January 16, 2018

# 2017-2018 秋季量子力学 (A) 期末试题

By 逸

#### January 16, 2018

#### Contents

1	运动方程(10分)	2
2	送分(10分)	2
3	微扰 (10 分)	3
4	势阱与束缚态(10分)	3
5	坐标变换(10 分)	3
6	三个自旋(10分)	4
7	许多电子(15分)	4
8	被限制的离子(15分)	5
9	自旋-轨道耦合(10分)	5

## 1 运动方程(10分)

- 一个电荷 q、质量 m 的粒子,受均匀静电场 E 的作用。
- (1) 写出系统的薛定谔方程。
- (2) 任取薛定谔方程的一个归一化的解  $\Psi(\mathbf{r},\mathbf{t})$ , 证明牛顿方程成立:

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}, \frac{d\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt} = q\mathbf{E}.$$
 (1)

## 2 送分(10分)

t=0 时, 氢原子波函数为:

$$\psi(t=0) = \frac{1}{\sqrt{10}} (2\psi_{1,0,0} + \psi_{2,1,0} + \sqrt{2}\psi_{2,1,1} + \sqrt{3}\psi_{2,1,-1}). \tag{2}$$

其中 n、l、m 分别为主量子数、角量子数、磁量子数。

- (1) 令  $E_1$  为  $\psi_{1,0,0}$  能量本征值,问  $\psi(t=0)$  的能量平均值为?
- (2) 求 t 时刻波函数  $\psi(t)$ 。
- (3) 时刻 t, 体系处于量子数 l=1, m=1 态的几率?

#### 3 微扰 (10分)

质量 m 的粒子约束在半径 R 的圆环上,运动满足方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2}{d\phi^2}\psi(\phi) = E\psi(\phi). \tag{3}$$

- (1) 求能量本征谱及对应的波函数。
- (2) 加微扰势:

$$\hat{H}' = A \sin\phi \cos\phi. \tag{4}$$

对基态和第一激发态, 计算一级微扰能量修正。

### 4 势阱与束缚态(10分)

一个质量 m 的粒子在球对称势场

$$V(r) = -C\delta(r - a) \tag{5}$$

中运动,C>0 是一个常数。问: 若仅存在一个束缚态(可将角动量 L 取为 0)时 C 最小值为何?

提示: L=0 时, 粒子在中心力场中运动满足径向方程:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial R_0(r)}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))R_0(r) = 0.$$
 (6)

## 5 坐标变换(10分)

质量 m 的粒子在势场

$$V(x, y, z) = A(x^{2} + y^{2} + 2\lambda xy) + B(z^{2} + 2\mu z)$$
(7)

中运动,其中 A>0、B>0, $|\lambda|>1$  和  $\mu$  为实常数。

(1) 引入变换

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} + \tilde{y}), y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} - \tilde{y}), z = \tilde{z}.$$
 (8)

证明拉普拉斯算符在变换下不变,并将势能改写为 $V(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$ 。

(2) 求该粒子的基态能量值。

### 6 三个自旋(10分)

一个系统由三个自旋 1/2 的非全同离子组成,哈密顿量为:

$$\hat{H} = \frac{A}{\hbar^2} \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 + \frac{B}{\hbar^2} (\hat{s}_1 + \hat{s}_2) \cdot \hat{s}_3. \tag{9}$$

其中  $\hat{s}_1$ 、 $\hat{s}_2$ 、 $\hat{s}_3$  分别为三个粒子的自旋算符。

(1) 令:

$$\hat{S}_{12} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2, \hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2 + \hat{s}_3. \tag{10}$$

试证哈密顿量  $\hat{H}$  可以写作:

$$\hat{H} = \frac{A}{2\hbar^2} (\hat{S}_{12}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 \hat{I}) + \frac{B}{2\hbar^2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_{12}^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 \hat{I}). \tag{11}$$

(2) 已知算符组  $(\hat{H}, \hat{S}^2_{12}, \hat{S}^2, \hat{S}_z)$  中的算符两两对易,求哈密顿量的全部本征值及简并度。

#### 7 许多电子(15分)

原子的能量是电子动能及库仑势能之和, 其哈密顿量可以写作:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \dots + \frac{\hat{p}_N^2}{2m} + U(\mathbf{r_1}, \dots, \mathbf{r_N}). \tag{12}$$

此处的相互作用势定义为:

$$U(\mathbf{r_1}, ..., \mathbf{r_N}) = -\frac{\mathbf{Z}\mathbf{e^2}}{|\mathbf{r_1}|} - ... - \frac{\mathbf{Z}\mathbf{e^2}}{\mathbf{r_N}} + \frac{\mathbf{e^2}}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|} + ... + \frac{\mathbf{e^2}}{|\mathbf{r_{N-1}} - \mathbf{r_N}|}.$$
 (13)

(1) 证明对任意正实数  $\lambda > 0$ , 等式

$$U(\lambda \mathbf{r_1}, ..., \lambda \mathbf{r_N}) = \lambda^{-1} \mathbf{U}(\mathbf{r_1}, ..., \mathbf{r_N}). \tag{14}$$

成立。

(2) 任取归一化波函数  $\Psi(\mathbf{r_1},...,\mathbf{r_N})$ ,令  $\langle \hat{T} \rangle_{\Psi}$  和  $\langle \hat{U} \rangle_{\Psi}$  分别为体系的总动能和总势能在这个态下的平均值。取实数  $\lambda > 0$ ,并定义波函数

$$\Phi_{\lambda}(r_1, ..., r_N) = \lambda^{3N/2} \Psi(\lambda \mathbf{r_1}, ..., \lambda \mathbf{r_N}). \tag{15}$$

试证明  $\Phi_{\lambda}(\mathbf{r_1},...,\mathbf{r_N})$  是归一化的,并且其能量最小值由下式给出:

$$E_{min}(\Phi_{\lambda}) = E(\lambda = -\frac{\langle \hat{U} \rangle_{\Psi}}{2\langle \hat{T} \rangle_{\Psi}}) = -\frac{\langle \hat{U} \rangle_{\Psi}^{2}}{4\langle \hat{T} \rangle_{\Psi}}.$$
 (16)

(3) 现取体系真实的归一化基态波函数  $\Psi_0({\bf r_1},...,{\bf r_N})$ , 设能量为 -B。又知 -B 与  $E_{min}(\Phi_{\lambda}^{(0)})$  相等(这里  $\Phi_{\lambda}^{(0)}=\lambda^{3N/2}\Psi_0(\lambda{\bf r_1},...,\lambda{\bf r_N})$ )。求在此基态下体系的总动能和总势能的平均值  $\langle \hat{T} \rangle_{\Psi_0}$  和  $\langle \hat{U} \rangle_{\Psi_0}$ 。

### 被限制的离子(15分)

某种离子处于自由空间时,具有角动量 L=1 和 S=0。将该离子在 x=y=1z=0 处嵌入一个晶体,它与晶体间的相互作用势能可以写作:

$$\hat{H}_1 = \frac{\alpha}{\hbar^2} (\hat{L}_x^2 - \hat{L}_y^2). \tag{17}$$

此外, z 方向上加一个外磁场, 会引起附加的微扰相互作用:

$$\hat{H}_2 = \frac{\beta B}{\hbar} \hat{L}_z. \tag{18}$$

- (1) 用轨道角动量升降算符表示该离子总的哈密顿量  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ 。 (2) 写出哈密顿量在下述三个态的空间中张成的矩阵。

$$\Psi_1 = |L = 1, L_z = -1\rangle, \Psi_2 = |L = 1, L_z = 0\rangle, \Psi_3 = |L = 1, L_z = 1\rangle.$$
 (19)

- (3) 求出该离子的全部能量本征值。
- (4) 磁场为 0 时,求该离子的基态  $\Phi_0$ 。

#### 自旋-轨道耦合(10分)

一个在中心力场中运动的电子的自旋-轨道相互作用哈密顿量

$$\hat{H}_{S-L} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (-\frac{e^2}{r}) \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \xi(r) \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}. \tag{20}$$

- (1) 求出  $\hat{H}_{S-L}$  算符的复共轭  $\hat{H}_{S-L}^*$ 。 (2) 找出一个幺正矩阵 U,使得

$$U^{\dagger} \hat{H}_{S-L} U = \hat{H}_{S-L}^*. \tag{21}$$