《量子力学教程》习题解答

郑锦阳

目录

1 波函数与薛定谔方程

1.1 波函数的统计诠释

微观粒子具有显著的波粒二象性，其波长和频率分别为：

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \nu = \frac{E}{h}$$

所以能用平面波函数来描述微观粒子的运动状态[1]

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

- 一般波函数具有常数因子不定性：$\psi(\vec{r},t)$ 和 $A\psi(\vec{r},t)$ 描述的是同一个量子态
- 一般波函数具有位相因子不定性：$\psi(\vec{r})$ 和 $\psi(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ 和描述的是同一个量子态

规范波函数必须在全空间满足归一化：

$$\iiint \left|\psi(\vec{r})\right|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 1$$

1.2 力学量算符

与经典力学不同，微观粒子显著的波粒二象性使得我们无法其测量力学量的瞬时值，无论是多精密的仪器，其对力学量 Q 的测量，本质上都是测量 Q 在极短时间内的平均值。我们以坐标 x 和动量 p 为例，对这二者的测量结果（也就是平均值）分别可以写成

$$\langle x\rangle = \int \psi^* x\psi \,\mathrm{d}x \qquad \langle p\rangle = \int \psi^*\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x$$

再结合经典力学的知识，所有力学量本质上都是坐标 x 和动量 p 的函数，所以对于任意力学量的测量结果可以写成

$$\langle Q\rangle = f\left(x,p\right)$$

在量子理论中，我们把这种测量操作称为“算符”，写成 $\hat{Q}$ 的形式，下面是几种常用力学量的算符形式

[1]表达式中各变量的含义在后续内容中会详细介绍，这里只是引出概念

- 动量算符

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla \quad \vee \quad \begin{cases} \hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \\ \hat{p}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} \\ \hat{p}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} \end{cases}$$

- 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

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{r}\times(-\mathrm{i}\hbar\nabla) = -\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}\right) = -\mathrm{i}\hbar\begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial x} \end{vmatrix}$$

1.3 薛定谔方程

薛定谔通过类别经典力学中的最小作用量原理，推导出了微观粒子的波动方程（即含时薛定谔方程）

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

我们在此基础上把波函数改写成分离变量的形式 $\Psi(r,t) = \psi(r)\varphi(t)$

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

整理方程，使得等号左侧仅与时间 t 有关，等号右侧仅与位矢 r 有关，两边完全独立

$$\mathrm{i}\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$

这两个无关式子相等的条件是两侧都等于某个常数 E，仅包含位矢 r 的部分

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

被称为**定态薛定谔方程（能量本征方程、哈密顿算符本征方程）**

1.4 定态一维粒子的哈密顿量

对于处在定态的一维粒子，其 Hamilton 算符的期望值（本征值）和标准差分别为

$$\langle\hat{H}\rangle = \int\psi^*\hat{H}\psi\,\mathrm{d}x = \int\psi^*E\psi\,\mathrm{d}x = E\int\psi^*\psi\,\mathrm{d}x = E$$

$$\langle\hat{H}^2\rangle = \int\psi^*\hat{H}^2\psi\,\mathrm{d}x = \int\psi^*\hat{H}(\hat{H}\psi)\,\mathrm{d}x = E\int\psi^*\hat{H}\psi\,\mathrm{d}x = E^2\int\psi^*\psi\,\mathrm{d}x = E^2$$

$$\hat{\sigma}_H = \sqrt{\langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = 0$$

例题

证明规范波函数的归一化不随时间变换，即证明：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=0$$

证明. 先交换微分算符 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ 和积分算符 $\int\mathrm{d}x$ 的顺序

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t}\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^*+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)\mathrm{d}x$$

再根据薛定谔方程代换因式 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 和 $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial t}&=+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\psi\\ \frac{\partial\psi^*}{\partial t}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V\psi^*\end{aligned}$$

量子力学中的势能都是实数（即 $V^*=V$）

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^*-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi\right)\mathrm{d}x\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^*-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)\mathrm{d}x\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^*-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}\end{aligned}$$

最后根据规范波函数的性质 $\psi(-\infty)=0$，$\psi(+\infty)=0$，说明上式为零，证毕。 □

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 $E=\frac{3kT}{2}$ 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

$$\lambda_e=\frac{h}{\sqrt{2m_eE_e}}=1.23\times10^{-10}\,\mathrm{m}$$

(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　电子被加速后获得的动能为 $E_k = eU$，动能转化形成的光子能量为 $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$，所以加速用的电势差 U 可以表示为

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

(1) 当光子对应的光波波长为 5000Å 时，电势差为

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

(2) 当光子对应的光波波长为 1Å 时，电势差为

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

(3) 当光子对应的光波波长为 0.001Å 时，电势差为

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

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 $\mathrm{d}\Omega$ 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

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

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 (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

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

解得

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

所以波函数为

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

(2) 概率密度 $w(x,t)$ 为

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

(3) 对概率密度函数求导，寻找极值点

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

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) 求物理量 $g(x)$ 均值的通用公式是

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

参考常用积分公式B.6，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　一维自由粒子只有动能 $E_p=\frac{p^2}{2m}$，没有势能 $V(x)$

(a) 我们将 Hamilton 算符作用于波函数

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

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

(b) 粒子在初始时刻的波函数为

$$\psi(x,0)=\psi_p(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$$

在此基础上再添加时间因子，就能得到粒子在任意时刻的波函数

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_0x/\hbar-Et)}$$

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

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

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[2]

$$\vec{j}(\vec{r},t)=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right) \tag{3}$$

本题比较简单，两个定态波函数仅与 r 有关，由此分别计算概率流密度

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

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

综上，$\psi_1(r)$ 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 $V(x)$，波函数为 $\Psi(x,t)$，其薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\Psi(x,t) \tag{4}$$

分离变数 $\Psi(x,t)=\psi(x)\varphi(t)$，并考虑仅包含 $\psi(x)$ 的部分

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

[2] 直角坐标系中的 ∇ 算符为

$$\nabla=\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x+\frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_y+\frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_z$$

球坐标系中的 ∇ 算符为

$$\nabla=\frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\vec{e}_\theta+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi$$

这也是一维粒子的**能量本征方程（也叫定态薛定谔方程、哈密顿算符本征方程）**. 在量子力学中，我们一般默认 $V(x)$ 取实值，即

$$V^*(x) = V(x) \tag{6}$$

定理 2.1. *设 $\psi(x)$ 是方程 (5) 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 ψ 的能量本征方程两边取复共轭

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

这就是 $\psi^*(x)$ 的能量本征方程，且能量本征值为 E. □

定理 2.2. *对于能量的某个本征值 E，总可以找到方程 (5) 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. 根据定理2.1，只要 $\psi(x)$ 是能量本征值 E 的解，那 $\psi^*(x)$ 也必定是能量本征值 E 的解，再利用二者的线性叠加构造出实解[3]

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

实际上，这组实数解和复数解是等效的 [4] 所以能用这组用实数解的线性叠加表示所有解

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

□

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 (5) 的对应于能量本征值 E 的解，则 $\psi(-x)$ 也是方程 (5) 的对应于能量 E 的解.*

证明. 二阶微分运算显然满足空间反射不变性

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(-x)^2} \to \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2},$$

又已知势能函数具有空间反射不变性 $V(-x) = V(x)$

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

显然量子态 $\psi(-x)$ 也满足能量本征方程，且能量本征值也是 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 (5) 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.*

[3] 复数解可以写为三角函数的形式

$$\psi(x) = A\cos kx + \mathrm{i}B\sin kx$$
$$\psi^*(x) = A\cos kx - \mathrm{i}B\sin kx$$

所以叠加态的实数解可以写为

$$\varphi(x) = \psi(x) + \psi^*(x) = 2A\cos kx$$
$$\chi(x) = -\mathrm{i}[\psi(x) - \psi^*(x)] = 2B\sin kx$$

[4] 根据态叠加原理，对叠加态 $\varphi(x)$ 和 $\chi(x)$ 进行能量测量，二者就会塌缩成能量本征态 $\psi(x)$ 或 $\psi^*(x)$，相应的测量结果也会是能量本征值 E

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，一个实变函数 $\psi(x)$ 总可以分解为偶函数 $f(x)$ 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（定态薛定谔方程）两边同乘 $\mathrm{d}x$

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

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

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

对两边取极限 $\varepsilon \to 0$，得到无限窄区间

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

方程右侧 $[E - V(x)]\psi(x)$ 是有限的，所以在无限窄区间上的积分只能为零，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，一阶导函数连续，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 (5) 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. 这两个量子态的能量本征方程分别为

$$\psi_1'' = -\frac{2m}{\hbar}[E - V(x)]\psi_1$$
$$\psi_2'' = -\frac{2m}{\hbar}[E - V(x)]\psi_2$$

两式相除、整理、凑微分

$$\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'' = (\psi_2'\psi_1 - \psi_2\psi_1')' = 0$$

两边积分得到

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

□

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. 设能量本征方程的束缚态解存在简并，即不同的量子态 ψ_1 和 ψ_2 同时具有能量本征值 E

$$\psi_1\psi_2' = \psi_2\psi_1'$$

分离变量的形式为

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$$

两边同时积分得到

$$\psi_1(x) = C\psi_2(x)$$

这说明两个束缚态解实际上描述同一个量子态，也即能级不简并。 □

2.2 方势

P32 练习：一维无限深方势阱问题

试取无限深方势阱的中心为坐标原点，即

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

证明粒子的能量仍为

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

但波函数表示为

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

解答　粒子的定态薛定谔方程为

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

由此得到粒子在方势阱内（$|x| < \frac{a}{2}, V = 0$）的能量本征方程

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

这个微分方程的解形如

$$\psi(x) = c_1\sin kx + c_2\cos kx, \qquad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)$$

在无限深方势阱内部 $\psi(x) \neq 0$，方势阱外部 $\psi(x) = 0$，考虑到边界条件 $\psi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0$，如果是奇宇称，则 $k = \frac{(2n+1)\pi}{a}$；如果是偶宇称，则 $k = \frac{(2n)\pi}{a}$，但无论如何，粒子的能量都可以写成

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

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 $A = \frac{a}{2}$，并且

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

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[5]

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

方程的解可以写成分离变数的形式

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

粒子被限制在矩形匣中运动，根据边界条件 $\psi(0,y,z) = \psi(x,0,z) = \psi(x,y,0) = 0$ 可以确定 $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 0$，再代入 $\psi(a,b,c) = 0$

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

所以粒子的能量本征值为

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

再归一化波函数

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

得到

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

---

[5] 本质上来说，就是三维形式的定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

如果匣子恰巧是边长为 a 的立方体，则

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

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　首先利用边界条件和波函数的归一化，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 (31)

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

两边对 ε 取极限

$$\lim_{\varepsilon\to0^+}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\mathrm{d}\left[\psi'(x)\right] = -\frac{2m}{\hbar}\left[\lim_{\varepsilon\to0^+}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}E\psi(x)\,\mathrm{d}x - \gamma\psi(0)\right]$$

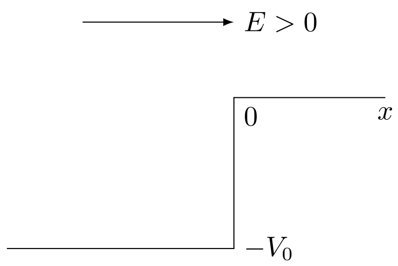
化简得（此处要结合公式 (31)）

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m}{\hbar^2}[0 - \gamma\psi(0)] \neq 0 \tag{7}$$

这说明 $\psi'(x)$ 在 $x = 0$ 处一般不连续（除非 $\psi(0) = 0$），公式 (7) 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

$$\overline{x} = 0$$

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 $\Delta x\Delta p$

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

2.4 一维谐振子

利用一维谐振子回复力 $F=-kx$ 和固有频率 $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$ 的关系，得到一维谐振子的势能表达式

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

再将 $V(x)$ 代入一维谐振子的定态薛定谔方程

$$\frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2+(m\omega x)^2\right]\psi=E\psi$$

我们在此处定义升降阶算符 $a_\pm$ 如下[6]

$$\begin{aligned}a_+&\equiv\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(-\mathrm{i}p+m\omega x)\\a_-&\equiv\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(+\mathrm{i}p+m\omega x)\end{aligned}$$

可以证明 $(a_+\psi)$ 是薛定谔方程的解，其对应能量为 $(E+\hbar\omega)$；同时 $(a_-\psi)$ 也是薛定谔方程的解，其对应能量为 $(E-\hbar\omega)$。在反复使用降阶算符后，我们会得到一个最低能量 $a_-\psi_0=0$

$$\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+m\omega x\right)\psi_0=0$$

解得通解

$$\psi_0(x)=A\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

对波函数归一化，得到

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

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

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

[6] 跟我们之前定义角动量的升降阶算符 $\hat{l}_\pm$ 类似，这里定义升降阶算符 $a_\pm$ 是为了方便求解能量本征值

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 在 $x<0$ 的部分，粒子无法穿过 $V(x)=\infty$ 的势垒，所以

$$\psi(x)=0$$

在 $x>0$ 的部分，粒子运动的薛定谔方程为

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

这个变系数微分方程想要得到多项式解，必须满足

$$\lambda-1=2n\implies\frac{E}{\frac{1}{2}\hbar\omega}-1=2n$$

此时方程的解形如

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

同时波函数必须连续

$$\psi(0-)=\psi(0+)=0$$

也即 Hermite 多项式必须为零，所以 n 只能取奇数（$n=1,3,5,\cdots$）此时谐振子的能级为

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

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

$$\hat{A}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{A}\psi_1+c_2\hat{A}\psi_2 \tag{8}$$

3.1.2 算符之和

$$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\psi=\hat{A}\psi+\hat{B}\psi \tag{9}$$

3.1.3 算符之积

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi=\hat{A}\left(\hat{B}\psi\right) \tag{10}$$

量子力学的基本对易式 量子力学中最早被发现并证实的对易关系是动量算符和位置算符[7]

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

为了简洁和方便，我们可以定义符号 [ ] 来表达类似的对易关系

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{11}$$

根据对易式的定义，可以推出下列对易恒等式：

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -\left[\hat{B}, \hat{A}\right] \tag{12}$$

$$\left[\hat{A}, \hat{B}+\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right] \tag{13}$$

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

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

进一步可以证明 Jacobi 恒等式[8]

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{B}, \hat{C}\right]\right] + \left[\hat{B}, \left[\hat{C}, \hat{A}\right]\right] + \left[\hat{C}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = 0 \tag{16}$$

3.1.4 角动量的对易式

角动量算符定义为

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{r} \times (-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}) = -\mathrm{i}\hbar \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

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

$$\left[\hat{l}_\alpha, x_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar x_\gamma \tag{17}$$

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

$$\begin{cases} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = -\varepsilon_{\beta\alpha\gamma} = -\varepsilon_{\alpha\gamma\beta} \\ \varepsilon_{123} = 1 \end{cases} \tag{18}$$

---

[7]动量算符表示为

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

Kronecker 函数的含义是

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

[8]题外话：群论中的李代数是满足 Jacobi 恒等式代数结构的一个主要例子

类似地，还可以证明

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

$$\left[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \mathrm{i}\hbar \hat{l}_\gamma \tag{20}$$

证明题

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

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

提示：利用基本对易关系能在很大程度上简化问题

解答 先证明 $\alpha = x$ 的情形

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

以上过程需要利用角动量算符的基本对易关系

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

同理也可以证明 $\alpha = y, z$ 的情形

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

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

证明题

定义角动量的升降阶算符 $\hat{l}_\pm$

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

证明：

(19) $\hat{l}_z \hat{l}_\pm = \hat{l}_\pm \left(\hat{l}_z \pm \hbar\right)$，即 $\left[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm\right] = \pm \mathrm{i}\hbar \hat{l}_\pm$

(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 $\hat{l}_\pm$ 的定义和量子力学的基本对易式[9]

$$\left[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm\right] = \left[\hat{l}_z, \hat{l}_x \pm \mathrm{i}\hat{l}_y\right] = \left[\hat{l}_z, \hat{l}_x\right] \pm \mathrm{i}\left[\hat{l}_z, \hat{l}_y\right] = \mathrm{i}\hbar \hat{l}_y \pm \mathrm{i}(-\mathrm{i}\hbar)\hat{l}_x = \pm \mathrm{i}\hbar \hat{l}_\pm$$

[9] 任意两个角动量分量算符 $\hat{l}_\alpha$ 和 $\hat{l}_\beta$ 的对易关系在前文已经证明过：

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

(20) 根据 $\hat{l}_\pm$ 的定义，先证明

$$\hat{l}_+\hat{l}_- = \left(\hat{l}_x + \mathrm{i}\hat{l}_y\right)\left(\hat{l}_x - \mathrm{i}\hat{l}_y\right) = \hat{l}_x^2 + \mathrm{i}\left(-\hat{l}_x\hat{l}_y + \hat{l}_y\hat{l}_x\right) + \hat{l}_y^2 = \hat{l}_x^2 + \mathrm{i}\left[\hat{l}_y, \hat{l}_x\right] + \hat{l}_y^2 = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 + \hbar\hat{l}_z$$

同理可证

$$\hat{l}_-\hat{l}_+ = \left(\hat{l}_x - \mathrm{i}\hat{l}_y\right)\left(\hat{l}_x + \mathrm{i}\hat{l}_y\right) = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar\hat{l}_z$$

(21) 根据 $\hat{l}_\pm$ 的定义

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

3.1.5 逆算符

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

3.1.6 算符的函数

类比泰勒级数展开，可以得到算符 $\hat{A}$ 的函数

$$F\left(\hat{A}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F^{(n)}(0)}{n!}\hat{A}^n \tag{21}$$

进一步，还能得到位移算符

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

3.1.7 转置算符

算符 $\hat{A}$ 的转置算符定义为

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

表示为

$$\left(\psi, \tilde{\hat{A}}\varphi\right) = \left(\varphi^*, \hat{A}\psi^*\right) \tag{22}$$

实际上对于算符之积，有

$$\widetilde{\hat{A}\hat{B}} = \tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}}$$

3.1.8 复共轭算符与 Hermitian 共轭算符

算符 $\hat{A}$ 的复共轭算符定义为

$$\hat{A}^*\psi = \left(\hat{A}\psi^*\right)^* \tag{23}$$

算符 $\hat{A}$ 的 Hermitian 共轭算符定义为

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

证明题

证明：动量算符 $-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 是 Hermitian 算符。

证明. 一方面[10]

$$\langle\psi \mid \hat{p}\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x = -\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\mathrm{d}\psi = -\mathrm{i}\hbar\left(\psi^*\psi\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi\mathrm{d}\psi^*\right) = \mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\mathrm{d}\psi^*$$

另一方面

$$\langle\hat{p}\psi \mid \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}(\hat{p}\psi)^*\,\psi\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^*\psi\,\mathrm{d}x = \mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\,\mathrm{d}x = \mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\mathrm{d}\psi^*$$

由此可见 $\langle\psi \mid \hat{p}\psi\rangle = \langle\hat{p}\psi \mid \psi\rangle$，说明动量算符是 Hermitian 算符 □

扩展问题

微分算符 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 是 Hermitian 算符吗？

提示：考虑 $\langle\psi|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi\rangle$ 与 $\langle\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi|\psi\rangle$ 是否相等

解答 微分算符的本征方程为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x = \psi^*\psi|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi\,\mathrm{d}\psi^* = -\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\,\mathrm{d}\psi^*$$

类似地，考虑其转置再取复共轭的形式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\psi\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi\,\mathrm{d}\psi^*$$

二者的结果相反，说明微分算符是反 Hermitian 算符。

3.1.9 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 $\frac{1}{2}(AB+BA)$ 和 $\frac{1}{2\mathrm{i}}(AB-BA)$ 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.

---

[10]满足归一化条件的规范波函数必须满足

$$\psi(+\infty) = \psi(-\infty) = 0$$

解答 已知 A 与 B 都是 Hermitian 算符（自伴算符）

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

对于

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

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

这说明以上两个算符都是 Hermitian 算符，根据这一结论，我们再对任意算符 F 进行分解

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

这说明 F_+ 和 F_- 都是 Hermitian 算符.[11]

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

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

[11] 升降阶算符对于我们求解能量本征值是十分有用的，不过具体的构造方法还是需要李代数的相应知识

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. 对于 Hermitian 算符 $\hat{A}$ 其本征方程可以写为

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

再根据算符的自伴性质，其平均值有以下两种等价的计算方式

$$\langle\psi \mid \hat{A}\psi\rangle=\int\psi^*\left(\hat{A}\psi\right)\mathrm{d}\tau=A_n\int\psi^*\psi\,\mathrm{d}\tau=A_n$$

$$\langle\hat{A}\psi \mid \psi\rangle=\int\left(\hat{A}\psi\right)^*\psi\,\mathrm{d}\tau=A_n^*\int\psi^*\psi\,\mathrm{d}\tau=A_n^*$$

所以理应有 $A_n=A_n^*$，也即本征值为实数。 □

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

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.

虽然在出现简并态时，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，我们还是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 $\frac{1}{2}f_n(f_n-1)+f_n=\frac{1}{2}f_n(f_n+1)$ 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

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

还没有归一化……

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 设算符 $\hat{F}$ 的本征态为 $\psi(x)$，对应的本征值为 λ

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

代入动量算符 $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$，得到

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

整理成分离变量的形式

$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(x-\lambda)\psi(x)$$

再两边积分得到本征函数

$$\psi(x)=\frac{1}{2}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(x^2-2\lambda x)\right]+C$$

对于所有实数 λ，波函数 $\psi(x)$ 均满足标准条件。

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 $\hat{l}_z$ 的本征态下，$\overline{l_x}=\overline{l_y}=0$.

提示：可以利用对易式 $\hat{l}_y\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{l}_y=\mathrm{i}\hbar\hat{l}_x$ 进行代换

解答 角动量 z 分量算符 $\hat{l}_z$ 的本征值是我们熟知的 $m\hbar$，本征方程为

$$\hat{l}_z\psi=m\hbar\psi$$

再根据角动量的对易关系

$$\left[\hat{l}_y,\hat{l}_z\right]=l_yl_z-l_zl_y=\mathrm{i}\hbar l_x$$

建立算符 $\hat{l}_x$ 与算符 $\hat{l}_z$ 的关系，最后利用 $\hat{l}_z$ 的本征方程求得算符 $\hat{l}_x$ 平均值

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

同理，再利用 $\left[\hat{l}_z,\hat{l}_x\right]=\mathrm{i}\hbar\hat{l}_y$ 可得

$$\overline{l_y}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int\psi^*(\hat{l}_z\hat{l}_x-\hat{l}_x\hat{l}_y)\psi\,\mathrm{d}y=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\int(\hat{l}_z\psi)^*\hat{l}_x\psi\,\mathrm{d}y-\int\psi^*\hat{l}_x(\hat{l}_z\psi)\,\mathrm{d}y\right]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}m\hbar\left(\overline{l_x}-\overline{l_x}\right)=0$$

题目 3.15

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

解答 球谐函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 是 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的共同本征函数，两个本征方程分别为

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\quad\hat{l}_z\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

考虑到球谐函数的对称性，有

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

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

根据概率统计的相关知识 $D(X) = E(X^2) - E^2(X)$

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

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

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

$$E_{20} = 0, \quad P_{20} = |c_2|^2$$

(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 $\overline{A}$ 表示为[12]

$$\overline{A} = \langle\psi(t) \mid \hat{A}\psi(t)\rangle = \int \psi^*\hat{A}\psi\,\mathrm{d}\tau$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \psi^*\hat{A}\psi\,\mathrm{d}\tau = \int \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\psi^*\hat{A}\psi)\,\mathrm{d}\tau = \int \left(\dot{\psi}^*\hat{A}\psi + \psi^*\dot{\hat{A}}\psi + \psi^*\hat{A}\dot{\psi}\right)\mathrm{d}\tau$$

利用薛定谔方程做代换 $\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hat{H}}{\mathrm{i}\hbar}\psi$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A} = \int \left(\frac{\hat{H}\psi^*}{-\mathrm{i}\hbar}\hat{A}\psi + \psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi + \psi^*\hat{A}\frac{\hat{H}\psi}{\mathrm{i}\hbar}\right)\mathrm{d}\tau$$

如果力学量 A 不显含 t（也即 $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$），上式还能消去一项

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int \left(-\hat{H}\psi^*\hat{A}\psi + \psi^*\hat{A}\hat{H}\psi\right)\mathrm{d}\tau = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int \psi^*(\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A})\psi\,\mathrm{d}\tau = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A,H]} \tag{25}$$

如果恰好有 $[A,H] = 0$（即力学量 A 恰好与 H 对易），则 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A} = 0$，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.

定理 4.1 (Virial 定理)**.** *当体系处于定态时，有*

$$2\overline{T} = \overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V}$$

其中 $T = \frac{p^2}{2m}$ 是粒子动能，$V(\boldsymbol{r})$ 是势能.

证明. 系统的 Hamilton 算符为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r})$$

考虑 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 的平均值随时间演化[13]

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}} = \overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}, H]} = \frac{1}{2m}\overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}, \hat{p}^2]} + \overline{[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}, V(\boldsymbol{r})]}$$

---

[12] 虽然在《量子力学教程》中，波函数的标积表示为

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

但最好还是用 Dirac 符号表示

$$\langle\psi \mid \varphi\rangle = \int \psi^*\varphi\,\mathrm{d}\tau$$

[13] 不显含 t 的力学量 A，其平均值随时间演化

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

如果在此基础上，力学量 A 又恰好与 H 对易，则 $\frac{\mathrm{d}\bar{A}}{\mathrm{d}t} = 0$，也即 A 是体系的一个守恒量。

对于第一项 因式 $[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},\hat{p}^2]$ 可以写为

$$[\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\hat{p}^2]=\left[x\hat{p}_x+y\hat{p}_y+z\hat{p}_z,\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right]=\left[x\hat{p}_x,\hat{p}_x^2\right]+\left[y\hat{p}_y,\hat{p}_y^2\right]+\left[z\hat{p}_z,\hat{p}_z^2\right]$$

这显然具有极佳的轮换对称性，我们根据对易式的代数恒等式[14] 和量子力学的基本对易式[15]处理其中一项

$$\begin{aligned}\left[x\hat{p}_x,\hat{p}_x^2\right]&=x\left[\hat{p}_x,\hat{p}_x^2\right]+\left[x,\hat{p}_x^2\right]\hat{p}_x\\&=0+\left[x,\hat{p}_x^2\right]\hat{p}_x\\&=0+\left[x,\hat{p}_x\hat{p}_x\right]\hat{p}_x\\&=0+\hat{p}_x\left[x,\hat{p}_x\right]\hat{p}_x+\left[x,\hat{p}_x\right]\hat{p}_x^2\\&=\hat{p}_x(\mathrm{i}\hbar)\hat{p}_x+(\mathrm{i}\hbar)\hat{p}_x^2=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x^2\end{aligned}$$

类似地，可以得到

$$\left[\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\hat{p}^2\right]=2\mathrm{i}\hbar\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right)=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}^2$$

对于第二项 也利用相同的对易代数恒等式展开

$$[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]=\boldsymbol{r}\left[\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})\right]+\left[\boldsymbol{r},V(\boldsymbol{r})\right]\boldsymbol{p}=\boldsymbol{r}[\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]+0=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\nabla V(\boldsymbol{r})$$

考虑到定态下 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}}=0$，所以

$$2\overline{T}=\overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(r)}$$

□

题目 4.2

设体系有两个粒子，每个粒子可处于三个单粒子态 φ_1，φ_2，φ_3 中的任何一个态。试求体系可能的态数目，分三种情况讨论：两个全同玻色子、两个全同费米子、两个不同粒子。

解答

- 全同玻色子：8 个态
- 全同费米子：6 个态
- 不同粒子：9 个态

题目 4.3

解答 如果不考虑波函数的交换对称性，其可能的态数目为

$$3^3=27$$

[14]对易式的代数恒等式：

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

[15]量子力学的基本对易式：

$$[x,\hat{p}_x]=\mathrm{i}\hbar$$

如果要求波函数是交换反对称的，其可能的态数目为

$$1$$

如果要求波函数是交换对称的，其可能的态数目为

$$1+6+3=10$$

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(期末考试的证明题)

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

$$\langle\psi,\psi\rangle=\text{有限值}$$

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 Hermitian 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

以氢原子为例，质量较大的质子 m_1 和质量较小的电子 m_2 构成二体系统，其势能是库伦势

$$V(r)=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$$

如果我们取巧地选用质心坐标系

$$\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2,\quad \vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2},\quad \mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2},$$

就能获得一个相对简单的定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla_R^2-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2+V(\vec{r})\right]\psi(\vec{R},\vec{r})=E\psi(\vec{R},\vec{r})$$

再进一步分离变数 $\psi(R,r)=\psi_R(\vec{R})\psi_r(\vec{r})$，得到分别描述**质心运动**和**二体体系内部结构**的两个方程

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\psi_R(\vec{R})=E_R\psi_R(\vec{R}),\quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi_r(\vec{r})=E_r\psi_r(\vec{r})$$

对于描述二体体系内部结构（中心力场）的方程，其定态波函数还可以进一步分离变数

$$\psi(r)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中关于 $R(r)$ 的部分称为径向方程，可以写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2rR(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left[-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]rR(r)=rR(r)E$$

以上步骤用到了考察渐进行为、寻找多项式、根据归一化条件截断多项式等技巧，最终解出玻尔的氢原子能级公式

$$E_n=-\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\right]\frac{1}{n^2}=\frac{E_1}{n^2},\quad n=1,2,3.\cdots$$

曾谨言的书中写为

$$\boxed{E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,\cdots}$$

其中 $a=\frac{\hbar^2}{me^2}$ 是玻尔半径。

5.1 角动量算符

只写结论，角动量算符的平方 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 和角动量算符的 z 分量 $\hat{l}_z$ 具有一个共同本征函数 Y_{lm}，本征方程为：

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2\mathrm{Y}_{lm}=l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}_{lm},\quad \hat{l}_z\mathrm{Y}_{lm}=m\hbar\mathrm{Y}_{lm}$$

此外，角动量算符的升降阶算符 $\hat{l}_\pm$

$$\hat{l}_\pm\mathrm{Y}_{lm}=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\mathrm{Y}_{lm\pm1}$$

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

(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 $e = -1.602 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$
2. 电子质量 $m_e = 9.109\,383\,7 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$
3. 中子质量 $m_\mathrm{n} = 1.674\,928\,6 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$
4. 氦原子质量 $m_\mathrm{He} = 6.646\,473\,1 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$
5. 普朗克常量 $h = 6.626\,070\,15 \times 10^{-34}\,\mathrm{m^2{\cdot}kg\cdot s^{-1}}$
6. 玻尔兹曼常量 $k = 1.380\,649 \times 10^{-23}\,\mathrm{m^2{\cdot}kg\cdot s^{-2}{\cdot}K^{-1}}$
7. 电子伏特和焦耳的换算 $1\,\mathrm{eV} = 1.602\,176\,62 \times 10^{-19}\,\mathrm{J}$

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

$$\begin{cases} f(x) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}} \displaystyle\int_0^{+\infty} B(\omega)\sin\omega x\,\mathrm{d}x \\ B(\omega) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}} \displaystyle\int_0^{+\infty} f(\xi)\sin\omega\xi\,\mathrm{d}\xi \end{cases} \tag{26}$$

2. 实数形式的傅里叶余弦变换

$$\begin{cases} f(x) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}} \displaystyle\int_0^{+\infty} A(\omega)\cos\omega x\,\mathrm{d}x \\ A(\omega) = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}} \displaystyle\int_0^{+\infty} f(\xi)\cos\omega\xi\,\mathrm{d}\xi \end{cases} \tag{27}$$

3. 复数形式的傅里叶变换

$$\begin{cases} F(\omega) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x}\right]^*\,\mathrm{d}x \\ f(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x}\,\mathrm{d}\omega \end{cases} \tag{28}$$

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

$$H(x) = \int_{-\infty}^{x} \delta(t)\,\mathrm{d}t = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \tag{29}$$

2. 奇偶性

$$
\begin{aligned}
\delta(-x) &= \delta(x) \\
\delta'(-x) &= -\delta'(x)
\end{aligned}
\tag{30}
$$

3. 挑选性

$$
\int_a^b \delta(x-x_0) f(x)\,\mathrm{d}x = \begin{cases} f(x_0), & x_0 \in (a,b) \\ 0, & x_0 \notin (a,b) \end{cases} \tag{31}
$$

B.3 Kronecker 函数

$$
\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \tag{32}
$$

B.4 Laplace 变换

$$
\begin{cases} \bar{f}(p) = \displaystyle\int_0^{+\infty} f(t)\mathrm{e}^{-pt}\,\mathrm{d}t \\ f(t) = \dfrac{1}{2\pi\mathrm{i}} \displaystyle\int_{\sigma-\mathrm{i}\infty}^{\sigma+\mathrm{i}\infty} \bar{f}(p)\mathrm{e}^{pt}\,\mathrm{d}p \end{cases} \tag{33}
$$

B.5 Hermite 多项式

变系数微分方程

$$
u'' - 2zu' + (\lambda - 1)u = 0 \tag{34}
$$

的系数必须满足

$$
\lambda - 1 = 2n, \quad n = 0, 1, 2 \cdots \tag{35}
$$

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

$$
\mathrm{e}^{-s^2+2zs} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n \tag{36}
$$

由此可以证明 Hermite 多项式的正交归一性

$$
\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(z) H_n(z) \mathrm{e}^{-z^2}\,\mathrm{d}z = \sqrt{\pi} 2^n \cdot n! \delta_{mn} \tag{37}
$$

和递推关系

$$
H_{n+1}(z) - 2zH_n(z) + 2nH_{n-1}(z) = 0 \tag{38}
$$

$$
H_n'(z) = 2nH_{n-1}(z) \tag{39}
$$

B.6 常用积分公式

$$\int x\sin ax\,\mathrm{d}x=\frac{1}{a^2}\sin ax-\frac{1}{a}x\cos ax+C \tag{40}$$

$$\int x^2\sin ax\,\mathrm{d}x=-\frac{1}{a}x^2\cos ax+\frac{2}{a^2}x\sin ax+\frac{2}{a^3}\cos ax+C \tag{41}$$

$$\int x\cos ax\,\mathrm{d}x=\frac{1}{a^2}\cos ax+\frac{1}{a}x\sin ax+C \tag{42}$$

$$\int x^2\cos ax\,\mathrm{d}x=\frac{1}{a}x^2\sin ax+\frac{2}{a^2}x\cos ax-\frac{2}{a^3}\sin ax+C \tag{43}$$

B.7 求矩阵的逆矩阵

定义法：寻找一个与 $\boldsymbol{A}$ 同阶的方阵 $\boldsymbol{B}$，使得

$$\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{E},\quad \boldsymbol{BA}=\boldsymbol{E}$$

公式法：可利用矩阵行列式和代数余子式构成的伴随矩阵来求逆矩阵 [16]

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\boldsymbol{A}^*$$

初等变换法：

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{A} & \vdots & \boldsymbol{E}\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{初等行变换}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{E} & \vdots & \boldsymbol{A}^{-1}\end{pmatrix}\quad \begin{pmatrix}\boldsymbol{A}\\ \cdots\\ \boldsymbol{E}\end{pmatrix}\xrightarrow{\text{初等列变换}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{E}\\ \cdots\\ \boldsymbol{A}^{-1}\end{pmatrix}$$

分块矩阵法：当 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 均可逆时

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{B}\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}^{-1} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{B}^{-1}\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}^{-1}\\ \boldsymbol{B}^{-1} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$$

---

[16]例如矩阵 $\begin{pmatrix}1 & 2\\ 2 & 5\end{pmatrix}$ 的伴随矩阵为

$$\boldsymbol{A}^*=\begin{pmatrix}M_{11} & -M_{12}\\ -M_{21} & M_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5 & -2\\ -2 & 1\end{pmatrix}$$

于是逆矩阵为

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\boldsymbol{A}^*=\begin{pmatrix}5 & -2\\ -2 & 1\end{pmatrix}$$