

关于等价电子组态波函数与 Young 盘间 变换性质的讨论

胡昆明[†]

(商丘师范学院物理与信息工程系, 商丘 476000)
(2005 年 3 月 30 日收到, 2005 年 7 月 18 日收到修改稿)

指出了等价电子组态波函数与 Young 盘间变换性质是么正的, 而不是厄米么正的. 指出了谱项波函数的符号错误.

关键词: 群论, 量子力学

PACC: 0365, 0220

文献 [1] 给出了用 Young 盘表达 f^N 组态谱项波函数的系统方法, 该方法是正确可行的. 但是, 文献 [1] 在表述等价电子组态波函数与 Young 盘间变换性质时出现失误, 其给出的一个谱项波函数也出现失误, 致使相应的系数变换矩阵都不满足正确的变换性质. 现分别指出如下:

第一, 文献 [1] 有下述论述: “在 N, S 给定的情况下, Young 盘和本征函数 $|nf^N WUSLM_L\rangle$ 之间有如下

变换关系: “.....这种变换是厄米么正的.” 文献 [1] 给出的变换性质是厄米么正的结论失误之处在于, 这种变换性质应是么正的, 不可能是厄米的. 下面给出变换性质不是厄米的一个具体例子.

文献 [2] 给出了确定等价电子组态谱项波函数的电子 Young 盘表示的理论和方法, 在其 (35) 式中给出的 d^3 电子组态的谱项波函数 ($S = 1/2, M_L = 2$) 的电子 Young 盘表示为:

$$\begin{array}{ccccc} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} & \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} & \begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} & \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} & \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 5 & \\ \hline \end{array} \end{array}$$

$$\begin{aligned} |d^3 {}^2D_{2,1}\rangle &= (5\sqrt{2} \quad -5\sqrt{3} \quad -2\sqrt{3} \quad -1 \quad +\sqrt{2}) \sqrt{140}, \\ |d^3 {}^2D_{2,2}\rangle &= (0 \quad +0 \quad +\sqrt{6} \quad -2\sqrt{2} \quad +4) \sqrt{30}, \\ |d^3 {}^2F_2\rangle &= (0 \quad +\sqrt{3} \quad -2\sqrt{3} \quad +1 \quad +2\sqrt{2}) 2\sqrt{6}, \\ |d^3 {}^2G_2\rangle &= (4\sqrt{6} \quad +9 \quad -2 \quad -5\sqrt{3} \quad -2\sqrt{6}) 2\sqrt{70}, \\ |d^3 {}^2H_2\rangle &= (6 \quad +\sqrt{6} \quad +2\sqrt{6} \quad +5\sqrt{2} \quad +2) 2\sqrt{30}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中, Young 盘中填补的数字 1, 2, 3, ..., 5 分别表示 $m_l = 2, 1, \dots, -2$ 的状态. 显然, 本征函数和电子 Young 盘之间的变换由 (1) 式中的系数矩阵给出, 设该系数矩阵为 C . 容易证明, C 的共厄矩阵 C^\dagger 与该系数矩阵的乘积 $C^\dagger C$ 等于单位矩阵, 即该系数矩阵为么正矩阵. 然而, 系数矩阵 C 的任一矩阵元 C_{ij}

($i \neq j$) 却不等于 C_{ji}^* ($i \neq j$), 即 $C^\dagger \neq C$, 则该系数矩阵不是厄米矩阵. 文献 [3] 也指出, 在轨道角动量耦合基下, 对 l^n 组态 LS 耦合波函数所作的变换为么正变换.

第二, 将文献 [1] (11) 式给出的算符 L_- 作用于文献 [1] 的 (25) 式和 (28) 式, 并应用文献 [2] 图 3 给

[†]E-mail: sqsyhkm@163.com

出的 $E_{i-1,i}$ 公式,可以分别得到

$$|\eta WU86\rangle = \frac{1}{\sqrt{16}} \left(2 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} + 3 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} + \sqrt{3} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} \right) \quad (2)$$

$$|\eta WU76\rangle = \frac{1}{\sqrt{112}} \left(6 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} - 5\sqrt{3} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} \right) \quad (3)$$

注意到文献 [1] 给出的 (29) 式中的

$$|\eta WU66\rangle = \sqrt{\frac{3}{7}} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} - \sqrt{\frac{1}{7}} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} + \sqrt{\frac{3}{7}} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array}$$

与 (2) 式中的 $|\eta WU86\rangle$ 和 (3) 式中的 $|\eta WU76\rangle$ 并不正交,导致该希尔伯特空间中的变换系数矩阵不是幺正的,原因何在?经分析,是上式第三项符号有

误,应改为

$$|\eta WU66\rangle = \frac{1}{\sqrt{7}} \left(-\sqrt{3} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} + \sqrt{3} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} \right) \quad (4)$$

易证,由 (2) (3) 和 (4) 式给出的变换系数矩阵满足幺正性.事实上,利用文献 [1] 给出的方法,即利用 (20) 式,用 L_+ 算符作用 $|\eta WU66\rangle$ 态也可证明 (4) 式是正确的.只有将文献 [1] 的 (29) 式改为本文的 (4) 式,才能使得 $M_L \leq 6$ 的希尔伯特空间中的变换系数矩阵是幺正矩阵.

笔者感谢张思远先生对本文工作的肯定.

[1] Zhang S Y 1984 *Acta Phys. Sin.* **33** 86 (in Chinese) [张思远 1984 物理学报 **33** 86]

[2] Harter W G and Patterson C W 1976 *Phys Rev A* **13** 1067

[3] Li X M and Chen J H 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1593 (in Chinese)

[李晓梅、陈健华 1999 物理学报 **48** 1593]

Discussion on the transformation property between the configuration wavefunction of the equivalent-electron and the Young tableau

Hu Kun-Ming[†]

(Physics and Information Engineering Department, Shangqiu Normal College, Shangqiu 476000, China)

(Received 30 March 2005; revised manuscript received 18 July 2005)

Abstract

The transformation property between the configuration wavefunction of the equivalent-electron and the Young tableau is pointed out to be unitary but not to be Hermite unitary. And a sign error of the spectrum item wavefunction is presented.

Keywords: group theory, quantum mechanics

PACC: 0365, 0220

[†]E-mail: sqsyhkm@163.com