

量子力学

(下册)

姚玉洁 主编

吉林大学出版社

量子力学

(下 册)

姚玉洁 主 编

吉林大学出版社

量子力学
(下册)

姚玉洁 主编

责任编辑: 张 延

封面设计: 甘 莉

吉林大学出版社出版
(长春市解放大路85号)

吉林省新华书店发行
吉林大学印刷厂印刷

开本: 850×1168毫米1/32

1989年6月第1版

印张: 10

1989年6月第1次印刷

字数: 247千字

印数1-1 500册

ISBN 7-5601-0251-4/O·42 定价: 2.55元

目 录

(下册)

第七章 自旋及角动量加法..... (1)

I

§ 1 存在自旋的实验依据.....	(1)
§ 2 自旋算符和自旋波函数.....	(5)
§ 3 升降算符.....	(17)
§ 4 轨道角动量 $\hat{L}$ 和自旋 $\hat{S}$ 的相加 总角动量.....	(22)
§ 5 自旋1/2加自旋1/2.....	(32)
§ 6 角动量加法的一般问题.....	(38)
§ 7 精细结构.....	(47)
§ 8 塞曼 (Zeeman) 效应.....	(52)
§ 9 外磁场中的自旋粒子.....	(58)
§ 10 两自旋粒子体系的相互作用.....	(64)
小结.....	(67)

II

§ 1 粒子在电磁场中的运动.....	(68)
§ 2 角动量的应用.....	(74)
习题.....	(94)

第八章 定态近似方法..... (102)

I

§ 1 非退化情况下的定态微扰理论.....	(102)
§ 2 退化情况下的定态微扰理论.....	(110)
§ 3 斯塔克 (Stark) 效应.....	(118)
§ 4 变分法.....	(122)
§ 5 氦原子基态 (变分法)	(128)

§ 6 WKB 近似	(130)
小结	(140)
II	
§ 1 定态微扰论	(141)
§ 2 变分法	(152)
§ 3 WKB 方法	(156)
习题	(161)
第九章 跃迁理论初步	(170)
I	
§ 1 与时间相关的微扰理论	(170)
§ 2 跃迁几率	(173)
§ 3 简谐微扰与共振跃迁	(174)
§ 4 原子体系对于光的辐射和吸收	(177)
§ 5 常微扰及黄金规则	(183)
小结	(184)
II	
§ 1 与时间相关的微扰论	(185)
§ 2 光的吸收与辐射	(190)
习题	(193)
第十章 散射理论初步	(195)
I	
§ 1 碰撞过程和散射截面	(195)
§ 2 分波法	(201)
§ 3 方位势散射	(210)
§ 4 玻恩 (Born) 近似法	(213)
§ 5 质心坐标系和实验室坐标系	(219)
小结	(223)
II	
§ 1 分波法及举例	(224)
§ 2 玻恩近似法及举例	(229)
习题	(233)

第十一章 多体体系及多电子原子	(235)
I	
§ 1 全同性原理.....	(236)
§ 2 泡利不相容原理.....	(241)
§ 3 全同粒子的散射.....	(247)
§ 4 原子的电子壳层结构.....	(250)
§ 5 多电子原子的能级.....	(256)
小结.....	(262)
II	
§ 1 多粒子体系的波函数的求解.....	(263)
§ 2 全同粒子的散射举例.....	(275)
习题.....	(278)
附录	(283)
一、常用物理常数.....	(283)
二、能量、功、热单位换算.....	(284)
三、我国的法定计量单位.....	(285)
四、常用数学公式.....	(287)
五、向量运算公式.....	(289)
六、正交曲线坐标.....	(291)
七、 δ 函数的性质.....	(292)
八、特殊函数.....	(293)
九、克莱布许-高登系数.....	(305)
人名对照表	(309)

第七章 自旋及角动量加法

I

自旋是微观粒子独具的固有的基本属性。它具有角动量的性质。本章在引入了自旋物理量之后，将就角动量的一般性质做一些展开性的初步讨论。

§1 存在自旋的实验依据

一切微观粒子都具有一个经典粒子所没有的基本物理属性——本征角动量，或称自旋。

在非相对论量子力学范畴内，自旋的存在是在实验资料的基础上作为一种“假定”给出的（事实上，自旋是一种相对论效应）。

最直接地证实存在自旋的实验是史特恩-盖拉赫 (Stern-Gerlach) 实验，而光谱的精细结构则间接地证实了自旋的存在。

一、史特恩-盖拉赫实验

这个实验是“原子物理”中相当重要的实验，我们仅对这一实验作一简单回顾。实验装置示意图如图7.1所示。电炉 K 加热后放出原子蒸气（如氢原子、银原子等气体），用狭缝 S_1 ， S_2 选出 x 方向的水平原子束，让它通过不均匀磁场 NS 。通过这一磁场后，在它前进的方向上置一照像板 pp ，原子打在其上可观察原子集结的情况。整个装置放在真空之中。

这个实验的关键在于磁场的不均匀性，因为带磁矩的粒子

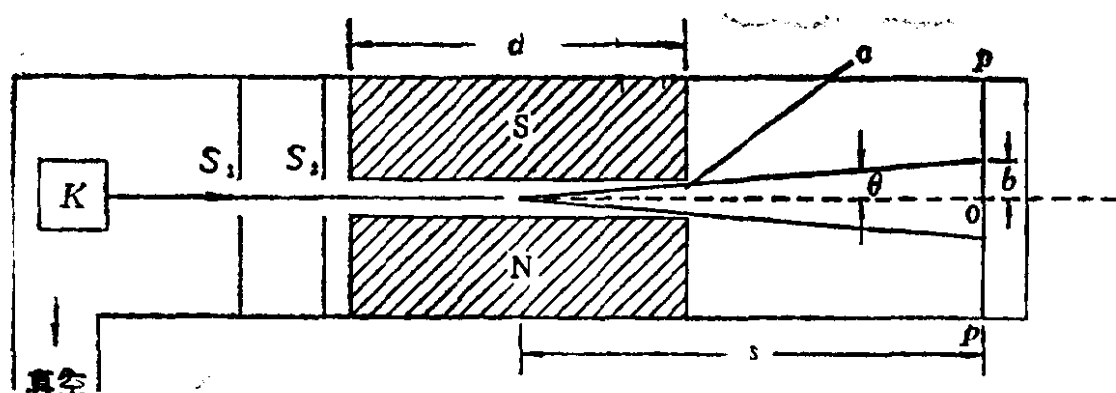


图7.1

只在非均匀磁场中才受力的作用，而“不均匀性”是相对而言的，实验的对象是原子束，因此这种不均匀性应该在 10^{-10}m 的线度内呈现出来（请读者考虑，如果用电子代替原子来作实验，将会怎样？目前实验证据表明，电子的线度远小于 10^{-16}m ）。还应该指出，在这个实验中原子束的原子处于基态。以氢原子束为例，在电炉 K 中加热样品，当达到热平衡时，原子的动能为 $3/2KT$ ；当 $T = 10^5\text{K}$ 时，动能大约为 $8-9\text{eV}$ 。这能量值小于氢原子的第一激发态能。通常加热的温度远小于 10^5K ，因此从源中出来的氢原子总是处于基态。

设非均匀磁场沿 z 轴方向，磁场长度为 d ，带磁矩为 μ_z 的中性原子进入磁场后在力

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

的作用下，原子在磁场区内做抛物线运动：

水平方向 $x = vt$ (v 为原子入射速度)

z 方向 $z = \frac{1}{2} F_z t^2 / m$ (由 $F_z = m \frac{d^2 z}{dt^2}$ 得出)

到磁场区的出口处，所用时间 $t = d/v$ 。因此在出口处，原子偏离 x 轴的距离为 a ，偏转角为 θ (见图7.1)：

$$a = \frac{1}{2} F_z \left(\frac{d}{v} \right)^2 / m$$

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{a}{d/2} = \frac{F_z d}{mv^2}$$

从而原子束离开磁场后沿直线方向打向 pp, 垂直距离为 b :

$$b = \operatorname{tg} \theta \cdot s = \frac{F_z ds}{mv^2}$$

将 F_z 的值代入得

$$b = \frac{ds}{mv^2} \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

入射原子的动能为 $T = \frac{1}{2}mv^2$, 设 $\eta \equiv -\frac{2T}{ds} \left(\frac{\partial B_z}{\partial z} \right)^{-1}$,

则在 z 方向的磁矩 μ_z 为

$$\mu_z = \eta b$$

b 的取值可以由实验测出, 而 η 完全由实验装置和原子动能决定。因此通过史特恩-盖拉赫实验, 可以直接给出 μ_z 的取值情况。

在1921年和1927年分别用银原子和氢原子成功地做了实验, 二者给出了同样的分析结果: 原子在 pp 上的集结情况给出的 b 值取量子化值, 从而原子磁矩取量子化值。

△ 原子具有磁矩是很自然的, 因为它具有轨道角动量。但是前面我们特别强调指出原子束一般处于基态。如氢原子处于基态, 就是说电子的轨道角动量量子数 l 为零, 即为 s 态, 这时不存在轨道角动量引起的磁矩, 因此似乎原子不应受到磁场力的作用, 而应在 pp 的中心处集结 (即 $b=0$)。但实验结果并非如此。事实上, 原子束在 pp 上集结的痕迹刚好只有两个, 而且它们的位置十分对称, 强度也相同。这一情况清楚表明: 原子具有磁矩。既然它不存在轨道磁矩, 那么它只能还具有一个固有磁矩 (本征磁矩)。这本征磁矩在 z 方向上只取两个值, 大小相等, 方向相反。实验证实, 电子本征磁矩的值是一个玻尔磁子。

二、光谱线的精细结构

观察 $_{11}\text{Na}$ 光谱的主线系($np \rightarrow 3s$)。由 $3p$ 到 $3s$ 发出一条谱线—— D (黄)线。如果用高分辨率的摄谱仪或分光镜观察 D 线会发现, D 线实际上不是一条谱线,而是靠得十分近的两条谱线,波长分别为 $\lambda_{D_1} = 5895.93 \text{ \AA}$, $\lambda_{D_2} = 5889.95 \text{ \AA}$,二者仅相差 $6 \text{ \AA}$ 。事实上,不仅是主线系,锐线系也是双线结构,漫线系、基线系的每条谱线已不只是两条而是三条了(复双重线)。这种现象表明光谱线具有精细结构。如果认为原子具有本征磁矩的话,这一现象就容易解释了。本征磁矩在由轨道磁矩引起的“内磁场”的作用下,将使价电子受到力的作用,从而引起了附加能量。由于本征磁矩的分量只有两个值 $M_{s_z} = \pm M_B$,因此由此引起的附加能量 U_{sL} 也只有两个值,从而一条能级将分裂成两条。由于 s 能级 $l=0$,因此不存在内磁场,从而附加能量为零—— s 能级不分裂。但 p 能级将分裂成距离很近的两条 $3p_1$, $3p_2$ 。因此 $3p$ 向 $3s$ 跃迁时发出的谱线有两条。又因为 $3p_1$, $3p_2$ 相距很近,因此这两条谱线波长相差很小。精细结构是一切原子的特点,只不过碱金属原子的精细结构最为简单,最易于暴露本征角动量的本质特点而已。

三、电子自旋假设

1925年乌伦贝克(Uhlenbeck)和古兹米特(Goudsmit)提出,稍后由泡利(Pauli)加以完善的关于存在自旋的假设,在非相对论量子力学范畴内是行得通的。

这一假设的基本内容可以归纳如下:

(1) 一切微观粒子都存在本征角动量(即内禀角动量),又称自旋。它是微观粒子的固有属性之一。

在非相对论量子力学中,自旋物理量用线性厄米算符 $\hat{S}$ 描述。它具有与轨道角动量 $\hat{L}$ 相同的性质。

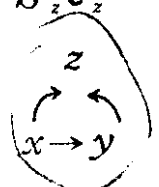
(2) 电子自旋在任意方向上的投影值仅有两个，且大小相等，方向相反。这样，一个电子的自由度应为4，即除了空间自由度 x, y, z 外，还有一个与自旋相联系的自由度 S_z 。

§2 自旋算符和自旋波函数

一、自旋算符

自旋作为微观粒子的固有属性之一，在非相对论量子力学的理论构架中，自然也应该用一线性厄米算符描述之，记为 $\hat{S}$ 。它具有与轨道角动量算符 $\hat{L}$ 同样的性质，即有：

$$\hat{S} = \hat{S}_x \mathbf{e}_x + \hat{S}_y \mathbf{e}_y + \hat{S}_z \mathbf{e}_z$$

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z$$

(1)

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$$

$$[S^2, \hat{S}_\mu] = 0 \quad \mu = x, y, z$$
(2)

用 s 表示 S^2 的量子数， m_s 表示 S_z 的量子数（当然，也可以选 S_x 或 S_y ），按狄拉克符号， $|s\rangle$ 表示 S^2 的本征矢， $|m_s\rangle$ 表示 S_z 的本征矢。从而 S^2 和 S_z 的本征方程为

$$S^2 |s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s\rangle$$
(3)

$$S_z |m_s\rangle = \hbar m_s |m_s\rangle$$
(4)

又由于(2)式， S^2 与 S_z 有共同本征函数系，本征函数为 $|sm_s\rangle$ ，即

$$\begin{matrix} S^2 \\ S_z \end{matrix} |sm_s\rangle = \begin{matrix} \hbar^2 s(s+1) \\ \hbar m_s \end{matrix} |sm_s\rangle$$
(5)

在轨道角动量的理论中已经知道， $(2l+1)$ 是 m_l 可取值的个数（下文均用 m_l 表示轨道角动量的磁量子数，以示与 m_s 的区别），相仿地， $(2s+1)$ 是 m_s 可取值的个数。实验表明，电子自旋在空间任意方向上的取值只有两个，因此 $2s+1=2$ ，

则 $s = 1/2$, 即电子自旋量子数 s 只能取 $1/2$ 这一个值。 S^2 的本征值只有一个, 即 $\frac{3}{4}\hbar^2$; 而 m_s 的取值应为 $(s, s-1, \dots, -s+1, -s)$, 因此对电子, $m_s = \pm 1/2$. 习惯上常把 $m_s = +1/2$ 时的本征函数 $|1/2\rangle$ 记为 $|+\rangle$, 描述自旋向上的态; $m_s = -1/2$ 时的本征函数 $|-1/2\rangle$ 记为 $|-\rangle$, 描述自旋向下的态。

到目前为止, 我们还没有把自旋算符及其有关的本征函数具体表达出来。由于自旋物理量与空间坐标自由度全然无关, 因此 $\hat{S}$ 的具体形式的建立需借助于第六章的矩阵方法。

下面仅就自旋为 $1/2$ 的粒子 (如电子、质子、中子等) 的自旋算符及其本征问题讨论之。

二、泡利矩阵 σ

1. σ 的定义

定义 泡利矩阵 σ 为:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma \quad (6)$$

σ 与 $\hat{S}$ 仅相差一常数 $\hbar/2$, 说明欲研究 $\hat{S}$ 的有关问题, 可以通过 σ 研究之。显然, σ 是无量纲的线性厄米算符。

2. σ 的性质

$$(1) \quad [\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad \begin{array}{c} z \\ \swarrow \quad \searrow \\ x \rightarrow y \end{array} \quad (7)$$

利用(1)式及(6)式直接可得(7)式。(7)式也可写为

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2ie_{ijk}\sigma_k$$

$$\sigma \times \sigma = 2i\sigma$$

(2) 由于 $\hat{S}$ 沿任何方向均只能取值 $\pm \frac{\hbar}{2}$, 因此 σ 沿任何方向也只能取两个值 (± 1), 从而 $\sigma_\mu^2 (\mu = x, y, z)$ 只能取一个值 ($+1$)。根据表象理论, σ_μ^2 在自身表象中是单位矩阵 I , 而单位

矩阵在任何表象中均为单位矩阵，即

$$\sigma_{\mu}^2 = I, \quad \mu = x, y, z \quad (8)$$

(3) $\hat{\sigma}$ 的任意两分量均反对易，即

$$\{\hat{\sigma}_{\mu}, \hat{\sigma}_{\nu}\} \equiv \hat{\sigma}_{\mu}\hat{\sigma}_{\nu} + \hat{\sigma}_{\nu}\hat{\sigma}_{\mu} = 0 \quad (9)$$

$$\mu, \nu = x, y, z, \quad (\mu \neq \nu)$$

利用(7)式和(8)式可得(9)式。由于

$$\hat{\sigma}_y \cdot (\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y) = 2i \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x$$

$$\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = 2i \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x$$

$$(\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y) \cdot \hat{\sigma}_y = 2i \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y$$

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_z = 2i \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y$$

得

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0$$

其它类推之。

$$(4) \quad \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i$$

由(7)式及(9)式得 (10)

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i \hat{\sigma}_z$$

两边右乘以 $\hat{\sigma}_z$ ，且利用 $\hat{\sigma}_z^2 = 1$ ，即得(10)式。

(5) 当 $[A, \hat{\sigma}] = [B, \hat{\sigma}] = 0$ 时

$$(\hat{\sigma} \cdot A)(\hat{\sigma} \cdot B) = A \cdot B + i \hat{\sigma} \cdot (A \times B)$$

3. 泡利表象中的 $\hat{\sigma}$ 表达式

根据第六章§3之五的讨论，对比 $\hat{\sigma}$ 具有的性质，可知前者讨论的结果就是泡利矩阵在 $\{\hat{\sigma}^2, \hat{\sigma}_z\}$ 表象中的具体形式。这一表象通常称之为泡利表象。仅将结果复述如下：

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (12)$$

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 I \quad (13)$$

三、 S^2, S_z 的共同本征函数系

泡利表象的基底为： $\hat{\sigma}_z$ 的本征函数 $|+1\rangle$ 和 $|-1\rangle$ 。其中 $(+1)$ 和 (-1) 分别为 $\hat{\sigma}_z$ 的本征值。通常也习惯写为

$$|+1\rangle \equiv |+\rangle, \quad |-1\rangle \equiv |-\rangle \quad (14)$$

显然(14)式也是 S_z 的本征函数，因此泡利表象就是 S_z 表象。

$\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 构成正交、归一、完备基：

$$\begin{aligned} \langle + | - \rangle &= \langle - | + \rangle = 0 \\ \langle + | + \rangle &= \langle - | - \rangle = 1 \end{aligned} \quad (15)$$

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = 1$$

1. S_z 本征函数的矩阵形式

本征方程

$$S_z |m_s\rangle = \hbar m_s |m_s\rangle$$

的矩阵形式为

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \hbar m_s \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

其中

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle + | m_s \rangle \\ \langle - | m_s \rangle \end{pmatrix}$$

由此得出：

$m_s = 1/2$ 时，本征函数为

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |+\rangle \equiv |1/2\rangle \quad (16)$$

$m_s = -1/2$ 时，本征函数为

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |-\rangle \equiv |-1/2\rangle \quad (17)$$

实际上， S_z 的本征函数矩阵形式就是基底在自身表象中的表达形式。

2. S^2 的本征函数系

由(6)式及(8)式可得

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 I = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) I \quad (18)$$

S^2 作为一常数矩阵，任何非零态矢均为其本征函数，对应唯一一本征值 $\frac{3}{4} \hbar^2$ ，量子数 s 为 $\frac{1}{2}$ 。

3. S^2 和 S_z 的共同本征函数系

由于任意非零态矢均为 S^2 的本征函数，因此 S^2 和 S_z 的共同本征函数系就是 S_z 的本征函数系，记为 $|sm_s\rangle$ 。

$|1/2 \ 1/2\rangle$ 表示 $s = 1/2$ ， $m_s = 1/2$ 的本征函数，其矩阵形式为(16)式； $|1/2 \ -1/2\rangle$ 表示 $s = 1/2$ ， $m_s = -1/2$ 的本征函数，其矩阵形式为(17)式。

总之，对于

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |sm_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |sm_s\rangle \\ \hat{S}_z |sm_s\rangle &= \hbar m_s |sm_s\rangle \end{aligned}$$

有

$$s = 1/2, \quad m_s = \pm 1/2$$

在泡利表象中

$$|1/2 \ 1/2\rangle \equiv \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ 对应本征值为 } \frac{3}{4} \hbar^2 \text{ 及 } \frac{1}{2} \hbar$$

$$|1/2 \ -1/2\rangle \equiv \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ 对应本征值为 } \frac{3}{4} \hbar^2 \text{ 及 } -\frac{1}{2} \hbar$$

正交归一化条件为

$$\chi_+^\dagger \chi_+ = \chi_-^\dagger \chi_- = 1$$

$$\chi_+^\dagger \chi_- = \chi_-^\dagger \chi_+ = 0$$

4. 旋量的矩阵形式

在自旋态空间中的任意态 $|\chi\rangle$ 为旋量。在泡利表象中，它的矩阵形式为二行列矩阵。

由基底 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 的完备性得

$$\begin{aligned} |\chi\rangle &= |+\rangle \langle + | \chi \rangle + |-\rangle \langle - | \chi \rangle \\ &\equiv |+\rangle c_+ + |-\rangle c_- \end{aligned} \quad (19)$$

写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle + | \chi \rangle \\ \langle - | \chi \rangle \end{pmatrix} \quad (20)$$

由展开假定知, $|c_{\pm}|^2$ 分别代表粒子处于 $m_s = 1/2$ 和 $m_s = -1/2$ 的几率密度。

5. 旋量的函数形式

由于泡利表象中的基底是分立的, 因此把态矢写成矩阵形式是方便的。但由于基底个数只有两个, 故而将态矢写成通常函数的形式也是方便的, 只不过这时的自变量和函数值都间断而已。

由(19)式知, c_+ 和 c_- 确定了, $|\chi\rangle$ 就完全确定了。让我们引进函数 $\chi(s_z)$, 它的自变量 s_z 仅能取两个值 $s_z = \pm \hbar/2$, 即以 $\hat{S}_z$ 的本征值作为 χ 的自变量。对应的函数值分别为 c_+ 和 c_- 。总之, 自变量和函数之间的关系为:

$$\begin{aligned} \text{自变量 } s_z &= \frac{\hbar}{2}, & s_z &= -\frac{\hbar}{2} \\ \text{函数值 } \chi\left(\frac{\hbar}{2}\right) &= c_+ & \chi\left(-\frac{\hbar}{2}\right) &= c_- \end{aligned}$$

$$= \langle + | \chi \rangle \quad = \langle - | \chi \rangle$$

$\chi(s_z)$ 就是态矢在泡利表象中的函数表达式。特别地, 对本征函数 $|m_s\rangle$ 的函数形式为 $\chi_{m_s}(s_z)$, 其中 m_s 表示 χ 是对应哪个本征值的本征函数, s_z 是 χ 函数的自变量。

对应自旋向上 ($m_s = \frac{1}{2}$) 的本征态的函数形式为:

$$\chi_{1/2}(s_z): \chi_{1/2}\left(\frac{\hbar}{2}\right), \chi_{1/2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)$$

由于

$$\chi_{1/2}\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \langle + | 1/2 \rangle = 1, \chi_{1/2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \langle - | 1/2 \rangle = 0$$

从而得

$$\chi_{1/2}(s_z) = \delta_{\frac{\hbar}{2}, s_z}$$

对应自旋向下 $\left(m_s = -\frac{1}{2}\right)$ 的本征态的函数形式为:

$$\chi_{-1/2}(s_z): \chi_{-1/2}\left(\frac{\hbar}{2}\right), \chi_{-1/2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)$$

由于

$$\chi_{-1/2}\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \langle + | -1/2 \rangle = 0, \chi_{-1/2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \langle - | -1/2 \rangle = 1$$

从而得

$$\chi_{-1/2}(s_z) = \delta_{-\frac{\hbar}{2}, s_z}$$

总之, 本征态 $|m_s\rangle$ 在 s_z 表象中的函数形式为

$$\chi_{m_s}(s_z) = \delta_{m_s, \hbar s_z} \quad (21)$$

正交归一化条件为

$$\sum_{s_z} \chi_{m_s}^*(s_z) \chi_{m'_s}(s_z) = \delta_{m_s, m'_s} \quad (22)$$

四、波函数具有 4 个自由度

(1) 在引进了自旋量子数后, 波函数的自由度应为 4 个。除空间坐标 $\mathbf{r}(x, y, z)$ 外, 还应该有 s_z , 即波函数可一般地写为 $\Psi(\mathbf{r}, s_z, t)$, 自变量的定义域为 $-\infty < x, y, z < +\infty$ 及 $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ 。

在自旋态空间中 $\Psi(\mathbf{r}, s_z, t)$ 的矩阵形式为

$$\Psi(\mathbf{r}, s_z, t) = \begin{pmatrix} \langle + | \Psi \rangle \\ \langle - | \Psi \rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \Psi_+(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_-(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

亦即

$$\Psi = \Psi_+(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_-(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (23)$$

归一化条件: