《量子力学教程》习题解答

郑锦阳

2023 年 4 月 24 日

目录

1 波函数与薛定谔方程

最小作用量原理

$$\delta \int_A^B p\,\mathrm{d}l = \delta \int_A^B \sqrt{2m(E-V)}\,\mathrm{d}l = 0$$

实物粒子的运动状态可以用平面波函数来描述

$$\psi_{\vec{p}} = A \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et\right)\right]$$

1.1 力学量算符

一维形式的动量算符

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

动能算符

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

Hamilton 算符

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{r}\times\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla\right) = \hat{l}_x\vec{e}_x + \hat{l}_y\vec{e}_y + \hat{l}_z\vec{e}_z$$

1.2 薛定谔方程

一般粒子的薛定谔方程是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t)\right]\psi(\vec{r},t)$$

特殊地，对于势场不随时间变化的**定态**

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

能量本征方程为

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

题目 1

求与下列各粒子相关的 de Broglie 波波长：

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

解答 根据粒子的动能与动量之间的关系

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \tag{1}$$

结合德布罗意波波长的表达式

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \tag{2}$$

(1) 题设自由电子的德布罗意波波长为

$$\lambda_e = \frac{h}{\sqrt{2m_eE_e}} = 1.23 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}$$

(2) 题设自由中子的德布罗意波波长为

$$\lambda_\mathrm{n} = \frac{h}{\sqrt{2m_\mathrm{n}E_\mathrm{n}}} = 9.04 \times 10^{-11}\,\mathrm{m}$$

(3) 题设自由粒子的德布罗意波波长为

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 1.17 \times 10^{-22}\,\mathrm{m}$$

(4) 氦原子包含 2 个中子和 2 个质子，其德布罗意波波长为

$$\lambda_\mathrm{He} = \frac{h}{\sqrt{2m_\mathrm{He}E_\mathrm{He}}} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m_\mathrm{He} \cdot \frac{3}{2}kT}} = \frac{h}{\sqrt{3 \cdot (4m_\mathrm{n}) \cdot \frac{3}{2}kT}} = 1.25 \times 10^{-9}\,\mathrm{m}$$

题目 2

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 5000Å（可见光），1Å（X 射线），0.001Å（γ 射线）时，加速电子所需的电势差各是多少？

解答 电子的动能为

$$E_k = eU$$

光子的能量为

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

电子的动能会全部转化为光子的能量，因此电势差

$$U = \frac{hc}{e\lambda} = \frac{hc}{e} \cdot \frac{1}{\lambda} = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{\lambda}$$

当光子对应的光波波长为 5000Å 时，电势差为

$$U=\frac{1.24\times10^{-6}}{\lambda}=\frac{1.24\times10^{-6}}{5000\times10^{-10}}=2.48\,\mathrm{V}$$

当光子对应的光波波长为 1Å 时，电势差为

$$U=\frac{1.24\times10^{-6}}{\lambda}=\frac{1.24\times10^{-6}}{10^{-10}}=1.24\times10^{4}\,\mathrm{V}$$

当光子对应的光波波长为 0.001Å 时，电势差为

$$U=\frac{1.24\times10^{-6}}{\lambda}=\frac{1.24\times10^{-6}}{0.001\times10^{-10}}=1.24\times10^{7}\,\mathrm{V}$$

练习 5

设用球坐标表示，粒子波函数表为 $\psi(\rho,\theta,\varphi)$，求：

(1) 粒子在球壳 $(r,r+\mathrm{d}r)$ 中被测到的概率；

(2) 在 (θ,φ) 方向的立体角元 $\mathrm{d}\Omega=\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$ 中找到粒子的概率.

解答 粒子在 $(r\to r+\mathrm{d}r,\theta\to\theta+\mathrm{d}\theta,\varphi\to\varphi+\mathrm{d}\varphi)$ 范围内被探测到的概率为

$$P=|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\,r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

(1) 粒子在球壳 $(r,r+\mathrm{d}r)$ 中被测到的概率为

$$P=\left[\int_0^{\pi}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\,\mathrm{d}\varphi\right]r^2\,\mathrm{d}r$$

(2) 在 (θ,φ) 方向的立体角元内找到粒子的概率为

$$P=\left[\int_0^{+\infty}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\,r^2\,\mathrm{d}r\right]\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

习题 20

设 $\varphi(x)=Ax(a-x)$，其中 $0\leqslant x\leqslant a$，求：

(1) 归一化常数 A

(2) 在何处找到粒子的概率最大？

解答 按照统计诠释，一个真实的波函数必须满足归一化条件

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty}|\psi(\vec{r})|^2\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=1 \tag{3}$$

(1) 让波函数在全空间归一化

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x=\int_0^a|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x=\int_0^a|Ax(a-x)|^2\,\mathrm{d}x=|A|^2\left(\frac{1}{5}x^5-\frac{1}{2}ax^4+\frac{1}{3}a^2x^3\right)_0^a=1$$

解得

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

(2) 粒子的概率密度为

$$\rho(x)=|Ax(a-x)|^2=\frac{30}{a^5}x^2(a-x)^2$$

对概率密度求导，寻找极值点

$$\rho'(x)=\frac{30}{a^5}[4x^3-6ax^2+2a^2x]=\frac{60}{a^5}x(2x-a)(x-a)$$

因此，$\rho(x)$ 在 $\left(0,\frac{a}{2}\right)$ 上单调递增，在 $\left(\frac{a}{2},a\right)$ 上单调递减，在极大值点 $x=\frac{a}{2}$ 附近找到粒子的概率最大.

习题 21

若粒子只在一维空间中运动，它的状态可用波函数

$$\psi(x,t)=\begin{cases}A\sin\dfrac{\pi x}{a}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

来描述，式中 E 和 a 分别为确定的常数，而 A 是任意常数，求：

(1) 归一化的波函数；

(2) 概率密度 $w(x,t)$；

(3) 在何处找到粒子的概率最大？

(4) $\bar{x}$ 和 $\overline{x^2}$ 的值.

解答 (1) 先将波函数归一化

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\int_0^a\left|A\sin\frac{\pi x}{a}\right|^2\mathrm{d}x=\int_0^a\frac{A^2}{2}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x=\int_0^a\frac{A^2}{2}\mathrm{d}x=1$$

解得

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

所以波函数为

$$\psi(x,t)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

(2) 概率密度 $w(x,t)$ 为

$$w(x,t)=|\psi(x,t)|^2=\begin{cases}\dfrac{2}{a}\sin^2\dfrac{\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

(3) 对概率密度函数求导，寻找极值点

$$\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}=\begin{cases}\dfrac{2\pi}{a^2}\sin\dfrac{2\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

综上，$w(x,t)$ 在 $\left(0,\frac{a}{2}\right)$ 上单调递增，在 $\left(\frac{a}{2},a\right)$ 上单调递减，在极大值点 $x=\frac{a}{2}$ 附近找到粒子的概率最大.

(4) 概率密度函数为

$$w(x)=|\psi(x)|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{\pi x}{a}=\frac{1}{a}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)$$

求物理量 $g(x)$ 均值的通用公式是

$$\overline{g(x)}=\int_{-\infty}^{+\infty}w(x)g(x)\,\mathrm{d}x$$

于是分别有

$$\overline{x}=\int_0^a\frac{x}{a}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x=\left(\frac{x^2}{2a}-\frac{a^2}{4\pi^2}\cos\frac{2\pi x}{a}+\frac{ax}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a=\frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2}=\int_0^a\frac{x^2}{a}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x=\left(\frac{x^3}{3a}-\frac{x^2}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}-\frac{ax}{2\pi^2}\cos\frac{2\pi x}{a}+\frac{a^3}{4\pi^3}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2\pi^2}$$

题目 1.3

对于一维自由粒子：

(a) 设波函数为 $\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$，试用 Hamilton 算符 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ 对 $\psi_p(x)$ 运算，验证 $\hat{H}\psi_p(x)=\frac{p^2}{2m}\psi_p(x)$. 说明动量本征态 $\psi_p(x)$ 也是 Hamliton 量（能量）本征态，本征值为 $E=\frac{p^2}{2m}$.

(b) 设粒子在初始（$t=0$）时刻 $\psi(x,0)=\psi_p(x)$，求 $\psi(x,t)$.

(c) 设波函数为 $\psi(x)=\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k=\frac{1}{2\pi}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\,\mathrm{d}p$，可以看成是无穷多个平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$ 的叠加，即无穷多个动量本征态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$ 的叠加. 试问 $\psi(x)=\delta(x)$ 是否是能量本征态？

(d) 设粒子在 $t=0$ 时刻 $\psi(x,0)=\delta(x)$，求 $\psi(x,t)$.

解答　对于一维自由粒子：

(a)　我们将 Hamilton 算符作用于波函数

$$\hat{H}\psi_p(x)=-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}\right)^2\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}=\frac{p^2}{2m}\psi_p(x)$$

这说明动量本征态 $\psi_p(x)$ 也是 Hamilton 量的本征态，且本征值为 $E=\frac{p^2}{2m}$

(b)　粒子在初始时刻 $\psi(x,0)=\psi_p(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$，结合 Fourier 变换公式 (30)

$$\psi_p(x)=\mathscr{F}[\psi(x)]=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\,\mathrm{d}x=\sqrt{2\pi\hbar}\delta(p-p_0)$$

由于 $\psi(x,0)$ 是能量本征态

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\sqrt{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\delta(p-p_0)\,\mathrm{d}p\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_0x/\hbar-\mathrm{i}Et/\hbar}$$

(c)　对于自由粒子而言，动量本征态和能量本征态是等价的，但是题目中的 $\psi(x,0)=\delta(x)$ 是无穷多个动量本征态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$ 的叠加（即所谓叠加态），所以显然不是能量本征态。

习题 12

由下列两个定态波函数计算几率流密度：

(1) $\psi_1(r)=\dfrac{A}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$

(2) $\psi_2(r)=\dfrac{A}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}$

从所得结果证明 $\psi_1(r)$ 表示向外传播的球面波，$\psi_2(r)$ 表示向内（即向原点）传播的平面波.

解答 概率流密度的表达式为

$$\vec{j}(\vec{r},t)=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right) \tag{4}$$

分别计算 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的概率流密度

$$\vec{j}_1(\vec{r})=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left\{\left(\frac{A}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\cdot\frac{A}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\mathrm{i}k\right)-\left[\frac{A}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\cdot\frac{A}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}(-\mathrm{i}k)\right]\right\}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\frac{A^2k}{r^2}$$

$$\vec{j}_2(\vec{r})=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left\{\left[\frac{A}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\cdot\frac{A}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}(-\mathrm{i}k)\right]-\left(\frac{A}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\cdot\frac{A}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\mathrm{i}k\right)\right\}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\frac{A^2k}{r^2}$$

由此可见，$\psi_1(r)$ 表示向外传播的球面波，$\psi_2(r)$ 表示向内（即向原点）传播的平面波.

2 一维势场中的粒子

2.1 一维势场中粒子能量本征态的一般性质

设质量为 m 的粒子，沿 x 方向运动，势能为 $V(x)$，则薛定谔方程表示为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t) \tag{5}$$

对于定态，即具有一定能量 E 的状态，波函数形式为

$$\psi(x,t)=\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et} \tag{6}$$

代入 (5)，可得 $\psi(x)$ 满足的方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{7}$$

此即一维粒子的能量本征方程. 在量子力学中，我们一般默认 $V(x)$ 取实值，即

$$V^*(x)=V(x) \tag{8}$$

定理 2.1. 设 $\psi(x)$ 是方程 (7) 的一个解，对应的能量本征值为 E，则 $\psi^*(x)$ 也是方程的一个解，对应的能量也是 E.

证明. 对方程 (7) 取复共轭

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi^*(x)=E\psi^*(x)$$

即 $\psi^*(x)$ 也满足方程 (7)，并且对应能量本征值为 E. □

定理 2.2. 对于能量的某个本征值 E，总可以找到方程 (7) 的一组实数解，凡是属于 E 的任何解，均可表示为这一组实解的线性叠加.

证明. 设 $\psi(x)$ 是能量本征值 E 的一个解，那 $\psi^*(x)$ 也必定是能量本征值 E 的解，我们利用二者的线性叠加构造出一组实解

$$\varphi(x)=\psi(x)+\psi^*(x),\quad \chi(x)=-\mathrm{i}[\psi(x)-\psi^*(x)]$$

显然这组实数解也是能量本征值 E 的一组解，我们只要将这组实数解适当地线性叠加，就能得到能量本征值 E 的所有解

$$\psi=\frac{1}{2}(\varphi+\mathrm{i}\chi),\quad \psi^*=\frac{1}{2}(\varphi-\mathrm{i}\chi)$$

□

定理 2.3. 设 $V(x)$ 具有空间反射不变性，$V(-x)=V(x)$. 如 $\psi(x)$ 是方程 (7) 的对应于能量本征值 E 的解，则 $\psi(-x)$ 也是方程 (7) 的对应于能量 E 的解.

证明. 令 $x=-x$，再代回能量本征方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(-x)^2}=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2},\quad V(-x)=V(x)$$

结合空间反射不变性

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi(-x)=E\psi(-x)$$

显然 $\psi(-x)$ 也满足方程，能量本征值也是 E. □

定理 2.4. 设 $V(x)=V(-x)$，则对应于任何一个能量本征值 E，总可以找到方程组 (7) 的一组解（每一个解都有确定的宇称），而属于能量本征值 E 的任何解，都可用它们来展开.

证明. 已知同属本征值 E 的一组解是 $\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$，我们可以通过线性叠加构造出任意一组解

$$f(x)=\psi(x)+\psi(-x),\quad g(x)=\psi(x)-\psi(-x)$$

而 $f(x)$ 和 $g(x)$ 各自具有确定的宇称，不妨令

$$f(-x)=f(x),\quad g(-x)=-g(x)$$

由此反解出 $\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 的线性表示

$$\psi(x)=\frac{1}{2}[f(x)+g(x)],\quad \psi(-x)=\frac{1}{2}[f(x)-g(x)]$$

实际上，任何一个实变函数都可以分解为偶函数 $f(x)$ 和奇函数 $g(x)$ 的和. □

定理 2.5. 对于阶梯形方势

$$V(x)=\begin{cases}V_1, & x<a\\ V_2, & x>a\end{cases}$$

如果 (V_2-V_1) 有限，则能量本征方程 $\psi(x)$ 及其导数 $\psi'(x)$ 必定是连续的.

证明. 对能量本征方程的两边同乘 $\mathrm{d}x$

$$\mathrm{d}\left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right] = -\frac{2m}{\hbar}[E - V(x)]\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

对于 $\forall\varepsilon > 0$，我们在区间 $[a-\varepsilon, a+\varepsilon]$ 上对 x 积分

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \mathrm{d}\left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right] = -\frac{2m}{\hbar}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}[E - V(x)]\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

两边对 ε 取极限

$$\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \mathrm{d}\left[\psi'(x)\right] = -\frac{2m}{\hbar}\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}[E - V(x)]\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

其中 $[E - V(x)]\psi(x)$ 有限，所以方程右侧为零，进而有

$$\psi'(a+0^+) - \psi'(a-0^+) = 0$$

这说明一阶导函数 $\psi'(x)$ 在跳跃点 $x = a$ 处存在，所以原函数 $\psi(x)$ 必定连续. □

定理 2.6. 对于一维粒子，设 $\psi_1(x)$ 与 $\psi_2(x)$ 均为方程 (7) 的属于同一能量 E 的解，则

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = \mathrm{Const}$$

且与 x 无关.

证明. □

定理 2.7. 设粒子在规则势场 $V(x)$ 中运动，如存在束缚态，则必定是不简并的.

证明. □

2.2 方势

P32 练习

试取无限深方势阱的中心为坐标原点，即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < \dfrac{a}{2} \\ \infty, & |x| \geqslant \dfrac{a}{2} \end{cases}$$

证明粒子的能量仍为

$$E = E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

但波函数表示为

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{a}{2}}\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), n = 1, 3, 5, \cdots, & \\ & |x| < \frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{a}{2}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), n = 2, 4, 6, \cdots, & \\ 0, & |x| \geqslant \frac{a}{2} \end{cases}$$

解答 粒子在方势阱内的能量本征方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2mE}{\hbar}\psi(x)=0$$

这个微分方程的解形如

$$\psi(x)=A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x+\delta\right)$$

其中 A 和 δ 是待定系数，我们代入中心条件 $\psi(0)=0$，得到 $\delta=0$，再结合边界条件

$$\begin{cases}\psi\left(-\dfrac{a}{2}\right)=0\\ \psi\left(\dfrac{a}{2}\right)=0\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left(-\dfrac{a}{2}\right)=n\pi\\ \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left(\dfrac{a}{2}\right)=n\pi\end{cases}\Longrightarrow E=E_n=\frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

此外，能量本征值 E_n 对应的本征波函数还要满足归一化条件

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}}|\psi_n(x)|^2\,\mathrm{d}x=\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}}\left|A\sin\frac{2n\pi x}{a}\right|^2\mathrm{d}x=A^2\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}}\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x=1$$

解得 $A=\dfrac{a}{2}$，并且

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{a}{2}}\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right),n=1,3,5,\cdots, & \\ & |x|<\frac{a}{2}\\ \sqrt{\frac{a}{2}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),n=2,4,6,\cdots, & \\ 0, & |x|\geqslant\frac{a}{2}\end{cases}$$

习题 2.1

设粒子限制在矩形匣子中运动，即

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<a,0<y<b,0<z<c\\ \infty, & \text{其它位置}\end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征波函数. 如 $a=b=c$，讨论能级的简并度.

解答 粒子在矩形匣子中运动时，满足能量本征方程

$$\nabla^2\psi(x,y,z)+\frac{2mE}{\hbar}\psi(x,y,z)=0$$

方程的解形如

$$\psi(x,y,z)=A\sin(k_1x+\delta_1)\sin(k_2y+\delta_2)\sin(k_3z+\delta_3)$$

根据边界条件 $\psi(0,0,0)=0$ 确定 $\delta_1=\delta_2=\delta_3=0$，再代入 $\psi(a,b,c)=0$

$$\begin{cases}\sin(k_1a)=0\\ \sin(k_2b)=0\\ \sin(k_3c)=0\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}k_1a=n_1\pi, & n_1=1,2,3,\cdots\\ k_2b=n_2\pi, & n_2=1,2,3,\cdots\\ k_3c=n_3\pi, & n_3=1,2,3,\cdots\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}k_1=\dfrac{n_1\pi}{a}, & n_1=1,2,3,\cdots\\ k_2=\dfrac{n_2\pi}{a}, & n_2=1,2,3,\cdots\\ k_3=\dfrac{n_3\pi}{a}, & n_3=1,2,3,\cdots\end{cases}$$

所以粒子的能量本征值为

$$E = E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

再归一化能量本征函数

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,y,z)|^2\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = A^2\int_0^a\left|\sin\frac{n_1\pi x}{a}\right|^2\mathrm{d}x\int_0^b\left|\sin\frac{n_2\pi y}{b}\right|^2\mathrm{d}y\int_0^c\left|\sin\frac{n_3\pi z}{a}\right|^2\mathrm{d}z = 1$$

得到

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a}\sin\frac{n_3\pi z}{a}$$

如果匣子恰巧是边长为 a 的立方体

$$E\psi(x,y,z)+\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2+n_3^2+n_2^2\right) = 0$$

则此时的能级简并条件退化为

$$n_1^2+n_2^2+n_3^2 = \frac{2ma^2E}{\hbar^2\pi^2}$$

习题 2.2

设粒子处于一维无限深方势阱中，

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0<x<a \\ \infty, & x<0, x>a \end{cases}$$

证明处于能量本征态 $\psi_n(x)$ 的粒子

1. $\overline{x} = \dfrac{a}{2}$
2. $\overline{(x-\overline{x})^2} = \dfrac{a^2}{12}\left(1-\dfrac{6}{n^2\pi^2}\right)$
3. 讨论 $n\to\infty$ 的情况，并与经典力学计算结果比较.

解答　首先求解粒子的本征函数

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{a}{2}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

所以

$$\overline{x} = \int_0^a x|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{a}{2}\int_0^a\frac{x^2}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x = \frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a x^2|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{a}{2}\int_0^a\frac{x^2}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x = \frac{a^3}{3}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2} = \overline{x^2}-\overline{x}^2 = \frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{n^2\pi^2}\right)$$

而在经典力学的范畴内，粒子没有波动性

$$\overline{x} = \int_0^a\frac{x}{a}\,\mathrm{d}x = \frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a\frac{x^2}{a}\,\mathrm{d}x = \frac{a^2}{3}$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \frac{a^2}{12}$$

可见，当 $n \to \infty$ 时，量子力学结果与经典力学结果一致.

2.3 δ 势

我们假设一个质量为 m 的粒子（能量 $E>0$）从左入射，碰到 δ 势垒

$$V(x) = \gamma\delta(x)$$

代入不含时薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = [E - \gamma\delta(x)]\psi(x)$$

注意到 $x=0$ 是方程的奇点，波函数在 $x=0$ 处的一阶导数 ψ' 不连续，二阶导数 ψ'' 不存在.

证明. 对方程两边同乘 $\mathrm{d}x$

$$\mathrm{d}\left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right] = -\frac{2m}{\hbar}[E - \gamma\delta(x)]\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

对于 $\forall\varepsilon>0$，我们在区间 $[0-\varepsilon, 0+\varepsilon]$ 上对 x 积分，结合公式 (33)

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\mathrm{d}\left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right] = -\frac{2m}{\hbar}\left[\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E\psi(x)\,\mathrm{d}x - \gamma\psi(0)\right]$$

两边对 ε 取极限

$$\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\mathrm{d}\left[\psi'(x)\right] = -\frac{2m}{\hbar}\left[\lim_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E\psi(x)\,\mathrm{d}x - \gamma\psi(0)\right]$$

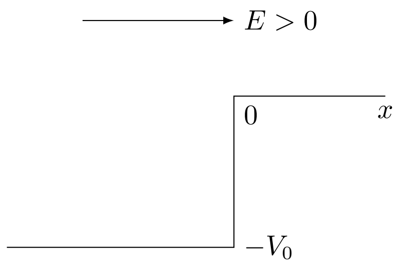
化简得（此处要结合公式 (33)）

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m}{\hbar^2}[0 - \gamma\psi(0)] \neq 0 \tag{9}$$

这说明 $\psi'(x)$ 在 $x=0$ 处一般不连续（除非 $\psi(0)=0$），公式 (9) 也被称为 δ 势中 ψ' 的跃变条件. □

题目 2.6

设粒子（能量 $E>0$）从左入射，碰到如图所示的势阱，求透射系数与反射系数.



解答 透射系数和反射系数为

$$T = \frac{4k/k'}{(1+k/k')^2}, \quad R = \frac{(1-k/k')^2}{(1+k/k')^2}.$$

其中

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}.$$

不难验证

$$R + T = 1.$$

题目 2.9

谐振子处于 ψ_n 态下，计算

(1) $\Delta x=\sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}$

(2) $\Delta p=\sqrt{\overline{(p-\bar{p})^2}}$

(3) $\Delta x\Delta p$

解答 已知 Hermite 多项式的递推关系

$$H_{n+1}(x)-2xH_n(x)+2nH_{n-1}(x)=0$$

结合波函数的递推关系

$$\psi_{n-1}(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^{n-1}(n-1)!}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_{n-1}(\alpha x)$$
$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_n(\alpha x)$$
$$\psi_{n+1}(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^{n+1}(n+1)!}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_{n+1}(\alpha x)$$

得到

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

利用本征函数之间的正交性，得到

$$\bar{x}=0$$

另外

$$x^2\psi_n(x)=\frac{1}{2\alpha^2}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x)+(2n+1)\psi_n(x)+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x)\right]$$

利用 Hermite 多项式之间的求导递推关系

$$H_n'(x)=2nH_{n-1}(x)$$

得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)=\frac{\alpha^2}{2}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x)-(2n+1)\psi_n(x)+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x)\right]$$

于是得到

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi_n(x)\,\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2}(2n+1)$$

(1) 对于 Δx

$$\Delta x=\sqrt{\overline{x^2}-\overline{x}^2}=\sqrt{\frac{1}{2\alpha^2}(2n+1)-0}=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{2n+1}{2}}$$

(2) 对于 Δp

$$\Delta p=\sqrt{\overline{p^2}-\overline{p}^2}=\sqrt{\frac{\alpha^2\hbar^2}{2}(2n+1)-0}=\alpha\hbar\sqrt{\frac{2n+1}{2}}$$

(3) 对于 $\Delta x\Delta p$

$$\Delta x\Delta p=\frac{2n+1}{2}\hbar$$

题目 2.10

电荷 q 的谐振子，受到外电场 $\mathscr{E}$ 的作用

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\mathscr{E}x$$

求能量本征值和本征函数.

解答 首先对势能 $V(x)$ 配方

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2(x-x_0)^2-\frac{1}{2}m\omega^2x_0^2,\quad x_0=\frac{q\mathscr{E}}{m\omega^2}$$

能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2},\quad n=0,1,2,\cdots$$

本征函数为

$$\varphi_n(x)=\psi_n(x-x_0)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}2^nn!}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}}H_n[\alpha(x-x_0)]$$

题目 2.11

设粒子在下列势阱中运动，求粒子的能级

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & x>0\end{cases}$$

解答 粒子运动的薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x)=E\psi(x)$$

这个变系数微分方程想要得到多项式解，必须满足

$$\lambda-1=2n$$

此时方程的解写为

$$\psi_n(x)=A_n\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{4}}H_n(\alpha x)$$

对应的能量本征值为

$$E_n=\frac{2n+1}{2}\hbar\omega$$

再考虑边界条件 $\psi_n(0)=0$，n 只能取奇数（$n=2m+1,\quad m=0,1,2,\cdots$）

$$E_n=\frac{4m+3}{2}\hbar\omega$$

3 力学量用算符表达

3.1 算符的运算规则

以下所有的讨论都要建立在「**对任意波函数和任意常数都成立**」这一前提上.

3.1.1 线性算符

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2 \tag{10}$$

3.1.2 算符之和

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right)\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \tag{11}$$

3.1.3 算符之积

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right) \tag{12}$$

3.1.4 量子力学的基本对易式

量子力学中最基本的对易关系是[1]

$$x_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{p}_\beta x_\alpha = \mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

抽象但普遍的量子力学对易式

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{13}$$

而对易式满足下列恒等式：

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -\left[\hat{B}, \hat{A}\right] \tag{14}$$

$$\left[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right] \tag{15}$$

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} \tag{16}$$

$$\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B} \tag{17}$$

进一步可以证明 Jacobi 恒等式[2]

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{B}, \hat{C}\right]\right] + \left[\hat{B}, \left[\hat{C}, \hat{A}\right]\right] + \left[\hat{C}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = 0 \tag{18}$$

3.1.5 角动量的对易式

角动量算符定义为

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{p}}$$

---

[1]动量算符表示为

$$\hat{p} = \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\hat{e}_x + \frac{\partial}{\partial y}\hat{e}_y + \frac{\partial}{\partial z}\hat{e}_y\right)$$

Kronecker 函数的含义是

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$$

[2]李代数是满足 Jacobi 恒等式代数结构的一个主要例子

各个分量表示为

$$\hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -\mathrm{i}\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$
$$\hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -\mathrm{i}\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$
$$\hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

不难证明

$$\left[\hat{l}_\alpha, x_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar x_\gamma \tag{19}$$

上式中的 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 称为 Levi-Civita 符号

$$\begin{cases} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = -\varepsilon_{\beta\alpha\gamma} = -\varepsilon_{\alpha\gamma\beta} \\ \varepsilon_{123} = 1 \end{cases} \tag{20}$$

类似地，还可以证明

$$\left[\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar\hat{p}_\gamma \tag{21}$$
$$\left[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar\hat{l}_\gamma \tag{22}$$

证明题

定义 $\hat{\boldsymbol{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$，试证明：

$$\left[\hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{l}_\alpha\right] = 0, \quad \alpha = x, y, z$$

解答 先证明 $\alpha = x$ 的情形

$$\begin{aligned} LHS = \left[\hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{l}_x\right] &= \left[\left(\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2\right), \hat{l}_x\right] \\ &= \left[\hat{l}_x^2, \hat{l}_x\right] + \left[\hat{l}_y^2, \hat{l}_x\right] + \left[\hat{l}_z^2, \hat{l}_x\right] \\ &= \hat{l}_x^3 - \hat{l}_x^3 + \hat{l}_y^2\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z^2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

可见 $LHS = RHS$，同理也可以证明

$$\left[\hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{l}_y\right] = 0, \quad \left[\hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{l}_z\right] = 0.$$

这说明角动量的平方 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ 与角动量的任意分量 $\hat{l}_\alpha$（$\alpha = x, y, z$）相互对易.

证明题

定义

$$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm \mathrm{i}\hat{l}_y$$

证明：

(19) $\hat{l}_z\hat{l}_\pm = \hat{l}_\pm\left(\hat{l}_z \pm \hbar\right)$

(20) $\hat{l}_\pm \hat{l}_\mp = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 \pm \hbar \hat{l}_z$

(21) $\left[\hat{l}_+, \hat{l}_-\right] = 2\hbar \hat{l}_z$

解答 (19) 根据 $\hat{l}_\pm$ 的定义

$$LHS = \hat{l}_z \hat{l}_\pm = \hat{l}_z \left(\hat{l}_x \pm \mathrm{i}\hat{l}_y\right) = \hat{l}_z \hat{l}_x \pm \mathrm{i}\hat{l}_z \hat{l}_y$$

$$RHS = \left(\hat{l}_x \pm \mathrm{i}\hat{l}_y\right)\left(\hat{l}_z \pm \hbar\right)$$

所以

$$RHS = LHS$$

(20) 根据 $\hat{l}_\pm$ 的定义

$$LHS =$$

$$RHS =$$

所以

$$RHS = LHS$$

(21) 根据 $\hat{l}_\pm$ 的定义

$$\begin{aligned} LHS &= [\hat{l}_x + \mathrm{i}\hat{l}_y, \hat{l}_x - \mathrm{i}\hat{l}_y] \\ &= [\hat{l}_x, \hat{l}_x - \mathrm{i}\hat{l}_y] + [\mathrm{i}\hat{l}_y, \hat{l}_x - \mathrm{i}\hat{l}_y] \\ &= [\hat{l}_x, \hat{l}_x] - [\hat{l}_x, \mathrm{i}\hat{l}_y] + [\mathrm{i}\hat{l}_y, \hat{l}_x] - [\mathrm{i}\hat{l}_y, \mathrm{i}\hat{l}_y] \\ &= 0 - \mathrm{i}[\hat{l}_x, \hat{l}_y] - [\hat{l}_x, \mathrm{i}]\hat{l}_y + \mathrm{i}[\hat{l}_y, \hat{l}_x] + [\hat{l}_y, \mathrm{i}]\hat{l}_x - 0 \\ &= 0 - \mathrm{i}(\mathrm{i}\hbar\hat{l}_z) - 0 + \mathrm{i}(-\mathrm{i}\hbar\hat{l}_z) + 0 - 0 \\ &= 2\hbar\hat{l}_z = RHS \end{aligned}$$

3.1.6 逆算符

$$\hat{A}\psi = \phi \iff \hat{A}^{-1}\phi = \psi$$

3.1.7 算符的函数

类比泰勒级数展开，可以得到算符 $\hat{A}$ 的函数

$$F\left(\hat{A}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F^{(n)}(0)}{n!}\hat{A}^n \tag{23}$$

进一步，还能得到位移算符

$$\mathrm{e}^{a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\psi(x) = \psi(x+a)$$

3.1.8 转置算符

算符 $\hat{A}$ 的转置算符定义为

$$\int \mathrm{d}\tau\, \psi^* \tilde{\hat{A}} \varphi = \int \mathrm{d}\tau\, \varphi \hat{A} \psi$$

表示为

$$\left(\psi, \tilde{\hat{A}}\varphi\right) = \left(\varphi^*, \hat{A}\psi^*\right) \tag{24}$$

3.1.9 复共轭算符与 Hermitian 共轭算符

算符 $\hat{A}$ 的复共轭算符定义为

$$\hat{A}^*\psi = \left(\hat{A}\psi^*\right)^* \tag{25}$$

算符 $\hat{A}$ 的 Hermitian 共轭算符定义为

$$\left(\psi, \hat{A}^\dagger\varphi\right) = \left(\hat{A}\psi, \varphi\right) \tag{26}$$

3.1.10 转置并取复共轭

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \overline{\langle\psi|\hat{B}|\varphi\rangle}$$

题目 3.1

设 A 与 B 为 Hermitian 算符，则 $\dfrac{1}{2}(AB+BA)$ 和 $\dfrac{1}{2\mathrm{i}}(AB-BA)$ 也是 Hermitian 算符. 由此证明：任何一个算符 F 均可分解为 $F = F_+ + \mathrm{i}F_-$

$$F_+ = \frac{1}{2}(F+F^\dagger), \quad F_- = \frac{1}{2\mathrm{i}}(F-F^\dagger)$$

F_+ 与 F_- 均为 Hermitian 算符.

解答 Hermitian 算符就是一种自伴算符

$$A^\dagger = A, \quad B^\dagger = B, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$$

对于

$$\frac{1}{2}(AB+BA)^\dagger = \frac{1}{2}\left(B^\dagger A^\dagger + A^\dagger B^\dagger\right) = \frac{1}{2}(BA+AB) = \frac{1}{2}(AB+BA)$$

$$\left[\frac{1}{2\mathrm{i}}(AB-BA)\right]^\dagger = -\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger\right) = -\frac{1}{2\mathrm{i}}(BA-AB) = \frac{1}{2\mathrm{i}}(AB-BA)$$

这说明以上两个算符都是 Hermitian 算符，根据这一结论，我们再对任一算符 F 分解

$$F = \frac{F}{2} + \frac{F}{2} = \frac{1}{2}\left(F+F^\dagger\right) + \frac{1}{2}\left(F-F^\dagger\right) = F_\dagger + \mathrm{i}F_-$$

这说明 F_+ 和 F_- 都是 Hermitian 算符.

题目 3.4

定义反对易式

$$[A,B]_\dagger \equiv AB+BA$$

再证明

$$[AB,C]=A[B,C]_\dagger-[A,C]_\dagger B$$
$$[A,BC]=[A,B]_\dagger C-B[A,C]_\dagger$$

解答 (1) 根据反对易式的定义

$$\begin{cases} LHS=A[B,C]+[A,C]B=A(BC-CB)+(AC-CA)B=ABC-CAB \\ RHS=A(BC+CB)-(AC+CA)B=ABC-CAB \end{cases}$$

(2) 类似地

$$\begin{cases} LHS=B[A,C]+[A,B]C=B(AC-CA)+(AB-BA)C=ABC-BCA \\ RHS=(AB+BA)C-B(AC+CA)=ABC-BCA \end{cases}$$

以上两式均有 $LHS=RHS$，证毕.

3.2 Hermitian 算符的本征值与本征函数

3.2.1 涨落

对于处于量子态 ψ 的体系，力学量 A 的测量结果会围绕平均值涨落，即：

$$\overline{\Delta A^2}=\overline{\left(\hat{A}-\overline{A}\right)^2}=\int \psi^*\left(\hat{A}-\overline{A}\right)^2\psi\,\mathrm{d}\tau$$

因为 $\hat{A}$ 是 Hermitian 算符，$\overline{A}$ 必为实数，因此 $\overline{\Delta A}=\left(\hat{A}-\overline{A}\right)$ 仍然是 Hermitian 算符

$$\overline{\Delta A^2}=\int\left|\left(\hat{A}-\overline{A}\right)\psi\right|^2\mathrm{d}\tau\geqslant 0$$

3.2.2 本征态

我们把测量结果永远不变的特殊量子态被称为本征态

$$\overline{\Delta A^2}=0\implies\left(\hat{A}-\overline{A}\right)\psi=0$$

记常数 $\overline{A}$ 为 A_n，本征态为 ψ_n，整理得到算符 $\hat{A}$ 的本征方程

$$\hat{A}\psi_n=A_n\psi_n$$

其中 A_n 称为算符 $\hat{A}$ 的一个本征值，ψ_n 为相应的本征态.

定理 3.1. *Hermitian 算符的本征值必为实.*

证明. 在本征态 ψ_n 下

$$\overline{A}=\left(\psi_n,\hat{A}\psi_n\right)=A_n(\psi_n,\psi_n)=A_n$$

因为 $\overline{A}$ 必为实数，所以本征值 A_n 也一定是实数. □

定理 3.2. *Hermitian 算符的属于不同本征值的本征函数，彼此正交.*

证明. 设量子态 ψ 的两个本征值分别为 A_m 和 A_n，对应的本征函数分别为 ψ_m 和 ψ_n □

3.2.3 本征态简并

本征态简并往往与体系的对称性密切相关，在能级简并的情况下，仅根据能量本征值并不能完全确定各能量简并态.

设力学量 $\hat{A}$ 的本征方程为

$$\hat{A}\psi_{n\alpha} = A_n\psi_{n\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \cdots, f_n$$

即属于本征值 A_n 的本征态有 f_n 个，本征值 A_n 为 f_n 重简并.

在出现简并态时，简并态的选择并不唯一，而且往往也不彼此正交，但只要把它们适当地线性叠加，就能获得一组彼此正交的简并态

$$\phi_{n\beta} = \sum_{a}^{f_n} \alpha_{\beta\alpha}\hat{A}\psi_{n\alpha}, \quad \beta = 1, 2, \cdots, f_\alpha$$

容易证明 $\phi_{n\beta}$ 仍为 $\hat{A}$ 的本征态，相应的本征值仍为 A_n，因为

$$\hat{A}\phi_{n\beta} = \sum_{a} a_{\beta\alpha}\hat{A}\psi_{n\alpha} = A_n \sum_{a} a_{\beta\alpha}\psi_{n\alpha} = A_n\phi_{n\beta}$$

问题转化为：能否找到合适的 $\alpha_{\beta\alpha}$，使 $\phi_{n\beta}$ 具有正交性？也即下列方程组是否有解的问题

$$(\phi_{n\beta}, \phi_{n\beta'}) = \delta_{\beta\beta'}$$

实际上，我们目前有 $\dfrac{1}{2}f_n(f_n-1)+f_n = \dfrac{1}{2}f_n(f_n+1)$ 个线性方程，而待解系数 $a_{\beta\alpha}$ 只有 f_n^2 个，根据

$$f_n^2 \geqslant \frac{1}{2}f_n(f_n+1)$$

可以说明线性方程组个数多于系数个数，方程组显然有解，也即一定能找到合适的 $a_{\beta\alpha}$ 使正交性条件得到满足.

习题集 Ex.43

求算符 $\hat{F} = -\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 的本征函数

解答 设量子本征态为 $\psi_n(x)$，本征值为 F_n，本征方程为

$$\hat{F}\psi_n(x) = -\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\frac{\mathrm{d}\psi_n(x)}{\mathrm{d}x} = F_n\psi_n(x)$$

分离变量并两边积分，得到

$$\psi_n(x) = C\exp\left(-F_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}\right)$$

习题集 Ex.44

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

解答 设量子本征态为 $\psi_n(x)$，本征值为 F_n，本征方程为

$$\hat{F}\psi_n(x) = (\hat{p}_x + x)\psi_n(x) = F_n\psi_n(x)$$

代入动量算符，得到

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi_n(x)}{\mathrm{d}x} + (x - F_n)\psi_n(x) = 0$$

分离变量后两边积分得到本征函数

$$\psi_n(x) = C\exp\left[-\frac{\mathrm{i}x}{2\hbar}(x - 2F_n)\right]$$

习题集 Ex.48

若算符 $\hat{K}$ 有属于本征值为 λ 的本征函数 ϕ，且有 $\hat{K} = \hat{A}\hat{B}$ 和 $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1$，试证明 $u_1 = \hat{A}\phi$ 和 $u_2 = \hat{B}\phi$ 也是算符 $\hat{K}$ 的本征函数，且对应的本征值分别为 $\lambda - 1$ 和 $\lambda + 1$.

解答 (1) 对于算符 $\hat{K}$ 和函数 $u_1 = \hat{A}\phi$

$$\hat{K}u_1 = \hat{K}\hat{A}\phi = \hat{A}\hat{B}\hat{A}\phi = \hat{A}\left(\hat{A}\hat{B} - 1\right)\phi = \hat{A}\left(\hat{K} - 1\right)\phi$$

设本征值为 E_1，则本征方程为

$$\hat{A}\left(\hat{K} - 1\right)\phi = \hat{A}\left(\lambda - 1\right)\phi = E_1\hat{A}\phi$$

两边左乘 $\hat{A}^{-1}$，于是

$$E_1 = \lambda - 1$$

(2) 对于算符 $\hat{K}$ 和函数 $u_2 = \hat{B}\phi$

$$\hat{K}u_2 = \hat{A}\hat{B}\hat{B}\phi = \left(1 + \hat{B}\hat{A}\right)\hat{B}\phi = \hat{B}\left(1 + \hat{A}\hat{B}\right)\phi = \hat{B}\left(1 + \hat{K}\right)\phi$$

设本征值为 E_2，则本征方程为

$$\hat{B}\left(1 + \hat{K}\right)\phi = \hat{B}\left(1 + \lambda\right)\phi = E_2\hat{B}\phi$$

两边左乘 $\hat{B}^{-1}$，于是

$$E_2 = \lambda + 1$$

3.3 共同本征函数

题目 3.14

证明在 l_z 的本征态下，$\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$. （提示：利用 $l_y l_z - l_z l_y = \mathrm{i}\hbar l_x$，求平均）

解答 对于球谐函数 Y_{lm}

$$l_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}, \quad m = l, l-1, \cdots, -l+1, -l$$

设 ψ_m 是 l_z 的本征态，且相应的本征值是 $m\hbar$

$$l_z\psi_m = m\hbar\psi_m$$

根据角动量的对易关系

$$l_y l_z - l_z l_y = \mathrm{i}\hbar l_x$$

得到

$$\begin{aligned}
\overline{l_x} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int \psi_m^* \left(l_y l_z - l_z l_y\right)\psi_m \,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\int \psi_m^* l_y l_z \psi_m \,\mathrm{d}x - \int \psi_m^* l_z l_y \psi_m \,\mathrm{d}x\right] \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[m\hbar \int \psi_m^* l_y \,\mathrm{d}x - \int \left(l_z\psi_m\right)^* l_y \psi_m \,\mathrm{d}x\right] \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} m\hbar \left[\overline{l_y} - \overline{l_z}\right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

题目 3.15

设粒子处于 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 状态下，求 $\overline{(\Delta l_x)^2}$ 和 $\overline{(\Delta l_y)^2}$.

解答 球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的本征函数

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{l}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi), \\
l_z Y_{lm}(\theta,\varphi) &= m\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi)
\end{aligned}$$

考虑到球谐函数的对称性，有

$$\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$$

$$\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2} = \frac{1}{2}\overline{\left(\boldsymbol{l}^2 - l_z^2\right)} = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]$$

根据概率统计的相关知识

$$\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{(\Delta l_z)^2} = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]$$

题目 3.16

设体系处于 $\psi = c_1 Y_{11} + c_2 Y_{20}$ 状态（已归一化，即 $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$），求：

1. l_z 的可能测值及平均值；
2. $\boldsymbol{l}^2$ 的可能测值及相应的概率；
3. l_x 的可能测值及相应的概率.

解答 按照态叠加原理，体系的任何一个状态 ψ 都可以用 $\{\phi_\alpha\}$ 展开，并且利用 ψ_α 的正交归一性，可以求出展开系数 a_α

$$\psi = \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha$$

(1) l_z 的可能测值和对应概率为

$$\begin{aligned}
E_{11} &= \hbar, \quad P_{11} = |c_1|^2 \\
E_{20} &= 0, \quad P_{20} = |c_2|^2
\end{aligned}$$

(2) $\boldsymbol{l}^2$ 的可能测值和对应概率为

$$E_{11} = 2\hbar^2, \quad P_{11} = |c_1|^2$$
$$E_{20} = 6\hbar, \quad P_{20} = |c_2|^2$$

习题 Ex55

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) 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 时刻谐振子能量的可能取值及其相应的几率，并求其平均值.

解答 (1) 利用归一化条件

$$\left(\sqrt{\frac{1}{5}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2 + c_5^2 = 1$$

得到

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

(2) 定态波函数为

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t}$$

而 t 时刻的波函数为

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

4 力学量随时间的演化与对称性

4.1 守恒量

力学量 A 的平均值表示为[3]

$$\bar{A}(t) = (\psi(t), A\psi(t))$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A}(t) = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t}, A\psi\right) + \left(\psi, A\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) + \left(\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi\right)$$

利用薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

[3] 波函数的标积定义为

$$(\psi, \varphi) = \int \psi^* \varphi \,\mathrm{d}\tau$$

对 $\dfrac{\partial\psi}{\partial t}$ 进行代换

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A}(t) &= \left(\frac{H\psi}{\mathrm{i}\hbar}, A\psi\right) + \left(\psi, A\frac{H\psi}{\mathrm{i}\hbar}\right) + \left(\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi\right) \\ &= \frac{1}{-\mathrm{i}\hbar}(\psi, HA\psi) + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi, AH\psi) + \left(\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi\right) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi, [A, H]\psi) + \left(\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi\right) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A, H]} + \overline{\frac{\partial A}{\partial t}}\end{aligned}$$

如果力学量 A 不显含 t，则 $\dfrac{\partial A}{\partial t} = 0$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A, H]} \tag{27}$$

如果恰好有 $[A, H] = 0$（即力学量 A 恰好与 H 对易），则 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A} = 0$，这说明力学量 A 在任何量子态下的平均值都不会随时间改变，这是体系的一个守恒量.

题目 4.4

设力学量 A 不显含 t，H 为体系的 Hamilton 量，证明：

$$-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{A} = \overline{[[A, H], H]}.$$

解答　因为力学量 A 不显含 t

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A, H]}$$

上式两边再对 t 求导，则有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A, H]} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A, H], H\right]} = -\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[A, H], H]}$$

简单整理得到

$$-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{A} = \overline{[[A, H], H]}$$

证毕.

题目 4.5

设力学量 A 不显含 t，证明在束缚定态下

$$\frac{\mathrm{d}\bar{A}}{\mathrm{d}t} = 0$$

解答　定态 ψ 是体系的能量本征态，且束缚态可以归一化

$$(\psi, \psi) = \text{有限值}$$

因为力学量 A 不显含 t

$$\frac{\mathrm{d}\bar{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A, H]}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\bar{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{(\psi,[A,H]\psi)}{(\psi,\psi)}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{(\psi,AH\psi)-(\psi,HA\psi)}{(\psi,\psi)}$$

利用能量本征方程和 Hermite 算符的性质

$$(\psi,AH\psi)=(\psi,AE\psi)$$
$$(\psi,HA\psi)=(H\psi,A\psi)$$

得到

$$\frac{\mathrm{d}\bar{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{(\psi,AE\psi)-(H\psi,A\psi)}{(\psi,\psi)}=\frac{E}{\mathrm{i}\hbar}\frac{(\bar{A}-\bar{A})}{(\psi,\psi)}=0$$

证毕.

5 中心力场

题目 5.1

利用 5.1.3 节中的式 (17) 和式 (18)，证明下列关系式：

1. 相对动量

$$\vec{p}=\mu\dot{\vec{r}}=\frac{1}{M}\left(m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2\right)$$

2. 总动量

$$\vec{P}=M\dot{\vec{R}}=\vec{p}_1+\vec{p}_2$$

3. 总轨道角动量

$$\vec{L}=\vec{l}_1+\vec{l}_2=\vec{r}_1\times\vec{p}_1+\vec{r}_2\times\vec{p}_2=\vec{R}\times\vec{P}+\vec{r}\times\vec{p}$$

4. 总动能

$$T=\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1}+\frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}=\frac{\vec{P}^2}{2M}+\frac{\vec{p}^2}{2m}$$

反之，有

$$\vec{r}_1=\vec{R}+\frac{\mu}{m_1}\vec{r},\quad \vec{r}_2=\vec{R}-\frac{\mu}{m_2}\vec{r}$$
$$\vec{p}_1=\frac{\mu}{m_2}\vec{P}+\vec{p},\quad \vec{p}_2=\frac{\mu}{m_1}\vec{P}-\vec{p}$$

以上各式中

$$M=m_1+m_2,\quad \mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$$

解答 质心坐标表示为

$$\vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2}$$

相对半径表示为

$$\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$$

(1) 相对动量

$$\vec{p}=\mu\dot{\vec{r}}=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\left(\dot{\vec{r}}_1-\dot{\vec{r}}_2\right)=\frac{1}{M}[m_2(m_1\dot{\vec{r}}_1)-m_1(m_2\dot{\vec{r}}_2)]=\frac{1}{M}(m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2)$$

(2) 总动量

$$\vec{P} = M\dot{\vec{R}} = M\frac{m_1\dot{\vec{r}}_1 + m_2\dot{\vec{r}}_2}{M} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

(3) 总轨道角动量

$$\begin{aligned}\vec{R}\times\vec{P} + \vec{r}\times\vec{p} &= \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{M}\times(\vec{p}_1+\vec{p}_2) + (\vec{r}_1-\vec{r}_2)\times\frac{1}{M}(m_2\vec{p}_1 + m_1\vec{p}_2)\\ &= \frac{1}{M}[(m_1+m_2)\vec{r}_1\times\vec{p}_1 + (m_1+m_2)\vec{r}_2\times\vec{p}_2]\\ \vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 &= \vec{r}_1\times\vec{p}_1 + \vec{r}_2\times\vec{p}_2\end{aligned}$$

(4) 总动能

$$T = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}$$

A 常用物理学常量

1. 电子的带电量为 $e = -1.602\times10^{-19}\,\mathrm{C}$
2. 电子质量 $m_e = 9.109\,383\,7\times10^{-31}\,\mathrm{kg}$
3. 中子质量 $m_\mathrm{n} = 1.674\,928\,6\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$
4. 氦原子质量 $m_\mathrm{He} = 6.646\,473\,1\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$
5. 普朗克常量 $h = 6.626\,070\,15\times10^{-34}\,\mathrm{m^2{\cdot}kg\cdot s^{-1}}$
6. 玻尔兹曼常量 $k = 1.380\,649\times10^{-23}\,\mathrm{m^2{\cdot}kg\cdot s^{-2}{\cdot}K^{-1}}$
7. 电子伏特和焦耳的换算 $1\,\mathrm{eV} = 1.602\,176\,62\times10^{-19}\,\mathrm{J}$

B 常用数学工具

B.1 Fourier 变换

1. 实数形式的傅里叶正弦变换

$$\begin{cases} f(x) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\displaystyle\int_0^{+\infty} B(\omega)\sin\omega x\,\mathrm{d}x \\ B(\omega) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\displaystyle\int_0^{+\infty} f(\xi)\sin\omega\xi\,\mathrm{d}\xi \end{cases} \tag{28}$$

2. 实数形式的傅里叶余弦变换

$$\begin{cases} f(x) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\displaystyle\int_0^{+\infty} A(\omega)\cos\omega x\,\mathrm{d}x \\ A(\omega) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\displaystyle\int_0^{+\infty} f(\xi)\cos\omega\xi\,\mathrm{d}\xi \end{cases} \tag{29}$$

3. 复数形式的傅里叶变换

$$\begin{cases} F(\omega) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x}\right]^*\,\mathrm{d}x \\ f(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x}\,\mathrm{d}\omega \end{cases} \tag{30}$$

B.2 δ 函数

虽然 δ 函数并没有具体解析式，但有一种十分符合物理直觉的定义

$$\delta(x-x_0)=\begin{cases}\infty, & x=x_0\\ 0, & x\neq x_0\end{cases}\qquad \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x_0)\,\mathrm{d}x=1$$

1. 原函数

$$H(x)=\int_{-\infty}^{x}\delta(t)\,\mathrm{d}t=\begin{cases}0, & x<0\\ 1, & x>0\end{cases}\tag{31}$$

2. 奇偶性

$$\begin{aligned}\delta(-x)&=\delta(x)\\ \delta'(-x)&=-\delta'(x)\end{aligned}\tag{32}$$

3. 挑选性

$$\int_a^b\delta(x-x_0)f(x)\,\mathrm{d}x=\begin{cases}f(x_0), & x_0\in(a,b)\\ 0, & x_0\notin(a,b)\end{cases}\tag{33}$$

B.3 Kronecker 函数

$$\delta_{ij}=\begin{cases}0, & i\neq j\\ 1, & i=j\end{cases}\tag{34}$$

B.4 Laplace 变换

$$\bar{f}(p)=\int_0^{+\infty}f(t)\mathrm{e}^{-pt}\,\mathrm{d}t\tag{35}$$

$$f(t)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\sigma-\mathrm{i}\infty}^{\sigma+\mathrm{i}\infty}\bar{f}(p)\mathrm{e}^{pt}\,\mathrm{d}p\tag{36}$$

B.5 Hermite 多项式

变系数微分方程

$$u''-2zu'+(\lambda-1)u=0\tag{37}$$

的系数必须满足

$$\lambda-1=2n,\quad n=0,1,2\cdots\tag{38}$$

其无穷级数解才会中断为一个多项式，多项式的生成函数为

$$\mathrm{e}^{-s^2+2zs}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(z)}{n!}s^n\tag{39}$$

由此可以证明 Hermite 多项式的正交归一性

$$\int_{-\infty}^{+\infty}H_m(z)H_n(z)\mathrm{e}^{-z^2}\,\mathrm{d}z=\sqrt{\pi}2^n\cdot n!\delta_{mn}\tag{40}$$

和递推关系

$$H_{n+1}(z) - 2zH_n(z) + 2nH_{n-1}(z) = 0 \tag{41}$$

$$H_n'(z) = 2nH_{n-1}(z) \tag{42}$$

B.6 常用积分公式

$$\int x \sin ax \, \mathrm{d}x = \frac{1}{a^2} \sin ax - \frac{1}{a} x \cos ax + C \tag{43}$$

$$\int x^2 \sin ax \, \mathrm{d}x = -\frac{1}{a} x^2 \cos ax + \frac{2}{a^2} x \sin ax + \frac{2}{a^3} \cos ax + C \tag{44}$$

$$\int x \cos ax \, \mathrm{d}x = \frac{1}{a^2} \cos ax + \frac{1}{a} x \sin ax + C \tag{45}$$

$$\int x^2 \cos ax \, \mathrm{d}x = \frac{1}{a} x^2 \sin ax + \frac{2}{a^2} x \cos ax - \frac{2}{a^3} \sin ax + C \tag{46}$$