福建省物理教育专业专升本
自学考试系列辅导材料之五

# 量子力学

福建师范大学物理系编
二０００年六月

# 目　　录

# 第一章 绪 论

## 一、主要内容

1、了解黑体辐射、光电效应、康普顿效应等现象揭露了光的波粒二象性。

2、了解原子结构的玻尔量子理论的两条基本假设和索末菲的量子化条件。
两条基本假设：
（1）原子中的电子在库仑力作用下，在一些许可的轨道上运动，仅当电子的轨道角动量 $L = n\hbar(n = 1,2,3,\cdots)$，这些轨道才是许可的轨道。电子在这些轨道上运动既不吸收也不发出辐射，即这是一系列的定态。
（2）当电子由一个定态跃迁到另一个定态时，才产生辐射的吸收或发射现象。电子由能量为 $E_m$ 的定态跃迁到能量为 $E_n$ 的定态时所吸收或发射的辐射频率 $\vartheta$，满足下面的关系

$$\vartheta = \frac{|E_n - E_m|}{h}$$

索末菲的量子化条件

$$\oint pdq = nh$$

$q$ 是电子的一个广义坐标，P 是对应的广义动量，回路积分是沿运动轨道积一圈，n 是正整数，称为量子数。

3、掌握德布罗意关于微观粒子的波粒二象性的假设，掌握德布罗意公式（或称德布罗意关系式）：

$$\begin{cases} E = h\vartheta = \hbar\omega \\ P = \dfrac{h}{\lambda}\vec{n} = \hbar\vec{k} \end{cases}$$

其中 $\vec{n}$ 表示沿微观粒子运动方向的单位矢量，$\omega = 2\pi\vartheta$ 表示角频率，$\lambda$ 为相应的德布罗意波的波长，$\vec{k} = \dfrac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$ 称为波矢。

4、掌握德布罗意波波长的计算方法：
（1）若电子被 V 伏的电势差加速，则相应的德布罗意波的波长为

$$\lambda_e \approx \frac{12.25}{\sqrt{V}}\overset{\circ}{A}$$

（2）对一般的自由粒子，设其速度远小于光速，则相应的德布罗意波的波长为

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{\sqrt{2\mu E}}$$

5、戴维孙、革末的电子衍射等实验验证了德布罗意假设和德布罗意关系式的正确性。

## 二、例题

1、温度 T=OK 附近，钠的价电子能量约为 3 电子伏特，求德布罗意波长。

解：$\lambda_e = \dfrac{12.25}{\sqrt{V}} = \dfrac{12.25}{\sqrt{3}} = 7.08(\overset{o}{A})$

2、求与下列各粒子相关的德布罗意波长

（1）能量为 100 电子伏特的自由电子；

（2）能量为 0.1 电子伏特的自由中子；

（3）能量为 0.1 电子伏特、质量为 1 克的自由粒子；

（4）温度 T=1K 时，具有动能 $E=\dfrac{3}{2}kT$ 的氦原子，其中 k 为玻尔兹曼常数。

解：（1）$\lambda_e = \dfrac{12.25}{\sqrt{V}} = \dfrac{12.25}{\sqrt{100}} = 1.225(\overset{\circ}{A})$

（2）$\lambda_n = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{\sqrt{2\mu_n E}} = \dfrac{6.626\times10^{-34}}{\sqrt{2\times1.67\times10^{-27}\times0.1\times1.6\times10^{-19}}}$

$$= 9.0\times10^{-11}(m) = 0.90\,\overset{\circ}{A}$$

（3）$\lambda_m = \dfrac{h}{\sqrt{2\mu E}} = \dfrac{6.626\times10^{-34}}{\sqrt{2\times1\times10^{-3}\times0.1\times1.6\times10^{-19}}} = 1.17\times10^{-22}(m)$

$$= 1.17\times10^{-12}\,\overset{\circ}{A}$$

（4）$\lambda_{He} = \dfrac{h}{\sqrt{2\mu_{He}E}} = \dfrac{h}{\sqrt{2\mu_{He}\times\frac{3}{2}KT}}$

$$= \frac{6.626\times10^{-34}}{\sqrt{2\times4\times1.67\times10^{-27}\times\frac{3}{2}\times1.38\times10^{-23}\times1}}$$

$$= 1.258\times10^{-9}(m) = 12.58\,\overset{\circ}{A}$$

3、若电子和中子的德布罗意波长等于 $1\overset{o}{A}$，试求它们的速度、动量和动能。

解：$\lambda = \dfrac{h}{p}$

$\therefore\ p_e = p_n = \dfrac{h}{\lambda} = \dfrac{6.626\times10^{-34}}{1\times10^{-10}} = 6.626\times10^{-24}$（千克米/秒）

$v_e = \dfrac{p_e}{\mu_e} = \dfrac{6.626\times10^{-24}}{9.1\times10^{-31}} = 7.3\times10^{6}$（米/秒）

$$T_e = \frac{{p_e}^2}{2\mu_e} = \frac{(6.626\times10^{-24})^2}{2\times9.1\times10^{-31}} = 2.412\times10^{-17}(J) = 1.5\times10^{2}\,eV$$

$$v_n = \frac{p_n}{\mu_n} = \frac{6.626\times10^{-24}}{1.67\times10^{-27}} = 4\times10^3 (m/s)$$

$$T_n = \frac{{p_n}^2}{2\mu_n} = \frac{(6.626\times10^{-24})^2}{2\times1.67\times10^{-27}} = 1.31\times10^{-20}(J) = 0.08eV$$

4、两个光子在一定条件下可以转化为正负电子对，如果两电子的能量相等，问要实现这种转化，光子的波长最大是多少？

解：$2\frac{hc}{\lambda} \ge 2\mu_e c^2$

$$\therefore \lambda \le \frac{h}{\mu_e c} = \frac{6.626\times10^{-34}}{9.1\times10^{-31}\times3\times10^8}$$

$$= 2.43\times10^{-12}(m) = 2.43\times10^{-2}\ \overset{\circ}{A}$$

$$\therefore \lambda_{\max} = 2.43\times10^{-2}\ \overset{\circ}{A}$$

5、设一电子被电势差 U 所加速，最后打在靶上，若电子的动能转化为一光子，求当这光子相应的光波波长分别为 5000 $\overset{\circ}{A}$（可见光）、1 $\overset{\circ}{A}$（x 射线）、0.001 $\overset{\circ}{A}$（$\gamma$ 射线）时，加速电子所需的电势差各是多少？

解：$eU = \frac{hc}{\lambda}$

$$\therefore U_1 = \frac{hc}{e\lambda_1} = \frac{6.626\times10^{-34}\times3\times10^8}{1.6\times10^{-19}\times5000\times10^{-10}} = 2.48(V)$$

$$U_2 = \frac{hc}{e\lambda_2} = 1.24\times10^4(V)$$

$$U_3 = \frac{hc}{e\lambda_3} = 1.24\times10^7(V)$$

# 第二章　波函数和薛定谔方程

## 一、主要内容

（一）波函数

1、量子力学的基本假设（原理）之一：微观体系（粒子）的状态用波函数 $\Psi(\vec{r},t)$ 完全描述。

2、波函数的统计解释：波函数在空间中某一点的强度（振幅绝对值的平方）和在该点找到粒子的几率成正比。

3、波函数的标准条件：单值性、有限性、连续性。

4、波函数的两个特性

（1）常数因子不定性：$C\Psi(\vec{r},t)$ 和 $\Psi(\vec{r},t)$ 所描述的是同一个态。

（2）位相因子不定性 $\Psi(\vec{r},t)e^{i\delta}$（$\delta$ 为实常数）与 $\Psi(\vec{r},t)$ 描述同一个态。

5、波函数的归一化

（1）归一化条件：$\int_{\infty}\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d\tau = 1$

（2）几率密度：$\omega(\vec{r},t) = \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2$

6、仅与坐标有关的力学量的平均值

若 $\Psi$ 已归一化，则

$$\overline{x} = \int_{\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

$$\overline{x^2} = \int_{\infty} x^2\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx$$

$$\overline{F(\vec{r})} = \int_{\infty} F(\vec{r})\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d\tau$$

（二）态叠加原理——量子力学的基本假设（原理）之二

1、态叠加原理的两种表述方式：

（1）如果 $\Psi_1$ 和 $\Psi_2$ 是体系的可能状态，那末，它们的线性迭加

$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$（$C_1, C_2$ 为复常数）

也是这个体系的一个可能状态。

（2）当粒子处于态 $\Psi_1$ 和态 $\Psi_2$ 的线性迭加态 $\Psi$ 时，粒子是既处在态 $\Psi_1$，又处在态 $\Psi_2$。

2、态叠加原理导致了在叠加态下观测结果的不确定性。

（三）薛定谔方程——量子力学的基本假设（原理）之三

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + U(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

1、特例：若势场不显含时间，则有定态波函数

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$$

存在，$\psi(\vec{r})$ 满足定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

2、推论：几率守恒定律

（1）微分表达式：$\frac{\partial\omega}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{J} = 0$

（2）积分表达式：$\int_V \frac{\partial\omega}{\partial t}d\tau = -\oint_s \vec{J}\cdot d\vec{s} = -\oint_s J_n ds$

其中 $\omega=\left|\Psi\right|^2=\Psi^*\Psi$，$\vec{J}=\frac{i\hbar}{2\mu}(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)$，面积分是对包围体积 V 的封闭面 S 进行的。

（四）几个典型的一维定态问题

1、一维无限深势阱：

$$U(x)=\begin{cases}0 & 0<x<a\\ \infty & x\le 0, x\ge a\end{cases},$$

能量本征值 $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$，　$n=1,2,3,\cdots$。

能量本征函数 $\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}x) & 0<x<a\\ 0 & x\le 0, x\ge a\end{cases}$

2、线性谐振子：

$$U(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

能量本征值 $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$　$n=0,1,2,\cdots$

能量本征函数 $\psi_n(x)=N_nH_n(\alpha x)\exp(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2)$

$$\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}},\quad \omega=\sqrt{\frac{k}{\mu}},\quad N_n=(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^n n!})^{1/2}$$

3、势垒贯穿

粒子在能量 E 小于势垒高度时仍能贯穿势垒的现象，称为隧道效应。

方形势垒 $U(x)=\begin{cases}U_0, & 0<x<a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}$

能量本征值：任何正值；

当 $K_3a>>1$ 时，透射系数为

$$D=D_0e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu(U_0-E)}a}$$

对于任意形状势垒 $U(x)$,透射系数为

$$D=D_0\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2\mu[U(x)-E]}dx\right\}$$

## 二、例题

1、设粒子的归一化波函数为 $\psi(x,y,z)$, 求

i)在 $(x,x+dx)$ 范围内找到粒子的几率；

ii)在 $(y_1, y_2)$ 范围内找到粒子的几率；

iii)在 $(x_1, x_2)$ 及 $(z_1, z_2)$ 范围内找到粒子的几率。

解：设波函数 $\psi(x,y,z)$ 已归一化，则

i)在（$x, x+dx)$ 范围内找到粒子的几率为

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(x,y,z)\right|^2 dz \cdot dx$$

ii)在 $(y_1, y_2)$ 范围内找到粒子的几率为

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{y_1}^{y_2} dy \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi\right|^2 dz$$

iii)在 $(x_1, x_2)$ 及 $(z_1, z_2)$ 范围内找到粒子的几率为

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{z_1}^{z_2} \left|\psi\right|^2 dz$$

2、设粒子的归一化波函数为 $\psi(r,\theta,\varphi)$, 求

i)在球壳 $(r, r+dr)$ 内找到粒子的几率

ii)在 $(\theta\ ,\varphi)$ 方向的立体角 $d\Omega$ 内找到粒子的几率

解：设波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 已归一化，则

i)在球壳（$r, r+dr)$ 内找到粒子的几率为

$$\int_o^{\pi} \sin\theta d\theta \int_o^{2\pi} \left|\psi\right|^2 d\varphi \cdot r^2 dr$$

ii)在 $(\theta\ ,\varphi)$ 方向的立体角 $d\Omega$ 内找到粒子的几率为

$$\int_o^{\infty} \left|\psi\right|^2 r^2 dr \cdot d\Omega \text{或} \int_o^{\infty} \left|\psi\right|^2 r^2 dr \cdot \sin\theta d\theta d\varphi$$

3、下列波函数所描述的状态是否为定态？为什么？

i) $\Psi_1(x,t) = \psi_1(x) e^{ix - \frac{i}{\hbar}Et} + \psi_2(x) e^{-ix - \frac{i}{\hbar}Et}$

$[\psi_1(x) \neq \psi_2(x)]$

ii) $\Psi_2(x,t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}$ $\qquad (E_1 \neq E_2)$

iii) $\Psi_3(x,t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + \psi(x) e^{\frac{i}{\hbar}Et}$

解：波函数具有 $\psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ 形式的状态叫定态

i) $\Psi_1(x,t) = [\psi_1(x) e^{ix} + \psi_2(x) e^{-ix}] e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$，$\therefore$ 是定态

ii)不是定态

iii)不是定态

4、对于一维自由粒子，设 $\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}$，求 $\Psi(x,t)$

解：$\Psi(x,t)=\Psi(x,o)e^{\frac{-i}{\hbar}Et}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(p_0x-Et)}$

其中 $E=\frac{{p_0}^2}{2\mu}$

5、由下列两个定态波函数计算几率流密度

i) $\psi_1(x)=Ae^{ikx}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

ii) $\psi_2(x)=Ae^{-ikx}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

解：$\vec{J}=\frac{i\hbar}{2\mu}(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)$

在直角坐标系中，$\nabla=\vec{e}_x\frac{\partial}{\partial x}+\vec{e}_y\frac{\partial}{\partial y}+\vec{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$

i) $\psi_1{}^*(x)=A^*e^{-ikx}e^{\frac{i}{\hbar}Et}$

$$\begin{aligned}\vec{J}_1&=\frac{i\hbar}{2\mu}[\psi_1(x)\nabla\psi_1{}^*(x)-\psi_1{}^*(x)\nabla\psi_1(x)]\\&=\frac{i\hbar}{2\mu}[Ae^{i\hbar x}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\frac{\partial}{\partial x}(A^*e^{-ikx}e^{\frac{i}{\hbar}Et})-A^*e^{-ikx}e^{\frac{i}{\hbar}Et}\frac{\partial}{\partial x}(Ae^{ikx}e^{-\frac{i}{\hbar}Et})]\vec{e}_x\\&=\frac{i\hbar}{2\mu}[-ik|A|^2-ik|A|^2]\vec{e}_x\\&=\frac{\hbar k}{\mu}|A|^2\vec{e}_x\end{aligned}$$

$\vec{J}_1(x)$ 沿 $x$ 轴正方向，所以 $\psi_1(x)$ 表示沿 $x$ 轴正方向传播的平面波。

ii)同理可得 $\vec{J}_2(x)=-\frac{\hbar k}{\mu}|A|^2\vec{e}_x$

$\therefore\ \psi_2(x)$ 表示沿 $x$ 轴负向传播的平面波。

6、由下列两个定态波函数计算几率流密度

$\varphi_1(r)=\frac{A}{r}e^{ikr}$，$\varphi_2(r)=\frac{A}{r}e^{-ikr}$

从所得结果证明：$\varphi_1(r)$ 表示向外传播的球面波，$\varphi_2(r)$ 表示向内传播的球面波（即向原点）

解：在球坐标系中 $\nabla=\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

i) $\varphi_1(r)$ 仅与 $r$ 有关，与 $\theta,\varphi$ 无关，$\varphi^*(r)=\frac{A^*}{r}e^{-ikr}$

$$\vec{J}_1(r)=\frac{i\hbar}{2\mu}[\varphi_1(r)\nabla\varphi_1^*(r)-\varphi_1^*(r)\nabla\varphi_1(r)]$$

$$=\frac{i\hbar}{2\mu}[\varphi_1(r)\frac{\partial\varphi_1^*(r)}{\partial r}-\varphi_1^*(r)\frac{\partial\varphi_1(r)}{\partial r}]\vec{e}_r$$

$$=\frac{i\hbar}{2\mu}[\frac{-ik|A|^2}{r^2}-\frac{ik|A|^2}{r^2}]\vec{e}_r$$

$$=\frac{\hbar k|A|^2}{\mu r^2}\vec{e}_r$$

$\vec{J}_1(r)$ 与 $\vec{e}_r$ 同向，$\therefore\varphi_1(r)$ 表示向外传播的球面波。

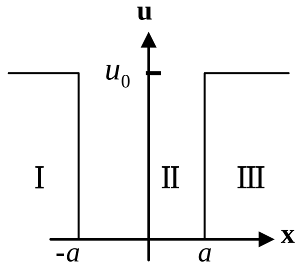
ii）同理可得：$\vec{J}_2(r)=-\frac{\hbar k|A|^2}{\mu r^2}\vec{e}_r$

$\vec{J}_2(r)$ 与 $\vec{e}_r$ 反向，即 $\varphi_2(r)$ 表示向内传播的球面波。

7、一粒子在一维势场 $u(x)=\begin{cases}u_{0,} & |x|>a\\ 0, & |x|\le a\end{cases}$ 中运动，其中 $u_0>0$，求束缚态能级所满足的方程。

解：$\because$ 是束缚态，$\therefore 0<E<u_0$

（1）分区列方程




$$\begin{cases}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi_I}{dx^2}+u_0\psi_I=E\psi_I, & x<-a\\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}=E\psi_{II}, & -a\le x\le a\\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2}+u_0\psi_{III}=E\psi_{III}, & x>a\end{cases}$$

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}(u_0-E)\psi_I=0$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi_{II}=0$$

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}(u_0-E)\psi_{III}=0$$

（2）求通解

令 $\alpha^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}(u_0-E)$，$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}$

$$\therefore \psi_I = A_1 e^{\alpha x} + A_2 e^{-\alpha x}$$
$$\psi_{II} = B\sin(kx+\delta)$$
$$\psi_{III} = c_1 e^{\alpha x} + c_2 e^{-\alpha x}$$

（3）利用波函数的标准条件

i)有限性

当 $x \to -\infty$ 时，$\psi_I \to 0$，$\therefore A_2 = 0$，$\therefore \psi_I = A_1 e^{\alpha x}$

当 $x \to \infty$ 时，$\psi_{III} \to 0$，$\therefore C_1 = 0$，$\therefore \psi_{III} = C_2 e^{-\alpha x}$

ii)连续性

$$\begin{cases} \psi_I\big|_{x=-a} = \psi_{II}\big|_{x=-a} \\ \left.\dfrac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=-a} = \left.\dfrac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=-a} \end{cases} \qquad \begin{cases} A_1 e^{-\alpha a} = B\sin(-ka+\delta) & (1) \\ A_1\alpha e^{-\alpha a} = Bk\cos(-ka+\delta) & (2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_{II}\big|_{x=a} = \psi_{III}\big|_{x=a} \\ \left.\dfrac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=a} = \left.\dfrac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=a} \end{cases} \qquad \begin{cases} B\sin(ka+\delta) = C_2 e^{-\alpha a} & (3) \\ Bk\cos(ka+\delta) = -C_2\alpha e^{-\alpha a} & (4) \end{cases}$$

$(1)\div(2)$ 得： $tg(-ka+\delta) = \dfrac{k}{\alpha}$ （5）

$(3)\div(4)$ 得： $tg(ka+\delta) = -\dfrac{k}{\alpha}$ （6）

由（5）得：$-ka+\delta = n_1\pi + tg^{-1}\dfrac{k}{\alpha}$，  $n_1 = 0,\pm1,\cdots$

由（6）得：$ka+\delta = n_2\pi - tg^{-1}\dfrac{k}{\alpha}$，  $n_2 = 0,\pm1,\cdots$

两式相加：$\delta = \dfrac{(n_1+n_2)\pi}{2} = \dfrac{m}{2}\pi$，  $m = n_1+n_2 = 0,\pm1,\cdots$

实际上只有两组独立的解，分别对应

i)当 $\delta = 0$ 时，  $tgka = -\dfrac{k}{\alpha}$

ii)当 $\delta = \dfrac{\pi}{2}$ 时，  $ctgka = \dfrac{k}{\alpha}$

这就是束缚态能级所满足的方程。

8、若有一质量 $\mu = 0.001kg$ 的粒子以速度 $v = 10^{-2}m/s$ 在宽度 $a = 10^{-2}m$ 的一维无限深势阱中运动，求对应能级的量子数。

解：对一维无限深势阱而言，其能量本征值为

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, \qquad n = 1,2,3,\cdots$$

而该粒子的能量为 $E=\frac{1}{2}\mu\nu^2$

$$\therefore n^2=\frac{2\mu E_n a^2}{\pi^2\hbar^2}=\frac{\mu^2\nu^2 a^2}{\pi^2\hbar^2}=\frac{(1\times10^{-3})^2\times(10^{-2})^2\times(10^{-2})^2}{(3.14)^2\times(1.05\times10^{-34})^2}$$

$$\therefore n=3\times10^{26}$$

9、设 $\psi(x)=\begin{cases}Ax(a-x), & 0\le x\le a,\\ 0\ , & x<0,x>a\end{cases}$

求归一化常数 A，并问在何处找到粒子的几率最大？

解：$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx=\int_0^a|A|^2x^2(a-x)^2dx=\int_0^a|A|^2x^2(a^2-2ax+x^2)dx$

$$=|A|^2(\frac{a^2}{3}x^3-\frac{a}{2}x^4+\frac{1}{5}x^5)\Big|_0^a=|A|^2\frac{a^5}{30}=1$$

$$\therefore A=\sqrt{\frac{30}{a^5}}$$

$\therefore$归一化的波函数为 $\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x), & 0\le x\le a\\ 0\ , & x<0,x>a\end{cases}$

几率密度为

$$\omega=|\psi|^2=\begin{cases}\frac{30}{a^5}x^2(a-x)^2, & 0\le x\le a\\ 0\ , & x<0,x>a\end{cases}$$

令 $\frac{d\omega}{dx}=\frac{30}{a^5}(2a^2x-6ax^2+4x^3)=0$

$$x(a^2-3ax+2x^2)=0$$

$\therefore x_1=0$，$x_2=\frac{a}{2}$，$x_3=a$

经检验当 $x_2=\frac{a}{2}$时，几率最大

10、若粒子只在一维空间中运动，它的状态可用波函数

$$\Psi(x,t)=\begin{cases}A\sin(\frac{\pi}{a}x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} & 0\le x\le a\\ 0 & x<0,x>a\end{cases}$$

描述，式中 E 和 a 分别为确定的常数，而 A 是任意常数，求

i)归一化的波函数；

ii)几率密度（或几率分布函数）$\omega(x,t)$;

iii)在何处找到粒子的几率最大？

iv) $\overline{x}$、$\overline{x^2}$ 的值

解：i) $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2dx=\int_0^a|A|^2\sin^2\frac{\pi}{a}xdx=|A|^2\int_0^a\frac{1-\cos\frac{2\pi}{a}x}{2}dx$

$$=|A|^2(\frac{x}{2}-\frac{a}{4\pi}\sin\frac{2\pi}{a}x)\Big|_0^a=1$$

$\therefore\ A=\sqrt{\frac{2}{a}}$

$\therefore$ 归一化的波函数为 $\Psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi}{a}x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, & 0\le x\le a\\ 0, & x<0,x>a\end{cases}$

ii) $\omega(x,t)=|\Psi|^2=\begin{cases}\frac{2}{a}\sin^2\frac{\pi}{a}x, & 0\le x\le a\\ 0, & x<0,x>a\end{cases}$

iii)令 $\frac{d\omega}{dx}=\frac{2}{a}\times2\sin(\frac{\pi}{a}x)\cos(\frac{\pi}{a}x)\times\frac{\pi}{a}=0$

$\sin\frac{2\pi}{a}x=0$，$x=\frac{na}{2}$，$n=0,\pm1,\cdots$

$\because\ 0\le x\le a$，$\therefore\ x_1=0$，$x_2=\frac{a}{2}$，$x_3=a$

经检验当 $x=\frac{a}{2}$ 时几率最大

iv) $\overline{x}=\int_{-\infty}^{\infty}x|\Psi|^2dx=\int_0^a\frac{2}{a}x\sin^2\frac{\pi}{a}xdx=\int_0^a\frac{2x}{a}\times\frac{1-\cos\frac{2\pi}{a}x}{2}dx$

$$=\frac{1}{a}[\frac{x^2}{2}\Big|_0^a-\int_0^a x\cos\frac{2\pi}{a}xdx]$$

$$=\frac{1}{a}[\frac{a^2}{2}-\frac{a}{2\pi}\int_0^a xd\sin\frac{2\pi}{a}x]$$

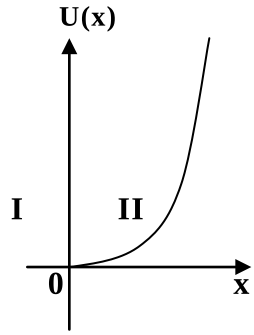
$$=\frac{a}{2}-\frac{1}{2\pi}[x\sin\frac{2\pi}{a}x\Big|_0^a-\int_0^a\sin\frac{2\pi}{a}xdx]$$

$$=\frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{\infty}x^2|\Psi|^2dx=\int_0^a\frac{2x^2}{a}\sin^2\frac{\pi}{a}xdx=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2\pi^2}$$

10、一粒子在势场

$$u(x)=\begin{cases}\frac{1}{2}kx^2, & x\ge 0\\ \infty\quad, & x<0\end{cases}$$




中运动，求能级（提示：利用谐振子的本征解）

解：在 I 区 $(x<0)$，$u(x)$ 为 $\infty$，$\therefore \psi_I=0$

在 II 区 $(x\ge 0)$，$u(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$

和一维谐振子相同，即 $\psi_{II}=\psi_n(x)=N_nH_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$

但 $\because \psi_{II}\big|_{x=0}=\psi_I\big|_{x=0}=0$

$\therefore$ n 只能取奇数，即 $n=1,3,5,\cdots$

$\therefore$ 所求的能级为

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\quad n=1,3,5,\cdots$$

或表为 $E_m=(2m+\frac{3}{2})\hbar\omega,\quad m=0,1,2,\cdots$

11、一电荷为 e 的一维线性谐振子受恒定弱电场 $\varepsilon$ 作用，电场沿正 $x$ 方向，求该粒子的能量及相应的波函数。[提示：利用配方法]

12、对于一维线性谐振子的第一激发态 $\psi_1(x)=\frac{\sqrt{2}\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}}xe^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$，求：

（1）振子几率最大的位置

（2）经典振幅 A

解：（1）$\omega(x)=|\psi_1(x)|^2=\frac{2\alpha^3}{\pi^{1/2}}x^2e^{-\alpha^2x^2}$

令 $\frac{d\omega}{dx}=\frac{2\alpha^3}{\pi^{1/2}}(2xe^{-\alpha^2x^2}-2\alpha^2x^3e^{-\alpha^2x^2})=0$

$\therefore x_1=0$，$x_2=\frac{1}{\alpha}$，$x_3=-\frac{1}{\alpha}$，$x_4=\infty$，$x_5=-\infty$

经检验：当 $x=\pm\frac{1}{\alpha}$ 时，几率最大

（2）$E_1=(1+\frac{1}{2})\hbar\omega=\frac{3}{2}\hbar\omega=\frac{1}{2}\mu\omega^2A^2$

$$\therefore A^2=\frac{3\hbar}{\mu\omega}=\frac{3}{\alpha^2}$$

$$\therefore A=\frac{\sqrt{3}}{\alpha}$$

# 第三章 量子力学中的力学量

## 一、主要内容

（一）量子力学的基本原理（假设）之四：在量子力学中，力学量 $F(\vec{r},\vec{p})$ 用算符 $\hat{F}(\hat{r},\hat{p})$ 表示

1、表示力学量的算符的构成方式：当表示体系状态的波函数以坐标 $\vec{r}$ 为变量时，如果量子力学中的力学量 F 在经典力学中有相应的力学量，那么表示这个力学量的算符 $\hat{F}$ 由经典表示式 $F(\vec{r},\vec{p})$ 中的 $\vec{r},\vec{p}$ 分别换成算符 $\hat{\vec{r}}=\vec{r},\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$ 而得到，即 $\hat{F}(\vec{r},-i\hbar\nabla)$。

2、表示力学量的算符都是线性厄米算符，其本征函数组成正交归一完全系。厄密算符的定义是：

$$\int\psi^*\hat{F}\phi d\tau=\int(\hat{F}\psi)^*\phi d\tau$$

其中 $\psi$ 和 $\phi$ 是任意函数。厄密算符的本征函数组成正交归一系：

或 $$\begin{cases}\int\phi_m{}^*\phi_n d\tau=\delta_{mn} & (\text{分立谱})\\ \int\phi_\lambda{}^*\phi_{\lambda'}d\tau=\delta(\lambda-\lambda') & (\text{连续谱})\end{cases}$$

3、"力学量用算符表示"的含义

（1）在 $\hat{F}$ 的本征态中，测量力学量 F，可得到唯一值——$\phi_n$ 所属的 $\hat{F}$ 的本征值 $\lambda_n$ $(\hat{F}\phi_n=\lambda_n\phi_n)$

（2）在任一状态 $\psi(x)$ 中，测量力学量 F，有好多可能值，所有可能出现的值，都是 $\hat{F}$ 的本征值，测量结果取 $\lambda_n$ 的几率为 $\psi(x)$ 用 $\hat{F}$ 的本征函数 $\phi_n$ 展开时，展开系数 $c_n$ 的模平方 $|c_n|^2$，得到结果在 $\lambda-\lambda+d\lambda$ 范围内的几率是 $|c_\lambda|^2d\lambda$。

$$\psi(x)=\sum_n c_n\phi_n(x)+\int c_\lambda\phi_\lambda(x)d\lambda$$

$$c_n=\int\phi_n^*(x)\psi(x)dx$$

$$c_\lambda=\int\phi_\lambda^*(x)\psi(x)dx$$

4、力学量平均值公式

设波函数 $\psi(x)$ 已归一化，则

（1）$\overline{F}=\int\psi^*\hat{F}\psi d\tau$

（2）$\overline{F}=\sum_n\lambda_n|c_n|^2+\int\lambda|c_\lambda|^2d\lambda$

（二）几个力学量算符的本征值和本征函数

1、动量算符：$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$

本征值： $\vec{P}$

本征函数：$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$

$$\int \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r})\psi_{\vec{p}'}(\vec{r})d\tau = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

2、角动量 z 分量算符：$\hat{L}_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$

本征值： $L_z = m\hbar,\ m = 0,\pm1,\pm2,\cdots$

本征函数： $\Phi_m(\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, m = 0,\pm1,\pm2,\cdots$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi)\Phi_{m'}(\varphi)d\varphi = \delta_{mm'}$$

3、角动量平方算符：$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

本征值： $L^2 = l(l+1)\hbar^2, l = 0,1,2,\cdots$

本征函数： $Y_{lm}(\theta,\varphi), l = 0,1,2,\cdots; m = 0,\pm1,\cdots,\pm l$

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$亦是$\hat{L}_z$的本征函数，本征值为 $m\hbar$

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{l'm'}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

4、氢原子和类氢原子的哈密顿算符：$\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \dfrac{Ze_s{}^2}{r,}$， $e_s = \dfrac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_o}}$

能级： $E_n = -\dfrac{\mu Z^2 e_s{}^4}{2n^2\hbar^2} = -\dfrac{Z^2 e_s{}^2}{2n^2 a_0}$， $n = 1,2,3,\cdots$

波函数： $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$

主量子数 $n = 1,2,3,\cdots$

角量子数 $l = 0,1,2,\cdots,n-1$

磁量子数 $m = 0,\pm1,\cdots,\pm l$

$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$为 $\hat{H}$ 、$\hat{L}^2$ 、$\hat{L}_z$ 的共同本征函数：

$$\left.\begin{matrix}\hat{H}\\ \hat{L}^2\\ \hat{L}_z\end{matrix}\right\}\psi_{nlm} = \left.\begin{matrix}E_n\\ L^2\\ L_z\end{matrix}\right\}\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$$

$$\int_{r=0}^{\infty}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\psi^{*}_{n'l'm'}(r,\theta,\varphi)\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta drd\theta d\varphi=\delta_{n'n}\delta_{l'l}\delta_{m'm}$$

（三）两个力学量算符之间的关系

1、对易：$[\hat{F},\hat{G}]=0$，则 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 有组成完全系的共同本征态。

2、不对易：$\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}=i\hat{k}$，算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 之间有测不准关系：$\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{G})^2}\geq\dfrac{\overline{k}^2}{4}$。

## 二、例题

1、下列算符中哪些是线性算符？

①$3x^2\dfrac{d^2}{dx^2}$，　②$|\ \ |^2$；　③$\int dx$；　④$\sqrt{\ }$；　⑤$\sum\limits_{i=1}^{n}$

答：①、③、⑤是线性算符，其余非线性

2、下列算符中哪些是厄米算符？

①$\dfrac{d}{dx}$；②$i\dfrac{d}{dx}$；③$\dfrac{d^2}{dx^2}$；④$i\dfrac{d^2}{dx^2}$；⑤$-i\hbar(\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r})$；⑥$i(\hat{p}_x^2x-x\hat{p}_x^2)$；

答：②、③、⑤、⑥是厄米算符，其余为非厄米算符

3、如果 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 都是厄米算符，但互不对易，试判断下列算符中哪些是厄米算符？

①$\hat{F}\hat{G}$；②$\hat{G}\hat{F}$；③$\hat{F}\hat{G}+\hat{G}\hat{F}$；④$\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}$；⑤$i(\hat{F}\hat{G}+\hat{G}\hat{F})$；

⑥$i(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})$；⑦$\hat{F}+\hat{G}$；⑧$\hat{F}-\hat{G}$；⑨$i(\hat{F}+\hat{G})$；⑩$i(\hat{F}-\hat{G})$；

答：③、⑥、⑦、⑧都是厄米算符，其余为非厄米算符。（根据厄米算符的定义即可证明）

4、证明：$(\dfrac{d}{dx}+x)(\dfrac{d}{dx}-x)=\dfrac{d^2}{dx^2}-x^2-1$

证明：
$$\begin{aligned}(\frac{d}{dx}+x)(\frac{d}{dx}-x)&=\frac{d^2}{dx^2}-\frac{d}{dx}\cdot x+x\frac{d}{dx}-x^2\\&=\frac{d^2}{dx^2}-x\frac{d}{dx}-1+x\frac{d}{dx}-x^2\\&=\frac{d^2}{dx^2}-x^2-1\end{aligned}$$

证毕！

5、利用对易关系式$[x,\hat{p}_x]=i\hbar$，$[F(x),\hat{p}_x]=i\hbar F'(x)$，式中$F'(x)=\dfrac{dF(x)}{dx}$，试证明：

①$[x,\hat{p}_x^2F(x)]=2i\hbar\hat{p}_xF(x);$

② $[x, \hat{p}_x F(x)\hat{p}_x] = i\hbar[F(x)\hat{p}_x + \hat{p}_x F(x)]$;

③ $[x, F(x)\hat{p}_x^2] = 2i\hbar F(x)\hat{p}_x$;

④ $[\hat{p}_x, \hat{p}_x^2 F(x)] = -i\hbar\hat{p}_x{}^2 F'(x)$;

⑤ $[\hat{p}_x, \hat{p}_x F(x)\hat{p}_x] = -i\hbar\hat{p}_x F'(x)\hat{p}_x$;

⑥ $[\hat{p}_x, F(x)\hat{p}_x{}^2] = -i\hbar F'(x)\hat{p}_x{}^2$

证明：利用对易式 $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

① $[x, \hat{p}_x{}^2 F(x)] = \hat{p}_x[x, \hat{p}_x F(x)] + [x, \hat{p}_x]\hat{p}_x F(x)$

$$= \hat{p}_x{}^2[x, F(x)] + \hat{p}_x[x, \hat{p}_x]F(x) + i\hbar\hat{p}_x F(x)$$

$$= 2i\hbar\hat{p}_x F(x)$$

② $[\hat{x}, \hat{p}_x F(x)\hat{p}_x] = \hat{p}_x[x, F(x)\hat{p}_x] + [x, \hat{p}_x]F(x)\hat{p}_x$

$$= \hat{p}_x F(x)[x, \hat{p}_x] + \hat{p}_x[x, F(x)]\hat{p}_x + i\hbar F(x)\hat{p}_x$$

$$= i\hbar[\hat{p}_x F(x) + F(x)\hat{p}_x]$$

③ $[x, F(x)\hat{p}_x{}^2] = F(x)[x, \hat{p}_x{}^2] + [x, F(x)]\hat{p}_x{}^2$

$$= F(x)\hat{p}_x\ [x, \hat{p}_x] + F(x)[x, \hat{p}_x]\hat{p}_x$$

$$= 2i\hbar F(x)\hat{p}_x$$

④ $[\hat{p}_x, \hat{p}_x{}^2 F(x)] = \hat{p}_x{}^2[\hat{p}_x, F(x)] + [\hat{p}_x, \hat{p}_x{}^2]F(x)$

$$= -i\hbar\hat{p}_x^2 F'(x)$$

⑤ $[\hat{p}_x, \hat{p}_x F(x)\hat{p}_x] = \hat{p}_x[\hat{p}_x, F(x)\hat{p}_x] + [\hat{p}_x, \hat{p}_x]F(x)\hat{p}_x$

$$= \hat{p}_x F(x)[\hat{p}_x, \hat{p}_x] + \hat{p}_x[\hat{p}_x, F(x)]\hat{p}_x$$

$$= -i\hbar\hat{p}_x F'(x)\hat{p}_x$$

⑥ $[\hat{p}_x, F(x)\hat{p}_x{}^2] = F(x)[\hat{p}_x, \hat{p}_x{}^2] + [\hat{p}_x, F(x)]\hat{p}_x{}^2$

$$= -i\hbar F'(x)\hat{p}_x{}^2$$

6、求 $[x, \hat{L}_x] = ?$，$[x, \hat{L}_y] = ?$，$[x, \hat{L}_z] = ?$，由此推出 $y$、$z$ 分别与 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 的对易关系式

7、求 $[\hat{p}_x, \hat{L}_x] = ?$，$[\hat{p}_x, \hat{L}_y] = ?$，$[\hat{p}_x, \hat{L}_z] = ?$，由此推出 $\hat{p}_y$、$\hat{p}_z$ 分别与 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 的对易关系式

解：$[\hat{p}_x, \hat{L}_x] = [\hat{p}_x, yp_z - z\hat{p}_y] = 0$

$$[\hat{p}_x, \hat{L}_y] = [\hat{p}_x, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = -[\hat{\hat{p}}_x, x\hat{p}_z] = -[\hat{p}_x, x]\hat{p}_z = i\hbar\hat{p}_z$$

$$[\hat{p}_x, \hat{L}_z] = [\hat{p}_x, x\hat{p}_y - y\hat{p}_x] = [\hat{\hat{p}}_x, x\hat{p}_y] = [\hat{p}_x, x]\hat{p}_y = -i\hbar\hat{p}_y$$

同理可推得：$[\hat{p}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{p}_k \varepsilon_{ijk}$，　$i, j, k = x, y, z$

8、求$[\hat{L}_x, \hat{L}_x] = ?$，　$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = ?$，$[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = ?$，由此推出$\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$之间的对易关系式

解：$[\hat{L}_x, \hat{L}_x] = 0$

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] \\
&= [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, x\hat{p}_z] \\
&= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z] \\
&= y[\hat{p}_z, z]\hat{p}_x + x[z, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\
&= -i\hbar y\hat{p}_x + i\hbar x\hat{p}_y \\
&= i\hbar \hat{L}_z
\end{aligned}
$$

同理可得：$[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar \hat{L}_y$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_y] = 0, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_y, \hat{L}_x] = -i\hbar \hat{L}_z$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, [\hat{L}_z, \hat{L}_y] = -i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_z] = 0$$

即$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k \varepsilon_{ijk}$，　$i$、$j$、$k = x, y, z$

9、证明：若体系的哈密顿算符$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2\mu} + u(x)$，则有$[x, [\hat{H}, x]] = \frac{\hbar^2}{\mu}$

证明：
$$
\begin{aligned}
[\hat{H}, x] &= [\frac{\hat{p}_x{}^2}{2\mu} + u(x), x] \\
&= [\frac{\hat{p}_x{}^2}{2\mu}, x] + [u(x), x] \\
&= \frac{\hat{p}_x}{2\mu}[\hat{p}_x, x] + \frac{1}{2\mu}[\hat{p}_x, x]\hat{p}_x \\
&= -\frac{i\hbar}{\mu}\hat{p}_x
\end{aligned}
$$

$$\therefore [x, [\hat{H}, x]] = [x, -\frac{i\hbar}{\mu}\hat{p}_x] = -\frac{i\hbar}{\mu}[x, \hat{p}_x] = \frac{\hbar^2}{\mu}$$

10、一维谐振子处在基态$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$，求

①坐标的平均值$\bar{x}$；

②动量的平均值$\bar{p}$；

③势能的平均值$\overline{U}(x)$；

④动能的平均值 $\overline{T}$ 。

解：① $\overline{x}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0{}^*x\psi_0dx=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}xe^{-\alpha^2x^2}dx=0$ （被积函数为 x 的奇函数）

② $\overline{p}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0{}^*(-i\hbar\frac{d}{dx})\psi_0dx=+i\hbar\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0{}^*x\psi_0dx=0$

③ $\overline{u(x)}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0{}^*\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi_0dx=\frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\alpha^2x^2}dx$

$$=\frac{\alpha\mu\omega^2}{\pi^{1/2}}\int_0^{\infty}x^2e^{-\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{\alpha\mu\omega^2}{\pi^{1/2}}\times\frac{1}{2^2\alpha^2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}$$

$$=\frac{\mu\omega^2}{4\alpha^2}=\frac{\mu\omega^2\hbar}{4\mu\omega}=\frac{1}{4}\hbar\omega$$

④ $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$

$\because\ \overline{T}+\overline{u}=\overline{E}=E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$

$\therefore\ \overline{T}=E_0-\overline{u}=\frac{1}{4}\hbar\omega$

11、氢原子处在基态 $\psi\ (r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$ ，求：

(1) $r$ 的平均值；

(2)势能 $\overline{u}=-\frac{e_s{}^2}{r}$ 的平均值；

(3)最可几半径；

(4)动能的平均值

解：(1) $\overline{r}=\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi^*r\psi\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi$

$$=\frac{4}{a_0^3}\int_0^{\infty}r^3e^{-\frac{2r}{a_0}}dr$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\times\frac{3!}{(\frac{2}{a_0})^4}$$ （利用积分公式 $\int_0^{\infty}x^ne^{-\alpha x}dx=\frac{n!}{\alpha^{n+1}}$）

$$=\frac{3}{2}a_0$$

(2) $\bar{u} = -e_s^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^* \frac{1}{r} \psi \cdot r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$

$$= -\frac{4e_s^2}{a_0^3} \int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$$

$$= -\frac{4e_s^2}{a_0^3} \times \frac{1}{(\frac{2}{a_0})^2} \qquad （利用积分公式 \int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}})$$

$$= -\frac{e_s^2}{a_0}$$

(3) $\omega_{10} dr = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \left|\psi_{100}\right|^2 d\varphi \cdot r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$

$$\therefore \omega_{10} = \frac{4}{a_o{}^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_o}}$$

令 $\frac{d\omega}{dr} = \frac{4}{a_0{}^3}(2re^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{2r^2}{a_0} e^{-\frac{2r}{a_0}}) = 0$

$\therefore r_1 = 0$， $r_2 = a_0$， $r_3 = \infty$

经检验当 $r = a_0$ 时，几率最大，所以最可几半径为 $r = a_0$

(4)对氢原子的基态

$$E_1 = -\frac{e_s{}^2}{2a_0}$$

$\because \bar{T} + \bar{u} = \bar{E} = E_1$

$\therefore \bar{T} = E_1 - \bar{u} = -\frac{e_s{}^2}{2a_0} + \frac{e_s{}^2}{a_0} = \frac{e_s{}^2}{2a_0}$

12、试证明处于 $1s,2p,3d$ 态的氢原子的电子在离原子核的距离分别为 $a_0,4a_0,9a_0$ 的球壳内被发现的几率最大。

证明：(1)处于 $1s$ 态时， $n=1,\ \ l=0,$ 同上题的（3）;

(2)处于 $2p$ 态时， $n=2,\ \ l=1,\ \ R_{21} = (\frac{1}{2a_0})^{3/2} \frac{r}{\sqrt{3}a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$

$$\omega_{21} = R_{21}^2 r^2 = (\frac{1}{2a_0})^3 \frac{r^4}{3a_0^2} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

令 $\frac{d\omega_{21}}{dr} = \frac{1}{24a_0{}^5}(4r^3 e^{-\frac{r}{a_0}} - \frac{r^4}{a_0} e^{-\frac{r}{a_0}}) = 0$

$\therefore r_1 = 0$， $r_2 = 4a_0$， $r_3 = \infty$

经检验当 $r=4a_0$ 时几率最大

(3)处于 $3d$ 态时， $n=3,\quad l=2,\quad R_{32}=(\frac{2}{a_0})^{3/2}\frac{1}{81\sqrt{15}}(\frac{r}{a_0})^2 e^{-\frac{r}{3a_0}}$

同理可求得：当 $r=9a_0$ 时，几率最大

13、证明 $L=\sqrt{6}\hbar, L_z=\pm\hbar$ 的氢原子中的电子在 $\theta=45^\circ$ 和 $\theta=135^\circ$ 的方向上被发现的几率最大。

证明： $L=\sqrt{l(l+1)}\hbar=\sqrt{6}\hbar,\quad \therefore l=2$

$$L_z=m\hbar=\pm\hbar，\quad m=\pm1$$

氢原子波函数为 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$，在 $(\theta,\varphi)$ 方向附近立体角微元 $d\Omega=Sin\theta d\theta d\varphi$ 内找到电子的几率是

$$\omega_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=\left|Y_{lm}(\theta,\varphi)\right|^2 d\Omega$$

$$\omega_{2,\pm1}=\left|Y_{2,\pm1}\right|^2=\frac{15}{8\pi}Sin^2\theta\cos^2\theta=\frac{15}{32\pi}Sin^2 2\theta$$

可见，仅当 $\theta=\frac{\pi}{4}$ 或 $\theta=\frac{3\pi}{4}$ 时几率最大

14、求算符 $\hat{F}=-ie^{ix}\frac{d}{dx}$ 的本征函数

解：设 $\hat{F}$ 的本征函数为 $\psi(x)$，相应的本征值为 $\lambda$，则

$$-ie^{ix}\frac{d\psi}{dx}=\lambda\psi$$

$$\frac{d\psi}{\psi}=ie^{-ix}\lambda dx$$

$$\ln\psi=-\lambda e^{-ix}+c_1$$

$$\therefore \psi(x)=ce^{-\lambda e^{-ix}}$$ （其中 $c=e^{c_1}$ 为常数）

15、对于一维运动，求算符 $\hat{F}=\hat{P}+x$ 的本征值和本征函数

解：设 $\hat{F}$ 的本征函数为 $\psi(x)$，相应的本征值为 $\lambda$，则

$$(\hat{P}+x)\psi(x)=\lambda\psi(x)$$

$$-i\hbar\frac{d\psi}{dx}=(\lambda-x)\psi(x)，\quad \frac{d\psi}{\psi}=\frac{i}{\hbar}(\lambda-x)dx$$

$$\therefore \psi(x)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(\lambda x-\frac{x^2}{2})}$$

对所有的实数值 $\lambda$， $\psi(x)$ 均满足标准条件

16、下列函数哪些是 $\frac{d^2}{dx^2}$ 的本征函数？

(1) $e^x$ ； (2) $x^2$ ； (3) $\sin x$ ； (4) $\cos x$ ； (5) $\cos x+\sin x$ ； (6) $\cos x-\sin x$ ；(7) $\cos x+i\sin x$；(8) $\cos x-i\sin x$

解：依据本征方程的定义： $\hat{F}\Psi=\lambda\Psi$

可判定：(1),(3),(4),(5),(6),(7),(8)都是 $\frac{d^2}{dx^2}$ 的本征函数，(2)不是。

17、一维谐振子处在 $\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^2x^2-1)$ 的状态中，试证明：这个态是一维谐振子哈密顿算符的本征态，并求其相应的本征值。$(\alpha^2=\frac{\mu\omega}{\hbar})$

证明：

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{d}{dx}[\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(4\alpha^2x-2\alpha^4x^3+\alpha^2x)]$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(5\alpha^2-6\alpha^4x^2-5\alpha^4x^2+2\alpha^6x^4)$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(5\alpha^2-11\alpha^4x^2+2\alpha^6x^4)$$

$$\hat{H}\psi(x)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(5\alpha^2-11\alpha^4x^2+2\alpha^6x^4)+$$

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^2x^2-1)$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-\frac{5}{2}\hbar\omega+\frac{11}{2}\mu\omega^2x^2-\frac{\mu^2\omega^3}{\hbar}x^4+\frac{\mu^2\omega^3}{\hbar}x^4-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2)$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(\frac{10}{2}\mu\omega^2x^2-\frac{5}{2}\hbar\omega)$$

$$=\frac{5}{2}\hbar\omega\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^2x^2-1)=\frac{5}{2}\hbar\omega\psi(x)$$

可见：$\psi(x)$ 为一维线性谐振子哈密顿算符的本征态，相应的本征值为 $\frac{5}{2}\hbar\omega$

18、体系处在 $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\sin^3\theta e^{-i3\varphi}$ 的状态中，试证明：这个态是 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态，并求出相应的本征值。

解：$\hat{L}_z\psi(r,\theta,\varphi)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}[R(r)\sin^3\theta e^{-i3\varphi}]=-3\hbar\psi(r,\theta,\varphi)$

$$\hat{L}^2\psi(r,\theta,\varphi)=-\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]R(r)\sin^3\theta e^{-i3\varphi}$$

$$=12\hbar^2\psi(r,\theta,\varphi)$$

该$\psi(r,\theta,\varphi)$是$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同本征态，所相应的本征值分别为$12\hbar^2,-3\hbar$。

19、若算符$\hat{K}$有属于本征值为$\lambda$的本征函数$\phi$，且有$\hat{K}=\hat{A}\hat{B}$和$\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=1$

证明：$u_1=\hat{A}\phi$和$u_2=\hat{B}\phi$也是算符$\hat{K}$的本征函数，对应的本征值分别为$\lambda-1$和$\lambda+1$。

证明：$\because\ \hat{K}\phi=\hat{A}\hat{B}\phi=\lambda\phi$， $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=1$

$\therefore\ \hat{K}u_1=\hat{A}\hat{B}\hat{A}\phi=\hat{A}(\hat{A}\hat{B}-1)\phi=\hat{A}(\lambda-1)\phi=(\lambda-1)u_1$

$\therefore\ u_1=\hat{A}\phi$是$\hat{K}$的本征函数，对应的本征值为$\lambda-1$

$\therefore\ \hat{K}u_2=\hat{A}\hat{B}\hat{B}\phi=(1+\hat{B}\hat{A})\hat{B}\phi=\hat{B}\phi+\lambda\hat{B}\phi=(\lambda+1)u_2$

$\therefore\ u_2=\hat{B}\phi$也是算符$\hat{K}$的本征函数，对应的本征值为$\lambda+1$

20、一刚性转子转动惯量为 I，它的能量的经典表示式是$H=\frac{L^2}{2I},L$为角动量，求与此对应的量子体系在下列情况下的定态能量及定态波函数。

(1)平面刚性转子，即转子绕一固定的轴转动；

(2)空间刚性转子，即转子绕一固定点转动。

(答案：(1)平面刚性转子：定态能量$E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2I}$

相应波函数$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$， $m=0,\pm1,\cdots$

(2)空间刚性转子：定态能量$E_l=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$

相应波函数为$Y_{lm}(\theta,\varphi)$， $l=0,1,2,\cdots$， $m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$)

21、一约束在平面上沿一定半径绕 z 轴（垂直平面）转动的平面转子（转动惯量为 I）处于$\Phi=A\cos^2\varphi$态中，试确定在此态中能量及角动量的可能取值及其相应的几率，并求平均值。

解：平面转子体系的哈密顿算符$\hat{H}$的本征函数为

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi},m=0,\pm1,\cdots$$

相应的能量为$E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2I}$，角动量$L_z=m\hbar$

求 $c_n$ 有两种方法：

法一：把 $\Phi(\varphi)$ 按 $\Phi_m(\varphi)$ 展开

$$\Phi = A\cos^2\varphi = \frac{A(1+\cos 2\varphi)}{2} = \frac{A}{2} + \frac{A}{4}(e^{i2\varphi} + e^{-i2\varphi})$$

$$= \frac{A\sqrt{2\pi}}{2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}} + \frac{A\sqrt{2\pi}}{4}(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i2\varphi} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i2\varphi})$$

$$= \frac{A\sqrt{2\pi}}{2}\Phi_0 + \frac{A\sqrt{2\pi}}{4}(\Phi_2 + \Phi_{-2})$$

$$c_0 = \frac{A\sqrt{2\pi}}{2}，\quad c_2 = \frac{A\sqrt{2\pi}}{4}，\quad c_{-2} = \frac{A\sqrt{2\pi}}{4}$$

$$|c_0|^2 + |c_2|^2 + |c_{-2}|^2 = \frac{|A|^2 2\pi}{4} + 2\times\frac{|A|^2 2\pi}{16} = 1$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{4}{3\pi}}$$

$$\therefore c_0 = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad c_2 = c_{-2} = \sqrt{\frac{1}{6}}$$

法二：

$$\int_0^{2\pi}\Phi^*\Phi d\varphi = \int_0^{2\pi}|A|^2\cos^4\varphi d\varphi = \frac{|A|^2}{4}\int_0^{2\pi}(1+2\cos 2\varphi + \cos^2 2\varphi)d\varphi = 1$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{4}{3\pi}}$$

$$c_m = \int_0^{2\pi}\Phi_m^*\Phi d\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{4}{3\pi}}\int_0^{2\pi}e^{im\varphi}\cos^2\varphi d\varphi$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3\pi^2}}\int_0^{2\pi}e^{im\varphi}\frac{1+\cos 2\varphi}{2}d\varphi$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3\pi^2}}\cdot\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}e^{im\varphi}(1+\frac{e^{i2\varphi}+e^{-i2\varphi}}{2})d\varphi$$

$$= \sqrt{\frac{1}{6\pi^2}}\cdot(2\pi\delta_{m,0} + \frac{1}{2}\times 2\pi\times\delta_{m,2} + \frac{1}{2}\times 2\pi\times\delta_{m,-2})$$

$$\therefore c_0 = \sqrt{\frac{2}{3}}，\quad c_2 = \sqrt{\frac{1}{6}}，\quad c_{-2} = \sqrt{\frac{1}{6}}$$

$\therefore$ 能量的可能取值为 $E_0 = 0$，$E_{\pm 2} = \dfrac{2\hbar^2}{I}$

相应几率为 $\dfrac{2}{3}$，$\dfrac{1}{3}$

平均值 $\overline{E}=\dfrac{2\hbar^2}{3I}$

角动量的可能取值为 $L_z=0$， $2\hbar$， $-2\hbar$

相应几率为 $\dfrac{2}{3}$， $\dfrac{1}{6}$， $\dfrac{1}{6}$

平均值为 $\overline{L_z}=\sum|c_n|^2 L_z=0$

22、设粒子在宽度为 $a$ 的一维无限深势阱中运动，若其状态由波函数 $\psi(x)=\dfrac{4}{\sqrt{a}}\sin\dfrac{\pi}{a}x\cdot\cos^2\dfrac{\pi}{a}x$ 描述，求粒子能量的可能取值和相应的几率及其平均值。

解：在宽度为 $a$ 的一维无限深势阱中运动的粒子，

其能量的本征值为 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$， $n=1,2,\cdots$

相应的波函数为 $\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x, & 0\le x\le a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}$

法一：把 $\psi(x)$ 按 $\psi_n(x)$ 展开

$$\psi(x)=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi}{a}x\cos^2\frac{\pi}{a}x=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi}{a}x\frac{1+\cos\frac{2\pi}{a}x}{2}$$

$$=\frac{2}{\sqrt{a}}(\sin\frac{\pi}{a}x+\sin\frac{\pi}{a}x\cos\frac{2\pi}{a}x)$$

$$=\sqrt{\frac{1}{2}}(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x+\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi}{a}x)$$

（利用 $\sin\alpha\cos\beta=\dfrac{1}{2}[\sin(\alpha+\beta)+\sin(\alpha-\beta)]$）

$$=\sqrt{\frac{1}{2}}[\psi_1(x)+\psi_3(x)]$$

$c_1=\sqrt{\dfrac{1}{2}}$， $c_3=\sqrt{\dfrac{1}{2}}$

$\because |c_1|^2+|c_3|^2=1$ 　　该波函数已归一化

法二： $c_n=\int\psi_n^*\psi(x)dx$

$$=\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{4}{\sqrt{a}}\int_0^a\sin\frac{n\pi}{a}x\sin\frac{\pi}{a}x\cos^2\frac{\pi}{a}xdx$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a\sin\frac{n\pi}{a}x(\sin\frac{\pi}{a}x+\sin\frac{3\pi}{a}x)dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x+\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi}{a}x)dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\delta_{n,1}+\frac{1}{\sqrt{2}}\delta_{n,3}$$

$\therefore c_1=\sqrt{\frac{1}{2}}$，$c_3=\sqrt{\frac{1}{2}}$，$c_n=0 \quad (n\neq 1,3)$

$\therefore$粒子能量的可能取值为：$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$，$E_3=\frac{9\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$

相应几率为：$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{2}$

平均值为 $\overline{E}=\sum E_n|c_n|^2=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$

23、线性谐振子在初始时刻处于下面归一化状态：

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{1}{5}}\psi_0(x)+\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_2(x)+c_5\psi_5(x)$$

式中$\psi_n(x)$表示谐振子第$n$个定态波函数，求：

（1）系数$c_5=?$

（2）写出 t 时刻的波函数；

（3）$t=0$时刻谐振子能量的可能取值及其相应几率，并求其平均值；

（4）$t=t$时刻谐振子能量的可能取值及其相应几率，并求其平均值。

解：（1）$\because \sum|c_n|^2=1$

$$\frac{1}{5}+\frac{1}{2}+|c_5|^2=1$$

$$\therefore c_5=\sqrt{\frac{3}{10}}$$

（2）定态波函数为$\Psi_n(x,t)=\psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}$

$\therefore$t 时刻的波函数为

$$\Psi(x,t)=\sqrt{\frac{1}{5}}\psi_0(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}+\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}+\sqrt{\frac{3}{10}}\psi_5(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_5t}$$

$$=\sqrt{\frac{1}{5}}\psi_0(x)e^{-\frac{i}{2}\omega t}+\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_2(x)e^{-\frac{i5\omega t}{2}}+\sqrt{\frac{3}{10}}\psi_5(x)e^{-i\frac{11}{2}\omega t}$$

（3）$t=0$时刻谐振子能量的可能取值为$E_0=\frac{\hbar}{2}\omega$，$E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$，$E_5=\frac{11}{2}\hbar\omega$

相应几率为$\frac{1}{5}$，$\frac{1}{2}$，$\frac{3}{10}$

平均值为 $\overline{E}=\sum_n E_n|c_n|^2=\frac{1}{5}\times\frac{\hbar}{2}\omega+\frac{1}{2}\times\frac{5}{2}\hbar\omega+\frac{3}{10}\times\frac{11}{2}\hbar\omega=3\hbar\omega$

（4） $t=t$ 时刻能量的取值情况与 $t=0$ 时刻相同

24、设氢原子处于状态 $\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{1-1}(\theta,\varphi)$，求氢原子能量、角动量平方及角动量 z 分量的可能取值及其相应的几率，并求这些力学量的平均值。

解：对于氢原子定态波函数 $\psi_{nlm}=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$，有

$$\left.\begin{matrix}\hat{H}\\ \hat{L}^2\\ \hat{L}_z\end{matrix}\right\}\psi_{nlm}=\left.\begin{matrix}E_n\\ l(l+1)\hbar^2\\ m\hbar\end{matrix}\right\}\psi_{nlm}\qquad \text{其中 } E_n=-\frac{e_s^2}{2n^2a_0}$$

题中给定的 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 已按 $\psi_{nlm}$ 展开了，且有 $c_{211}=\frac{1}{2}$， $c_{21-1}=-\frac{\sqrt{3}}{2}$

显然 $|c_{211}|^2+|c_{21-1}|^2=1$，即 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 已归一化

∴当氢原子处于状态 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 时

能量的可能取值为 $E_2=-\frac{{e_s}^2}{8a_0}$

相应几率为 1

平均值为 $\overline{E}=E_2=-\frac{{e_s}^2}{8a_0}$

角动量平方的可能取值为 $L^2=2\hbar^2$

相应几率为 1

平均值为 $\overline{L^2}=2\hbar^2$

角动量 z 分量的可能取值为 $L_z=\hbar$， $-\hbar$

相应几率为 $\frac{1}{4}$， $\frac{3}{4}$

平均值为 $\overline{L_z}=\frac{1}{4}\times\hbar-\frac{3}{4}\times\hbar=-\frac{\hbar}{2}$

25、电子在均匀电场 $\vec{E}=\varepsilon\vec{k}$ 中运动，其哈密顿算符为 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+e\varepsilon z$，试判断下列力学量算符中，哪些算符与 $\hat{H}$ 对易？

（1）x；（2） $y$；（3） $z$；（4） $\hat{p}_x$；（5） $\hat{p}_y$；（6） $\hat{p}_z$；（7） $\hat{p}^2$ ；（8） $\hat{L}_x$；（9） $\hat{L}_y$；（10） $\hat{L}_z$；（11） $\hat{L}^2$

答：与 $\hat{H}$ 对易的有：（4）、（5）、（10）

26、在 $\hat{L}^2-\hat{L}_z$ 具有确定值的状态中，试判断下列力学量哪些具有确定值：
（1） $L_x$；（2） $L_y$；（3） $L_z$；（4） $L_x^2$；（5） $L_y{}^2$；（6） $L_z{}^2$；（7） $L_x{}^2+L_y^2$；
（8） $L_y^2+L_z^2$；（9） $L_z{}^2+L_x{}^2$；（10） $L^2$。
答：有确定值的有（3）、（6）、（7）、（10）

27、一维谐振子处在基态 $\psi_0(x)=\sqrt{\dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$，求 $\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p)^2}=?$

（提示：$\int_0^\infty x^{2n}e^{-ax^2}dx=\dfrac{1\cdot3\cdot5\cdots(2n-1)}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\dfrac{\pi}{a}}$，其中 a>0）

解：$\bar{x}=\int_{-\infty}^{\infty}\dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}}xe^{-\alpha^2x^2}dx=0$

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}x^2e^{-\alpha^2x^2}dx=\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty x^2e^{-\alpha^2x^2}dx=\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2^2\alpha^2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}=\frac{1}{2\alpha^2}$$

$$\bar{p}=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-i\hbar\frac{d}{dx})e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}dx=\frac{i\hbar\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\alpha^2x^2}dx=0$$

$$\overline{p^2}=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2})e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{\hbar^2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{-\alpha^2x^2}-\alpha^2x^2e^{-\alpha^2x^2})dx$$

$$=\frac{2\hbar^2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}(\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}-\frac{\alpha^2\cdot1}{2^2\alpha^2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha})$$

$$=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2}$$

$$\therefore\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2=\frac{1}{2\alpha^2},\quad\overline{(\Delta p)^2}=\overline{p^2}-\bar{p}^2=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2}$$

$$\therefore\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}=\frac{\hbar^2}{4}$$

亦可利用下一题的递推公式做。

28、一维线性谐振子处在第 $n$ 个能量本征态 $\psi_n(x)$，求 $\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}=?$
[提示：对于一维线性谐振子的能量本征态 $\psi_n(x)$，有下列两个公式成立

$$x\psi_n=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$$

$$\frac{d\psi_n}{dx}=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\psi_{n-1}-\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$$

（答案：$\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}=(n+\frac{1}{2})^2\hbar^2$）

29、一维运动的粒子处在

$$\psi(x)=\begin{cases}Axe^{-\lambda x} & x\geq 0\\ 0 & x<0\end{cases},$$

态中，其中 $\lambda>0$，求 $(\Delta x)\cdot(\Delta p)=?$

[提示：$\int_0^\infty x^n e^{-ax}dx=\frac{n!}{a^{n+1}}(a>0)$]

解：先求出归一化常数 $A=2\lambda^{3/2}$

$$\overline{x}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\psi(x)dx=4\lambda^3\int_0^\infty x^3e^{-2\lambda x}dx=4\lambda^3\times\frac{3!}{(2\lambda)^4}=\frac{3}{2\lambda}$$

$$\overline{x^2}=4\lambda^3\int_0^\infty x^4e^{-2\lambda x}dx=4\lambda^3\times\frac{4!}{(2\lambda)^5}=\frac{3}{\lambda^2}$$

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)(-i\hbar\frac{d}{dx})\psi(x)dx=-i\hbar 4\lambda^3[\int_0^\infty xe^{-2\lambda x}\ dx-\int_0^\infty \lambda x^2e^{-2\lambda x}dx]=0$$

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2})\psi(x)dx=-4\lambda^3\hbar^2\int_0^\infty xe^{-x\lambda}\frac{d^2}{dx^2}(xe^{-\lambda x})dx$$

$$=-4\lambda^3\hbar^2[\int_0^\infty(\lambda^2x^2e^{-2\lambda x}-2\lambda xe^{-2\lambda x})dx]$$

$$=\lambda^2\hbar^2$$

$\therefore\ \overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}-\overline{x}^2=\frac{3}{4\lambda^2}$，$\overline{(\Delta p)^2}=\overline{p^2}-\overline{p}^2=\lambda^2\hbar^2$

$$\therefore\ \overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}=\frac{3\hbar^2}{4}$$

$$\therefore\ \Delta x\cdot\Delta p=\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

30、电子在原子大小范围（数量级为$10^{-10}m$）内运动，试用测不准关系估计电子的最小能量。

解：$\Delta x\cdot\Delta p\geq h$，$\Delta p\geq\frac{h}{\Delta x}$

$$E\approx\frac{(\Delta p)^2}{2\mu}\geq\frac{h^2}{2\mu(\Delta x)^2}=\frac{(6.626\times10^{-34})^2}{2\times9.1\times10^{-31}\times(10^{-10})^2}=2.41\times10^{-17}(J)=1.5\times10^2eV$$

因此在原子物理中能量的单位往往选用电子伏特。

31、质子（或中子）在原子核大小范围（数量级为$10^{-15}m$）内运动，试用测不准关系估计质子（或中子）的最小能量。

解：$E \approx \dfrac{(\Delta p)^2}{2\mu} \ge \dfrac{h^2}{2\mu(\Delta x)^2} = \dfrac{(6.626\times10^{-34})^2}{2\times1.67\times10^{-27}\times(10^{-15})^2} = 1.31\times10^{-10}(J)$

$= 8.2\times10^{8}eV$

因此在原子核物理中能量的单位往往选用$10^6$电子伏特，即兆电子伏特。

32、原子核的$\beta$衰变所放出的电子能量在$10^6$电子伏特以内，核大小数量级为$10^{-15}m$，试据此论证电子不可能是原子核的组成部分。

证明：若电子是原子核的组成部分，则其能量为

$$E \approx \frac{(\Delta p)^2}{2\mu} \ge \frac{h^2}{2\mu(\Delta x)^2} = \frac{(6.626\times10^{-34})^2}{2\times9.1\times10^{-31}\times(10^{-15})^2} = 2.41\times10^{-7}(J)$$

$$= 1.5\times10^{12}eV$$

大大超过$\beta$衰变所放出的电子能量在$10^6 eV$，若$E = 10^6 eV$，则

$$\Delta x \ge \frac{h}{\Delta p} \approx \frac{h}{\sqrt{2\mu E}} = \frac{6.626\times10^{-34}}{\sqrt{2\times9.1\times10^{-31}\times10^{6}\times1.6\times10^{-19}}} \approx 1.23\times10^{-12}(m)$$

大大超过原子核大小的数量级，由此论证电子不可能是原子核的组成部分。

33、一电子沿$x$方向移动，速度$v_x = 500m/s$，已知其精确度为 0.01%，求测定电子坐标所能达到的最大准确度，如果把电子换为子弹，其质量为$\mu = 0.01kg$，其他数据都相同，试求测定子弹$x$坐标所能达到的最大准确度。

解：$\dfrac{\Delta v_x}{v_x} = 0.01\%, \Delta v_x = v_x \times 0.01\% = 500\times\dfrac{0.01}{100} = 5\times10^{-2}m/s$

（1）对电子而言：$\Delta x \ge \dfrac{h}{\Delta p} = \dfrac{h}{\mu\Delta v_x} = \dfrac{6.626\times10^{-34}}{9.1\times10^{-31}\times5\times10^{-2}} \approx 1.45\times10^{-2}(m)$

（2）对子弹而言：$\Delta x \ge \dfrac{h}{\Delta p} = \dfrac{6.626\times10^{-34}}{0.01\times5\times10^{-2}} \approx 1.33\times10^{-30}(m)$

34、在阴极射线管中，电子的速度$v = 10^5 m/s$，若测量电子速度的精确度为千分之一，试分析在阴极射线管实验精度要求下，测不准关系有否实际意义。

解：$\dfrac{\Delta v}{v} = \dfrac{1}{1000}$，　$\therefore \Delta v = v\times\dfrac{1}{1000} = 10^5\times\dfrac{1}{1000} = 100(m/s)$

$$\Delta x \ge \frac{h}{\Delta p} = \frac{6.626\times10^{-34}}{9.1\times10^{-31}\times100} \approx 7.3\times10^{-6}(m)$$

此时的$\Delta v$和$\Delta x$的数值在阴极射线管实验精度要求下是可以忽略的，测不准关系无太大实际意义。

# 第四章 态和力学量的表象

## 一、主要内容

（一）态 $\Psi(x,t)$ 在动量表象中的波函数（一维）

$C(p,t)=\int\Psi(x,t)\psi_p{}^*(x)dx$，其中 $\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}$

（二）波函数、算符及量子力学公式的矩阵表示

设 $\hat{Q}u_n(x)=Q_nu_n(x)$， $n=1,2,3,\cdots$

1、波函数 $\Psi(x,t)$ 在 Q 表象中是一个矩阵

$$\Psi_Q=\begin{pmatrix} a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots \end{pmatrix}$$

其中 $a_n(t)=\int u_n{}^*(x)\Psi(x,t)dx$

$\Psi_Q$ 的共轭矩阵为 $\Psi_Q^+=(a_1{}^*(t)\quad a_2{}^*(t)\quad\cdots\quad a_n{}^*(t)\quad\cdots)$

2、力学量算符 $\hat{F}(x,-i\hbar\frac{d}{dx})$ 在 Q 表象中是一个矩阵

$$F_Q=\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n}\cdots\\ F_{21} & F_{22} & \cdots & F_{2n}\cdots\\ & & \cdots & \\ F_{m1} & F_{m2} & & F_{mn}\cdots\\ & & \cdots & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

式中， $F_{mn}=\int u_m^*(x)\hat{F}(x,-i\hbar\frac{d}{dx})u_n(x)dx$

3、波函数的归一化条件： $\Psi_Q^+\Psi_Q=1$

即： $(a_1{}^*(t)\quad a_2{}^*(t)\quad\cdots\quad a_n{}^*(t)\quad\cdots)\begin{pmatrix} a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots \end{pmatrix}=1$

4、平均值公式：$\overline{F}=\Psi_Q^+F_Q\Psi_Q$

即：$\overline{F}=(a_1^{\ *}(t)\quad a_2^{\ *}(t)\quad\cdots\quad a_n^{\ *}(t)\quad\cdots)\begin{pmatrix}F_{11}&F_{12}&\cdots&F_{1n}&\cdots\\F_{21}&F_{22}&\cdots&F_{2n}&\cdots\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\F_{m1}&F_{m2}&\cdots&F_{mn}&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\\\vdots\\a_n(t)\\\vdots\end{pmatrix}$

5、本征值方程：$F_Q\Psi_Q=\lambda\Psi_Q$

即：$\begin{pmatrix}F_{11}&F_{12}&\cdots&F_{1n}&\cdots\\F_{21}&F_{22}&\cdots&F_{2n}&\cdots\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\F_{m1}&F_{m2}&\cdots&F_{mn}&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\\\vdots\\a_n(t)\\\vdots\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a_1(t)\\a_2(t)\\\vdots\\a_n(t)\\\vdots\end{pmatrix}$

6、薛定谔方程

$$i\hbar\frac{d\Psi_Q}{dt}=H_Q\Psi_Q$$

## 二、例题

1、已知体系的哈密顿算符 $\hat{H}$ 与某一力学量算符 $\hat{B}$ 在能量表象中矩阵形式为：

$$H=\hbar\omega\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\qquad\qquad B=b\begin{pmatrix}2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$$

式中 $\omega$ 和 $b$ 均为实常数，问

（1）H 和 B 是否是厄米矩阵？

（2）H 和 B 是否对易？

（3）求算符 $\hat{B}$ 的本征值及相应的本征函数；

（4）算符 $\hat{B}$ 的本征函数是否也是 $\hat{H}$ 的本征函数。

解：（1） $H^+=\hbar\omega\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}=H$

$$B^+=b\begin{pmatrix}2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}=\mathrm{B}$$

∴H 和 B 均是厄米矩阵

（2） $HB=\hbar\omega b\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}=\hbar\omega b\begin{pmatrix}-2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$

$$BH=\hbar\omega b\begin{pmatrix}2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}=\hbar\omega b\begin{pmatrix}-2&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}=HB$$

∴H 和 B 对易

（3） $\begin{vmatrix}2b-\lambda&0&0\\0&-\lambda&b\\0&b&-\lambda\end{vmatrix}=0$

$$(2b-\lambda)(\lambda^2-b^2)=0$$

∴ $\lambda_1=2b$， $\lambda_2=+b$， $\lambda_3=-b$

当 $\lambda_1=2b$，设相应的本征函数为 $\Psi_1=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$,则

$$\begin{pmatrix}2b&0&0\\0&0&b\\0&b&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=2b\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}2ba_1\\ba_3\\ba_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2ba_1\\2ba_2\\2ba_3\end{pmatrix}$$

∴ $\begin{cases}ba_3=2ba_2\\ba_2=2ba_3\end{cases}\Rightarrow a_2=a_3=0$，则 $\Psi_1=\begin{pmatrix}a_1\\0\\0\end{pmatrix}$

利用归一化条件：

$$\Psi^+\Psi=(a_1^*\quad 0\quad 0)\begin{pmatrix}a_1\\0\\0\end{pmatrix}=|a_1|^2=1，\therefore 取\ a_1=1$$

∴算符 $\hat{B}$ 与本征值 $\lambda_1=2b$ 相应的本征函数为 $\Psi_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$

用同样的方法可求得：

与 $\lambda_2 = b$ 相应的 $\hat{B}$ 的本征函数为 $\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

与 $\lambda_3 = -b$ 相应的 $\hat{B}$ 的本征函数为 $\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

2、已知在 $\hat{L}^2 - \hat{L}_z$ 的共同表象中，算符 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的矩阵分别为

$$L_x = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}，\quad L_y = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

求它们的本征值和归一化的本征函数。

解：$\begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & -\lambda & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar & -\lambda \end{vmatrix} = 0$

$$-\lambda(\lambda^2 - \frac{\hbar^2}{2}) + \lambda\frac{\hbar^2}{2} = 0$$

$$\lambda((\hbar^2 - \lambda^2) = 0$$

$\therefore \lambda_1 = 0$，$\lambda_2 = \hbar$，$\lambda_3 = -\hbar$

设与 $\lambda_1 = 0$ 对应的 $\hat{L}_x$ 的本征函数为 $\Psi_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$，则

$$\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar a_2 = 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar(a_1 + a_3) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_2 = 0 \\ a_1 = -a_3 \end{cases} \Rightarrow \Psi_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ -a_1 \end{pmatrix}$$

利用波函数的归一化条件

$$\begin{pmatrix} a_1^* & 0 & -a_1^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ -a_1 \end{pmatrix} = 2|a_1|^2 = 1\text{，取 } a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$\therefore$ 与 $\lambda_1 = 0$ 对应的 $\hat{L}_x$ 的本征函数 $\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

设与 $\lambda_2 = \hbar$ 对应的 $\hat{L}_x$ 的本征函数 $\Psi_2 = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$，则

$$\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar b_2 = \hbar b_1 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar(b_1 + b_3) = \hbar b_2 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar b_2 = \hbar b_3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b_1 = \frac{b_2}{\sqrt{2}} \\ b_3 = \frac{b_2}{\sqrt{2}} \end{cases} \Rightarrow \Psi_2 = \begin{pmatrix} \frac{b_2}{\sqrt{2}} \\ b_2 \\ \frac{b_2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

利用波函数的归一化条件

$$\begin{pmatrix} \frac{b_2^*}{\sqrt{2}} & b_2^* & \frac{b_2^*}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{b_2}{\sqrt{2}} \\ b_2 \\ \frac{b_2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = 2|b_2|^2 = 1\text{，取 } b_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$\therefore$ 与 $\lambda_2 = \hbar$ 对应的 $\hat{L}_x$ 的本征函数 $\Psi_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$

设与 $\lambda_3 = -\hbar$ 对应的 $\hat{L}_x$ 的本征函数 $\Psi_3 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$，则

$$\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = -\hbar\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar c_2 = -\hbar c_1 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar(c_1 + c_3) = -\hbar c_2 \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar c_2 = -\hbar c_3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 = -\frac{c_2}{\sqrt{2}} \\ c_3 = -\frac{c_2}{\sqrt{2}} \end{cases} \Rightarrow \Psi_3 = \begin{pmatrix} -\frac{c_2}{\sqrt{2}} \\ c_2 \\ -\frac{c_2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

利用波函数的归一化条件

$$\begin{pmatrix} -\frac{c_2^*}{\sqrt{2}} & c_2^* & -\frac{c_2^*}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{c_2}{\sqrt{2}} \\ c_2 \\ -\frac{c_2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = 2|c_2|^2 = 1，\text{取 } c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$\therefore$ 与 $\lambda_3 = -\hbar$ 对应的 $\hat{L}_x$ 的本征函数 $\Psi_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$

按照上述同样的方法可求得 $\hat{L}_y$ 的本征值和相应的本征函数分别为

$$L_y = 0，\quad \Phi_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$L_y = \hbar，\quad \Phi_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}i \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$L_y = -\hbar，\quad \Phi_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2}i \\ -1 \end{pmatrix}$$

3、在 $\hat{S}^2 - \hat{S}_z$ 的共同表象中，$\hat{S}_x$ 和 $\hat{S}_y$ 的矩阵形式为

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

求它们的本征值和归一化的本征函数

解：设 $\hat{S}_x$ 的本征值为 $\lambda$，由久期方程得

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = 0，\quad \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0$$

$\therefore\ \lambda_1=\frac{\hbar}{2}$，$\lambda_2=-\frac{\hbar}{2}$

设与 $\lambda_1=\frac{\hbar}{2}$ 对应的 $\hat{S}_x$ 的本征函数为 $\Psi_1=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}$，则

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}$$

$$\begin{cases}\frac{\hbar}{2}a_2=\frac{\hbar}{2}a_1\\ \frac{\hbar}{2}a_1=\frac{\hbar}{2}a_2\end{cases}\Rightarrow a_1=a_2\text{，}\quad \Psi_1=\begin{pmatrix}a_1\\a_1\end{pmatrix}$$

利用波函数的归一化条件

$$(a_1^*\quad a_1^*)\begin{pmatrix}a_1\\a_1\end{pmatrix}=1\text{，取 }a_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

则与 $\lambda_1=\frac{\hbar}{2}$ 对应的 $\hat{S}_x$ 的本征函数为 $\Psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

设与 $\lambda_2=-\frac{\hbar}{2}$ 对应的 $\hat{S}_x$ 的本征函数为 $\Psi_2=\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix}$ 则

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix}$$

$$\begin{cases}\frac{\hbar}{2}b_2=-\frac{\hbar}{2}b_1\\ \frac{\hbar}{2}b_1=-\frac{\hbar}{2}b_2\end{cases}\Rightarrow b_2=-b_1\text{，}\quad \Psi_1=\begin{pmatrix}b_1\\-b_1\end{pmatrix}$$

利用波函数的归一化条件：

$$(b_1^*\quad -b_1^*)\begin{pmatrix}b_1\\-b_1\end{pmatrix}=1\text{，}\quad 2|b_1|^2=1\text{，取 }b_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

则与 $\lambda_2=-\frac{\hbar}{2}$ 对应的 $\hat{S}_x$ 的本征函数为 $\Psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

用同样的方法可求得 $\hat{S}_y$ 的本征值和相应的本征函数分别为

$$S_y=\frac{\hbar}{2}\text{，}\quad \Phi_1=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$$

$$S_y=-\frac{\hbar}{2}\text{，}\quad \Phi_2=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$$

4、分别在坐标表象、动量表象、能量表象中写出一维无限深势阱中基态粒子的波

函数。
解：（1）坐标表象：

基态波函数为 $\psi_1(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi}{a}x & (0<x<a)\\ 0 & (x\le 0, x\ge a)\end{cases}$

（2）动量表象：

动量 $\hat{p}$ 的本征函数为 $\psi_p(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\dfrac{i}{\hbar}px)$

$$\therefore c(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p{}^*\psi_1(x)dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a \exp(-\frac{i}{\hbar}px)\sin\frac{\pi}{a}xdx=\sqrt{\frac{\pi a}{\hbar}}\frac{1+\exp(-\frac{i}{\hbar}pa)}{\pi^2-(pa/\hbar)^2}$$

（3）能量表象

哈密顿算符 $\hat{H}$ 的本征函数为 $\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x & (0<x<a)\\ 0 & (x\le 0, x\ge a)\end{cases}$

$$\therefore a_n(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n{}^*(x)\psi_1(x)dx=\delta_{n1}=\begin{cases}1, & n=1\\ 0, & n\ne 1\end{cases}$$

故基态波函数为 $\Psi=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}$

# 第五章 微扰理论

## 一、主要内容

（一）定态微扰论

体系的 $\hat{H}$ 不显含时间

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$$

其中 $\hat{H}'$ 为微扰，且已知 $\hat{H}_0$ 本征方程的解为

$$\hat{H}_0\psi_n{}^{(0)}=E_n{}^{(0)}\psi_n{}^{(0)}\qquad (n=1,2,3,\cdots)$$

该理论的适用条件是

$$\left|\frac{H'_{mn}}{E_n{}^{(0)}-E_m{}^{(0)}}\right|<<1，\quad E_n{}^{(0)}\ne E_m{}^{(0)}$$

设体系未受微扰时处于 $E_n{}^{(0)}$ 能级，加上微扰 $\hat{H}'$ 后，能级和波函数的修正按以下

两种情形分别处理：

1、$E_n^{(0)}$非简并

至二级修正的能量为 $E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_m' \dfrac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$

至一级修正的波函数为 $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_m' \dfrac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$

2、$E_n^{(0)}$简并

设简并度为 $k$：$\hat{H}_0 \psi_{ni}^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_{ni}^{(0)}$， $i = 1,2,\cdots,k$

至一级近似的能量为 $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$，其中 $E_n^{(1)}$决定于久期方程

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E_n^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1k} \\ H'_{21} & H'_{22} - E_n^{(1)} & \cdots & H'_{2k} \\ & \cdots & & \\ H'_{k1} & H'_{k2} & \cdots & H'_{kk} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

零级近似波函数为 $\psi_n^{(0)} = \sum_{i=1}^k c_i^{(0)} \psi_{ni}^{(0)}$，其中 $\{c_i^{(0)}\}$为方程组

$$\sum_{i=1}^k (H'_{li} - E_n^{(1)} \delta_{li}) c_i^{(0)} = 0, \quad l = 1,2,\cdots,k$$

的解。以上方程中

$$H'_{li} = \int \psi_{nl}^{(0)*} \hat{H}' \psi_{ni}^{(0)} d\tau$$

（二）含时微扰

使用条件为：

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t)$$

其中 $H'$ 为微扰，$\hat{H}_0$不显含时间且已知其本征方程的解为

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n \qquad (n = 1,2,\cdots)$$

1、体系由初态 $\psi_n$ 跃迁到终态 $\psi_m$ 的几率为

$$W_{n\to m} = |a_m(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t H'_{mn} e^{i\omega_{mn} t'} dt' \right|^2$$

其中 $\omega_{mn} = \dfrac{1}{\hbar}(E_m - E_n)$，$H'_{mn} = \int \psi_m^* H' \psi_n d\tau$

2、偶极跃迁中角量子数与磁量子数的选择定则为

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = o, \pm 1$$

## 二、例题

1、转动惯量为 I，电矩为 $\vec{D}$ 的平面转子处在均匀电场 $\varepsilon$ 中，电场是在转子运动的

平面上，用微扰法求转子能量至二级修正。

解：在均匀电场中，平面转子体系的哈密顿算符为

$$\hat{H}=\frac{\hat{L}_z{}^2}{2I}-D\varepsilon\cos\varphi=\hat{H}_0+\hat{H}'$$

其中 $\hat{H}'=-D\varepsilon\cos\varphi$，$\hat{H}_0=\frac{\hat{L}_z{}^2}{2I}$，$\hat{H}_0$ 的本征值和本征函数分别为

$$E_m^{(0)}=\frac{m^2\hbar^2}{2I}$$

$$\psi_m{}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}，\quad m=0,\pm1,\cdots$$

$\because$ $\hat{H}$ 不显含时间，属于定态微扰

$$\begin{aligned}H'_{mn}&=\int_0^{2\pi}\psi_m{}^{(0)*}(-D\varepsilon\cos\varphi)\psi_n{}^{(0)}d\varphi=-\frac{D\varepsilon}{2}\int_0^{2\pi}\psi_m{}^{(0)*}(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi})\psi_n{}^{(0)}d\varphi\\&=-\frac{D\varepsilon}{2}\left[\int_0^{2\pi}\psi_m{}^{(0)*}\psi_{n+1}^{(0)}d\varphi+\int_0^{2\pi}\psi_m{}^{(0)*}\psi_{n-1}^{(0)}d\varphi\right]\\&=-\frac{D\varepsilon}{2}\delta_{m,n+1}-\frac{D\varepsilon}{2}\delta_{m,n-1}=\begin{cases}-\dfrac{D\varepsilon}{2}, & m=n\pm1\\ 0, & m\neq n\pm1\end{cases}\end{aligned}$$

由上式可见，对于能级 $E_m^{(0)}$ 的 2 个简并态 $\psi_m^{(0)}$ 和 $\psi_{-m}^{(0)},H'$ 的所有矩阵元均为 0，即

$$H'_{m,m}=H'_{-m,-m}=H'_{m,-m}=0$$

$\therefore$本题可按非简并态微扰论处理，精确到二级修正的能量值为

$$\begin{aligned}E&=E_m^{(0)}+H'_{mm}+\sum_n{}'\frac{\left|H'_{mn}\right|^2}{E_m^{(0)}-E_n^{(0)}}\\&=\frac{m^2\hbar^2}{2I}+\frac{\frac{D^2\varepsilon^2}{4}}{\frac{m^2\hbar^2}{2I}-\frac{(m-1)^2\hbar^2}{2I}}+\frac{\frac{D^2\varepsilon^2}{4}}{\frac{m^2\hbar^2}{2I}-\frac{(m+1)^2\hbar^2}{2I}}\\&=\frac{m^2\hbar^2}{2I}+\frac{D^2\varepsilon^2 I}{(4m^2-1)\hbar^2}\end{aligned}$$

2、转动惯量为 I，电矩为 $\vec{D}$ 的空间转子处在均匀弱电场 $\varepsilon$ 中，电场沿 z 轴方向，用微扰法求转子基态能量至二级修正。

[提示： $\cos\theta Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}$]

解： $\hat{H}=\frac{\hat{L}^2}{2I}-D\varepsilon\cos\theta=\hat{H}_0+\hat{H}'$

其中 $\hat{H}' = -D\varepsilon\cos\theta,\ \hat{H}_0 = \frac{\hat{L}^2}{2I}$，$\hat{H}_0$ 的本征值和本征函数为

$$E_l^{(0)} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}，\quad l = 0,1,2,\cdots$$

$$\psi_{lm}^{(0)} = Y_{lm}^{(0)}(\theta,\varphi)，\quad m = 0,\pm1,\cdots,\pm l$$

基态 $\psi_{00}{}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ 是非简并态

$$H'_{lm,00} = \int Y_{lm}^{(0)*}(-D\varepsilon\cos\theta)Y_{00}d\Omega = \frac{-D\varepsilon}{\sqrt{3}}\int Y_{lm}^{(0)*}Y_{10}d\Omega = \frac{-D\varepsilon}{\sqrt{3}}\delta_{l,1}\delta_{m,0}$$

∴精确到二级修正的基态能量值为

$$E_0 = E_0^{(0)} + H'_{00,00} + \sum_l{}' \frac{\left|H'_{lm,00}\right|^2}{E_0^{(0)} - E_l^{(0)}} = -\frac{D^2\varepsilon^2 I}{3\hbar^2}$$

3、设体系未受微扰作用时，只有两个能级 $E_{01}$ 及 $E_{02}$，现受到微扰 $H'$ 作用，微扰矩阵元为 $H'_{12} = H'_{21} = a, H'_{11} = H'_{22} = b,\ a$ 、$b$ 都是小的实数，用微扰公式求能量至二级修正值。

解：$\because E_{01} \neq E_{02}$，属于定态非简并情形，则

$$E_1 = E_{01} + H'_{11} + \frac{\left|H'_{12}\right|^2}{E_{01} - E_{02}} = E_{01} + b + \frac{a^2}{E_{01} - E_{02}}$$

$$E_2 = E_{02} + H'_{22} + \frac{\left|H'_{21}\right|^2}{E_{02} - E_{01}} = E_{02} + b + \frac{a^2}{E_{02} - E_{01}}$$

4、一维势阱宽度为 $a$，其势能函数为

$$u(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, x > a \\ 0 & 0 \le x \le \frac{a}{4}, \frac{3a}{4} \le x \le a \\ k & \frac{a}{4} < x < \frac{3}{4}a \end{cases}$$

$k$ 是常数，把此势阱中的粒子看成是受到微扰的关在盒子中的粒子，求其能量的一级近似。

解：$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + u(x) = \hat{H}_0 + \hat{H}'$

其中 $\hat{H}' = \begin{cases} 0, & x \le \frac{a}{4}, x \ge \frac{3}{4}a \\ k, & \frac{a}{4} < x < \frac{3}{4}a \end{cases}$

$\hat{H}_0$ 为一维无限深势阱的哈密顿算符，$\hat{H}_0$ 的本征值和本征函数为

$$E_n^{(0)}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}，\quad n=1,2,3,\cdots$$

$$\psi_n^{(0)}=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x & 0\le x\le a\\ 0 & x<0,x>a\end{cases}$$

$E_n^{(0)}$ 是非简并态，能量的一级近似为

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=\frac{2k}{a}\int_{\frac{a}{4}}^{\frac{3a}{4}}\sin^2\frac{n\pi}{a}xdx=\frac{k}{a}\int_{\frac{a}{4}}^{\frac{3a}{4}}(1-\cos\frac{2n\pi}{a}x)dx$$

$$=\frac{k}{a}(\frac{a}{2}-\frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi}{a}x\Big|_{\frac{a}{4}}^{\frac{3}{4}a})=\frac{k}{2}-\frac{k}{n\pi}\sin\frac{n\pi}{2}\cos n\pi$$

精确到一级近似的能量为

$$E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}+\frac{k}{2}-\frac{k}{n\pi}\sin\frac{n\pi}{2}\cos n\pi$$

5、利用微扰法重解第二章的第 11 题，求该体系的能量至二级修正。
[提示：对谐振子的第 n 个本征态，有

$$x\psi_n=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})，\quad \frac{d\psi_n}{dx}=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\psi_{n-1}-\sqrt{n+1}\psi_{n+1})]$$

解：$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2-e\varepsilon x=\hat{H}_0+\hat{H}'$

其中 $\hat{H}'=-e\varepsilon x$，$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$，$\hat{H}_0$ 的本征值和本征函数为

$$E_n^{(0)}=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega, n=0,1,2,\cdots$$

$$\psi_n^{(0)}(x)=N_nH_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$E_n^{(0)}$ 是非简并态

$$H'_{mn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)*}(-e\varepsilon x)\psi_n^{(0)}dx=-\frac{e\varepsilon}{\sqrt{2}\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)*}(\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)})dx$$

$$=-\frac{e\varepsilon}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1})$$

$$=\begin{cases} 0, & m \neq n \pm 1 \\ -\frac{\sqrt{n}e\varepsilon}{\sqrt{2}\alpha}, & m = n-1 \\ -\frac{\sqrt{n+1}e\varepsilon}{\sqrt{2}\alpha}, & m = n+1 \end{cases}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_m{}' \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$= (n+\frac{1}{2})\hbar\omega + \frac{\frac{ne^2\varepsilon^2}{2\alpha^2}}{\hbar\omega} - \frac{\frac{(n+1)e^2\varepsilon^2}{2\alpha^2}}{\hbar\omega}$$

$$= (n+\frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{e^2\varepsilon^2}{2\mu\omega^2}$$

这个结果与精确解完全一致，可见，微扰法是相当精确的。

6、设哈密顿量在能量表象中的矩阵形式为：

$$H = \begin{pmatrix} E_1^0 + a & b \\ b & E_2^0 + a \end{pmatrix}$$

其中 a、b 为小的实数且 $E_1^0 > E_2^0$，求

（1）用微扰公式求能量至二级修正；

（2）直接求能量，并和（1）所得结果比较。[提示：当 $c << 1$ 时，$\sqrt{1+c^2} \approx 1 + \frac{c^2}{2}$]

解：（1） $H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$

$\because E_1^0 \neq E_2^0$，属于非简并态微扰情形

$$E_1 = E_1^0 + H'_{11} + \frac{|H'_{21}|^2}{E_1^0 - E_2^0} = E_1^0 + a + \frac{b^2}{E_1^0 - E_2^0}$$

$$E_2 = E_2^0 + H'_{22} + \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^0 - E_1^0} = E_2^0 + a + \frac{b^2}{E_2^0 - E_1^0}$$

（2） $\begin{vmatrix} E_1^0 + a - \lambda & b \\ b & E_2^0 + a - \lambda \end{vmatrix} = 0$

$$(E_1^0 + a - \lambda)(E_2^0 + a - \lambda) - b^2 = 0$$

$$\lambda_1 = \frac{E_1^0 + E_2^0 + 2a + \sqrt{(E_1^0 - E_2^0)^2 + 4b^2}}{2}$$

$$\lambda_2=\frac{E_1^0+E_2^0+2a-\sqrt{(E_1^0-E_2^0)^2+4b^2}}{2}$$

设 $E_1^0>E_2^0$，取 $\sqrt{1+c^2}=1+\dfrac{c^2}{2}\ (c<<1)$

则 $\lambda_1=\dfrac{E_1^0+E_2^0+2a+(E_1^0-E_2^0)[1+\frac{2b^2}{(E_1^0-E_2^0)^2}]}{2}=E_1^0+a+\dfrac{b^2}{E_1^0-E_2^0}=E_1$

$$\lambda_2=\frac{E_1^0+E_2^0+2a-(E_1^0-E_2^0)[1+\frac{2b^2}{(E_1^0-E_2^0)^2}]}{2}=E_2^0+a-\frac{b^2}{E_1^0-E_2^0}=E_2$$

可见，在取 $\sqrt{1+c^2}\approx 1+\dfrac{c^2}{2}$ 这种近似条件下，（1）和（2）的结果一致。

7、设哈密顿量在能量表象中的矩阵形式为 $H=\begin{pmatrix}1 & c & 0\\ c & 3 & 0\\ 0 & 0 & c-1\end{pmatrix}$

（1）求 H 的精确本征值；

（2）设 $c<<1$，利用微扰法理论求能量至二级修正；

（3）在什么条件下上述两种结果一致。[提示：当 $c<<1$ 时，$\sqrt{1+c^2}\approx 1+\dfrac{c^2}{2}$]

解：（1）$\begin{vmatrix}1-\lambda & c & 0\\ c & 3-\lambda & 0\\ 0 & 0 & c-1-\lambda\end{vmatrix}=0$

$$(c-1-\lambda)[(1-\lambda)(3-\lambda)-c^2]=0$$

$$\therefore\ \lambda_1=c-1,\quad \lambda_2=2+\sqrt{1+c^2},\quad \lambda_3=2-\sqrt{1+c^2}$$

（2）$H=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 3 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & c & 0\\ c & 0 & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}=H_0+H'$

由非简并态微扰论得：

$$E_1=E_1^0+H'_{11}+\sum_n{}'\frac{|H'_{n1}|^2}{E_1^0-E_n^0}=1-\frac{c^2}{2}$$

$$E_2=E_2^0+H'_{22}+\sum_n{}'\frac{|H'_{n2}|^2}{E_2^0-E_n^0}=3+\frac{c^2}{2}$$

$$E_3=E_3^0+H'_{33}+\sum_n{}'\frac{|H'_{n3}|^2}{E_3^0-E_n^0}=-1+c$$

（3） $\lambda_2 = 2+\sqrt{1+c^2} \approx 2+(1+\frac{c^2}{2}) = 3+\frac{c^2}{2} = E_2$

$$\lambda_3 = 2-\sqrt{1+c^2} \approx 2-(1+\frac{c^2}{2}) = 1-\frac{c^2}{2} = E_3$$

$$\lambda_1 = E_3$$

可见，当取 $\sqrt{1+c^2} \approx 1+\frac{c^2}{2}$，（1）和（2）的结果一致。

8、当 $\varepsilon$ 为小的参数时，在能量表象中

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 2\varepsilon & 0 \\ 2\varepsilon & 2+\varepsilon & 3\varepsilon \\ 0 & 3\varepsilon & 3+2\varepsilon \end{pmatrix}$$

用微扰法求能量至二级修正

解：$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2\varepsilon & 0 \\ 2\varepsilon & \varepsilon & 3\varepsilon \\ 0 & 3\varepsilon & 2\varepsilon \end{pmatrix} = H_0 + H'$

$\therefore E_1^0 = 1$， $E_2^0 = 2$， $E_3^0 = 3$， $H'_{11} = H'_{13} = H'_{31} = 0, H'_{22} = \varepsilon$，

$H'_{12} = H'_{21} = H'_{33} = 2\varepsilon$， $H'_{23} = H'_{32} = 3\varepsilon$

$$\therefore E_1 = 1+\frac{4\varepsilon^2}{-1} = 1-4\varepsilon^2$$

$$E_2 = 2+\varepsilon+\frac{4\varepsilon^2}{1}+\frac{9\varepsilon^2}{-1} = 2+\varepsilon-5\varepsilon^2$$

$$E_3 = 3+2\varepsilon+\frac{9\varepsilon^2}{1} = 3+2\varepsilon+9\varepsilon^2$$

9、一维谐振子，$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$，如受到微扰的作用。

$$H' = \frac{\lambda\mu\omega^2}{2}x^2, |\lambda| << 1$$

（1）求精确解；

（2）试用微扰论公式求能级（至二级修正）；

（3）与精确解比较，[提示： $x\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$ ]

解：（1） $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2+\lambda\cdot\frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu(\omega^2+\lambda\cdot\omega^2)x^2$

令 $\omega'^2 = \omega^2(1+\lambda)$

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega'^2x^2$$

$$\therefore\ E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega'=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega\sqrt{1+\lambda}$$

（2）$\hat{H}_0$ 的本征值和本征函数为

$$E_n^0=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots$$

$$\psi_n^{(0)}=N_nH_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$H'_{mn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)*}(\lambda\cdot\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2)\psi_n dx$$

$$=\frac{\lambda}{2}\mu\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)*}x\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})dx$$

$$=\frac{\lambda}{2\sqrt{2}\alpha}\mu\omega^2\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)*}\frac{\sqrt{n}}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n-1}\psi_{n-2}+\sqrt{n}\psi_n)dx+\right.$$

$$\left.\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)*}\frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{2}\alpha}(\sqrt{n+1}\psi_n+\sqrt{n+2}\psi_{n+2})dx\ \right]$$

$$=\frac{\lambda\mu\omega^2}{4\alpha^2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)*}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}+(2n+1)\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right]dx$$

$$=\frac{\lambda\mu\omega^2}{4\alpha^2}\left[\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2}+(2n+1)\delta_{m,n}+\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}\right]$$

$$\therefore\ E_n^{(1)}=H'_{nn}=(n+\frac{1}{2})\frac{\lambda\hbar\omega}{2},\quad E_n^{(2)}=-\frac{\lambda^2(n+\frac{1}{2})\hbar\omega}{8}$$

$$\therefore\ E_n=E_n^0+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega+\frac{\lambda}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega-\frac{\lambda^2}{8}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

（3）当 $|\lambda|<<1,\sqrt{1+\lambda}\approx1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\cdots$

$$\therefore\ E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega(1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\cdots)$$

可见，只要准确到 $\lambda^2$ 项，准确解和微扰论的结果一致。

10、设哈密顿量在能量表象中的矩阵形式为 $H=\begin{pmatrix}A+B & A-B\\ A-B & A+B\end{pmatrix}$

其中 A、B 为实数，求

（1）若 $(A+B)>>(A-B)$，用微扰法求能量至一级修正；

（2）直接求能量本征值并和（1）所得结果进行比较。

解：（1） $H=\begin{pmatrix} A+B & 0 \\ 0 & A+B \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} 0 & A-B \\ A-B & 0 \end{pmatrix}=H_0+H'$

$E_1^0=E_2^0=A+B$，该能级是 2 度简并，须用简并微扰公式

由久期方程：$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & A-B \\ A-B & -E^{(1)} \end{vmatrix}=0$

$E_1^{(1)}=A-B$

$E_2^{(1)}=-(A-B)$

$\therefore E_1=E_1^0+E_1^{(1)}=2A$， $E_2=E_2^0+E_2^{(1)}=2B$

（2） $\begin{vmatrix} A+B-\lambda & A-B \\ A-B & A+B-\lambda \end{vmatrix}=0$

$\therefore \lambda_1=2A=E_1$， $\lambda_2=2B=E_2$

两者结果一致。

11、粒子在一维势场 $u(x)=\begin{cases} \infty & (x\le 0, x\ge a) \\ \lambda\delta(x-\dfrac{a}{2}) & (0<x<a) \end{cases}$

中运动，$\lambda$ 甚小，试求其基态能量的一级修正。

解： $H=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{d^2}{dx^2}+u(x)=H_0+H'$

其中 $H'=\begin{cases} 0, & (x\le 0, x\ge a) \\ \lambda\delta(x-\dfrac{a}{2}), & (0<x<a) \end{cases}$

$H_0=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{d^2}{dx^2}+\begin{cases} \infty, & (x\le 0, x\ge a) \\ 0, & (0<x<a) \end{cases}$

$H_0$ 的本征值和本征函数为

$E_n^{(0)}=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$， $n=1,2,\cdots$

$\Psi_n^{(0)}=\begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x, & 0\le x\le a \\ 0, & x<0, x>a \end{cases}$

$E_1^0$ 是非简并态

$\therefore E_1^{(1)}=H'_{11}=\dfrac{2\lambda}{a}\int_0^a \sin^2\dfrac{\pi}{a}x\delta(x-\dfrac{a}{2})dx=\dfrac{2\lambda}{a}$

$\therefore$ 精确至一级修正的基态能量为

$E_1=E_1^0+E_1^{(1)}=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}+\dfrac{2\lambda}{a}$

# 第七章 算旋与全同粒子

## 一、主要内容

（一）电子自旋

斯特恩—革拉赫实验及光谱线的精细结构等证明了电子具有自旋的事实。

1、电子自旋算符 $\bar{s}$

对易关系：$\hat{\bar{s}}\times\hat{\bar{s}} = i\hbar\hat{\bar{s}},[\hat{s}^2,\hat{s}_i]=0,i=x,y,z,\hat{s}_x\hat{s}_y+\hat{s}_y\hat{s}_x=0$ 等

$$\hat{s}_x^2=\hat{s}_y^2=\hat{s}_z^2=\frac{\hbar^2}{4},\hat{s}^2=\frac{3}{4}\hbar^2$$

在 $s^2$ 和 $s_z$ 的共同表象中，自旋算符的矩阵表示

$$\hat{s}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}，\quad \hat{s}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$$

$$\hat{s}_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}，\quad \hat{s}^2=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$\hat{s}^2$ 和 $\hat{s}_z$ 的共同本征函数

$$x_{\frac{1}{2}}(s_z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}，\quad x_{-\frac{1}{2}}(s_z)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$x_{\pm\frac{1}{2}}(s_z)$ 组成正交归一完全系，电子的任一自旋状态都可以用其展开。

2、泡利算符 $\hat{\bar{\sigma}}\equiv\frac{2}{\hbar}\hat{\bar{s}}$

对易关系：$\hat{\bar{\sigma}}\times\hat{\bar{\sigma}}=2i\hat{\bar{\sigma}},[\hat{\bar{\sigma}}^2,\hat{\sigma}_i]=0,i=x,y,z,\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=0$ 等

$$\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=1，\quad \hat{\sigma}^2=3$$

在 $\sigma^2$ 和 $\sigma_z$ 的共同表象中泡利矩阵为

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

$$\hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}，\quad \hat{\sigma}^2=3\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

3、考虑电子自旋后，电子的波函数是二行一列矩阵

$$\Psi=\begin{pmatrix}\Psi_1\\\Psi_2\end{pmatrix}$$

当电子的自旋与轨道相互作用可以略去时，电子的波函数可写为

$$\Psi(x,y,z,s_z,t)=\Psi_1(x,y,z,t)\chi(s_z)$$

（二）正常塞曼效应

无外磁场时辐射频率为 $\omega_0$ 的原子谱线，在外加均匀强磁场 B 中分裂成频率为 $\omega_0+\frac{eB}{2\mu},\omega_0,\omega_0-\frac{eB}{2\mu}$ 的三条谱线。

（三）全同粒子体系的特点

1、全同粒子不可区分性，全同性原理——量子力学的基本原理之一，在全同粒子组成的体系中，两全同粒子相互代换不引起物理状态的改变。

2、波函数的对称性

玻色子体系波函数是对称波函数

$$\Phi_s(q_1,q_2,\cdots,q_N)=c\sum_p p\phi_i(q_1)\phi_j(q_2)\cdots\phi_k(q_N)$$

其中，P 表示 N 个粒子在波函数中某一种排列，$\sum\limits_p$ 表示对所有可能的排列求和，C 为归一化常数。

费密子体系波函数是反对称波函数

$$\Phi_A(q_1,q_2,\cdots,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\phi_i(q_1) & \phi_i(q_2) & \cdots & \phi_i(q_N)\\ \phi_j(q_1) & \phi_j(q_2) & \cdots & \phi_j(q_N)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \phi_k(q_1) & \phi_k(q_2) & \cdots & \phi_k(q_N)\end{vmatrix}$$

当自旋与轨道相互作用可以忽略时，体系波函数写为

$$\Phi(q_1,q_2,\cdots,q_N)=\phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)X(s_1,s_2,\cdots,s_N)$$

3、泡利不相容原理

在全同费米子组成的体系内，不可能有两个或两个以上的粒子处于同一状态。

（四）两电子体系的自旋函数

| $\hat{s}^2=(\hat{s}_1+\hat{s}_2)^2$ 和 $\hat{s}_z=\hat{s}_{1z}+\hat{s}_{2z}$ 的共同本征函数 | $\hat{s}^2$ 的本征值 | $\hat{s}_z$ 的本征值 |
|---|---|---|
| $x_s^{(1)}=x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})$ | $2\hbar^2$ | $\hbar$ |
| $x_s^{(2)}=x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})$ | $2\hbar^2$ | $-\hbar$ |
| $x_s^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})+x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})]$ | $2\hbar^2$ | 0 |
| $x_A=\frac{1}{\sqrt{2}}[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})-x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})]$ | 0 | 0 |

可见，两电子自旋相互反平行的态是单一的，称这种态为独态；两电子自旋相互平行的能级是三重简并的，称这种态为三重态。

## 二、例题

1、证明：$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i$

证明：$\because \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 2i\hat{\sigma}_z$ （由 $\hat{\vec{\sigma}}\times\hat{\vec{\sigma}} = 2i\hat{\vec{\sigma}}$ 可得） （1）

$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 0$ （2）

（1）+（2）：$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z$

$\therefore \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_z^2 = i$ （$\because \hat{\sigma}_z^2 = 1$）

2、求在自旋态 $x_{\frac{1}{2}}(s_z)$ 中 $\hat{s}_x$ 和 $\hat{s}_y$ 的测不准关系式 $\overline{(\Delta\hat{s}_x)^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{s}_y)^2} = ?$

[提示：在 $s^2 - s_z$ 的共同表象中，$x_{\frac{1}{2}}(s_z) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, s_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}, s_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}$]

解：$x_{\frac{1}{2}}^{\ +}(s_z) = \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}$

$$\bar{s}_x = x_{\frac{1}{2}}^{\ +}(s_z)s_x x_{\frac{1}{2}}(s_z) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0$$

$$\overline{s_x^2} = x_{\frac{1}{2}}^{\ +}(s_z)s_x^2 x_{\frac{1}{2}}(s_z) = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\bar{s}_y = x_{\frac{1}{2}}^{\ +}(s_z)s_y x_{\frac{1}{2}}(s_z) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0$$

$$\overline{s_y^2} = x_{\frac{1}{2}}^{\ +}(s_z)s_y^2 x_{\frac{1}{2}}(s_z) = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{(\Delta\hat{s}_x)^2} = \overline{s_x^2} - \bar{s}_x^2 = \frac{\hbar^2}{4}, \quad \overline{(\Delta\hat{s}_y)^2} = \overline{s_y^2} - \bar{s}_y^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{(\Delta\hat{s}_x)^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{s}_y)^2} = \frac{\hbar^4}{16}$$

3、设氢原子的状态是 $\psi = \begin{pmatrix}\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$，求能量 E、角动量平方 $L^2$、角动量 $z$ 分量 $L_z$、自旋角动量平方 $s^2$、自旋角动量 $z$ 分量 $s_z$ 这五个力学量的可能取值、相应几率及其平均值。

[提示：氢原子的能级为 $E_n = -\frac{e_s^2}{2n^2a_0}$]

解：氢原子核外只有一个电子，

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

该波函数已归一化

氢原子能量的可能取值为 $E_2=-\frac{e_s^2}{8a_0}$，相应几率为 1，平均值为 $\overline{E}=E_2=-\frac{e_s^2}{8a_0}$

$L^2$ 的可能取值为 $L^2=2\hbar^2$；相应几率为 1；平均值为 $\overline{L^2}=L^2=2\hbar^2$。

$L_z$ 的可能取值为 $L_{z1}=\hbar$，$L_{z2}=0$；相应几率为：$\frac{1}{4}$，$\frac{3}{4}$；平均值为 $\overline{L_z}=\frac{\hbar}{4}$。

$s^2$ 的可能取值为 $s^2=\frac{3}{4}\hbar^2$；相应几率为 1；平均值为 $\overline{s^2}=\frac{3}{4}\hbar^2$。

$s_z$ 的可能取值为 $s_{z1}=\frac{\hbar}{2}$，$s_{z2}=-\frac{\hbar}{2}$；相应几率为：$\frac{1}{4}$，$\frac{3}{4}$；平均值为 $\overline{s_z}=\frac{1}{4}\times\frac{\hbar}{2}-\frac{3}{4}\times\frac{\hbar}{2}=-\frac{\hbar}{4}$。

4、试求在下列各态中轨道角动量 $z$ 分量 $L_z$ 和自旋角动量 $z$ 分量 $s_z$ 的平均值。

（1）$\psi_1=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}R_{21}Y_{1-1}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}Y_{11}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}R_{21}Y_{1-1}x_{\frac{1}{2}}-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}Y_{11}x_{-\frac{1}{2}}$

（2）$\psi_2=\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}x_{\frac{1}{2}}+\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{11}x_{-\frac{1}{2}}$

（3）$\psi_3=\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1,-1}x_{\frac{1}{2}}-\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}x_{-\frac{1}{2}}$

解：（1）$\psi_1$ 已归一化

$L_z$ 的可能取值为：$-\hbar$，$\hbar$；相应几率：$\frac{1}{4}$，$\frac{3}{4}$；$\therefore\ \overline{L}_z=-\hbar\times\frac{1}{4}+\hbar\times\frac{3}{4}=\frac{\hbar}{2}$。

$s_z$ 的可能取值为：$\frac{\hbar}{2}$，$-\frac{\hbar}{2}$；相应几率：$\frac{1}{4}$，$\frac{3}{4}$；$\therefore\ \overline{s}_z=\frac{\hbar}{2}\times\frac{1}{4}-\frac{\hbar}{2}\times\frac{3}{4}=-\frac{\hbar}{4}$。

用同样的方法可求得：

（2）$\overline{L}_z=\frac{\hbar}{3}$，$\overline{s}_z=\frac{\hbar}{6}$

（3）$\overline{L}_z=-\frac{\hbar}{3}$，$\overline{s}_z=-\frac{\hbar}{6}$

5、已知在 $\sigma^2-\sigma_z$ 表象中，$\sigma_x$、$\sigma_y$ 算符的矩阵形式为

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$$

试分别求出它们的本征值和相应的本征函数。

解：设$\sigma_x$的本征值为$\lambda$，由久期方程

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0，\lambda_1 = 1，\lambda_2 = -1$$

（1）当$\lambda_1 = 1$，设相应的$\sigma_x$的本征函数为$\Psi_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$，则

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \qquad \Rightarrow a_1 = a_2，\Psi_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

$\because \Psi_1{}^{+}\Psi_1 = 1$，$(a_1^* \quad a_1^*)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 1$，取$a_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$，

$\therefore$与本征值$\lambda_1 = 1$相应的$\sigma_x$的本征函数为$\Psi_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

（2）当$\lambda_2 = -1$，设相应的$\sigma_x$的本征函数为$\Psi_2 = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$，则

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}，\Rightarrow b_1 = -b_2，\Psi_2 = \begin{pmatrix} b_1 \\ -b_1 \end{pmatrix}$$

$\because \Psi_2{}^{+}\Psi_2 = 1$，$(b_1^* \; -b_1^*)\begin{pmatrix} b_1 \\ -b_1 \end{pmatrix} = 1$，取$b_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$，

$\therefore \Psi_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$\therefore$与本征值$\lambda_2 = -1$相应的$\sigma_x$的本征函数为$\Psi_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

同理可求得$\sigma_y$的本征值的和相应的本征函数分别为

$$\lambda_1' = 1，\Phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$\lambda_2' = -1，\Phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

6、试证明：$x_{\frac{1}{2}}(s_z)$与$x_{-\frac{1}{2}}(s_z)$都是$\hat{s}_x^2$的本征函数，而不是$\hat{s}_x$的本征函数。

证明：在$s^2 - s_z$的表象中，$x_{\frac{1}{2}}(s_z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，$x_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$s_x^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}，\quad s_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\therefore\ s_x^2 x_{\frac{1}{2}}(s_z)=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}x_{\frac{1}{2}}$$

$$s_x^2 x_{-\frac{1}{2}}=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}x_{-\frac{1}{2}}$$

$$s_x x_{\frac{1}{2}}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}x_{-\frac{1}{2}}$$

$$s_x x_{-\frac{1}{2}}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}x_{\frac{1}{2}}$$

$\therefore$ $x_{1/2}$、 $x_{-1/2}$是 $s_x^2$ 的本征函数，相应的本征值均为 $\dfrac{\hbar^2}{4}$； $x_{1/2}$、 $x_{-1/2}$不是 $s_x$ 的本征函数。

7、下列波函数中，哪些是完全对称的？哪些是完全反对称的？

（1） $f(\vec{r}_1)g(\vec{r}_2)x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})$；

（2） $f(\vec{r}_1)f(\vec{r}_2)\left[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})-x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})\right]$；

（3） $\left[f(\vec{r}_1)g(\vec{r}_2)-g(\vec{r}_1)f(\vec{r}_2)\right]\ \left[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})-x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})\right]$；

（4） $r_{12}^2\exp[-\alpha(r_1+r_2)]$；

（5） $\exp[-\alpha(r_1-r_2)]$

其中$\alpha$为常数。

答：（1）和（5）既不是完全对称的，也不是完全反对称的；（2）是完全反对称的；（3）和（4）是完全对称的。

8、一体系由三个全同的玻色子组成，玻色子之间无相互作用，玻色子只有两个可能的单粒子态$\psi_i$和$\psi_j$，问体系可能的状态有几个？它们的波函数怎样用单粒子波函数构成？

解：设$q_N=(\vec{r}_N,\vec{s}_N)$表示第 N 个粒子的坐标和自旋，体系可能的状态共有 4 种，相应的波函数分别为

（1）三个粒子处于同一个态

$$\Phi_s^{(1)}=\psi_i(q_1)\psi_i(q_2)\psi_i(q_3)$$

$$\Phi_s^{(2)}=\psi_j(q_1)\psi_j(q_2)\psi_j(q_3)$$

（2）二个粒子处于$i$态，另一个粒子处于 $j$态

$$\Phi_s^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\phi_i(q_1)\phi_i(q_2)\phi_j(q_3)+\phi_i(q_1)\phi_j(q_2)\phi_i(q_3)+\phi_j(q_1)\phi_i(q_2)\phi_i(q_3)\right]$$

（3）一个粒子处于$i$态，另两个粒子处于 $j$态

$$\Phi_s^{(4)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\phi_i(q_1)\phi_j(q_2)\phi_j(q_3)+\phi_j(q_1)\phi_i(q_2)\phi_j(q_3)+\phi_j(q_1)\phi_j(q_2)\phi_i(q_3)\right]$$

9、考虑由三个玻色子组成的全同粒子体系，限定单粒子状态只能是$\psi_i$、$\psi_j$和$\psi_k$，试写出体系的所有可能状态波函数。

解：设 $q_N=(\vec{r}_N,\vec{s}_N)$ 表示第 N 个粒子的坐标和自旋

（1）三个粒子处于同一个态

$$\Phi_s^{(1)}=\psi_i(q_1)\psi_i(q_2)\psi_i(q_3)$$

$$\Phi_s^{(2)}=\psi_j(q_1)\psi_j(q_2)\psi_j(q_3)$$

$$\Phi_s^{(3)}=\psi_k(q_1)\psi_k(q_2)\psi_k(q_3)$$

（2）两个粒子处于相同的单粒子态，第三个粒子处于另外一种单粒子态

$$\Phi_s^{(4)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi_i(q_1)\psi_i(q_2)\psi_j(q_3)+\psi_i(q_1)\psi_j(q_2)\psi_i(q_3)+\psi_j(q_1)\psi_i(q_2)\psi_i(q_3)\right]$$

$$\Phi_s^{(5)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi_i(q_1)\psi_i(q_2)\psi_k(q_3)+\psi_i(q_1)\psi_k(q_2)\psi_i(q_3)+\psi_k(q_1)\psi_i(q_2)\psi_i(q_3)\right]$$

$$\Phi_s^{(6)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi_j(q_1)\psi_j(q_2)\psi_i(q_3)+\psi_j(q_1)\psi_i(q_2)\psi_j(q_3)+\psi_i(q_1)\psi_j(q_2)\psi_j(q_3)\right]$$

$$\Phi_s^{(7)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi_j(q_1)\psi_j(q_2)\psi_k(q_3)+\psi_j(q_1)\psi_k(q_2)\psi_j(q_3)+\psi_k(q_1)\psi_j(q_2)\psi_j(q_3)\right]$$

$$\Phi_s^{(8)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi_k(q_1)\psi_k(q_2)\psi_i(q_3)+\psi_k(q_1)\psi_i(q_2)\psi_k(q_3)+\psi_i(q_1)\psi_k(q_2)\psi_k(q_3)\right]$$

$$\Phi_s^{(9)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi_k(q_1)\psi_k(q_2)\psi_j(q_3)+\psi_k(q_1)\psi_j(q_2)\psi_k(q_3)+\psi_j(q_1)\psi_k(q_2)\psi_k(q_3)\right]$$

（3）三个粒子各处于不同的单粒子态

$$\Phi_s^{(10)}=\frac{1}{\sqrt{6}}\Big[\psi_i(q_1)\psi_j(q_2)\psi_k(q_3)+\psi_i(q_1)\psi_k(q_2)\psi_j(q_3)+\psi_j(q_1)\psi_i(q_2)\psi_k(q_3)$$
$$+\psi_j(q_1)\psi_k(q_2)\psi_i(q_3)+\psi_k(q_1)\psi_i(q_2)\psi_j(q_3)+\psi_k(q_1)\psi_j(q_2)\psi_i(q_3)\Big]$$

体系共有 10 种独立的状态。

10、有一包含三个粒子的全同粒子体系，每个粒子可处于$\psi_a$、$\psi_b$、$\psi_c$、$\psi_d$四种状态，问若粒子是（1）经典粒子；（2）费米子；（3）玻色子时，系统各有多少种状态？

解：

| | 经典粒子 | 玻色子 | 费米子 |
|---|---|---|---|
| 三个粒子处在同一态： | 4 | 4 | 0 |
| 三个粒子有两个处在同一态： | 36 | 12 | 0 |
| 三个粒子各处在不同态： | 24 | 4 | 4 |
| 合　计 | 64 | 20 | 4 |

11、设两个电子在弹性辏力场中运动，每个电子的势能是$u(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$，如果

电子之间的库仑能和$u(r)$相比可以忽略，求这两个电子组成的体系波函数。
解：这是一个两电子体系，属于费米子系统

在不考虑电子之间库仑相互作用的情况下

$$\psi_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_m(\vec{r}_1)\psi_n(\vec{r}_2)+\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2)\right]$$

$$\psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_m(\vec{r}_1)\psi_n(\vec{r}_2)-\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2)\right]$$

其中$\psi_m(\vec{r})$、$\psi_n(\vec{r})$分别为谐振子第$m$、$n$个能量本征函数

（1）当$m=n$时，由这两电子组成的体系波函数为

$$\Phi_A=\psi_m(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2)x_A(s_{1z},s_{2z})$$

（2）当$m\neq n$时，由这两电子组成的体系波函数为

$$\Phi_A=\psi_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2)x_A(s_{1z},s_{2z}) \qquad \text{单重态}$$

$$\Phi_A=\psi_A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\begin{cases}x_s^{(1)}(s_{1z},s_{2z})\\ x_s^{(2)}(s_{1z},s_{2z})\\ x_s^{(3)}(s_{1z},s_{2z})\end{cases} \qquad \text{三重态}$$

其中 $x_s^{(1)}=x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})$

$$x_s^{(2)}=x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})$$

$$x_s^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})+x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})\right]$$

$$x_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z})-x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z})x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})\right]$$

12、有两个质量为$\mu$，自旋为$\dfrac{1}{2}$的全同粒子，在宽度为$a$的无限深势阱中，若略去两粒子间的相互作用，求体系能量本征值和本征函数，并指出最低两能级的简并度。
解：这是费米子体系，在一维无限深势阱中运动的粒子的能量和相应的波函数分别为

$$E_m=\frac{m^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, \qquad m=1,2,\cdots$$

$$\psi_m(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{m\pi}{a}x, & 0<x<a\\ 0, & x\le 0, x\ge a\end{cases}$$

（1）当$m=n$时，这两个粒子组成的体系能量本征值为$E=2E_m=\dfrac{m^2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$

相应的本征函数为$\Phi_A=\psi_m(x_1)\psi_m(x_2)x_A(s_{1z},s_{2z})$

（2）当 $m \neq n$ 时，这两个粒子组成的体系能量本征值为 $E = \frac{(m^2+n^2)\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$

波函数为：

$$\Phi_A = \psi_s(x_1, x_2) x_A(s_{1z}, s_{2z}) \qquad \text{单重态}$$

$$\Phi_A = \psi_A(x_1, x_2) \begin{cases} x_s^{(1)}(s_{1z}, s_{2z}) \\ x_s^{(2)}(s_{1z}, s_{2z}) \\ x_s^{(3)}(s_{1z}, s_{2z}) \end{cases} \qquad \text{三重态}$$

其中 $\psi_s(x_1 x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_m(x_1)\psi_n(x_2) + \psi_n(x_1)\psi_m(x_2)\right]$

$$\psi_A(x_1 x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_m(x_1)\psi_n(x_2) - \psi_n(x_1)\psi_m(x_2)\right]$$

$$x_s^{(1)} = x_{\frac{1}{2}}(s_{1z}) x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})$$

$$x_s^{(2)} = x_{-1/2}(s_{1z}) x_{-1/2}(s_{2z})$$

$$x_s^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z}) x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z}) + x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z}) x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})\right]$$

$$x_A = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[x_{\frac{1}{2}}(s_{1z}) x_{-\frac{1}{2}}(s_{2z}) - x_{-\frac{1}{2}}(s_{1z}) x_{\frac{1}{2}}(s_{2z})\right]$$

$\psi_m$、$\psi_n$ 为一维无限深势阱的能量本征函数

对于基态能级，$m = n = 1,\quad f = 1,$ 非简并态

对于第一激发态 $m = 1,\ n = 2$ 或 $m = 2, n = 1$，$f = 4$，4 重简并。