2019、

1、自由粒子的简并度。

对应于一个本征值有多个（一个以上）的本征函数的情况称为简并，

把对应于一个本征值的本征函数的个数称之为简并度

2. 波函数在坐标表象下为 $\psi(\vec{r},t)$，在动量表象下为 $C(\vec{p},t)$，在力学量Q表象下为矩阵 $A=\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \end{pmatrix}$，均归一化，指出 $|\psi(\vec{r},t)|^2$，$|C(\vec{p},t)|^2$，$|a_n(t)|^2$ 的物理意义，并指出三种波函数计算力学量 $F(\vec{r},\vec{p})$ 平均值的表达式。

$|\psi(\vec{r},t)|^2$：t时刻在 $\psi(\vec{r},t)$ 描写的状态下测量粒子坐标为 $\vec{r}_n$ 的概率密度。

$|\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r}$ 表示，t时刻在 $\psi(\vec{r},t)$ 描写的状态下测量粒子坐标所得结果在 $\vec{r}$ 到 $\vec{r}+d\vec{r}$ 之间的几率。

$|C(\vec{p},t)|^2$：t时刻在 $C(\vec{p},t)$ 描写的状态下测量粒子动量为 $\vec{p}_n$ 的概率密度。

$|C(\vec{p},t)|^2 d\vec{p}$：t时刻在 $C(\vec{p},t)$ 描写的状态下测量粒子动量所得结果在 $\vec{p}$ 到 $\vec{p}+d\vec{p}$ 之间的几率

$|a_n(t)|^2$：t时刻在 $\psi(\vec{r},t)$ 描写的状态下测量力学量Q所得结果为 Q_n 的几率

（还有一种：$|a_q(t)|^2 dq$ 表示在 $\psi(\vec{r},t)$ 所描写的状态下测量力学量Q所得结果在 q 到 q+dq 之间的几率）

在坐标表象下

$$\bar{F}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\vec{r},t)\,\hat{F}(\vec{r},-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}})\,\psi(\vec{r},t)\,d\vec{r}$$

在动量表象下

$$\bar{F}=\int_{-\infty}^{+\infty}C^*(\vec{p},t)\,\hat{F}(\vec{p},i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}})\,C(\vec{p},t)\,d\vec{p}$$

在Q表象下

$$\bar{F}=\sum_{mn}a_m^*(t)\,F_{mn}\,a_n(t)$$

3、用玻尔理论解释氢原子光谱，并指出局限性，德布罗意是如何解决的？

① 电子在原子中不可能沿着经典理论中所允许的每一条轨道运动，而是按照其中一组特定的轨道运动，沿这一组特定的轨道运动的电子处于稳定状态。（定态）

② 当电子保持在这种状态时，不吸收也不发射辐射，只有当电子由一个定态跃迁到另一个定态时，才能发射或吸收辐射。

③ 电子由 E_m 的定态跃迁到 E_n 的定态时所吸收或发射的辐射频率为 ν，且满足：$\nu = \dfrac{|E_n - E_m|}{\hbar}$ （h，不是 ħ）

缺陷：主要是由于玻尔将微观粒子（电子、原子等）看做是经典力学中的质点，从而把经典力学的规律运用在微粒上。

德布罗意在光有波粒二象性的启示下，提出微粒具有波粒二象性的假说，通过德布罗意关系
$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} = \dfrac{h}{\lambda}\vec{n} = \hbar\vec{k} \end{cases}$$
将 E、$\vec{p}$、λ、ν 联系在一起。

等式左边的 E、$\vec{p}$ 描写粒子性，右边的 ω、$\vec{k}$ 描写波的特性。

大题

1、(0,a) 的一维无限深势阱中，能量本征值与本征函数

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0<x<a \\ 0, & x\le 0,\ x\ge a \end{cases} \qquad n=1,2\cdots$$

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

2019 3
2019 2

7. 证、算符 $\hat{F}$ 不显含时间. 则 $\frac{d\bar{F}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{H}]$ P84. ①

① 在波函数 $\psi(x,t)$ 所描写的态中、力学量 $\hat{F}$ 的期望值为 $\bar{F}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\hat{F}\psi(x,t)dx$

$\psi(x,t)$ 是t的函数. $\hat{F}$ 也可能含t. 所以 $\bar{F}$ 一般是t的函数.

② 对 $\bar{F}$ 求时间微商.

$$\frac{d\bar{F}}{dt}=\int\psi^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}\psi dx+\int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{F}\psi dx+\int\psi^*\hat{F}\frac{\partial\psi}{\partial t}dx \quad ② \quad (分别取\frac{d}{dt})$$

(看到 $\bar{F}$ 应想到期望值公式、看到 ψ、ψ^* 应想到S方程)

由薛定谔方程有 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$

$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi$. $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi)^*$ 代入②中.

$$\frac{\partial\bar{F}}{\partial t}=\int \cancel{\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi)^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}}\psi^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}\psi dx+\int-\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi)^*\hat{F}\psi dx+\int\psi^*\hat{F}\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi dx$$

因为 $\hat{H}$ 为厄米算符. 即 $\int(\hat{H}\psi)^*\hat{F}\psi dx=\int\psi^*\hat{H}\hat{F}\psi dx$

原式: $\frac{\partial\bar{F}}{\partial t}=\int\psi^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}\psi dx+\frac{1}{i\hbar}\int\psi^*(\hat{F}\hat{H}-\hat{H}\hat{F})\psi dx$

$$\Rightarrow \frac{\partial\bar{F}}{\partial t}=\overline{\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}}+\frac{1}{i\hbar}\overline{(\hat{F}\hat{H}-\hat{H}\hat{F})}$$

引入 $\hat{F}\hat{H}-\hat{H}\hat{F}\equiv[\hat{F},\hat{H}]$ 对易式.

得 $\frac{\partial\bar{F}}{\partial t}=\overline{\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}}+\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{F},\hat{H}]}$

若 $\hat{F}$ 不显含时间、则 $\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}=0$、即 $\overline{\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}}=0$

$$\Rightarrow \frac{\partial\bar{F}}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{F},\hat{H}]}$$

若 $\hat{F}$ 既不显含时间. 又与 $\hat{H}$ 对易. 则 $\frac{\partial\bar{F}}{\partial t}=0$

即 $\hat{F}$ 的期望不随时间而改变.

称满足 $\frac{\partial\bar{F}}{\partial t}=0$ 的力学量 $\hat{F}$ 为运动恒量.

3、与2020同。

$\hat{H}=\begin{bmatrix}1 & a\\ a & 3\end{bmatrix}$ $a\to 0$.

(1) 求本征值与本征函数

(2) 用微扰法求能级至二级修正

(1) 根据 $\hat{H}$ 的本征方程 $\hat{H}\psi=\lambda\psi$. λ 为 $\hat{H}$ 的本征值. ψ 为 $\hat{H}$ 属于 λ 的本征函数

$(\lambda E-H)\psi=0$. 得 $|\lambda E-H|=0$ 即 $\begin{vmatrix}\lambda-1 & a\\ a & \lambda-3\end{vmatrix}=0$

$(\lambda-1)(\lambda-3)-a^2=0$ 由求根公式可得 $\lambda_1=2+\sqrt{1+a^2}$ $\lambda_2=2-\sqrt{1+a^2}$

$\lambda_1=2+\sqrt{1+a^2}$ 时

$(\lambda_1 E-H)\psi=0 \Rightarrow \begin{pmatrix}1+\sqrt{1+a^2} & -a\\ -a & -1+\sqrt{1+a^2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\ B\end{pmatrix}=0$ 得 $B=\dfrac{1+\sqrt{1+a^2}}{a}A$

又根据 $|A|^2+|B|^2=1$

得 $\psi_1=\dfrac{a}{\sqrt{2(1+a^2+\sqrt{1+a^2})}}\begin{pmatrix}1\\ \dfrac{1+\sqrt{1+a^2}}{a}\end{pmatrix}$

$\lambda_2=2-\sqrt{1+a^2}$

$(\lambda_2 E-H)\psi=0 \Rightarrow \begin{pmatrix}1-\sqrt{1+a^2} & -a\\ -a & -1-\sqrt{1+a^2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C\\ D\end{pmatrix}=0$ 得 $C=\dfrac{-(1+\sqrt{1+a^2})}{a}D$

$|C|^2+|D|^2=1$

得 $\psi_2=\dfrac{a}{\sqrt{2(1+a^2+\sqrt{1+a^2})}}\begin{pmatrix}-\dfrac{(1+\sqrt{1+a^2})}{a}\\ 1\end{pmatrix}$

(2) $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 3\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & a\\ a & 0\end{pmatrix}$

根据非简并微扰理论

$\hat{H}'$ 矩阵是在 $\hat{H}_0$ 表象下给出，即 H'_{mn} 皆为 $\hat{H}'$ 中的矩阵元

根据 $E_n=E_n^{(0)}+H'_{nn}+\sum\limits_{m\neq n}\dfrac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$

$E_1^{(0)}=1$. $E_2^{(0)}=3$. $H'_{11}=0$ $H'_{22}=0$

$E_1=E_1^{(0)}+H'_{11}+\dfrac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}=1-\dfrac{1}{2}|a|^2$ (写 a^2 也可以)

$E_2=E_2^{(0)}+H'_{22}+\dfrac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}=3+\dfrac{1}{2}a^2$.

其实根据 $x\to 0$. $\sqrt{1+x^2}=1+\frac{1}{2}x^2$ 可知

λ_1 展开为 $2+1+\frac{1}{2}a^2=3+\frac{1}{2}a^2$ 与 E_2 同. λ_2 展开为 $2-1-\frac{1}{2}a^2=1-\frac{1}{2}a^2$ 与 E_1 同

$$\psi=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}R_{21}(r) & Y_{11}(\theta,\varphi)\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r) & Y_{10}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$$

(1) 求轨道角动量及自旋角动量的Z分量的可能取值及几率

(2) 电子自旋向上的几率

(3) $\overline{(\Delta S_x)^2}\cdot\overline{(\Delta S_y)^2}$ 为多少？是否满足不确定关系

已知 $\psi=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}R_{21}(r) & Y_{11}(\theta,\varphi)\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r) & Y_{10}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$ 是 $\psi=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\chi_{\frac{1}{2}}-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\chi_{-\frac{1}{2}}$

的矩阵形式、ψ 已归一化，根据以上信息可列出表格

	$\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\chi_{\frac{1}{2}}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\chi_{-\frac{1}{2}}$
$\hat{L}_z=m\hbar$	$\hbar$	$0\hbar=0$
$\hat{L}^2=l(l+1)\hbar^2$	$2\hbar^2$	$2\hbar^2$
$\hat{S}_z$	$\frac{\hbar}{2}$	$-\frac{\hbar}{2}$
几率幅 C_i	$\frac{1}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$
几率 $\lvert C_i\rvert^2$	$\frac{1}{4}$	$(-\frac{\sqrt{3}}{2})^2=\frac{3}{4}$

$\overline{L_z}=\frac{1}{4}\times\hbar+0=\frac{1}{4}\hbar$

$\overline{L^2}=2\hbar^2\cdot\frac{1}{4}+2\hbar^2\times\frac{3}{4}=2\hbar^2$

$\hat{L}_z$ 取值为 $\begin{cases}\hbar\\0\end{cases}$ 几率 $\begin{cases}\frac{1}{4}\\\frac{3}{4}\end{cases}$

电子自旋向上的几率为 $\frac{1}{4}$.

(3) 灵感来自7.2

$\psi=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\chi_{\frac{1}{2}}-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\chi_{-\frac{1}{2}}$

在自旋空间中，可将 ψ 可表示为 $\psi=\frac{1}{2}\psi_1(r)\chi_{\frac{1}{2}}-\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_2(r)\chi_{-\frac{1}{2}}$

其中 $\chi(S_z)=\frac{1}{2}\chi_{\frac{1}{2}}-\frac{\sqrt{3}}{2}\chi_{\frac{1}{2}}$ 自旋波函数部分

已知$\hat{S}_z$表象下 $\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\chi_{-\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

则 $\chi(S_z)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{3}\end{pmatrix}$

$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$. $\hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$

$\bar{S}_x=\langle\chi(S_z)|\hat{S}_x|\chi(S_z)\rangle=\frac{1}{4}\cdot\frac{\hbar}{2}(1\ -\sqrt{3})\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{3}\end{pmatrix}$

$=-\frac{\sqrt{3}}{4}\hbar$

$\overline{\hat{S}_x^2}=\frac{\hbar^2}{4}\left[\langle\chi(S_z)|\hat{S}_x^2|\chi(S_z)\rangle=\frac{\hbar^2}{4}\times\frac{1}{4}(1\ -\sqrt{3})\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{3}\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{16}\times4=\frac{\hbar^2}{4}\right]$

$\overline{(\Delta S_x)^2}=\overline{\hat{S}_x^2}-(\bar{S}_x)^2=\frac{\hbar^2}{4}-\frac{3\hbar^2}{4^2}=\frac{4}{16}\hbar^2-\frac{3}{16}\hbar^2=\cancel{-\frac{3}{16}\hbar^2}$ $\frac{\hbar^2}{16}$

$\bar{S}_y=\langle\chi(S_z)|\hat{S}_y|\chi(S_z)\rangle=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{2}(1\ -\sqrt{3})\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{3}\end{pmatrix}$

$=0$

$\overline{\hat{S}_y^2}=\frac{\hbar^2}{4}\cdot\left[\langle\chi(S_z)|\hat{S}_y^2|\chi(S_z)\rangle\right]=\frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{4}(1\ -\sqrt{3})\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{3}\end{pmatrix}$

$\overline{(\Delta S_y^2)}=\overline{\hat{S}_y^2}-\bar{S}_y^2=\frac{\hbar^2}{4}=\frac{\hbar^2}{4}$

$\overline{(\Delta S_x)^2}\cdot\overline{(\Delta S_y)^2}=\cancel{\frac{3\hbar^2}{16}\times\frac{\hbar^2}{4}=-\frac{3}{64}\hbar^2}$ $\frac{1}{64}\hbar^4$