


图 4.12: 量子霍尔效应的手性边缘态

4.6.4 无序—最终的解释

但是，以上解释依然有问题。问题就在于朗道能级的能量曲线在霍尔片体内其实并不是平坦的。比方说，如果内外两个边缘有电势差，那在霍尔片体内沿着径向方向就会有一个横向电场，这个电场会改变体内电子的电势能，考虑到这个电势能以后，朗道能级的能量曲线就会是倾斜的，如图(4.13)所示。这时候如果体内填充有电子的话，那它们的 $\frac{\partial E_n(r)}{\partial r}$ 就不等于零，根据(4.168)式，这些电子就会在体内产生电流，这在解释霍尔电阻的平台区时就会遇到困难。

为了解释清楚问题，我们不妨假设磁场从一个非常强的磁场逐渐降低，也就是说，我们要从右往左读整数量子霍尔效应的实验结果(4.5)。在霍尔电阻的 ν 平台上，前 ν 个朗道能级都已经填充满了，这时随着磁场的减小，

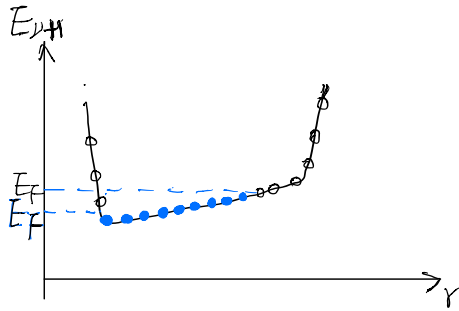


图 4.13: 电场中的朗道能级以及部分填充

每个朗道能级的态数目 N_{Φ} 就在减少，这样原来填充在前 ν 个朗道能级上的电子就会有部分多出来，这些多出来的电子就会开始填充第 $\nu + 1$ 个朗道能级，当然，这时候这第 $\nu + 1$ 个朗道能级是部分填充的，填充情况大体如图(4.13)所示，随着磁场的连续减少，它会逐渐填充得越来越多。但是，霍尔电阻实验测量的平台区意味着，这第 $\nu + 1$ 个部分填充的朗道能级并没有参与导电，否则由于导电的电子数逐渐变多，霍尔电导就会连续变大，霍尔电阻就会连续变小，那就根本不会保持在一个平台值不变。但是，根据刚才我们的理论分析，图(4.13)中所示的部分填充的第 $\nu + 1$ 个朗道能级是要参与导电的，而且是在霍尔薄片的体内导电。由于这些电子是在体内导电，而不是处于手性边缘态，那它们当然就要和背景离子散射从而损耗能量，因此理论上纵向电阻也不能为零。很显然，这些理论分析结果都和实验观测相矛盾。

解决问题的关键在于，实际上，朗道能级的能量曲线在霍尔片体内不仅仅不平坦，而且是相当不平坦，相当崎岖。这是因为，实际的霍尔片不可能完全纯净(如果太纯净那反而观察不到霍尔电阻的平台)，它里面有各种杂质，我们统称为无序。在效果上，这些无序就相当于一个各点势能取值随机分布的随机势，这样的势能当然会非常崎岖，从而使得整个霍尔片内部布满了各种坑坑洼洼，各种势能的“山峰”和“山谷”。这样的系统当然没有绕 z 轴的旋转对称性，因此前面的角动量量子数 m 就不再是一个好量子数，不同的量子态不再对应不同的径向坐标，我们也就不能再将分析简化为沿着径向坐标的一维分析。不过，由于每一个磁通量子对应一个量子态，我们很容易想到，薄片上每一个面积为 $2\pi l_B^2$ 的极小的局部小圆盘，都可以用来标记一个量子态。由于这些小圆盘极小，可以近似看成一个圆点，因此 $x - y$ 平面的每一个圆点都相应于一个量子态，它的能量是该点处的随

机势能加上标准的 $\hbar\omega_B(n + \frac{1}{2})$ ，由于势能很崎岖，所以不同点的量子态通常并不简并。这样，加上这个崎岖的随机势能以后，前面朗道能级能量曲线的概念就应该推广成二维的能量曲面，一个朗道能级就对应一个这样的崎岖能量曲面。当然，在霍尔片边缘处，分析基本上还和前面一样，因为边缘一定会有一个很高的势垒(否则电子就从样品边缘逃逸出去了)。

在图(4.14)中，我们示意性地画出了一个长方形霍尔薄片某一个朗道能级的等能量曲线(类似于地图中的等高线)，等能量线的密度反映能量曲面的梯度，等能量线越密的地方，能量梯度就越大。图中的+号标记的是能量的“山峰”，-号标记能量的“山谷”。同一个朗道能级的不同量子态就以一个个面积为 $(2\pi l_B^2)$ 的非常小的小圆点的形式分布在这个能量“地形”中。当然，这个图形是示意性的，真实霍尔片中的能量地形可能要崎岖得多，“山峰”和“山谷”都会很多。

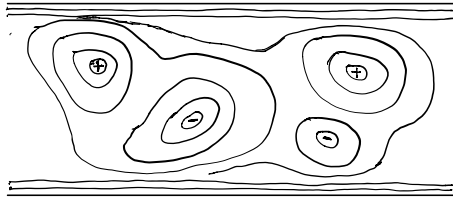


图 4.14: 霍尔薄片某一个朗道能级的能量“地形”图

以上的图像并不完全。因为占据在一个局部小圆点上的电子实际上还会跳到邻近的小圆点上去，从而产生运动。这些电子如何运动呢？为了搞清楚这个问题，我们再来仔细观察一下前面在圆周对称的情形中得到的电流密度公式(4.168)，我们发现公式中的 $\frac{\partial E_n(r)}{\partial r}$ 实际上就是能量的梯度，而电流密度的方向 ϕ 实际上就是和这个梯度垂直的方向。因此，我们可以这样来推广电流密度 J_n 的公式，我们说：在量子霍尔效应的一般情形中， n 朗道能级上占据在某小圆点上的电子贡献的电流密度 J_n 大小等于 $\frac{e}{2\pi\hbar}$ 乘以这点的能量梯度，并且电流沿着与梯度方向相垂直的方向流，也就是沿着等能量线流，而电流的正负号则由能量梯度的正负号决定。

当电子填充朗道能级的时候，如果它们填充到霍尔片的边缘，那由于边缘处有很高的能量梯度，所以就会产生较大的电流密度，又由于边缘处的等能量线都沿着霍尔薄片的边缘走，所以这些电流也沿着边缘流，而且，边缘处能量梯度的正负号是确定的，因此这些电流只有一个流向，这就是手性边缘电流。

当然，实际电子填充朗道能级的时候是按照能量最低原理进行的，也就是会先填充体内那些能量“山谷”。最先填在谷底电子，由于谷底的能量梯度为零，所以它就待在谷底不动了。接着填进来的电子就会填在围绕谷底的能量稍高一些的等能量线上，上面我们已经分析过了，这些电子就会沿着这些等能量线围绕着谷底打转。所以这些电子实际上已经被局域在某个能量“山谷”的附近了，我们称之为局域态。局域态的电子运动范围很小，所以当然不能产生宏观的电流，因此它们实际上是不参与导电的。

类似的，在最后填充进霍尔片体内的电子已经没有地方可占据了，它就只能填充到能量“山峰”附近，同样，这些电子也只能围绕着某个能量“山峰”打转，从而实际上也被局域化了，也无法参与导电。

能参与导电的是在中间的时候填充进来的电子，这时候它将刚好填在能量的“海平面”附近，它也只能沿着等能量线运动，但是“海平面”附近的等能量线范围会很大，如图(4.14)所示，因此这些电子就可以在一个宏观的范围内运动，产生宏观的电流。这样的态就称为延展态。在霍尔片体内，只有延展态可以参与导电。局域态、延展态的讨论通常主要是指霍尔片体内的电子态，但是当然，我们也可以把手性边缘态看成是一种延展态。

现在我们就可以解释霍尔电阻的平台是怎么回事了。当电子填满前 ν 个朗道能级开始填充第 $\nu + 1$ 朗道能级的时候，由于最先填进来的那些电子都被能量“山谷”局域化了，根本不导电，所以它们对霍尔电导根本就没有贡献，从而虽然电子在持续填充，但是霍尔电导会保持不变，从而就出现一个平台。而且由于这些局域化的电子根本不导电，所以这时候纵向电导就是零，纵向电阻也就是零。霍尔片上的电流都来自于前 ν 个朗道能级的手性边缘态。

但是，如果电子填充到了第 $\nu + 1$ 个朗道能级的“海平面”附近，那体内就会出现延展态，这些延展态有可能连接到手性边缘态上，从而使得手性边缘态可以被散射，产生能量耗散，进而使得纵向电阻出现非零的跳变，这就是图(4.5)中所显示的纵向电阻在两个相邻平台过渡的时候出现的跳变。

当 $\nu + 1$ 能级的“海平面”附近被填满以后，霍尔电阻实际上就已经跳到 $\nu + 1$ 平台区去了，这时候接着填充进来的电子又是被能量“山峰”局域化的局域态，同样不导电，霍尔电阻就会保持在新的 $\nu + 1$ 平台上。

至此，我们才算真正解释了量子霍尔效应的实验观测结果。

虽然有这么多复杂性，但每一个填满的朗道能级贡献的霍尔电导依然是 $e^2/(2\pi\hbar)$ 。为了看清楚这一点，我们来计算第 n 朗道能级沿着纵向 x 方向的电流强度 $I_{x,n}$ 。正如我们分析过的， x 方向的电流密度 $J_{x,n}$ 将由能量曲面沿着 y 方向的梯度给出， $J_{x,n} = \frac{e}{2\pi\hbar} \frac{\partial E_n(x,y)}{\partial y}$ ，从而

$$I_{x,n} = \frac{e}{2\pi\hbar} \int dy \frac{\partial E_n(x,y)}{\partial y}. \quad (4.169)$$

很显然，对于每一个填满的朗道能级，这个式子对 y 坐标积分的结果都只依赖于霍尔片上下边缘的费米能之差，从而也就只依赖于上下边缘的电势差，而和能量曲线在霍尔片体内的具体细节没有关系，如图(4.15)所示。不管

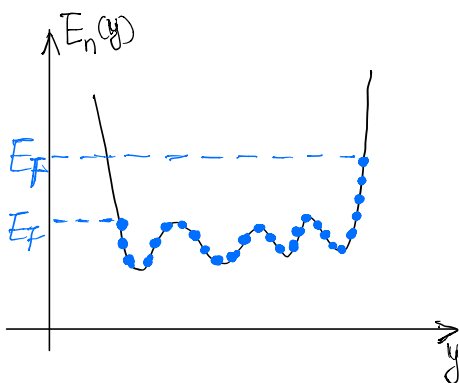


图 4.15: 能量曲面沿着 y 方向的横截图

能量曲线在霍尔片体内多么崎岖，最终的结果都是一样的，从而每一个填满的朗道能级都会贡献恒定不变的霍尔电导 $e^2/(2\pi\hbar)$ 。当然，从宏观上看，局域态根本不导电，对霍尔电导有贡献的是朗道能级中的延展态，其实主要是手性边缘态。

4.6.5 分数量子霍尔效应

整数量子霍尔效应已经够令人吃惊了，但是，1982年Tsui和Stormer发现了更为令人吃惊的事情。它们也在低温和强磁场的条件下测量了霍尔电阻 ρ_{xy} ，结果发现，不仅是在 ν 等于整数的时候会出现量子化平台，而且在 ν 等于分数时也会出现量子化平台，如图(4.16)所示。比方这幅图中最右边的那个霍尔电阻平台就对应 $\nu = 1/3$ (因此 $\rho_{xy} = 3h/e^2$)。不仅如此，图中 $\nu = 2/5$ 的地方也有一个很明显的量子化平台(对应 $\rho_{xy} = 2.5h/e^2$)。前面

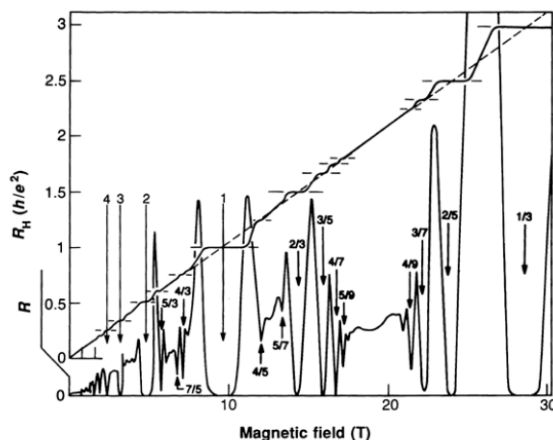


图 4.16: 分数量子霍尔效应

我们已经理解了 ν 等于整数时的量子化现象，它相应于前 ν 个朗道能级被填充满的情形。那么 $\nu = 1/3$ 是什么意思呢？它不应该对应最低朗道能级仅仅被填充 $1/3$ 这种部分填充的情况吗？为什么也会出现量子化平台呢？

不仅如此，此后人们又不断观测到了更多的量子化平台，它们对应的 ν 都是有理数。这就带来两个问题：第一，为什么朗道能级部分填充也会出现量子化平台。第二，为什么刚好是有理数，既然部分填充能出现量子化平台，为什么没有 $\nu = 1/\sqrt{2}$ 的量子化平台¹。到今天为止，对这两个问题人们其实已经有了很多了解，尤其后一个问题，一定意义上其实可以从数学上证明，不过这种数学证明的深度超出我们这本书的范围了。

显然，为了理解这种分数量子霍尔效应，我们不再能忽略电子间的相互作用。否则的话前面我们理解整数量子霍尔效应时使用的单电子填充朗道能级的图像就依然完全成立，那我们就只能得到整数量子霍尔效应。为了解释朗道能级部分填充时出现的分数量子化现象，电子间的库伦排斥力将非常重要。实际上，如果人们用 $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 l_B} = \frac{\hbar\alpha c}{l_B}$ 来估算这个库伦排斥势能的话，就会发现它并不比朗道能级差 $\hbar\omega_B$ 小。所以某种意义上，人们反而是要解释为什么在讨论整数量子霍尔效应的时候可以忽略电子间的库伦排斥力。不过，由于单电子近似是凝聚态物理中的传统近似，它在固体能带论中取得了巨大成功，而且它的成立性可以用朗道的费米液体理论来解释(后

¹当然， $\nu = 1/\sqrt{2}$ 可以用两个较大的整数之比来近似，但这种难以分辨的有理数也没有观测到

面的章节中我们会简单地讨论这个问题)。所以分数量子霍尔效应的发现其实是使得人们开始意识到,单电子近似有时候是不成立的,电子间的相互作用可能非常重要,这也就是所谓的强耦合强关联问题。

在理解整数量子霍尔效应时,我们之所以可以忽略电子间的相互作用,还因为这时候最重要的是讨论朗道能级被填满的情形,而对于这种情形,电子间的相互作用并不会实质性地改变我们的物理图像,因为我们可以设想将电子间的相互作用从零连续调节到实际值,这时候朗道能级可能会发生一些“形变”,但它被填满的实质并不会改变。

但是,对于分数量子霍尔效应,它的朗道能级是部分填充的,如果忽略相互作用,那就会有巨量的不同填充方式。比方说对于 $\nu = 1/3$ 的情形,这时候是将 $N = N_\Phi/3$ 个电子填充到最低朗道能级的 N_Φ 个态上去,填充方式将有 $\binom{N_\Phi}{N_\Phi/3}$ 种,考虑到 N_Φ 非常大,所以这将会是一个非常大的组合数。而这些不同填充方式都是简并的,对应整个材料的简并量子态(注意,不是单电子的简并态)。对于这样的简并态空间,任何相互作用微扰都可能非常重要,都会极大地改变系统的行为。关于这一点,我们后面学习了量子力学微扰论以后再回头看会更加清楚。

神奇的是,在分数量子霍尔效应的系统基态(整个材料的基态)之上,可以出现奇异的准粒子激发。所谓的准粒子,意思就是,它们并不是自然界中普遍存在的粒子,因此不是组成霍尔片材料本身的电子和离子,而是在霍尔片中出现的行为和一个粒子的行为完全类似的一种局部状态。它们本质上是分数量子霍尔效应中的电子通过相互作用产生的东西。但是,分数量子霍尔效应中出现的这些准粒子非常奇怪,它们可以有分数电荷!比方说在 $\nu = 1/3$ 的霍尔态中,可以出现 $e/3$ 电荷的准粒子激发。而且,我们知道,自然界中的粒子可以分成两大类,玻色子和费米子,但是,这些准粒子既不是玻色子,也不是费米子,它们是一种被称为任意子(anyon)的东西。而且,我们知道,电子可以有两种不同的自旋状态,自旋向上和自旋向下,它们是电子的内禀状态,但是,在某些分数量子霍尔态中出现的准粒子甚至可以有诸如 $\sqrt{2}$ 这样的无理数个不同的内禀状态!

对这些奇异任意子的研究是当前的前沿之一,因为,原则上它们有实现大规模量子计算的能力。当前凝聚态研究中的拓扑序和量子计算研究中的拓扑量子计算有很大一部分都是在从不同的角度研究这样的任意子。