量 子 力 学 题 解

（内部资料，只供教师参考，不准翻印）

北大物理系量子力学教学小组编

上 饶 师 专 物 理 科 印 发

一 九 八 三 年 十 月

前　　言

今年三月份中国物理学会在北京举办了一次量子力学讲习班，与会教师一致要求翻印北京大学物理系量子力学教学组编写的曾谨言教授编著的《量子力学》习题解答，以满足教学上的需要，经协商由我校承担此项工作。根据原编者意见，此题解仅作教师教学时参考，请不要流传到学生中去。未经原编者同意，也不准翻印。

上饶师专物理科

一九八三年十月

目　录

Ⅰ—Ⅱ　量子论、波函数与波动方程

1、试用量子化条件，求谐振子的能量。

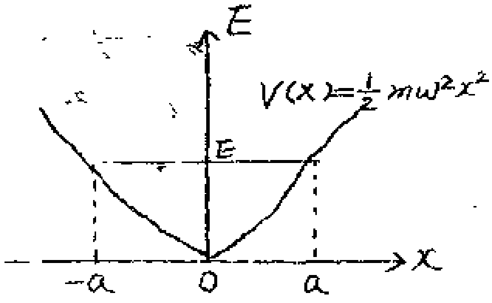


图 1—1

〔解一〕：设谐振子能量为E，

按经典力学

$$E=p^2/2m+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \text{------(1)}$$

m为振子质量，p为动量，$K=m\omega^2$是为常数。在此谐振子势中运动的经典粒子的角频率为ω，设粒子能量为E，则其活动范围是：

$$|x|\leqslant a \text{--------------(2)}$$

其中，$a=\sqrt{2E/m\omega^2}$ ------(3)　$x=\pm a$即转折点。按(1)式得：

$$\oint p\,dx=2\int_{-a}^{+a}\sqrt{2m(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)}\,dx \text{-----(4)}$$

利用(3)式，$$=2m\omega\int_{-a}^{+a}\sqrt{a^2-x^2}\,dx$$

积分得：$$=2m\omega\cdot\frac{\pi}{2}a^2$$

按量子化条件　$$=nh \qquad \therefore a^2=nh/\pi m\omega \text{---(5)}$$

代入(3)式：$$E=\frac{1}{2}m\omega^2a^2=nh\omega/2\pi=n\hbar\omega \quad (n=1,2,3\cdots) \text{---(6)}$$

〔解二〕：按经典力学，在谐振子势$V(x)=\frac{1}{2}Kx^2$中运动的粒子，将作简谐运动，角频率为$\sqrt{K/m}$，m为振子质量。因此，若取$K=m\omega^2$，则振子角频率即为ω（周期$T=2\pi/\omega$）。选择适当相角（或时间零点），谐振子的位置可以表为

$$x=a\sin\omega t \qquad (a\text{为振幅}) \text{------(7)}$$

因此　$$p=m\dot{x}=ma\omega\cos\omega t$$

代入量子化条件，积分一周期

$$\oint p\,dx=\int_0^{2\pi/\omega}ma\omega\cos\omega t\cdot a\omega\cos\omega t\,dt$$
$$=ma^2\omega^2\int_0^{2\pi/\omega}\cos^2\omega t\,dt \quad \text{积分后得}$$
$$=\pi m\omega a^2=nh \text{------------(8)}$$

用(7)式代入能量公式(1)，化简得

$$E = P^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$= \frac{1}{2}m\omega^2a^2 \qquad \text{利用(8)式得}$$

$$= \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot nh/\pi m\omega = n\hbar\omega \quad (n=1,2,3\cdots)\cdots\cdots(9)$$

2. 用量子化条件求限制在箱内运动的粒子的能量。箱的长宽高分别为 a、b 和 c。

〔解〕：除碰壁时以外，粒子在箱内作自由运动，动量是守恒的。在碰壁（弹性碰撞）时，粒子动量反向，但数值不变。选箱的长宽高三个方向为 x、y、z 轴方向。把粒子沿 x、y、z 轴三个方向的运动分开处理。利用量子化条件

$$\oint p_x dx = n_x h$$

$$\oint p_y dy = n_y h$$

$$\oint p_z dz = n_z h \qquad n_x \cdot n_y \cdot n_z = 1,2,3\cdots\cdots$$

但

$$\oint p_x dx = p_x 2a$$

$$\oint p_y dy = p_y 2b$$

$$\oint p_z dz = p_z 2c$$

∴ $p_x = n_x h/2a$，$p_y = n_y h/2b$，$p_z = n_z h/2c$。而粒子总能量为：$E = \frac{(p_x^2+p_y^2+p_z^2)}{2m} = \frac{h^2}{8m}\left[\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right]$

其中：n_x、n_y、$n_z = 1,2,3\cdots\cdots$

3、平面转子的转动惯量为 I，求它的能量允许值。

〔解〕：平面转子的转角记为 θ

图 1—2

它的角动量记为 $p_\theta = I\dot{\theta}$，p_θ 是运动常数，θ 看成广义坐标，p_θ 为相应的广义动量。按照量子化条件

$$\int_0^{2\pi} p_\theta d\theta = nh \qquad n = 1,2,3\cdots\cdots$$

$$2\pi p_\theta = m\hbar$$

$$p_\theta = m\hbar$$

因而转子的能量为：

$$E = p_\theta^2/2I = \frac{m^2\hbar^2}{2I}$$

4. 有一个带电q的粒子在平面内运动，垂直于平面方向有磁场B。求粒子能量允许值。

〔解〕：设粒子速度为v，它受到Lorentz力作用而不断改变方向，构成圆周运动。设轨道半径为r，则（用高斯单位制）

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{B|q|v}{c} \quad ----(1)$$

$$\therefore \quad r = \frac{mc}{|q|B} v$$

$$\text{或} \quad v = \frac{|q|B}{mc} r \quad --------(2)$$

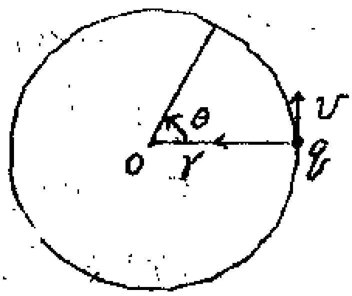


图1—3

c为光速，m为粒子质量。因此，粒子的角动量（广义动量）为mvr，是守恒量。

代入量子化条件

$$\oint p_\theta d\theta = 2\pi m v r = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3 \cdots\cdots$$

$$m v r = n\hbar \quad --------(3)$$

用（2）式代入：

$$= m\frac{|q|B}{mc} r^2$$

$$r^2 = \frac{n\hbar c}{|q|B} \quad -----(4)$$

即r取值是量子化的，$r = r_n = \sqrt{n\hbar c/|q|B}$，$n = 1, 2, 3 \cdots$ (4)

现在来研究粒子的能量，先讨论粒子的动能

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\frac{q^2B^2}{m^2c^2}r^2$$

$$= \frac{1}{2}m\frac{q^2B^2}{m^2c^2} \cdot \frac{n\hbar c}{|q|B}$$

$$= \frac{|q|B}{2mc} n\hbar \quad ------------(5)$$

其次计算磁能。带电粒子作圆周运动，相当于有一个磁矩 μ，取磁场方向 B 为 z 正方向，则磁矩：

$$\mu = \frac{iA}{c} = -q\frac{v}{2\pi r}\cdot\frac{\pi r^2}{c} = -\frac{qvr}{2c} \quad \cdots(6)$$

$v/2\pi r$ 代表粒子作圆周运动的频率，i 是电流强度。$A=\pi r^2$ 是电流环的面积。用(2)、(4)式代入(6)式：

$$\mu = -\frac{q}{2c}\frac{|q|B}{mc}r^2 = -\frac{q}{2c}\frac{|q|B}{mc}\cdot\frac{n\hbar c}{|q|B} = -n\frac{\hbar q}{2mc}$$

因此，与磁场 B 的作用能为

$$V = -\mu B = n\hbar\frac{|q|B}{2mc}$$

所以，带电粒子总能量为：

$$E = T+V = n\hbar|q|B/mc \qquad n=1,2,3,\cdots$$

（参阅§6 第2题，用量子力学严格求解的结果：

$$E_n = \frac{\hbar|q|B}{2\mu c}(2n+1) = \frac{\hbar|q|B}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

其中：$n=0,1,2,3,\cdots\cdots$）

5. 对于高速运动粒子（静质量为 m），能量及动量由下式给出：

$$E = mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2}，\quad（v \text{是粒子速度}）$$

$$\vec{p} = m\vec{v}/\sqrt{1-v^2/c^2}.$$

试根据哈密顿量 $H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$ 来验证这两式，由此求出粒子速度与德·布罗意波的群速的关系。计算波的相速，并证明相速大于光速。

〔解〕：利用 $H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$，代入正则方程

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{c^2 p_x}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}} = v_x \quad \cdots\cdots\cdots(1)$$

类似可求 $\dot{y}$、$\dot{z}$，从而求出 $\vec{v} = \dfrac{c^2\vec{p}}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}} \quad \cdots\cdots(2)$

平方 $$c^4p^2=(m^2c^4+p^2c^2)v^2$$

消去 c^2 $$p^2(c^2-v^2)=m^2c^2v^2$$

$$p=\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad --- \tag{3}$$

又根据(2)式，$\vec{p}$ 与 $\vec{v}$ 同向

$$\vec{p}=\frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad --- \tag{4}$$

此外， $$E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}=mc^2\left(1+\frac{p^2}{m^2c^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

利用(3)式， $$E=mc^2\left[1+\frac{v^2/c^2}{1-v^2/c^2}\right]^{1/2}=mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2} \tag{5}$$

按照德·布罗意假定，$E=\hbar\omega$，$p=\hbar k$，可得

$$\hbar\omega=\sqrt{m^2c^4+\hbar^2c^2k^2}$$

∴ 群速度为 $$v_g=\frac{d\omega}{dk}=\frac{c^2\hbar k}{\sqrt{m^2c^4+\hbar^2c^2k^2}}$$

$$=\frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}}=v \quad \text{(利用(6)式)} \tag{7}$$

即波包群速 v_g 等于粒子速度 v。

德·布罗意波的相速为

$$u=\frac{\omega}{k}=\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2k^2}+c^2}>c \tag{8}$$

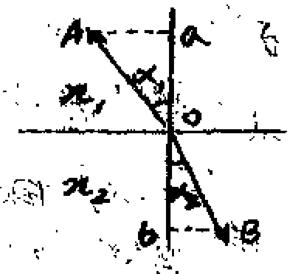
或根据 $v_g=c^2\hbar k/\hbar\omega=c^2/(\omega/k)=c^2/u$

即 $$uv_g=c^2 \tag{9}$$

不难看出 $u>c$，$v_g<c$

6、(1)试用Fermat最短光程原理，导出光的折射定律：

$$n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2$$



(图1-4)

(2)光的波动说的拥护者曾经向光的微粒说者提出过下列非难：如认为光是"粒子"，按最小作用原理，$\delta\int p\,dl=0$，若认为 $p=mv$，则 $\delta\int v\,dl=0$。P指"粒子"动量，V指"粒子"

速度，这将导致下列折射定律，$n_1\sin\alpha_2=n_2\sin\alpha_1$。这明显违反实验事实。即使考虑相对论效应，对于自由粒子，$p=Ev/c^2$ 仍然成立，E是粒子能量，从一种介质到另一种介质，E不改变，因此仍然得到 $\delta\int v\,dl=0$；矛盾依然存在。你怎样解决这个矛盾？

〔解〕：(1) 如图，光线自介质1中的A点，经过界面上的O点，到介质2中的B点。所历光程为

$$\int_A^B n\,dl=n_1 a\sec\alpha_1+n_2 b\sec\alpha_2 \qquad (1)$$

A与B点固定，变动O点，

$$\delta\int_A^B n\,dl=n_1 a\sec\alpha_1\,tg\,\alpha_1\,\delta\alpha_1+n_2 b\sec\alpha_2\,tg\,\alpha_2\,\delta\alpha_2=0 \qquad (2)$$

但

$$a\,tg\,\alpha_1+b\,tg\,\alpha_2=\text{固定值} \qquad (3)$$

两边取导数得：

$$a\sec^2\alpha_1\,\delta\alpha_1+b\sec^2\alpha_2\,\delta\alpha_2=0 \qquad (4)$$

(2)式与(4)式改写成：

$$n_1 a\sec\alpha_1\,tg\,\alpha_1\,\delta\alpha_1=-n_2 b\sec\alpha_2\,tg\,\alpha_2\,\delta\alpha_2 \qquad (2')$$

$$a\sec^2\alpha_1\,\delta\alpha_1=-b\sec^2\alpha_2\,\delta\alpha_2 \qquad (4)$$

两式相除，得：

$$n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2 \qquad (5)$$

(2) 光的波动说的拥护者提出：若光是微粒，则其运动应按 Maupertius 的最小作用原理来支配，即 $\delta\int p\,dl=0$。按牛顿力学，粒子动量 p = 粒子质量（常数）× v。因此又可得出 $\delta\int v\,dl=0$。于是与(1)相同，可得出 $v_1\sin\alpha_1=v_2\sin\alpha_2$，其中 v_1 与 v_2 分别是光微粒在介质1与2中的速度。但 $v_1=c/n_1$，$v_2=c/n_2$，因此 $n_1\sin\alpha_2=n_2\sin\alpha_1$。与折射定律完全矛盾。

若按相对论力学，粒子的动量 $p=Ev/c^2$ 是成立的〔见第(5)题(2)式〕。光微粒从一介质到另一介质，能量E是不改变

的。即E不变。因此 $\delta\int p\,dl=0$，仍将导致 $\delta\int v\,dl=0$，矛盾依然存在。

但按德·布罗意假定，可导出波的相速 u 与群速 v_g 有下列关系：

$u v_g=c^2$（见上题）。而粒子速度 v = 波的群速 v_g，所以 $p=Ev/c^2=Ev_g/c^2=h\nu/u=h\nu/(c/n)=h\nu n/c$。因此 $\delta\int p\,dl=0$ 将导致 $\delta\int n\,dl=0$。这样就可以得出正确的折射定律了。解决这个矛盾的关键是利用了德·布罗意波关系。

7. 当势能 $V(r)$ 改变一个常量 C 时，即 $V(r)\to V(r)+C$，粒子的波函数与时间无关部分改变否？能量本征值改变否？

【答】：波函数的与时间无关部分不改变。

能量本征值 $E\longrightarrow E+C$。

8. 设粒子势能 V 的极小值为 V_{min}，证明粒子的能量本征值 $E_n>V_{min}$

【证】：利用 $\bar{E}=\bar{T}+\bar{V}$，$\bar{V}$ 是势能平均值，$\bar{T}$ 为动能平均值

$$\bar{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi^*\nabla^2\psi\,d^3x=-\frac{\hbar^2}{2m}\int[\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)-(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)]d^3x.$$

第一项可化为面积分，而在无穷远处波函数要求为零。

所以 $\bar{T}=\frac{\hbar^2}{2m}\int|\nabla\psi|^2d^3x\geq0$

又 $\bar{V}>V_{min}$，

所以 $\bar{E}>V_{min}$

以上 ψ 是任意的，若 ψ 为某一个能量本征态 ψ_n，则 $\bar{E}=E_n$

因而 $E_n>V_{min}$（n 任意）。

9. 设粒子在势场 $V(r)$ 中运动：

(1)、试证明：其能量平均值为：

$$E=\int W d^3x=\int d^3x\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^* V\psi\right]。$$

W称为能量密度。

(2) 证明能量守恒公式：

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\nabla\cdot S=0$$

其中：$S=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla\psi^*\right)$ 是能流密度。

〔证〕(1) 粒子能量平均值为（设 ψ 已归一化）

$$E=\int\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right]\psi d^3x=\bar{T}+\bar{V}$$

$$\bar{V}=\int\psi^* V\psi d^3x \qquad \text{（势能平均值）}$$

$$\bar{T}=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi d^3x \quad \text{（动能平均值）}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\left[\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)-(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)\right]d^3x$$

其中第一项可化为面积分，而在无穷远处归一化的波函数必须为零。因此：

$$\bar{T}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi d^3x$$

(2) 利用 $W=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^* V\psi$

所以
$$\frac{\partial W}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi+\nabla\psi^*\cdot\nabla\dot{\psi}+\dot{\psi}^* V\psi+\psi^* V\dot{\psi}\right]$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\nabla\cdot(\dot{\psi}^*\nabla\psi+\dot{\psi}\nabla\psi^*)-(\dot{\psi}^*\nabla^2\psi+\dot{\psi}\nabla^2\psi^*)\right\}$$

$$+\dot{\psi}^* V\psi+\psi^* V\dot{\psi}$$

$$=-\nabla\cdot S+\dot{\psi}^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi+\dot{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi^*$$

$$=-\nabla\cdot S.$$

（利用了薛定谔方程）

因此
$$\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot S=0$$

10. 证明，从单粒子的薛定谔方程得出的粒子流的速度场是非旋的。

〔证〕：按薛定谔方程可导出几率守恒方程

$$\nabla\cdot\vec{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \quad \text{其中 } \rho=\psi^*\psi$$

$$\vec{j}=-\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$$

相应的速度场：$\vec{v}=\vec{j}/\rho$

本题要求证 $\nabla\times\vec{v}=0$

量子力学中波函数一般为复数，令 $\psi=u+iw$ 则不难证明

$$\vec{j}=\frac{\hbar}{m}(u\nabla w-w\nabla u)$$

$$\rho=u^2+w^2$$

因此 $\nabla\times\vec{v}=\nabla\times(\vec{j}/\rho)=\frac{1}{\rho}\nabla\times\vec{j}+(\nabla\frac{1}{\rho})\times\vec{j}$

而 $\nabla\times\vec{j}=\frac{2\hbar}{m}(\nabla u)\times(\nabla w)$

$$(\nabla\frac{1}{\rho})\times\vec{j}=-\frac{1}{\rho^2}(\nabla\rho)\times\vec{j}=-\frac{2\hbar}{m\rho}(\nabla u)\times(\nabla w)$$

因此 $\nabla\times\vec{v}=0$

11. 设 ψ_1 与 ψ_2 是薛定谔方程的任意两个解。证明：

$$\int\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t)d^3x \text{ 与时间无关。}$$

〔证〕：按薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\psi_1$$

取复数共轭 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^*=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\psi_1^* \quad (V^*=V)$ ---(1)

又 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\psi_2$ --- (2)

$\psi_2\times(1)-\psi_1^*\times(2)$ 得

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi_1^*\psi_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)$$

对全空间积分：

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int\psi_1^*(\vec{x},t)\psi_2(\vec{x},t)d^3x$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)d^3x$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int[\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)-(\nabla\psi_2)\cdot(\nabla\psi_1^*)+(\nabla\psi_1^*)\cdot(\nabla\psi_2)]d^3x$$

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\int\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)d^3x$$

最后式子可以化为面积分，按波函数在无穷远处要求为零的条件，积分为零。即

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\psi_1^*(\vec{x},t)\psi_2(\vec{x},t)d^3x=0,$$ 即积分与时间无关。

12、考虑单粒子的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_1(x)+iV_2(x))\psi$$

V_1与V_2为实函数。证明粒子的几率不守恒，求出在空间体积Ω中粒子几率"丧失"或"增加"的速率。

〔证〕：上述薛定谔方程取复数共轭

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_1-iV_2)\psi^* \qquad (2)$$

$\psi^*\times(1)-\psi\times(2)$，得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)+2i\psi^*V_2\psi$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+2iV_2\psi^*\psi$$

即 $$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=\frac{-\hbar}{2im}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+\frac{2V_2}{\hbar}\psi^*\psi \quad --- \quad (3)$$

或 $$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=\frac{2V_2}{\hbar}\rho\neq0 \quad ---- \quad (4)$$

此即几率不守恒的微分表达式。

(3)式对空间体积Ω积分：

$$\frac{d}{dt}\iiint_\Omega\psi^*\psi d^3x=-\frac{\hbar}{2im}\iiint_\Omega\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)d^3x+\frac{2V_2}{\hbar}\iiint_\Omega\psi^*\psi d^3x$$

$$=-\frac{\hbar}{2im}\oiint_S(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\cdot d\vec{S}+\frac{2V_2}{\hbar}\iiint_\Omega\psi^*\psi d^3x \quad --- \quad (5)$$

上式中右边第一项代表单位时间内粒子经过表面进入Ω的几率，

而第二项代表在几体积中"产生"的几率，这一项表征几率(或粒子数)不守恒。

13、对于一维运动的自由粒子，设 $\psi(x,0)=\delta(x)$，求 $|\psi(x,t)|^2$。

〔解〕为计算方便，进行富氏分析

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}dp$$

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)e^{-ipx/\hbar}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)e^{-ipx/\hbar}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

然后代入 $\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$, $E=p^2/2m$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i(\frac{p^2}{2m}t-px)/\hbar}dp$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\frac{t}{2m\hbar}(p^2-\frac{2mpx}{t})}dp$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{it}{2m\hbar}(p-\frac{mx}{t})^2}dp$$

令 $\xi^2=\frac{t}{2m\hbar}(p-\frac{mx}{t})^2$，

上式化为：$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\cdot\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\xi^2}d\xi$,

利用Fresnel积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\cos(\xi^2)d\xi=\int_{-\infty}^{+\infty}\sin(\xi^2)d\xi=\sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

可知 $$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\xi^2}d\xi=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot(1-i)=\sqrt{\pi}e^{-i\pi/4}$$

∴ $$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\cdot\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\sqrt{\pi}e^{-i\pi/4}$$

$$=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}e^{i(\frac{mx^2}{2\hbar t}-\pi/4)}$$

因而 $$|\psi(x,t)|^2=\frac{m}{2\pi\hbar t}。$$

14. 在非定域势中粒子的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x},t)+\int d^3x'\,V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)\quad\cdots(1)$$

求几率守恒对非定域势的要求。此时，只依赖于波函数 ψ 在空间一点的值的几率流是否存在？

〔解〕：在(1)式中，若 $V(\vec{x},\vec{x}')=V(\vec{x})\delta(\vec{x}-\vec{x}')$（定域势）$\cdots(2)$

则方程退化为平常习见的薛定谔方程

$(1)^*$ 为：$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\vec{x},t)+\int d^3x'\,V(\vec{x},\vec{x}')^*\psi^*(\vec{x}',t)$ (3)

$\psi^*(\vec{x},t)\times(1)-\psi(\vec{x},t)\times(3)$ 得：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\vec{x},t)|^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^*(\vec{x},t)\nabla^2\psi(\vec{x},t)-\psi(\vec{x},t)\nabla^2\psi^*(\vec{x},t)\right]$$
$$+\int d^3x'\left[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\psi^*(\vec{x}',t)\right]$$
$$------(4)$$

积分 $\int d^3x$：$\frac{d}{dt}\int|\psi(\vec{x},t)|^2d^3x=\frac{i\hbar}{2m}\int d^3x\left[\psi^*(\vec{x},t)\nabla^2\psi(\vec{x},t)-\psi(\vec{x},t)\nabla^2\psi^*(\vec{x},t)\right]$

$$-\frac{i}{\hbar}\iint d^3x\,d^3x'\left[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\psi^*(\vec{x}',t)\right]$$
$$-------(5)$$

对全空间积分，几率守恒要求左$=0$，右边第一项可化为面积分，对于任何真实的波函数，面积分为零。因此要求：

$$\iint d^3x\,d^3x'\left[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\psi^*(\vec{x}',t)\right]=0.$$

括号中后一项换一下积分变数 $\vec{x}\longleftrightarrow\vec{x}'$，则

$$\iint d^3x\,d^3x'\,\psi^*(\vec{x},t)\left[V(\vec{x},\vec{x}')-V^*(\vec{x}',\vec{x})\right]\psi(\vec{x}',t)=0\;---\quad(6)$$

ψ 为任意态，因此要求 $V(\vec{x},\vec{x}')=V^*(\vec{x}',\vec{x})\;---\quad(7)$

$V(\vec{x},\vec{x}')$ 是 V 在坐标表象中的"矩阵元"，上式相当于要求 V 为厄密算符。

此时，只依赖于波函数在空间一点的值的几率流不存在。

从(4)式可以看出，若令

$$\rho(\vec{x},t)=\psi^*(\vec{x},t)\psi(\vec{x},t) \quad ------$$

$$\vec{j}_0(\vec{x},t)=\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\vec{x},t)\nabla\psi(\vec{x},t)-\psi(\vec{x},t)\nabla\psi^*(\vec{x},t)]$$

则
$$\frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t}+\int d^3x'\{\delta(\vec{x}-\vec{x}')\nabla\cdot\vec{j}_0(\vec{x}',t)$$

$$-\frac{i}{\hbar}[\psi^*(\vec{x},t)V(\vec{x},\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)-\psi(\vec{x},t)V^*(\vec{x},\vec{x}')\cdot$$

$$\psi^*(\vec{x}',t)]\} \quad ------ \qquad (9)$$

上式{ }中第二项是非定域的，不能用空间一个点的波函数的值来表示。

2、一维定态问题

1. 对于无限深势井中运动的粒子，证明

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

并证明当 $n\longrightarrow\infty$，上述结果与经典结论一致。

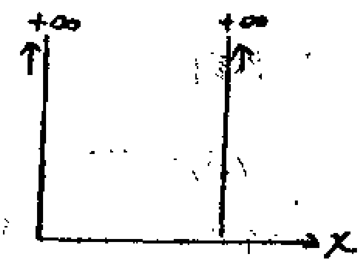


图 1

证：设粒子处于第 n 个本征态，其本征函数为：$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

$$\therefore \bar{x}=\int_0^a x\cdot|\psi_n|^2dx$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^a\frac{1}{2}x\cdot\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)dx$$

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

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

$$=\int_0^a x^2|\psi_n|^2dx-\frac{a^2}{4}$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^a x^2\cdot\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)dx-\frac{a^2}{4}$$

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

在经典情况下，在区域（0, a）中粒子处于 dx 范围中的几率为 $\frac{dx}{a}$

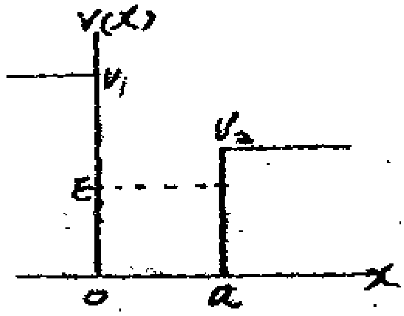
$$\therefore\quad \bar{x}=\int_0^a x\cdot\frac{dx}{a}=\frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2}=\int_0^a x^2\cdot\frac{dx}{a}=\frac{a^2}{3}$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2}=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{4}=\frac{a^2}{12}$$

∴ 当 $n\longrightarrow\infty$，量子力学的结果与经典的一致。

2、试求在不对称势井（图2）中的粒子的能级与波函数。



解：仅讨论分立能级的情形，

即 $E < V_2$

这时，薛定谔方程可表为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}\psi$$

考虑到 $x\longrightarrow\pm\infty$，$\psi\longrightarrow 0$。我们有解：

$$\psi=\begin{cases} A_1e^{k_1x} & x<0 \quad k_1=\frac{\sqrt{2m(V_1-E)}}{\hbar} \\ A\sin(kx+\delta) & 0<x<a \quad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ A_2e^{-k_2x} & a<x \quad k_2=\frac{\sqrt{2m(V_2-E)}}{\hbar} \end{cases}$$

由 $\frac{d\ln\psi}{dx}$ 在 $x=0$，a 处连续条件，得出

$$k_1=k\,\mathrm{ctg}\,\delta \tag{1}$$

$$k_2=-k\,\mathrm{ctg}(ka+\delta)$$

由(1)式得：$\sin\delta=\hbar k/\sqrt{2mV_1}$

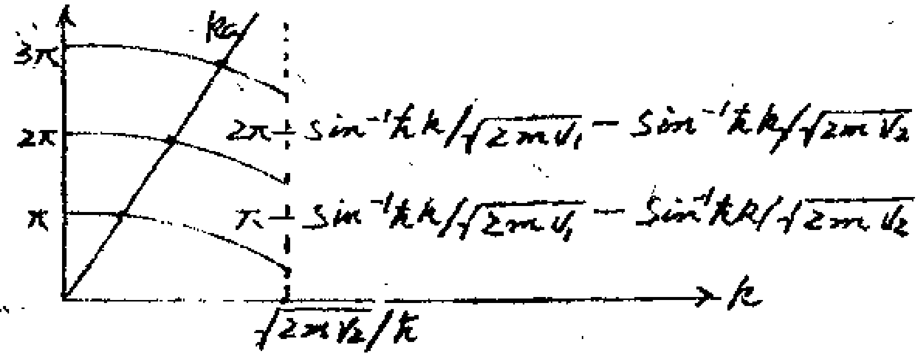
$\sin(ka+\delta)=-\hbar k/\sqrt{2mV_2}$

$$\therefore\quad ka=n\pi-\sin^{-1}\hbar k/\sqrt{2mV_1}-\sin^{-1}\hbar k/\sqrt{2mV_2} \tag{2}$$

其中 $n=1,2,3,\cdots\cdots$

一般而言，给定一个 n 值，有一个解 k_n，相应于有一能级

$E_n=\hbar^2k_n^2/2m$　（如图3所示）



（图 3）

当 $V_2\neq V_1$ 时，并不是任何条件下都有束缚态。由（2）式可知仅当：

$$a\sqrt{2mV_2}/\hbar\geq\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\sqrt{V_2/V_1} \tag{3}$$

时，才有束缚态

所以，当 V_1，V_2 给定，仅当

$$a\geq\frac{\hbar}{\sqrt{2mV_2}}\left(\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}\right)\quad\cdots \tag{4}$$

时，才有束缚态。

当 V_1，V_2，a 给定，由(2)式可求出 k_n（如有第 n 个解的话）则相应能量为

$$E_n=\hbar^2k_n^2/2m$$

而相应的波函数为

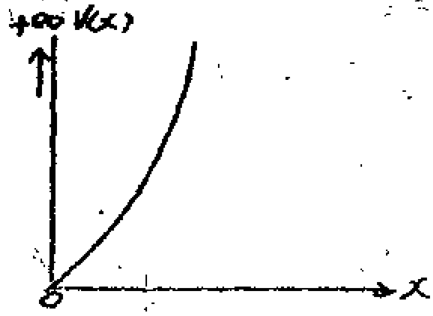
$$\psi=\begin{cases}A_n\hbar k_n/\sqrt{2mV_1}\,e^{k_{1n}x} & x<0\quad k_{1n}=\sqrt{2m(V_1-E)}/\hbar\\ A_n\sin(k_nx+\delta_n) & 0<x<a\\ A_n(-1)^{n-1}\hbar k_n/\sqrt{2mV_2}\,e^{-k_{2n}(x-a)} & a<x\quad k_{2n}=\sqrt{2m(V_2-E)}/\hbar\end{cases}$$

其中 $A_n=\sqrt{2/(a+1/k_{1n}+1/k_{2n})}$

3、设质量为m的粒子在下列势井中运动

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

求粒子的能级


(图 4)

解：由薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

得
$$\psi(x)=0 \qquad x<0 \text{---} \qquad (1)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x)=E\psi(x) \qquad x>0 \text{---} \qquad (2)$$

令 $\frac{m\omega}{\hbar}=\frac{1}{l^2}$. $\rho=x/l$. $\lambda=l^2\frac{2mE}{\hbar^2}=E/(\frac{1}{2}\hbar\omega)$

代入(2)式：

$$\psi''(\rho)-\rho^2\psi(\rho)+\lambda\psi(\rho)=0 \text{-----} \qquad (3)$$

由边界条件：$\rho\longrightarrow+\infty$ $\psi(\rho)\longrightarrow 0$，可令

$$\psi(\rho)=Ae^{-\frac{1}{2}\rho^2}H(\rho) \text{-----} \qquad (4)$$

将(4)式代入(3)式得：

$$H''(\rho)-2\rho H'(\rho)+(\lambda-1)H(\rho)=0 \text{----} \qquad (5)$$

这即为厄密多项式所满足的微分方程。

（要保证$\rho\to+\infty$，$\psi(\rho)\to 0$，则必须$\lambda=2n+1$）

于是方程(1)的解为

$$\psi_n(\rho)=A_ne^{-\frac{1}{2}\rho^2}H_n(\rho) \text{-----} \qquad (6)$$

相应能量为 $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

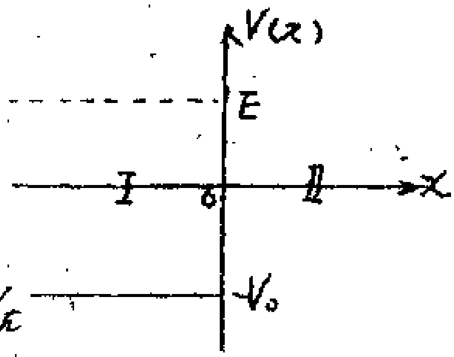
又据，在$x=0$的边界条件，$\psi_n(0)=0$，所以n只能取奇数。

所以，其能级可表为

$$E_n=(2m+3/2)\hbar\omega \qquad m=0,1,2,\cdots\cdots \qquad 7$$

4. 设粒子$(E>0)$在下列势井壁$(x=0)$处的反射系数(图5)

$$V(x)=\begin{cases}-V_0\,, & x<0\\ 0\,, & x>0\end{cases}$$



（图 5）

解：在区域Ⅰ有入射波和反射波，
在区域Ⅱ仅有透射波，

∴ $\psi_{I}=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$ $\quad k_1=\sqrt{2m(V_0+E)}/\hbar$

$\psi_{II}=Ce^{ik_2x}$ $\quad k_2=\sqrt{2mE}/\hbar$

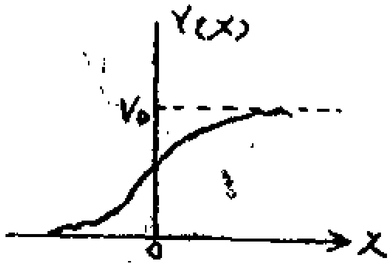
由 ψ,ψ' 在 $x=0$ 处连续，即得

$$R=\frac{B^2}{A^2}=\frac{\left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)^2}{\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)^2}$$

$$=\frac{V_0^2}{\left(\sqrt{V_0+E}+\sqrt{E}\right)^4}$$

$$=\begin{cases}V_0^2/(16E^2) & E\gg V_0\\ 1-4\sqrt{E/V_0} & E\ll V_0\end{cases}$$

5、试证明，对于任意势垒（图6），粒子的反射系数 R 及透射系数 D 满足 $R+D=1$（取 $E>V_0$）



（图 6）

证：不妨设粒子从左向右运动，
所以在 $x\to-\infty$ 的渐近形式为

$\psi(x)=e^{ikx}+Ae^{-ikx}$ $\quad k=\sqrt{2mE}/\hbar$

而在 $x\to+\infty$ 的渐近形式为

$\psi(x)=Be^{ik_1x}$ $\quad k_1=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

根据几率流密度守恒（对于 $V(x)$ 为实势）

∴ $\frac{k}{m}-\frac{k}{m}|A|^2=\frac{k_1}{m}|B|^2$

而反射系数 $R=\frac{k}{m}|A|^2/\left(\frac{k}{m}\right)$

透射系数 $D=\frac{k_1}{m}|B|^2/\left(\frac{k}{m}\right)$

∴ $R+D=1$

6. 设粒子处于范围在 $[0,a]$ 的一维无限深势中，状态用波函数 $\psi(x)=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}$ 描述，求粒子能量的可能测量值及相应的几率。

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

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

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

$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}\right)\quad\cdots\quad(1)$$

而无限深势井（宽度为 a）的本征函数为

$$\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

相应能量

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

∴ 由(1)式即知，处于 $\psi(x)$ 态的粒子~~其可能测量~~可能测量值为：

$E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ 和 $E_3=\frac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$，几率分别为 1/2。

解2：在无限深势井中，粒子的能量本征态

$$\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad n=1,2,3,\cdots$$

$$\therefore\quad a_n=\int_0^a\varphi_n^*(x)\psi(x)\,dx$$

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

$$=\frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a\left[\cos\frac{(n-1)\pi x}{a}-\cos\frac{(n+1)\pi x}{a}\right]\left[1+\cos\frac{2\pi x}{a}\right]dx$$

$$=\sqrt{2}\,\delta_{n1}+\frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a\left[\cos\frac{(n-1)\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}-\cos\frac{(n+1)\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}\right]dx$$

$$=\sqrt{2}\,\delta_{n1}+\frac{\sqrt{2}}{2a}\int_0^a\left[\cos\frac{(n-3)\pi x}{a}+\cos\frac{(n+1)\pi x}{a}-\cos\frac{(n-1)\pi x}{a}-\cos\frac{(n+3)\pi x}{a}\right]dx$$

$$=\sqrt{2}\,\delta_{n1}+\frac{\sqrt{2}}{2}\delta_{n3}-\frac{\sqrt{2}}{2}\delta_{n1}$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2}\psi_1 + \frac{\sqrt{2}}{2}\psi_3$$

$$\therefore \quad a_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad a_3 = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

即能量的可能测量值为 $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$，几率为 $\frac{1}{2}$

$E_3 = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$，几率为 $\frac{1}{2}$

7. 一维谐振子处于基态，求它的 $\overline{\Delta x^2}$ 及 $\overline{\Delta p_x^2}$，並验证测不准关系。

解：由一维谐振子波函数的递推关系

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

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

其中 $\alpha = (m\omega_0/\hbar)^{1/2}$

则 $x\psi_0(x) = \frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1(x)$

$$x^2\psi_0(x) = \frac{1}{2\alpha^2}\left[\psi_0 + \sqrt{2}\psi_2\right]$$

于是 $\bar{x} = 0$，$\overline{x^2} = \frac{1}{2\alpha^2}$ ------ (1)

又由一维谐振子波函数与导数之间的关系：

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

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

则 $-i\hbar\frac{d}{dx}\psi_0(x) = -i\hbar\alpha\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1(x)$

$$-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\psi_0(x) = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}\psi_0 - \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}\sqrt{2}\psi_2$$

于是 $\bar{p}_x = 0$，$\overline{p_x^2} = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}$

而 $\sqrt{\overline{\Delta x^2}\cdot\overline{\Delta p_x^2}} = \sqrt{\overline{x^2}\cdot\overline{p_x^2}} = \hbar/2$。符合测不准关系

8、设粒子处于无限深势井中，状态用波函数 $\psi(x) = Ax(x-a)$ 描述，$A = \sqrt{30}\,a^{-\frac{5}{2}}$ 是归一化常数。

(1) 粒子取不同能量的几率分布 W_n，$W_1=$？

(2) 能量平均值及涨落。

解：粒子处于能量为 E_n 的几率为

$$W_n=|c_n|^2=\left|\int_0^a \varphi_n^*(x)\psi(x)dx\right|^2$$

由 $\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad n=1,2,3\cdots\cdots$

即得 $\quad W_n=\frac{240}{(n\pi)^6}\left[1-(-1)^n\right]^2$

$$W_1=\frac{960}{\pi^6}$$

而能量平均值

$$\overline{E}=\sum_{n=1}^{\infty}W_nE_n$$

$$=\frac{240\hbar^2}{2m\pi^4a^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^4}\left(1-(-1)^n\right)^2$$

$$=\frac{960\hbar^2}{2m\pi^4a^2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)^4}$$

$$=5\hbar^2/(ma^2)$$

而能量涨落

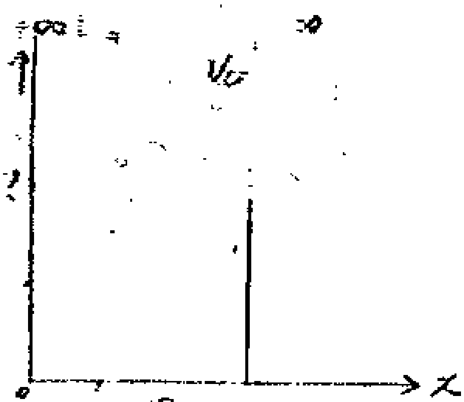
$$\overline{\Delta E}=\sqrt{\overline{E^2}-\overline{E}^2}$$

$$=\sqrt{\sum_{n=1}^{\infty}W_nE_n^2-(5\hbar^2/ma^2)^2}$$

$$=\sqrt{\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)^2\cdot\frac{960}{\pi^6}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)^2}-\left(\frac{5\hbar^2}{ma^2}\right)^2}$$

$$=\sqrt{5}\cdot\frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

9、一维无限深势井中，处于 $\psi_n(x)$ 态的粒子的动量分布几率 $|\phi(p)|^2$？



（图 7）

解：$\phi_n(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_0^a e^{-ipx/\hbar}\psi_n(x)dx$

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

即得：

$$\Phi_n(p)=2n\sqrt{\frac{\pi a}{\hbar}}\cdot\frac{e^{-ipa/(2\hbar)}}{(n\pi)^2-(pa/\hbar)^2}\cdot\begin{cases} i\sin\frac{pa}{(2\hbar)} & n\text{ 偶}\\ \cos pa/(2\hbar) & n\text{ 奇}\end{cases}$$

∴ 处于 $\psi_n(x)$ 态的粒子的动量分布几率为

$$|\Phi_n(p)|^2=\frac{4n^2\pi a}{\hbar}\cdot\frac{1}{[(n\pi)^2-(pa/\hbar)^2]^2}\cdot\begin{cases}\sin^2 pa/(2\hbar) & n\text{ 偶}\\ \cos^2 pa/(2\hbar) & n\text{ 奇}\end{cases}$$

10. 写出动量表象中一维谐振子的薛定谔方程，并求出动量几率分布。

证：对于定域位势，薛定谔方程可表为

$$\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\Phi_n(p)=E_n\Phi_n(p)$$

其中 $\Phi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-ipx/\hbar}\psi_n(x)\,dx$.

$\psi_n(x)$ 为坐标表象中一维谐振子薛定谔方程的第 n 个本征态。

$$\therefore\quad \left(-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{d^2}{dp^2}+\frac{1}{2m}p^2\right)\Phi_n(p)=E_n\Phi_n(p)$$

令 $\alpha^2=1/(m\omega\hbar)$

于是即得

$$\Phi_n(p)=\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}\cdot 2^n\cdot n!}\right)^{1/2}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2p^2}H_n(\alpha p)$$

$$=\left[\frac{1}{\pi^{1/2}\cdot 2^n\cdot n!(m\hbar\omega)^{1/2}}\right]^{1/2}\cdot e^{-p^2/(2m\hbar\omega)}H_n(p/\sqrt{m\hbar\omega})$$

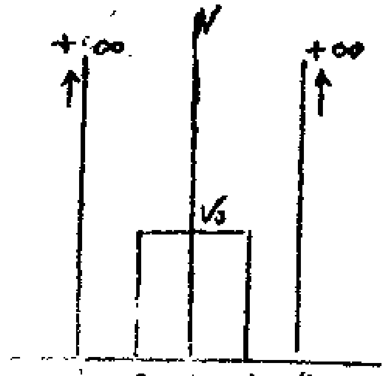
∴ 第 n 个态的动量几率分布为

$$|\Phi_n(p)|^2=\frac{1}{2^n\cdot n!\cdot\sqrt{\pi m\hbar\omega}}\,e^{-p^2/(m\hbar\omega)}H_n^2(p/\sqrt{m\hbar\omega})$$

$$n=0,1,2,\cdots\cdots$$

11. 设粒子处于对称的双方势井中

$$V(x)=\begin{cases}\infty & |x|>b\\ 0 & a\le|x|\le b\\ V_0 & |x|<a\end{cases}$$



（图 8）

(1) 在 $V_0\to\infty$ 的情况下，证明粒子能级为双重简并。

(2) 当 V_0 很大，但有限的情况下，证明简并消失（由于隧道效应）

(3) 写出上述情况下的能级

解：(1) $V_0\to\infty$ 情况

由于 $V(x)$ 是对称的，所以其本征解可只有确定宇称

(a) 偶宇称解：讨论 $x>0$ 的波函数

$$u(x)=\begin{cases}0 & a<x<a\\ A\sin k(x-b) & a<x<b\end{cases}\qquad k=\sqrt{2mE}/\hbar$$

由 $x=a$ 的连接条件，得 $k=\frac{n\pi}{b-a}$　　$(n=1,2\cdots\cdots)$

$$\therefore\quad E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{b-a}\right)^2$$

相应波函数为

$$u(x)=\begin{cases}0 & b<x\\ A\sin k(x-b) & a<x<b\\ 0 & -a<x<b\\ -A\sin k(x+b) & -b<x<-a\\ 0 & x<-b\end{cases}$$

A 由归一化条件确定。

(b) 奇宇称解：讨论 $x>0$ 的波函数

$$u(x)=\begin{cases}0 & 0<x<a\\ A\sin k(x-b) & a<x<b\end{cases}\qquad k=\sqrt{2mE}/\hbar$$

由 $x=a$ 的连接条件，得：$k=\frac{n\pi}{b-a}$

$\therefore\ E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{b-a}\right)^2$，与偶宇称情况相同，但相应波函数为：

$$u(x)=\begin{cases} 0 & b<x \\ A\sin k(x-b) & a<x<b \\ 0 & -a<x<a \\ A\sin k(x+b) & -b<x<-a \\ 0 & x<-b \end{cases}$$

偶字称解与奇字称解是线性无关的。因此，一个能级可相应二个线性无关解。

所以，$V_0\longrightarrow+\infty$ 时，能级是二重简并。

(2) V_0 有限时的情况

(i) $V_0>E$ 时。

ⓐ 偶字称解：在 $x>0$ 的区域有

$$u(x)=\begin{cases} A\,ch\,k_1x & 0<x<a \\ B\sin k(x-b) & a<x<b \end{cases}\qquad k_1=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar,\quad k=\sqrt{2mE}/\hbar$$

由 $x=a$ 的连接条件，得：

$$k\,ctg\,k(a-b)=k_1\,th\,k_1a$$

由这可确定本征值 E。

而相应波函数为

$$u(x)=\begin{cases} 0 & x>b \\ B\sin k(x-b) & b>x>a \\ A\,ch\,k_1x & a>x>-a \\ -B\sin k(x+b) & -a>x>-b \\ 0 & -b>x \end{cases}$$

ⓑ 奇字称解：$x>0$ 的区域有

$$u(x)=\begin{cases} A\,sh\,k_1x & 0<x<a \\ B\sin k(x-b) & a<x<b \end{cases}$$

由 $x=a$ 的连接条件，得：

$$k\,ctg\,k(a-b)=k_1\,cth\,k_1a$$

由这可确定本征值 E，而相应波函数为：

$$
u(x)=\begin{cases} 0 & x>b \\ B\sin k(x-b) & b>x>a \\ A\sin k_1 x & a>x>-a \\ B\sin k(x-b) & -a>x>-b \\ 0 & -b>x \end{cases}
$$

显然，奇宇称的能量本征值和偶宇称的能量本征值不相等。因此，简併消失。

(ii) $V_0<E$时

ⓐ偶宇称解：$x>0$的区域有

$$
u(x)=\begin{cases} A\cos k_1 x & a<x<a \\ B\sin k(x-b) & a<x<b \end{cases} \qquad \begin{aligned} k_1&=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \\ k&=\sqrt{2mE}/\hbar \end{aligned}
$$

由$x=a$处的连接条件，得：

$$
k\,\mathrm{ctg}\,k(a-b)=-k_1\,\mathrm{tg}\,k_1 a
$$

由此可确定能量本征值，而相应本征函数为：

$$
u(x)=\begin{cases} 0 & x>b \\ B\sin k(x-b) & b>x>a \\ A\cos k_1 x & a>x>-a \\ -B\sin k(x+b) & -a>x>-b \\ 0 & -b>x \end{cases}
$$

ⓑ奇宇称解：在$x>0$的区域有：

$$
u(x)=\begin{cases} A\sin k_1 x & 0<x<a \\ B\sin k(x-b) & a<x<b \end{cases}
$$

由 $x=a$处的连接条件，得：

$$
k\,\mathrm{ctg}\,k(a-b)=k_1\,\mathrm{ctg}\,k_1 a
$$

由此可确定能量本征值，而相应的本征函数为

$$
u(x)=\begin{cases} 0 & x>b \\ B\sin k(x-b) & b>x>a \\ A\sin k_1 x & a>x>-a \\ B\sin k(x+b) & -a>x>-b \\ 0 & -b>x \end{cases}
$$

奇宇称态和偶宇称态的本征值显然不同，因此，简并消失。

(3) 当 $V_0 \to \infty$ 时，相应能级 $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(a-b)^2}$

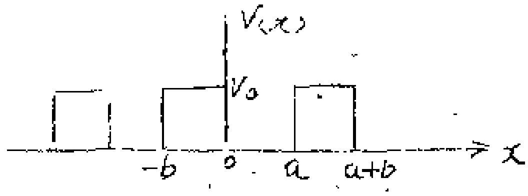
当 V_0 有限时，相应能级由：

$$\begin{cases} k^2 + k_1^2 = 2mV_0/\hbar^2 & E < V_0 \\ k\,ctg\,k(a-b) = -k_1\,cth\,k_1 a \quad \text{or} \quad k\,ctg\,k(a-b) = k_1\,th\,k_1 a \end{cases}$$

或 $$\begin{cases} k^2 - k_1^2 = 2mV_0/\hbar^2 & E > V_0 \\ k\,ctg\,k(a-b) = k_1\,ctg\,k_1 a \quad \text{or} \quad k\,ctg\,k(a-b) = -k_1\,tg\,k_1 a \end{cases}$$

所确定

12. 设粒子在下列周期场 $V(x)$ 中运动(图9)，求它的能带（分 $E>V_0$ 及 $E<V_0$ 两种情况）



解：周期为 $a+b$

所以，根据 Bloch 定理

$u(x) = e^{ik(a+b)}\,u(x-a-b)$ ---(1) （图9）

$a \le x \le 2a+b$

由薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x) + V(x)u(x) = E\,u(x) \quad ---(2)$$

当 $E > V_0$ 时：有解

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{ik_0 x} + Be^{-ik_0 x} & 0<x<a & k_0 = \sqrt{2mE}/\hbar \\ Ce^{ik_1 x} + De^{-ik_1 x} & -b<x<0 & k_1 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \end{cases}$$

由 $x=0$ 处的连续条件，有

$$C = \frac{1}{2}\left[(1+k_0/k_1)A + (1-k_0/k_1)B\right]$$
$$D = \frac{1}{2}\left[(1-k_0/k_1)A + (1+k_0/k_1)B\right] \qquad (3)$$

由 $x=a$ 处的连续条件：

$u(a-0) = u(a+0)$

$u'(a-0) = u'(a+0)$

得 $Ae^{ik_0a}+Be^{-ik_0a}=e^{ik(a+b)}(Ce^{-ik_1b}+De^{ik_1b})$

$$k_0(Ae^{ik_0a}-Be^{-ik_0a})=k_1e^{ik(a+b)}(Ce^{-ik_1b}-De^{ik_1b}) \tag{4}$$

将(3)代(4)得

$$\left\{e^{ik_0a}-e^{ik(a+b)}\frac{1}{2}\left[(1+\frac{k_0}{k_1})e^{-ik_1b}+(1-\frac{k_0}{k_1})e^{ik_1b}\right]\right\}A$$

$$+\left\{e^{-ik_0a}-e^{ik(a+b)}\frac{1}{2}\left[(1-\frac{k_0}{k_1})e^{-ik_1b}+(1+\frac{k_0}{k_1})e^{ik_1b}\right]\right\}B=0$$

$$\left\{k_0e^{ik_0a}-e^{ik(a+b)}\frac{1}{2}\left[(k_1+k_0)e^{-ik_1b}-(k_1-k_0)e^{ik_1b}\right]\right\}A$$

$$-\left\{k_0e^{-ik_0a}+e^{ik(a+b)}\frac{1}{2}\left[(k_1-k_0)e^{-ik_1b}-(k_1+k_0)e^{ik_1b}\right]\right\}B=0$$

要有解(A, B 不全为 0),则系数行列式为 0,于是得:

$$(k_0+k_1)^2\cos(k_1b+k_0a)-(k_0-k_1)^2\cos(k_0a-k_1b)$$

$$=4k_0k_1\cos k(a+b) \tag{5}$$

于是有,E 的可取值范围为:

$$-1\leq\cos k_0a\cdot\cos k_1b\,\frac{k_0^2+k_1^2}{2k_0k_1}\sin k_0a\cdot\sin k_1b\leq 1 \tag{6}$$

当 $E<V_0$ 时, $k_1=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar=i\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar=ik_2$

代入(5)式,得:

$$\cos k_0a\cdot chk_2b-(k_0^2-k_2^2)\sin k_0a\cdot shk_2b/2k_0k_2=\cos k(a+b) \tag{7}$$

这时 E 的可取值范围为:

$$-1\leq\cos k_0a\cdot chk_2b-\frac{k_0^2-k_2^2}{2k_0k_2}\sin k_0a\cdot shk_2b\leq 1 \tag{8}$$

可以容易求得,当 $b\to 0$, $V_0\to\infty$,但保持 bV_0 一常数

$\triangleq \Omega\hbar^2/m$ (Ω 无量纲)即 $\frac{k_2^2b}{2}=\Omega$(常数),

则上述周期场——→Dirac 梳,而能级就由下式决定:

$$\cos k_0a+\frac{\Omega}{k_0}\sin k_0a=\cos ka \tag{9}$$

13. 设粒子在周期场 $V(x)=V_0\cos bx$ 运动,写出它在 P 表象中薛定谔方程。

解：由p表象中薛定谔方程的微分形式：

$$\left[\frac{p^2}{2m}+V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\right]\Phi(p)=E\Phi(p)$$

易得

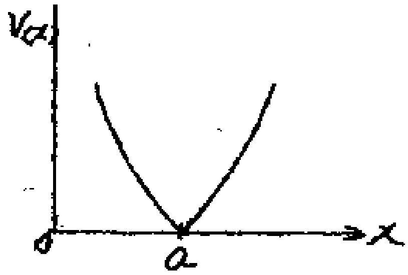
$$\left[\frac{p^2}{2m}+\frac{V_0}{2}(e^{b\hbar\frac{\partial}{\partial p}}+e^{-b\hbar\frac{\partial}{\partial p}})\right]\Phi(p)=E\Phi(p)$$

14、设势场 $V(x)=V_0(\frac{a}{x}-\frac{x}{a})^2$，$(a,x>0)$（图10）

求粒子能级与波函数，证明其能谱与谐振子相似。

解：由薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V_0(\frac{a}{x}-\frac{x}{a})^2\psi=E\psi$$



（图10）

令 $k_0^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$，$k^2=\frac{2mEa^2}{\hbar^2}$

$\eta=(\frac{x}{a})^2$

于是方程变换为：

$$\psi''(\eta)+\frac{1}{2\eta}\psi'(\eta)-k_0^2\frac{(1-\eta)^2}{4\eta^2}\psi(\eta)+\frac{k^2}{4\eta}\psi(\eta)=0 \qquad (1)$$

当 $\eta\to+\infty$ $(x\to+\infty)$，$\psi(\eta)$有渐近形式 $e^{-\frac{k_0}{2}\eta}$

∴令 $\psi(\eta)=Ae^{-\frac{k_0}{2}\eta}W(\eta)$ (2)

代入(1)式得：

$$W''(\eta)+(\frac{1}{2\eta}-k_0)W'(\eta)+(\frac{k^2+2k_0^2-k_0}{4\eta}-\frac{k_0^2}{4\eta^2})W(\eta)=0 \qquad (3)$$

当 $\eta\to0$，$\psi(\eta)\to0$ 即 $W(\eta)\to0$

∴令 $W=\eta^sR(\eta)$

代入(3)式得：

$$\eta^sR''(\eta)+(2s\eta^{s-1}+\frac{1}{2}\eta^{s-1}-k_0\eta^s)R'(\eta)+$$

$$+\left[s(s-1)\eta^{s-2}+\frac{s}{2}\eta^{s-2}-\frac{k_0^2}{4}\eta^{s-2}+(\frac{k^2+2k_0^2-k_0}{4}-k_0s)\eta^{s-1}\right]R(\eta)=0$$

---------------------------------(4)

∴ $\eta^2R''(\eta)+(2s+\frac{1}{2}-k_0\eta)\eta R'(\eta)+$

$+\left[s(s-1)+\frac{s}{2}-\frac{k_0^2}{4}+(\frac{k^2+2k_0^2-k_0}{4}-k_0s)\eta\right]\cdot R(\eta)=0$

所以 $s(s-1)+\frac{s}{2}-\frac{k_0^2}{2}=0$

从而得： $s=(1+\sqrt{1+4k_0^2})/4$ (5)

于是方程简化为：

$$\eta R''(\eta)+(2s+\frac{1}{2}-k_0\eta)R'(\eta)+(\frac{k^2+2k_0^2-k_0}{4}-k_0 s)R(\eta)=0 \qquad (6)$$

令 $Y=k_0\eta$

代入得合流超比函数所满足的微分方程

$$YR''(Y)+(2s+\frac{1}{2}-Y)R'(Y)+\frac{1}{k_0}(\frac{k^2+2k_0^2-k_0}{4}-k_0 s)R(Y)=0$$

要求 $\psi\longrightarrow 0$ （当 $Y\longrightarrow+\infty$）

∴要求 $R(Y)$ 是多项式（否则它趋于 $e^{k_0\eta}$）

于是得： $R(Y)=F(-n,\ 2s+\frac{1}{2},\ Y)$

$$n=\frac{1}{k_0}(\frac{k^2+2k_0^2-k_0}{4}-k_0 s) \qquad n=0,1,2\cdots\cdots$$

∴能级可表为

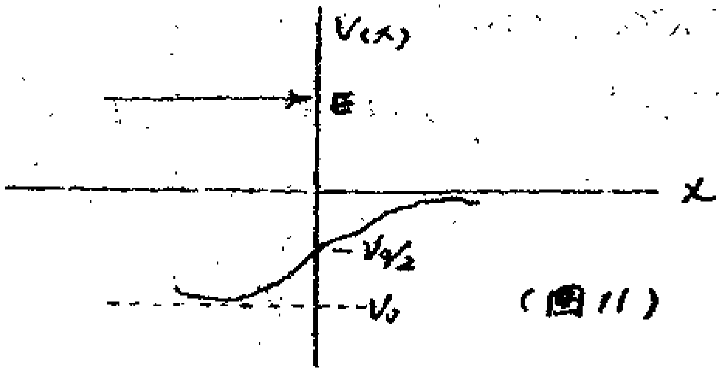
$$E_n=-\frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}\left\{n+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\left(\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}-\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)\right\} \qquad (7)$$

这与谐振子等间隔能级相似

而相应的波函数

$$\psi_n(x)=\left(\frac{x}{a}\right)^{\frac{1+\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}}{2}}\cdot e^{-\sqrt{\frac{mV_0}{2\hbar^2a^2}}x^2}\cdot F\left(-n,\ 1+\frac{1}{2}\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}},\ \sqrt{\frac{2mV_0}{a^2\hbar^2}}x^2\right)$$

15. 设 $V(x)=-\frac{V_0}{1+e^{x/a}}$，求反射系数 R



（图11）

解：根据薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)\quad\cdots\quad(1)$$

令 $\xi=-e^{-x/a}$，则方程(1)变换为：

$$\frac{1}{a^2}\xi^2\psi''(\xi)+\frac{1}{a^2}\xi\psi'(\xi)-\frac{2mV_0\xi}{(1-\xi)\hbar^2}\psi(\xi)=-k^2\psi(\xi)\quad\cdots\quad(2)$$

其中 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$

当 $x\longrightarrow\infty$，ψ 有渐近形式 $Ae^{ikx}\propto\xi^{-ika}$

于是，可令 $\psi(\xi)=A\xi^{-ika}\varphi(\xi)$，$\varphi(\xi)$ 在 $x\longrightarrow\infty$，$\xi\longrightarrow 0$ 时，趋于常数。

代入(2)式得：

$$\xi(1-\xi)\varphi''(\xi)+(1-2ika)(1-\xi)\varphi'(\xi)-(k_1^2-k_0^2)a^2\varphi(\xi)=0\quad(3)$$

其中 $k_1=\sqrt{2m(V_0+E}/\hbar$。

这即为超比函数所满足的微分方程（参见 L.D.Landau and E.M.Lifshitz Quantum Mechanics p.501）

要满足 $\xi\longrightarrow 0$（即 $x\to+\infty$），$\varphi(\xi)\longrightarrow$ 常数的条件的解为（相当于 $\gamma=(1-2ika)$，$\alpha=i(k_1-k)a$，$\beta=-i(k_1+k)a$）

$$\varphi(\xi)=F(i(k_1-k)a,\ -i(k_1+k)a,\ 1-2ika,\ \xi)\quad\cdots\quad(4)$$

为了便于讨论 $x\longrightarrow-\infty$（即 $\xi\longrightarrow-\infty$）时解的行为，

作变换：
$$\varphi(\xi)=\frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(-2ik_1a)}{\Gamma(-i(k_1+k)a)\Gamma(1-i(k_1+k)a)}(-\xi)^{-i(k_1-k)a}\cdot F(i(k_1-k)a,\ i(k_1+k)a,\ 1+2ik_1a,\ 1/\xi)$$

$$+\frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(2ik_1a)}{\Gamma(i(k_1-k)a)\Gamma(1+i(k_1-k)a)}F(-i(k_1+k)a,\ i(k-k_1)a,\ 1-2ik_1a,\ 1/\xi)$$

$\therefore$ 当 $x\longrightarrow-\infty$，即 $\xi\longrightarrow-\infty$ 时：

$$\varphi(\xi)\longrightarrow\xi^{-ika}\left[C_1(-\xi)^{-i(k_1-k)a}+C_2(-\xi)^{i(k_1+k)a}\right]$$

$$=(-1)^{ika}\left[C_1e^{ik_1x}+C_2e^{-ik_1x}\right]$$

而 $$C_1=\frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(-2ik_1a)}{\Gamma(-i(k_1+k)a)\Gamma(1-i(k_1+k)a)}$$

$$C_2=\frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(2ik_1a)}{\Gamma(i(k_1-k)a)\Gamma(1+i(k_1-k)a)}$$

注意到，$\Gamma(x)\Gamma(1-x)=\dfrac{\pi}{\sin\pi x}$，$\Gamma^*(x)=\Gamma(x^*)$

从而可求得反射系数

$$R=\frac{|C_2|^2}{|C_1|^2}=\frac{\mathrm{sh}^2[\pi a(k_1-k)]}{\mathrm{sh}^2[\pi a(k_1+k)]}$$

16、在 p 表象中，求解均匀场 $V(x)=-Fx$ 中粒子的能量本征函数。

解：在 p 表象中薛定谔方程为：

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\varphi(p)=E\varphi(p)$$

∴有方程

$$-i\hbar F\frac{d}{dp}\phi(p)+\frac{p^2}{2m}\phi(p)=E\phi(p)$$

得解：

$$\varphi_E(p)=Ce^{i[Ep-p^3/(6m)]/(\hbar F)}$$

$$C=1/(2\pi\hbar F)^{\frac{1}{2}}$$

17. 粒子处于 δ 势阱中，$V(x)=-V_0\delta(x)$，$(V_0>0)$ 中，用动量表象中的薛定谔方程，求解其束缚态的能量本征值及相应的本征函数。

解：在动量表象中，能量本征方程为：

$$(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m})\Phi(k)=\int dk'V(k-k')\Phi(k') \quad --- \quad (1)$$

$$V(k-k')=\frac{1}{2\pi}\int e^{-i(k-k')x}V(x)dx$$

代 $V(x)=-V_0\delta(x)$，得

$$V(k-k')=-V_0/2\pi$$

(2)式代入(1)式，得p表象中的薛定谔方程

$$\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\Phi(k)=\frac{-V_0}{2\pi}\int dk'\,\Phi(k') \qquad (3)$$

等式两边对k微商，则得

$$\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\Phi'(k)=\frac{\hbar^2k}{m}\Phi(k)$$

从而有解：

$$\Phi(p)=\frac{A}{p^2-2mE}$$

将(4)式代入(3)式，得

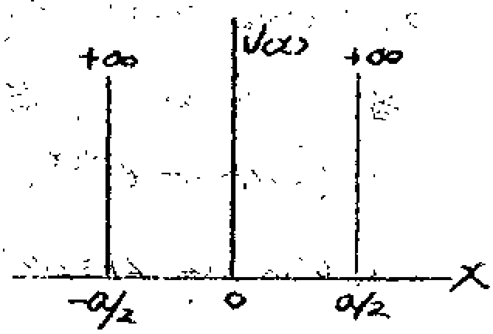
$$E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

相应的波函数为

$$\Phi_E(p)=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(-2mE)^{\frac{3}{4}}\frac{1}{p^2-2mE}$$

18. 设粒子在一维无限深位垒中运动，试求粒子作用于位垒上的平均力。

解：先考虑有限深位垒



$$V(x)=\begin{cases}0 & |x|<\frac{a}{2}\\ V_0 & |x|>\frac{a}{2}\end{cases}$$

∴作用于壁的反作用力为：

$$F(x)=\frac{\partial V}{\partial x}=V_0\left\{-\delta\left(x+\frac{a}{2}\right)+\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\right\}$$ （图 12）

它在$x=\frac{a}{2}$壁上的平均力为

$$\begin{aligned}\bar{F}&=\int V_0\,\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)|\psi(x)|^2dx\\&=V_0|\psi(x)|^2\Big|_{x=\frac{a}{2}}\\&=V_0|\psi(a/2)|^2\end{aligned}$$

而
$$\left|\psi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2=\frac{\sin^2\frac{k_0a}{2}}{\frac{a}{2}+\sin^2\frac{k_0a}{2}\cdot\frac{2mV_0}{k_1k_0^2\hbar^2}} \qquad k_0=\sqrt{2mE}/\hbar,\quad k_1=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$$

$$=\frac{E}{V_0}\cdot\frac{1}{k_1\cdot\frac{a}{2}} \qquad \left(\text{由于}\ \sin^2\frac{k_0a}{2}\approx\frac{E}{V_0}\right)$$

或 $\left|\psi\left(-\frac{a}{2}\right)\right|^2 = \dfrac{\cos^2\frac{k_0a}{2}}{\frac{a}{2}+\cos^2\frac{k_0a}{2}\cdot\frac{2mV_0}{k_1k_0^2\hbar^2}}$

$$= \frac{E}{V_0}\cdot\frac{1}{\frac{1}{k_1}+\frac{a}{2}} \qquad \left(\text{由于 } \cos^2\frac{k_0a}{2}=\frac{E}{V_0}\right)$$

$$\therefore \quad \overline{F} = E\cdot\frac{1}{\frac{1}{k_1}+\frac{a}{2}}$$

当 $V_0 \longrightarrow \infty$ 　则 $\overline{F} = \frac{2E}{a}$

如粒子处于第 n 个态，则

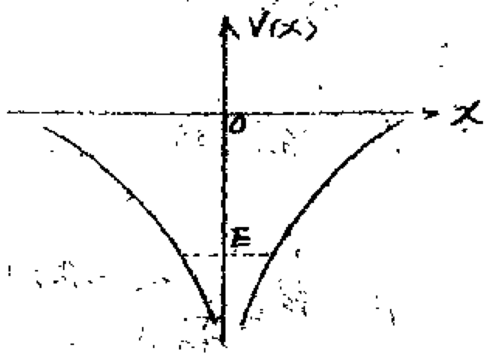
$$\overline{F}_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{m a^3}$$

19. 求解一维氢原子 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{e^2}{|x|}$ 的束缚态

解：由于位势是对称的，所以其解可以具有确定宇称

ⓐ 偶宇称解：在 $x>0$ 的波函数 $\psi(x)$ 满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi - \frac{e^2}{x}\psi = E\psi \quad (E<0) \text{ ---} \qquad (1)$$



(图13)

令 $\psi(x) = x u(x)$，$k = \sqrt{-2mE}/\hbar$

则 $x u''(x) + 2u'(x) + \frac{2me^2}{\hbar^2}u(x) - k^2 x u(x) = 0$ --- (2)

当 $x \longrightarrow +\infty$ 　ψ 有渐近形式 e^{-kx}

$\therefore$ 令 $u(x) = e^{-kx}W(x)$，代入得

$x W''(x) + (2-2kx)W'(x) + \left(\frac{2me^2}{\hbar^2} - 2k\right)W(x) = 0$ --- (3)

令 $Y = 2kx$，代入(3)式，得合流超比函数所满足的方程：

$Y W''(Y) + (2-Y)W'(Y) + \left(\frac{me^2}{k\hbar^2} - 1\right)W(Y) = 0$ --- (4)

求是有在 $x=0$ 处为有限的解

$$W(Y)=CF\left(1-\frac{me^2}{k\hbar^2},\ 2,\ Y\right)$$

由边界条件 $x\to+\infty$，$\psi(x)\to0$，

所以要求 $1-\frac{me^2}{k\hbar^2}=$ 负整数 $=-N$ $\quad N=0,1,2\cdots$

$$\therefore\quad E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}\qquad n=N+1,\ n=1,2,\cdots\qquad(5)$$

相应的波函数为：

$$\psi_n^e(x)=\begin{cases}Cxe^{-\frac{me^2}{n\hbar^2}x}F\left(1-n,2,\frac{2me^2}{n\hbar^2}x\right) & x>0\\ -Cxe^{+\frac{me^2}{n\hbar^2}x}F\left(1-n,2,-\frac{2me^2}{n\hbar^2}x\right) & x<0\end{cases}$$

$$=C|x|\cdot e^{-\frac{me^2}{n\hbar^2}|x|}F\left(1-n,2,+\frac{2me^2}{n\hbar^2}|x|\right)\qquad(6)$$

(b) 奇宇称解：在 $x>0$ 的区域的波函数 $\psi(x)$ 满足：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)-\frac{e^2}{x}\psi(x)=E\psi(x)\qquad(E<0)$$

同样得解：

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}\qquad n=1,2,\cdots$$

相应波函数为：

$$\psi_n^o(x)=\begin{cases}Cxe^{-\frac{me^2}{n\hbar^2}x}F\left(1-n,2,\frac{2me^2}{n\hbar^2}x\right) & x>0\\ Cxe^{\frac{me^2}{n\hbar^2}x}F\left(1-n,2,-\frac{2me^2}{n\hbar^2}x\right) & x<0\end{cases}$$

$$=Cx\cdot e^{-\frac{me^2}{n\hbar^2}|x|}F\left(1-n,2,\frac{2me^2}{n\hbar^2}|x|\right)\cdots\qquad(7)$$

$\therefore$ $\psi_n^o(x)$ 和 $\psi_n^e(x)$ 具有同样能量，但是是线性无关的，

$\therefore$ $E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}$ 的能级都是二重简併。

还必须指出，方程(4)还有另一解，即

$$W(Y)=Y^{-1}\cdot F\left(-\frac{me^2}{k\hbar^2},\ 0,\ Y\right)\qquad(8)$$

（因 $x=0$ 处，位能是奇异的，所以在 $Y=0$ 处正常解的条件并不是必要的）

但此解要有意义，必须 $-\dfrac{me^2}{k\hbar^2}\longrightarrow 0$

∴ 方程还有一解

$$\psi(x)=\lim_{k\to\infty}Ae^{-\frac{me^2}{k\hbar^2}x}$$

由归一化知 $\qquad A=\left(\dfrac{me^2}{k\hbar^2}\right)^{1/2}$

此态对应能量为 $-\infty$，所以是基态，它不简併。

3. 力学量用算符表达

1. 证明：

$$[q,\hat{p}^2f(q)]=2i\hbar\hat{p}f$$

$$[q,\hat{p}f(q)\hat{p}]=i\hbar(f\hat{p}+\hat{p}f)$$

$$[q,f(q)\hat{p}^2]=2i\hbar f\hat{p}$$

$$[\hat{p},\hat{p}^2f(q)]=\frac{\hbar}{i}\hat{p}^2f'$$

$$[\hat{p},\hat{p}f(q)\hat{p}]=\frac{\hbar}{i}\hat{p}f'\hat{p}$$

$$[\hat{p},f\hat{p}^2]=\frac{\hbar}{i}f'\hat{p}^2$$

证：

q 是正则坐标，$\hat{p}$ 是相应的正则动量，则基本对易关系式是：

$$[q,\hat{p}]=i\hbar$$

$$[q,f(q)]=0$$

$$[\hat{p},f(q)]=-i\hbar f'$$

$$[\hat{p},\hat{p}]=0$$

所以容易证明以下等式

(1) $[q, \hat{p}^2 f(q)]$

$= \hat{p}[q, \hat{p} f] + [q \hat{p}] \hat{p} f$

$= \hat{p}\hat{p}[q f] + \hat{p}[q \hat{p}] f + [q \hat{p}] \hat{p} f$

$= 2i\hbar \hat{p} f$

(2) $[q, \hat{p} f(q) \hat{p}]$

$= \hat{p}[q f \hat{p}] + [q \hat{p}] f \hat{p}$

$= \hat{p} f [q, \hat{p}] + \hat{p}[q, f]\hat{p} + i\hbar f \hat{p}$

$= \hat{p} f i\hbar + i\hbar f \hat{p}$

$= i\hbar (f\hat{p} + \hat{p} f)$

(3) $[q, f(q) \hat{p}^2]$

$= f(q)[q \hat{p}^2] + [q f(q)] \hat{p}^2$

$= 2i\hbar f \hat{p}$

(4) $[\hat{p}\ \hat{p}^2 f(q)]$

$= \hat{p}^2[\hat{p} f(q)] + [\hat{p}\ \hat{p}^2] f(q)$

$= -2i\hbar \hat{p}^2 f'(q)$

$= \frac{\hbar}{i} \hat{p}^2 f$

(5) $[\hat{p}, \hat{p} f(q) \hat{p}]$

$= \hat{p}^2 f(q) \hat{p} - \hat{p} f(q) \hat{p}^2$

$= \hat{p}[\hat{p} f(q)] \hat{p}$

$= \frac{\hbar}{i} \hat{p} f' \hat{p}$

(6) $[\hat{p}, f \hat{p}^2]$

$= \hat{p} f \hat{p}^2 - f \hat{p}^3$

$= [\hat{p} f] \hat{p}^2$

$= -i\hbar f' \hat{p}^2$

2. 证明：

$\hat{\vec{l}} \times \vec{r} + \vec{r} \times \hat{\vec{l}} = 2i\hbar \vec{r}$

$\hat{\vec{l}} \times \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{l}} = 2i\hbar \hat{\vec{p}}$

$\hat{\vec{l}}^2 x - x \hat{\vec{l}}^2 = i\hbar ((\vec{r} \times \hat{\vec{l}})_x - (\hat{\vec{l}} \times \vec{r})_x)$

$$\hat{\vec{l}}^2 p_x - p_x \hat{\vec{l}}^2 = i\hbar[(\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{l}})_x - (\hat{\vec{l}}\times\hat{\vec{p}})_x]$$

〔证〕：

从角动量 $\vec{l}$ 的定义及 $[x_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$，可以得到：

$$[\hat{l}_\alpha, x_\beta] = \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, i\hbar x_\gamma$$

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, i\hbar \hat{p}_\gamma$$

其中 $\alpha, \beta, \gamma = (1,2,3)$。$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 是 Levi-Civita 符号，它的定义是：

1° $\epsilon_{123} = 1$

2° $\epsilon_{\alpha\beta\gamma} = -\epsilon_{\beta\alpha\gamma} = -\epsilon_{\alpha\gamma\beta}$

而

$$\vec{l}\times\vec{r} = \underline{i}(\hat{l}_y z - \hat{l}_z y) + \underline{j}(\hat{l}_z x - \hat{l}_x z) + \underline{k}(\hat{l}_x y - \hat{l}_y x)$$

$$\vec{r}\times\vec{l} = \underline{i}(y\hat{l}_z - z\hat{l}_y) + \underline{j}(z\hat{l}_x - x\hat{l}_z) + \underline{k}(x\hat{l}_y - y\hat{l}_x)$$

$$\vec{l}\times\vec{p} = \underline{i}(\hat{l}_y\hat{p}_z - \hat{l}_z\hat{p}_y) + \underline{j}(\hat{l}_z\hat{p}_x - \hat{l}_x\hat{p}_z) + \underline{k}(\hat{l}_x\hat{p}_y - \hat{l}_y\hat{p}_x)$$

$$\vec{p}\times\vec{l} = \underline{i}(\hat{p}_y\hat{l}_z - \hat{p}_z\hat{l}_y) + \underline{j}(\hat{p}_z\hat{l}_x - \hat{p}_x\hat{l}_z) + \underline{k}(\hat{p}_x\hat{l}_y - \hat{p}_y\hat{l}_x)$$

由此可得：

$$\begin{aligned}
\vec{l}\times\vec{r} + \vec{r}\times\vec{l} = {} & \underline{i}[(\hat{l}_y z - z\hat{l}_y) - (\hat{l}_z y - y\hat{l}_z)] + \\
& \underline{j}[(\hat{l}_z x - x\hat{l}_z) - (\hat{l}_x z - z\hat{l}_x)] + \\
& \underline{k}[(\hat{l}_x y - y\hat{l}_x) - (\hat{l}_y x - x\hat{l}_y)] \\
= {} & \underline{i}\, 2i\hbar x + \underline{j}\, 2i\hbar y + \underline{k}\, 2i\hbar z \\
= {} & 2i\hbar\vec{r}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{l}}\times\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{l}} = {} & \underline{i}[(\hat{l}_y\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{l}_y) - (\hat{l}_z\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{l}_z)] \\
& + \underline{j}[(\hat{l}_z\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{l}_z) - (\hat{l}_x\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{l}_x)] \\
& + \underline{k}[(\hat{l}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{l}_x) - (\hat{l}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{l}_y)] \\
= {} & \underline{i}\, 2i\hbar\hat{p}_x + \underline{j}\, 2i\hbar\hat{p}_y + \underline{k}\, 2i\hbar\hat{p}_z = 2i\hbar\hat{\vec{p}}
\end{aligned}$$

$$[\vec{l}^2 x]=[l_x^2+l_y^2+l_z^2, x]$$

$$=[l_x^2 x]+[l_y^2 x]+[l_z^2 x]$$

$$=l_y[l_y x]+[l_y x]l_y+l_z[l_z x]+[l_z x]l_z$$

$$=-i\hbar l_y z-i\hbar z l_y+i\hbar l_z y+i\hbar y l_z$$

$$=i\hbar(y l_z-z l_y)-i\hbar(l_y z-l_z y)$$

$$=i\hbar(\vec{r}\times\vec{l})_x-i\hbar(\vec{l}\times\vec{r})_x$$

同样：$[\vec{l}^2 p_x]=l_y[l_y p_x]+[l_y p_x]l_y+l_z[l_z p_x]+[l_z p_x]l_z$

$$=-i\hbar l_y p_z-i\hbar p_z l_y+i\hbar l_z p_y+i\hbar p_y l_y$$

$$=i\hbar(p_y l_z-p_z l_y)-i\hbar(l_y p_z-l_z p_y)$$

$$=i\hbar(\vec{p}\times\hat{\vec{l}})_x-i\hbar(\vec{l}\times\hat{\vec{p}})_x$$

3、 F为任一力学量，$\hat{\vec{l}}$为角动量。证明

$$[\hat{\vec{l}}F]=-i\hbar\left(\vec{r}\times\frac{\partial}{\partial\vec{r}}F+\frac{\partial F}{\partial\vec{p}}\times\vec{p}\right)$$

其中 $\dfrac{\partial}{\partial\vec{r}}=\dfrac{\partial}{\partial x}\vec{i}+\dfrac{\partial}{\partial y}\vec{j}+\dfrac{\partial}{\partial z}\vec{k}$

$$\frac{\partial}{\partial\vec{p}}=\frac{\partial}{\partial p_x}\vec{i}+\frac{\partial}{\partial p_y}\vec{j}+\frac{\partial}{\partial p_z}\vec{k}$$

证：

$$[\hat{\vec{l}},F]=\vec{i}[\hat{l}_x F]+\vec{j}[\hat{l}_y F]+\vec{k}[\hat{l}_z F]$$

$$[\hat{l}_x,F]=[y\hat{p}_z-z\hat{p}_y, F]$$

$$=[y\hat{p}_z,F]-[z\hat{p}_y,F]$$

$$=y[\hat{p}_z,F]+[y,F]\hat{p}_z-z[\hat{p}_y,F]-[z,F]\hat{p}_y$$

$$=-i\hbar y\frac{\partial F}{\partial z}+i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_y}\hat{p}_z+i\hbar z\frac{\partial F}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_z}\hat{p}_y$$

$$=-i\hbar\left(y\frac{\partial F}{\partial z}-z\frac{\partial F}{\partial y}\right)-i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial p_z}\hat{p}_y-\frac{\partial F}{\partial p_y}\hat{p}_z\right)$$

$$=-i\hbar\left[\left(\vec{r}\times\frac{\partial}{\partial\vec{r}}F\right)_x+\left(\frac{\partial F}{\partial\vec{p}}\times\vec{p}\right)_x\right]$$

同理可得：

$$[\hat{l}_y F] = i\hbar\{(\vec{r}\times\frac{\partial}{\partial\vec{r}}F)_y + (\frac{\partial F}{\partial\vec{p}}\times\vec{p})_y$$

$$[l_z F] = -i\hbar\{(\vec{r}\times\frac{\partial}{\partial\vec{r}}F)_z + (\frac{\partial F}{\partial\vec{p}}\times\vec{p})_z$$

所以上式得证。

4. 设算符 $\hat{A},\hat{B}$ 与它们的对易式 $[\hat{A},\hat{B}]$ 都对易，

则 $$[\hat{A}\ \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$$

$$[\hat{A}^n\ \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$$

[证]：用数学归纳法证明。

$n=1$ 时，显然成立。

若 $n=k$ 时成立，则 $n=k+1$ 时为：

$$[\hat{A}\hat{B}^{k+1}] = \hat{B}[\hat{A}\ \hat{B}^k] + [\hat{A}\ \hat{B}]\hat{B}^k$$

$$= \hat{B}k\hat{B}^{k-1}[\hat{A}\ \hat{B}] + \hat{B}^k[\hat{A},\hat{B}]$$

$$= (k+1)\hat{B}^k[\hat{A}\ \hat{B}].$$

$$[\hat{A}^{k+1}\ \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}^k\ \hat{B}] + [\hat{A}\ \hat{B}]\hat{A}^k$$

$$= \hat{A}k\hat{A}^{k-1}[\hat{A}\ \hat{B}] + \hat{A}^k[\hat{A},\hat{B}]$$

$$= (k+1)\hat{A}^k[\hat{A},\hat{B}]$$

所以上两式成立

5. 证明：$$[\hat{A}\ \hat{B}^n] = \sum_{s=0}^{n-1}\hat{B}^s[\hat{A}\ \hat{B}]\hat{B}^{n-s-1}$$

并由此证明：$[q,\hat{p}^n] = ni\hbar\hat{p}^{n-1}$

$q,\hat{p}$ 是一维体系的坐标及相应的正则动量

[证]：用数学归纳法证明。

$n=1$ 时，显然成立。

若 $n=k$ 时成立，即

$$[\hat{A}\ \hat{B}^k] = \sum_{s=0}^{k-1}\hat{B}^s[\hat{A}\ \hat{B}]\hat{B}^{k-s-1}$$

则 $n=k+1$ 时，

$$
\begin{aligned}
[\hat{A}\ \hat{B}^{k+1}] &= \hat{B}[\hat{A}\ \hat{B}^{k}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^{k} \\
&= \sum_{s=0}^{k-1}\hat{B}\hat{B}^{s}[\hat{A}\hat{B}]\hat{B}^{k-s-1}+\hat{B}^{0}[\hat{A}\hat{B}]\hat{B}^{k} \\
&= \sum_{s=0}^{k-1}\hat{B}^{s+1}[\hat{A}\hat{B}]\hat{B}^{k-(s+1)}+\hat{B}^{0}[\hat{A}\hat{B}]\hat{B}^{k} \\
&= \sum_{s=1}^{k}\hat{B}^{s}[\hat{A}\ \hat{B}]\hat{B}^{k-s}+\hat{B}^{0}[\hat{A}\hat{B}]\hat{B}^{k} \\
&= \sum_{s=0}^{k}\hat{B}^{s}[\hat{A}\hat{B}]^{k-s} \\
&= \sum_{s=0}^{(k+1)-1}\hat{B}^{s}[\hat{A}\hat{B}]^{(k+1)-s-1}
\end{aligned}
$$

所以上式成立。

$$
\begin{aligned}
[\hat{x}\ \hat{p}^{n}] &= \sum_{s=0}^{n-1}\hat{p}^{s}[\hat{x}\hat{p}]\hat{p}^{n-s-1} \\
&= \sum_{s=0}^{n-1}\hat{p}^{s}i\hbar\hat{p}^{n-s-1} \\
&= i\hbar\hat{p}^{n-1}\sum_{s=0}^{n-1} \\
&= i\hbar n\hat{p}^{n-1}
\end{aligned}
$$

6、证明：$i(\hat{p}_x^2x-x\hat{p}_x^2)$ 是厄米算符。

〔证〕：

$$
\begin{aligned}
i(\hat{p}_x^2x-x\hat{p}_x^2) &= -i[x,\hat{p}_x^2] \\
&= -i(2i\hbar\hat{p}_x) \\
&= 2\hbar\hat{p}_x
\end{aligned}
$$

而 $\hat{p}_x$ 是厄密算符 $\hat{p}_x^{+}=\hat{p}_x$，所以 $i(\hat{p}_x^2x-x\hat{p}_x^2)$ 是厄密算符。

7、证明 $\hat{p}^{n}$ 是厄密算符，从而证明

$$F(\hat{p})=\sum_{n}A_{n}\hat{p}^{n} \qquad (A_n\text{为实数})$$

也是厄密算符。

〔证〕：$(\hat{p}^{n})^{+}=(\underbrace{\hat{p}\hat{p}\cdots\hat{p}}_{n\text{个}})^{+}$

$$=(\underbrace{\hat{p}^{+}\cdots\hat{p}^{+}\hat{p}^{+}}_{n个})$$
$$=(\hat{p}\cdots\cdots\hat{p}\hat{p})$$
$$=\hat{p}^{n}$$

所以，$\hat{p}^{n}$ 是厄密称符。

$$(F(\hat{p}))^{+}=(\sum_{n}A_{n}\hat{p}^{n})^{+}$$
$$=\sum_{n}A_{n}^{*}(\hat{p}^{n})^{+}$$
$$=\sum_{n}A_{n}\hat{p}^{n}$$
$$=F(\hat{p})$$

所以，$F(\hat{p})$ 是厄密称符。

8. 证明

$$\sum_{n,m=0}^{\infty}A_{n,m}\frac{(\hat{p}^{n}x^{m}+x^{m}\hat{p}^{n})}{2}\qquad(A_{n,m}\text{实数})$$

是厄密称符

〔证〕：

$$(\sum_{n,m=0}^{\infty}A_{n,m}\frac{(\hat{p}^{n}x^{m}+x^{m}\hat{p}^{n})}{2})^{+}$$
$$=\sum_{n,m=0}^{\infty}A_{n,m}^{*}\frac{(\hat{p}^{n}x^{m}+x^{m}\hat{p}^{n})^{+}}{2}$$
$$=\sum_{n,m=0}^{\infty}A_{n,m}\frac{x^{m}\hat{p}^{n}+\hat{p}^{n}x^{m}}{2}$$
$$=\sum_{n,m=0}^{\infty}A_{n,m}\frac{\hat{p}^{n}x^{m}+x^{m}\hat{p}^{n}}{2}$$

所以是厄密称符。

9. 证明：若 $\frac{\partial^{n}}{\partial x^{n}}\psi$，当 $x\longrightarrow\pm$ 时并不趋于 0，则

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1}\text{不一定是厄密称符。}$$

〔证〕：若称符 $\hat{L}$ 是厄密的，则满足

$$\int\varphi\hat{L}\psi dx=\int\psi\hat{L}^{*}\varphi dx$$

现令 $\hat{L}=(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}$

$$\psi^{(n)}=(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n}\psi$$

$$\varphi^{(n)}=(i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n}\varphi$$

则 $\int\varphi(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}\psi dx$

$$=\int\varphi(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n}\psi dx$$

$$=\int\varphi(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi^{(n)})dx$$

$$=-i\hbar\varphi\psi^{(n)}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int\psi^{(n)}(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi)dx$$

$$=-i\hbar\varphi\psi^{(n)}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int\varphi^{(1)}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi^{(n-1)}dx$$

$$=-i\hbar\varphi\psi^{(n)}\Big|_{-\infty}^{\infty}-i\hbar\varphi^{(1)}\psi^{(n-1)}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int\psi^{(n-1)}\varphi^{(2)}dx$$

$$=\cdots\cdots$$

$$=-i\hbar\sum_{s=0}^{n}\varphi^{(s)}\psi^{(n-s)}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int\psi(i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}\varphi dx$$

因为当 $x\to\pm\infty$ 时 $\psi^{(n)}$ 并不趋于 0，所以 $\sum_{s=0}^{n}\varphi^{(s)}\psi^{(n-s)}\neq 0$。

所以 $\int\varphi(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}\psi dx\neq\int\psi(i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}\varphi dx$

因而 $(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}$ 不是厄密标符。

10、证明：
$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{[\hat{A}\hat{B}]}{i\hbar}=\{A\ B\}$$

其中 $A(p,q)$，$B(p,q)$ 是经典正则动量 p 及坐标 q 的函数。上式左边是相应的标符。

[证]：这是证明从量子力学的泊松括号到经典力学的泊松括号。

利用：
$$[q\ \hat{p}^{n}]=ni\hbar\hat{p}^{n-1}$$

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{[q\ \hat{p}^{n}]}{i\hbar}=np^{n-1}$$

这时 p 就是普通的力学量了，它可以与 q 交换。

先证明对于 $\hat{A}=q^m\hat{p}^n$, $\hat{B}=q^k\hat{p}^l$ 时成立.

$$[q^m\hat{p}^n,\ q^k\hat{p}^l]$$

$$=q^m[\hat{p}^n,\ q^k\hat{p}^l]+[q^m,\ q^k\hat{p}^l]\hat{p}^n$$

$$=q^m\{q^k[\hat{p}^n,\hat{p}^l]+[\hat{p}^n,q^k]\hat{p}^l\}+\{q^k[q^m,\hat{p}^l]+[q^m,q^k]\hat{p}^l\}\hat{p}^n$$

$$=q^m[\hat{p}^n,q^k]\hat{p}^l+q^k[q^m,\hat{p}^l]\hat{p}^n$$

$$=-q^m[q^k,\hat{p}^n]\hat{p}^l+q^k[q^m,\hat{p}^l]\hat{p}^n$$

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{[q^k,\hat{p}^n]}{i\hbar}$$

$$=\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}\{q^{k-1}[q,\hat{p}^n]+[q^{k-1},\hat{p}^n]q\}$$

$$=\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}\{q^{k-1}i\hbar n\hat{p}^{n-1}+q^{k-2}[q,\hat{p}^n]q+[q^{k-2},\hat{p}^n]q^2\}$$

$$=\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}\{i\hbar nq^{k-1}\hat{p}^{n-1}+q^{k-2}i\hbar n\hat{p}^{n-1}q+q^{k-3}[q,\hat{p}^n]q^2+[q^{k-3},\hat{p}^n$$

$$=\cdots\cdots$$

$$=\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}\sum_{s=1}^{k}i\hbar nq^{k-s}\hat{p}^{n-1}q^{s-1}$$

$$=\sum_{s=1}^{k}nq^{k-1}p^{n-1}$$

$$=knq^{k-1}p^{n-1}$$

同样:

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{[q^m,\hat{p}^l]}{i\hbar}=mlq^{m-1}p^{l-1}$$

所以 $$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[q^m\hat{p}^n,\ q^k\hat{p}^l]$$

$$=mq^{m-1}p^nq^klp^{l-1}-q^mnp^{n-1}kq^{k-1}p^l$$

而 $$\{q^mp^n,\ q^kp^l\}$$

$$=\frac{\partial}{\partial q}(q^mp^n)\frac{\partial}{\partial p}(q^kp^l)-\frac{\partial}{\partial p}(q^mp^n)\frac{\partial}{\partial q}(q^kp^l)$$

$$=mq^{m-1}p^nq^klp^{l-1}-q^mnp^{n-1}kq^{k-1}p^l$$

所以 $$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[q^m\hat{p}^n,\ q^k\hat{p}^l]=\{q^mp^n,\ q^kp^l\}$$

因为 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 是 $\hat{p}$、$\hat{q}$ 的函数，它们总可以展成

$\sum\limits_{mn} C_{mn}\, q^n \hat{p}^n$ 的形式，证毕。

11. 设 $F(x, \hat{p})$ 是 x_k p_k 的任意函数，证明

$$[\hat{p}_k F] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x_k}$$

$$[x_k F] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_k}$$

（任意函数是指 $F(x, p)$ 可以展成

$$F(x, p) = \sum_{mn}\left\{\sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn}\, x_k^m\, \hat{p}_l^n\right\}$$

C_{kl}^{mn} 是数值系数）

〔证〕：利用 $[\hat{p}_k x_k^m] = -m i\hbar\, x_k^{m-1}$

$$[x_k \hat{p}_k^n] = n i\hbar\, \hat{p}_k^{n-1}$$

则可得：

$$\begin{aligned}
&[\hat{p}_s F] \\
&= \sum_{mn} \sum_{k,l=1}^{3} [\hat{p}_s, x_k^m \hat{p}_l^n]\, C_{kl}^{mn} \\
&= \sum_{m,n} \sum_{k,l=1}^{3} [\hat{p}_s, x_k^m]\, \hat{p}_l^n\, C_{kl}^{mn} \\
&= \sum_{m,n} \sum_{k,l=1}^{3} -m i\hbar\, x_k^{m-1}\, \hat{p}_l^n\, C_{kl}^{mn}\, \delta_{ks} \\
&= \sum_{m,n} \sum_{l=1}^{3} -m i\hbar\, x_s^{m-1}\, \hat{p}_l^n\, C_{sl}^{mn}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial x_s} &= \sum_{m,n} \sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn} \frac{\partial}{\partial x_s} x_k^m\, \hat{p}_l^n \\
&= \sum_{m,n} \sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn}\, m\, x_k^{m-1}\, \delta_{ks}\, \hat{p}_l^n \\
&= \sum_{m,n} \sum_{l=1}^{3} C_{sl}^{mn}\, m\, x_s^{m-1}\, \hat{p}_l^n
\end{aligned}$$

所以 $\quad [p_k F] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x_k}$

$$\begin{aligned}
&[x_s F] \\
&= \sum_{m,n} \sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn}\, [x_s\, x_k^m\, p_l^n]
\end{aligned}$$

$$=\sum_{m,n}\sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn} x_k^m [x_s, p_l^n]$$

$$=\sum_{m,n}\sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn} x_k^m n i\hbar p_l^{n-1}\delta_{ls}$$

$$=\sum_{m,n}\sum_{k=1}^{3} C_{ks}^{mn} x_k^m p_l^{n-1} n i\hbar$$

$$\frac{\partial F}{\partial p_s}$$

$$=\sum_{m,n}\sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn} x_k^m \frac{\partial}{\partial p_s} p_l^n$$

$$=\sum_{m,n}\sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn} x_k^m n p_l^{n-1}\delta_{ls}$$

$$=\sum_{m,n}\sum_{k=1}^{3} C_{ks}^{mn} n x_k^m p_s^{n-1}$$

$$[x_k F]=i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}$$

12、设$f(\vec{x})$只依赖于空间坐标，证明

$$[f,[\nabla^2,f]]=-2(\nabla f)^2$$

[证]:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},f\right]=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x},f\right]+\left[\frac{\partial}{\partial x},f\right]\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}f'+f'\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\left[f,\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},f\right]\right]=\left[f,\frac{\partial}{\partial x}f'\right]+\left[f,f'\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

$$=\frac{\partial}{\partial x}[f,f']+\left[f,\frac{\partial}{\partial x}\right]f'+[f,f']\frac{\partial}{\partial x}+f'\left[f,\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

$$=-\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)f'+f'\left(-\frac{\partial f}{\partial x}\right)=-2(f')^2$$

$$\therefore\ [f,(\nabla^2,f)]=-2(\nabla f)^2$$

1、利用测不准的关系估计谐振子的基态能量。

[解]：由于X轴对称

$$\therefore\quad \bar{x}=0,\qquad \bar{p}=0$$

$$\therefore\quad \overline{p_x^2}=\overline{\Delta p_x^2}\qquad \overline{x^2}=\overline{\Delta x^2}$$

已知：

$$\overline{\Delta x^2}\cdot\overline{\Delta p_x^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$$

而谐振子的能量为

$$E_n = \overline{E} = \overline{P_x^2}/2m + \frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}$$

$$= \overline{\Delta P_x^2}/2m + \frac{1}{2}m\omega^2\overline{\Delta x^2}$$

显然，$\overline{\Delta x^2}\,\overline{\Delta P_x^2} = \frac{\hbar^2}{4}$ 时，$\overline{E}$ 最小

$$\overline{E} = \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{\overline{\Delta x^2}} + \frac{1}{2}m\omega^2\overline{\Delta x^2}$$

$$\frac{dE}{d\overline{\Delta x^2}} = \frac{1}{2}m\omega^2 + \frac{-\hbar^2}{8m}\left(\frac{1}{\overline{\Delta x^2}}\right)^2 = 0$$

$$(\overline{\Delta x^2})^2 = \frac{\hbar^2}{8m}\times\frac{2}{m\omega^2} = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

$$\overline{\Delta x^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

代入$\overline{E}$可得：

$$\overline{E}_{min} = \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{\frac{\hbar}{2m\omega}} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$= \frac{1}{4}\hbar\omega + \frac{1}{4}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

14、利用测不准关系估计类氢原子中电子的基态能量（原子核带电 $+Ze$）

解：设电子质量为 μ，电子离核的距离为 r，则类氢原子的平均能量为

$$\overline{E} = \frac{\overline{P^2}}{2\mu} - \frac{\overline{Ze^2}}{r}$$

P 是电子的动量。

利用测不准关系 $\Delta P\Delta r \geq \frac{\hbar}{2} \approx \hbar$，而对于基态，由于球对称性 $\overline{P} = 0$，$\therefore \Delta P = P - \overline{P} = P$。而电子和核的距离在 r 数量级内，其误差不会大于 r 本身，即 $\Delta r = r - \overline{r} \leq r$

$\therefore$ 得到 $\quad \Delta r\cdot\Delta P = P\cdot r \geq \hbar$

在能量表示式中以 $\frac{\hbar}{r}$ 代替 P，由 $P \geq \frac{\hbar}{r}$，故

$$E \geq \frac{1}{2\mu}\frac{\hbar^2}{r^2} - \frac{Ze^2}{r}$$

基态能量最小，故

$$\frac{\partial E}{\partial r}=-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{1}{r^3}+\frac{ze^2}{r^2}=0$$

$$\therefore \quad E_{min}\cong-\frac{\mu z^2e^4}{2\hbar^2}$$

15、求证力学量 x 与 $F(p_x)$ 的测不准关系

$$\sqrt{\langle\overline{\Delta x^2}\rangle\langle\overline{\Delta F}\rangle^2}\geq\frac{\hbar}{2}\left|\overline{\frac{\partial F}{\partial p_x}}\right|$$

〔证〕：令 $\Delta x=x-\bar{x}=\hat{\alpha}$

$$\Delta F(p_x)=F(p_x)-\overline{F(p_x)}=\hat{\beta}$$

考虑积分

$$I(\xi)=\int|\xi\hat{\alpha}\psi+i\hat{\beta}\psi|^2dx\geq0$$

$$I(\xi)=\int(\xi\psi^*\hat{\alpha}^+-i\psi^*\hat{\beta}^+)(\xi\hat{\alpha}\psi+i\hat{\beta}\psi)dx$$

$$=\xi^2\int\psi^*\hat{\alpha}^2\psi dx+\int\psi^*\hat{\beta}^2\psi dx+\xi\int(i\psi^*\hat{\alpha}\hat{\beta}\psi-$$

$$-i\psi^*(\hat{\beta}\hat{\alpha})\psi)dx$$

$$=\xi^2\overline{\hat{\alpha}^2}+\overline{\hat{\beta}^2}+\xi i\overline{(\hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}\hat{\alpha})}$$

而 $\hat{\alpha}\hat{\beta}=(x-\bar{x})(F-\bar{F})=xF-x\bar{F}-\bar{x}F+\bar{x}\bar{F}$

$$\hat{\beta}\hat{\alpha}=(F-\bar{F})(x-\bar{x})=Fx-\bar{F}x-F\bar{x}+\bar{F}\bar{x}$$

$$\therefore \quad \hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}\hat{\alpha}=xF-Fx$$

$$=i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_x}$$

$$\overline{\hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}\hat{\alpha}}=\overline{i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_x}}$$

$$I(\xi)=\xi^2\overline{\hat{\alpha}^2}-\hbar\overline{\frac{\partial F}{\partial p_x}}\xi+\overline{\hat{\beta}^2}\geq0$$

由二项式定理应有 $b^2-4ac\leq0$

$$\overline{\hat{\alpha}^2}\cdot\overline{\hat{\beta}^2}\geq\left(\hbar\left|\overline{\frac{\partial F}{\partial p_x}}\right|\right)^2$$

$$\overline{\Delta x^2}\cdot\overline{(\Delta F(p_x))^2}\geq\frac{\hbar}{2}\left|\overline{\frac{\partial F}{\partial p_x}}\right|$$

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

〔提示：利用 $\hat{l}_y\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{l}_y=i\hbar\hat{l}_x$，两边求平均值〕

〔证〕：假设 ψ_m 是 $\hat{l}_z$ 的本征态，相应的本征值是 $m\hbar$

即：$\hat{l}_z\psi_m=m\hbar\psi_m$

根据角动量的对易关系，可得：

$$\hat{l}_y\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{l}_y=i\hbar\hat{l}_x$$

$$\hat{l}_z\hat{l}_x-\hat{l}_x\hat{l}_z=i\hbar\hat{l}_y$$

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

同样可得：

$$\overline{l_y}=0$$

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

〔答：$\frac{\hbar^2}{2}\left(l\cdot(l+1)-m^2\right)$〕

解：

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是 $\hat{l}^2$ 及 $\hat{l}_z$ 的本征函数，即

$$\hat{l}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\hat{l}_zY_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

因为 $\overline{l_x}=\overline{l_y}=0$

所以 $\overline{\Delta l_x^2}=\overline{l_x^2}$，$\overline{\Delta l_y^2}=\overline{l_y^2}$

先证：$\overline{l_x^2}=\overline{l_y^2}$

定义：$\hat{l}_+=\hat{l}_x+i\hat{l}_y \qquad \hat{l}_-=\hat{l}_x-i\hat{l}_y$

则 $\hat{l}_x=\frac{1}{2}(\hat{l}_++\hat{l}_-)$ $\hat{l}_y=\frac{i}{2}(l_--l_+)$

$(lm|l_x^2|lm)$

$=\frac{1}{4}\langle lm|\hat{l}_+\hat{l}_++\hat{l}_-\hat{l}_-+\hat{l}_+\hat{l}_-+\hat{l}_-\hat{l}_+|lm\rangle$

$=\frac{1}{4}\langle lm|\hat{l}_+\hat{l}_-+\hat{l}_-\hat{l}_+|lm\rangle$

$(lm|\hat{l}_y^2|lm)$

$=\frac{1}{4}\langle lm|-\hat{l}_+\hat{l}_+-\hat{l}_-\hat{l}_-+\hat{l}_+\hat{l}_-+\hat{l}_-\hat{l}_+|lm\rangle$

$=\frac{1}{4}\langle lm|\hat{l}_+\hat{l}_-+\hat{l}_-\hat{l}_+|lm\rangle$

$\therefore\ \overline{l_x^2}=\overline{l_y^2}$

$\hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2=\hat{l}^2-\hat{l}_z^2$

$\therefore\ \overline{l_x^2}=\overline{l_y^2}=\frac{1}{2}(\overline{\hat{l}^2-\hat{l}_z^2})$

$=\frac{1}{2}\langle lm|\hat{l}^2-\hat{l}_z^2|lm\rangle$

$=\frac{\hbar^2}{2}[l(l+1)-m^2]$

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

18、设体系处于 $\psi=C_1Y_{11}+C_2Y_{20}$ 态。求

(1) $\hat{l}_z$ 的可能测值及平均值。

(2) $\hat{l}^2$ 的可能测值及相应的几率。

(3) $\hat{l}_x$ 及 $\hat{l}_y$ 的可能测值。

[解]: Y_{11} 和 Y_{20} 是 $\hat{l}^2$, $\hat{l}_z$ 的共同本征函数，即

$\hat{l}^2Y_{11}=2\hbar^2Y_{11}$ $\hat{l}^2Y_{20}=6\hbar^2Y_{20}$

$\hat{l}_zY_{11}=\hbar Y_{11}$ $\hat{l}_zY_{20}=0\hbar Y_{20}$

(1) 设 ψ 已归一化，即 $|C_1|^2+|C_2|^2=1$

则 $\hat{l}_z$ 的可能测值为 $\hbar$ 0

所相应的测值几率为 $|C_1|^2$. $|C_2|^2$

$\hat{l}_z$ 的平均值为 $\overline{l_z}=\hbar|C_1|^2$

(2) $\hat{l}^2$的可能测值为 $2\hbar^2$ $6\hbar^2$

相应的测值几率为 $|c_1|^2$, $|c_2|^2$

(3) c_1，c_2不为0，则$\hat{l}_x$，$\hat{l}_y$的可能测值为$2\hbar$，$\hbar$，0，$-\hbar$，$-2\hbar$

$\hat{l}_x$在$l=1$空间，$(\hat{l}^2, l_z)$对角化的表象中的矩阵

是 $\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

求本征矢，令$\hbar=1$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

$b=\sqrt{2}\lambda a$， $a+c=\sqrt{2}\lambda b$， $b=\sqrt{2}\lambda c$

$\lambda=0, \pm$

取$\lambda=0$，

$b=0$， $c=-a$，

$\therefore$本征矢是$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

$\lambda=1$，

$b=\sqrt{2}a=\sqrt{2}c$

$\therefore$本征矢是$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$

$\lambda=-1$，

$b=-\sqrt{2}a=-\sqrt{2}c$

$\therefore$本征矢是$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$

$\lambda=-1$，

$$\left.\begin{array}{l} b=-\sqrt{2}a=-\sqrt{2}c \\ \therefore \text{本征矢是} \ \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}\right\} \to \text{此段重复}$$

在 $c_1 Y_{11} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 态下

l_x 取 0 的振幅是 $\quad c_1 (1\ 0\ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{c_1}{\sqrt{2}}$

$1 \quad c_1 (1\ 0\ 0) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{c_1}{2}$

$-1 \quad c_1 (1\ 0\ 0) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{c_1}{2}$

$\therefore$ l_x 取 $\hbar$ 的几率为 $\quad |c_1|^2/4$

$0 \quad |c_1|^2/2$

$-\hbar \quad |c_1|^2/4$

总几率为 $|c_1|^2$

l_x 在 $l=2$ 空间中 (l^2, l_z) 对角表象中的矩阵：

利用 $\quad \langle j\,m+1 | j_x | j\,m \rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$

$\langle j\,m-1 | j_x | j\,m \rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}$

$\therefore \quad \langle 22 | j_x | 21 \rangle = 1$

$\langle 21 | j_x | 20 \rangle = \sqrt{\frac{3}{2}}$

$\langle 20 | j_x | 2\,-1 \rangle = \sqrt{\frac{3}{2}}$

$\langle 2\,-1 | j_x | 2\,-2 \rangle = 1$

$$l_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

本征方程为

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix}$$

$b=\lambda a,\quad a+\sqrt{\frac{3}{2}}c=\lambda b,\quad \sqrt{\frac{3}{2}}b+\sqrt{\frac{3}{2}}d=\lambda c,\quad \sqrt{\frac{3}{2}}c+e=\lambda d,$
$d=\lambda e \quad \lambda=0,\pm1,\pm2$

$\lambda=0,\ b=0,\ a=-\sqrt{\frac{3}{2}}c,\ d=0,\ e=-\sqrt{\frac{3}{2}}c$

本征矢为: $\sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix}1\\0\\-\sqrt{\frac{2}{3}}\\0\\1\end{pmatrix}$

在 $c_2 Y_{20}=c_2\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$ 态下，测 $l_x=0$ 的振幅为

$$c_2(0\,0\,1\,0\,0)\sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix}1\\0\\-\sqrt{\frac{2}{3}}\\0\\1\end{pmatrix}=-\frac{c_2}{2}$$

几率为 $|c_2|^2/4$

$\lambda=1,\ b=a,\ c=0,\ d=-b,\ d=e$

本征矢为 $\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\-1\\-1\end{pmatrix}$

在 $c_2 Y_{20}$ 态中测 $l_x=\hbar$ 的振幅为

$$c_2(0\,0\,1\,0\,0)\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\-1\\-1\end{pmatrix}=0$$

几率为0

$\lambda=-1,\ b=-a,\ c=0,\ d=-b,\ e=-d$

本征矢为 $\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1\\-1\\0\\1\\1\end{pmatrix}$ 在 $c_2 Y_{20}$ 态中测 $l_x=-\hbar$ 的几率为0。

$\lambda=2,\ b=2a,\ c=\sqrt{6}a,\ e=\frac{1}{\sqrt{6}}c=a,\ d=2e=2a,$

本征矢为 $\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{pmatrix}$

在 c_2Y_{20} 态中测 $l_x=2\hbar$ 的振幅为

$$c_2(0\,0\,1\,0\,0)\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{6}}{4}c_2$$

几率为 $\frac{3}{8}|c_2|^2$

$\lambda=-2$，$b=-2a$，$c=\sqrt{6}a$，$d=-2a$，$e=a$

本征矢为 $\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\-2\\\sqrt{6}\\-2\\1\end{pmatrix}$

在 c_2Y_{20} 态中测得 $-2\hbar$ 的几率为 $\frac{3}{8}|c_2|^2$

$\therefore\ (\frac{3}{8}+\frac{3}{8}+\frac{1}{4})|c_2|^2=|c_2|^2$

在 $\psi=c_1Y_{11}+c_2Y_{20}$ 态中，测 l_x，l_x 的可能值及几率

$2\hbar$	$\hbar$	0	$-\hbar$	$-2\hbar$
$\frac{3}{8}\|c_2\|^2$	$\frac{\|c_1\|^2}{4}$	$\frac{1}{2}\|c_1\|^2+\frac{1}{4}\|c_2\|^2$	$\frac{\|c_1\|^2}{4}$	$\frac{3}{8}\|c_2\|^2$

总几率 $|c_2|^2+|c_1|^2=1$

19、求证：在 $\hat{l}_z$ 的本征态下，角动量沿与 z 轴成 θ 角的方向上的分量的平均值为 $m\hbar\cos\theta$

〔证〕：$\hat{l}_n=\vec{n}\cdot\hat{\vec{l}}=n_x\hat{l}_x+n_y\hat{l}_y+n_z\hat{l}_z$

因为在 $\hat{l}_z$ 的本征态下 $\overline{l}_x=\overline{l}_y=0$

所以 $\overline{l}_n=\int\psi_m^*n_z\hat{l}_z\psi_m d\tau$

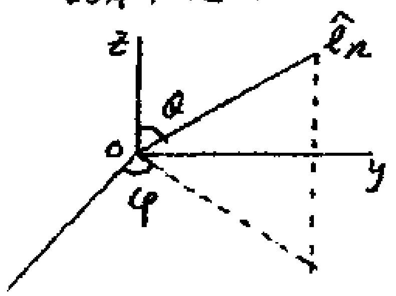
$$=n_zm\hbar=m\hbar\cos\theta$$

20. 设$\psi_m^{(0)}$是$\hat{l}_z$的本征态，相应的本征值为$m\hbar$，

则 $$\psi_m = e^{-i\hat{l}_z\varphi} e^{-i\hat{l}_y\theta} \psi_m^{(0)}$$

是 $$\hat{l}_n = \hat{l}_x \sin\theta\cos\varphi + \hat{l}_y \sin\theta\sin\varphi + \hat{l}_z\cos\theta$$

的本征态。



[证]：利用

$$e^{-i\hat{l}_y\theta}\hat{l}_z e^{i\hat{l}_y\theta} = \hat{l}_z\cos\theta + \hat{l}_x\sin\theta$$

$$e^{-i\hat{l}_z\varphi}\hat{l}_x e^{i\hat{l}_z\varphi} = \hat{l}_x\cos\varphi + \hat{l}_y\sin\varphi$$

则：

$$e^{-i\hat{l}_y\theta}\hat{l}_z = \hat{l}_z\cos\theta e^{-i\hat{l}_y\theta} + \hat{l}_x\sin\theta e^{-i\hat{l}_y\theta}$$

$$e^{-i\hat{l}_z\varphi}\hat{l}_x = \hat{l}_x\cos\varphi e^{-i\hat{l}_z\varphi} + \hat{l}_y\sin\varphi e^{-i\hat{l}_z\varphi}$$

$$\begin{aligned}
\hat{l}_n\psi_m &= (\hat{l}_x\sin\theta\cos\varphi + \hat{l}_y\sin\theta\sin\varphi + \hat{l}_z\cos\theta)\cdot \\
&\quad e^{-i\hat{l}_z\varphi} e^{-i\hat{l}_y\theta}\psi_m^{(0)} \\
&= e^{-i\hat{l}_z\varphi}(\hat{l}_x\sin\theta + \hat{l}_z\cos\theta)e^{-i\hat{l}_y\theta}\psi_m^{(0)} \\
&= e^{-i\hat{l}_z\varphi} e^{-i\hat{l}_y\theta}\hat{l}_z\psi_m^{(0)} \\
&= m\hbar\psi_m
\end{aligned}$$

21. 证明：对于任意两个波函数ψ及φ

$$|\langle\psi\varphi\rangle| \leq \sqrt{\langle\psi\psi\rangle\langle\varphi\varphi\rangle} \quad \text{（Schwarz不等式）}$$

[证]：ψ，φ为任意两个波函数，做内积

$$\langle\psi-\lambda\varphi,\ \psi-\lambda\varphi\rangle \geq 0$$

而 $$\begin{aligned}&\langle\psi-\lambda\varphi,\ \psi-\lambda\varphi\rangle \\ &= \langle\psi\psi\rangle + \bar{\lambda}\lambda\langle\varphi\varphi\rangle - \bar{\lambda}\langle\varphi\psi\rangle - \lambda\langle\psi\varphi\rangle\end{aligned}$$

令 $$\bar{\lambda} = \frac{\langle\psi\varphi\rangle}{\langle\varphi\varphi\rangle} \qquad \lambda = \frac{\langle\varphi\psi\rangle}{\langle\varphi\varphi\rangle}$$

将$\bar{\lambda}$，λ代入上式，并乘以$\langle\varphi\varphi\rangle$得到

$$(\varphi\varphi)(\psi\psi)+(\psi\psi)(\varphi\psi)-(\psi\varphi)(\varphi\psi)-(\psi\psi)(\psi\varphi)\geq 0$$

$$\therefore\ (\psi\varphi)(\varphi\psi)\leq(\varphi\varphi)(\psi\psi)$$

$$|(\psi\varphi)|^2\leq(\varphi\varphi)(\psi\psi)$$

$$|(\psi,\varphi)|\leq\sqrt{(\varphi,\varphi)(\psi,\psi)}$$

22. 设$\hat{H}$为正定的厄密算符，u、v为二任意波函数，证明

$$|(u\hat{H}v)|^2\leq(u\hat{H}u)(v\hat{H}v)$$

[证]: 因为$\hat{H}$是正定的厄密算符，可以得到

$$[(u-\lambda v)\hat{H}(u-\lambda v)]\geq 0$$

而$[(u-\lambda v)\hat{H}(u-\lambda v)]$

$$=(u\hat{H}u)+\bar{\lambda}\lambda(v\hat{H}v)-\lambda(u\hat{H}v)-\bar{\lambda}(v\hat{H}u)$$

令 $\lambda=\dfrac{(vHu)}{(vHv)}$ $\qquad\bar{\lambda}=\dfrac{(uHv)}{(vHv)}$

将λ $\bar{\lambda}$代入上式，並乘以(vHv)得到

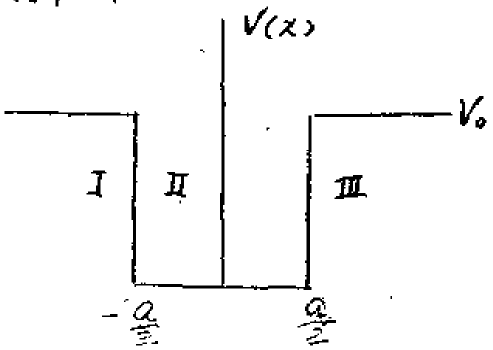
$$(u\hat{H}u)(v\hat{H}v)+(v\hat{H}u)(u\hat{H}v)-(v\hat{H}u)(u\hat{H}v)-(u\hat{H}v)(v\hat{H}u)\geq 0$$

$$\therefore\ (v\hat{H}u)(u\hat{H}v)\leq(u\hat{H}u)(v\hat{H}v)$$

$$|(u\hat{H}|v)|^2\leq(u\hat{H}u)(v\hat{H}v)$$

23. 在一维对称势阱中，粒子至少存在一个束缚态（见§3.1）。在给定势阱深度V_0的情形下，减少势阱宽度a使$a\ll\frac{\hbar^2}{mV_0}$。粒子动量不确度$\Delta p<\sqrt{mV_0}$，而位置不确定度$\Delta x\sim a$，因此下列关系似乎成立，$\Delta x\Delta p\sim\sqrt{mV_0}\,a\ll\hbar$。这与测不准关系矛盾。以上论证错误何在？

[解]:



论证中的错误是把位置不确定度Δx与势阱的宽度a等同起来。在

经典情况中，处于阱内Ⅱ的粒子是不可能到达阱外区域Ⅰ、Ⅲ的。在量子力学中则不然，粒子有一定的几率到阱外区域去。所以"Δx的大小是由粒子的空间几率分布$|\psi(x)|^2$的宽度来决定的。而动量的不确定度Δp，则由动量的几率分布$|c(p)|^2$的宽度来决定的。

从§3.1的讨论可知，无论V_0,a取什么值，至少有一个束缚态解的形式是：

$$\psi \sim \begin{cases} e^{k'x} & x < -a/2 \\ \cos kx & -a/2 < x < a/2 \\ e^{-k'x} & x > a/2 \end{cases}$$

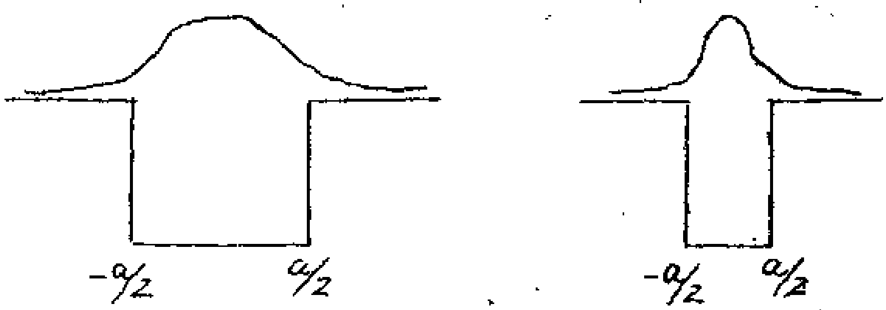
其中 $$k' = \sqrt{\frac{2mV_0 - E}{\hbar^2}}$$

对于最低的能量态可以近似为

$$k' \sim \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

而 $$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

当粒子处于能量最低的状态时，ψ在空间的分布如图(2)



当a逐渐减小时，粒子在阱内的几率小于阱外的，这时Δx主要由$e^{k'x}$的宽度来定。

$$\Delta x \sim \frac{1}{k'} \sim \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} \gg a$$

而 $$\Delta p \sim \hbar k$$

由此可得 $$\Delta x \Delta p \sim \hbar$$

24. 证明：在不连续谱的能量本征态下，动量平均值为0。

[证]：先证下式关系式

$$\hat{p}=\frac{im}{\hbar}(\hat{H}\vec{r}-\vec{r}\hat{H})$$

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

$$\therefore \quad \frac{im}{\hbar}(\hat{H}x-x\hat{H})$$

$$=\frac{im}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m}x-x\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right)$$

$$=\frac{im}{\hbar}\frac{1}{2m}[x\hat{p}_x^2]$$

$$=-\frac{i}{2\hbar}2i\hbar\hat{p}_x$$

$$=\hat{p}_x$$

∴在不连续谱能量本征态 ψ_n 下，$\hat{p}_x$ 的平均值是

$$\bar{p}=\int\frac{im}{\hbar}\psi_n^*(\hat{H}\vec{r}-\vec{r}\hat{H})\psi_n d^3x$$

$$=\frac{im}{\hbar}E_n\int(\psi_n^*\vec{r}\psi_n-\psi_n^*\vec{r}\psi_n)d^3x$$

$$=0$$

25. 设属于某能级E有三个简并态（ψ_1,ψ_2,ψ_3）彼此线性无关，但不正交。试找出三个彼此正交归一化的波函数。它们是否还简并？

[解]：令 $\varphi_1=a_1\psi_1$

$$=\frac{1}{\sqrt{(\psi_1|\psi_1)}}\psi_1$$

则 $$\varphi_2'=\psi_2-(\varphi_1|\psi_2)\varphi_1$$

$$\varphi_2=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_2'|\varphi_2')}}\varphi_2'$$

$$\varphi_3'=\psi_3-(\varphi_1|\psi_3)\varphi_1-(\varphi_2|\psi_3)\varphi_2$$

$$\varphi_3=\frac{1}{\sqrt{\varphi_3'|\varphi_3'}}\varphi_3'$$

φ_1、φ_2、φ_3 是正交归一的。

$$(\varphi_1|\varphi_2)=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_2'|\varphi_2')}}[(\varphi_1|\psi_2)-(\varphi_1|\psi_2)(\varphi_1|\varphi_1)]$$
$$=0$$
$$(\varphi_1|\varphi_3)=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_3'|\varphi_3')}}[(\varphi_1|\psi_3)-(\varphi_1|\psi_3)(\varphi_1|\varphi_1)-(\varphi_2|\psi_3)(\varphi_1|\varphi_2)]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_3'|\varphi_3')}}[(\varphi_1|\psi_3)-(\varphi_1|\psi_3)]$$
$$=0$$
$$(\varphi_2|\varphi_3)=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_3'|\varphi_3')}}[(\varphi_2|\psi_3)-(\varphi_1|\psi_3)(\varphi_2|\varphi_1)-(\varphi_2|\psi_3)(\varphi_2|\varphi_2)]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_3'|\varphi_3')}}[(\varphi_2|\psi_3)-(\varphi_2|\psi_3)]$$
$$=0$$

∴它们仍然是简併的。

26．证明：

$$\det(AB)=\det A\cdot\det B$$
$$\det(S^{-1}AS)=\det A$$
$$T_r(AB)=T_r(BA)$$
$$T_r(ABC)=T_r(CAB)=T_r(BCA)$$
$$T_r(S^{-1}AS)=T_rA$$

由此说明矩阵的 $\det$ 及 T_r 不因表象而异，或者说矩阵的本征值之积不因表象而异，矩阵的本征值之和不因表象而异。

〔证〕：

1. 根据定义

$$\det A=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)a_{1i_1}a_{2i_2}\cdots a_{ni_n}$$

其中

$$P(i_1\cdots i_n)=\begin{cases}1 & \text{当}(i_1\cdots i_n)\text{是}(1\cdots n)\text{的偶置换}\\ -1 & \text{当}(i_1\cdots i_n)\text{是}(1\cdots n)\text{的奇置换}\\ 0 & \text{其它情形}\end{cases}$$

上式可写成：

$$\det A=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)P(j_1\cdots j_n)a_{j_1i_1}a_{j_2i_2}\cdots a_{j_ni_n}$$

其中 $(j_1\cdots j_n)$ 是 $(1\cdots n)$ 的任一置换。

$$
\begin{aligned}
\det C &= \det(AB) \\
&= \sum_{i_n} P(i_1 \cdots i_n) C_{1i_1} C_{2i_2} \cdots C_{ni_n} \\
&= \sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) \sum_{j_1 \cdots j_n} a_{1j_1} b_{j_1 i_1} a_{2j_2} b_{j_2 i_2} \cdots a_{nj_n} b_{j_n i_n} \\
&= \sum_{j_1 \cdots j_n} a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n} \Big\{ \sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) b_{j_1 i_1} b_{j_2 i_2} \cdots b_{j_n i_n} \Big\} \\
&= \sum_{j_1 \cdots j_n} P(j_1 \cdots j_n) a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n} \Big\{ \sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) P(j_1 \cdots j_n) b_{j_1 i_1} b_{j_2 i_2} \cdots b_{j_n i_n} \Big\} \\
&= \sum_{j_1 \cdots j_n} P(j_1 \cdots j_n) a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n} \{\det B\} \\
&= \det A \cdot \det B
\end{aligned}
$$

2.

$$
\begin{aligned}
\det(S^{-1}AS) &= \det S^{-1} \det A \det S \\
&= \det S^{-1} \det S \det A \\
&= \det S^{-1}S \cdot \det A \\
&= \det A
\end{aligned}
$$

3.
$$
\begin{aligned}
Tr(AB) &= \sum_{ik} a_{ik} b_{ki} \\
&= \sum_{ik} b_{ki} a_{ik} \\
&= Tr(BA)
\end{aligned}
$$

4.
$$
\begin{aligned}
Tr(ABC) &= \sum_{ijk} a_{ij} b_{jk} c_{ki} \\
&= \sum_{ijk} b_{jk} c_{ki} a_{ij} \\
&= Tr(BCA)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Tr(ABC) &= \sum_{ijk} a_{ij} b_{jk} c_{ki} \\
&= \sum_{ijk} c_{ki} a_{ij} b_{jk} \\
&= Tr(CAB)
\end{aligned}
$$

5.
$$
\begin{aligned}
Tr(S^{-1}AS) &= Tr(S^{-1}(AS)) \\
&= Tr((AS)S^{-1}) \\
&= Tr(ASS^{-1}) \\
&= Tr\,A
\end{aligned}
$$

设在一表象中，矩阵 A 是对角的，则 $\det A$ 是它的本征值的积，TrA 是它的本征值之和。换到其它表象去，即相当于作变换 $S^{-1}AS$，所以本征值之积与和均不变。

27. 设粒子处于宽度为 a 的无限深方势阱中，求能量表象中粒子的坐标及动量的矩阵表示。

[解]：宽度为 a 的无限深的方势阱的能量本征函数为：

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

设 $m\neq n$ $x_{mn}=\frac{2}{a}\int_0^a\sin\frac{m\pi}{a}x\cdot x\cdot\sin\frac{n\pi}{a}x\,dx$

$$=\frac{1}{a}\int_0^a x\left[\cos\frac{(m-n)\pi}{a}x-\cos\frac{(m+n)\pi}{a}x\right]dx$$

$$=\frac{1}{a}\left[\frac{a^2}{(m-n)^2\pi^2}\cos\frac{(m-n)\pi}{a}x-\frac{a^2}{(m+n)^2\pi^2}\cos\frac{(m+n)\pi}{a}x\right]_0^a$$

$$=\frac{1}{a}\left(\frac{a^2}{(m-n)^2\pi^2}[(-1)^{m-n}-1]-\frac{a^2}{(m+n)^2\pi^2}[(-1)^{m+n}-1]\right)$$

$$=\frac{a}{\pi^2}[(-1)^{m-n}-1]\left[\frac{1}{(m-n)^2}-\frac{1}{(m+n)^2}\right]$$

$$=\frac{4a}{\pi^2}\left[\frac{(-1)^{m-n}-1}{(m^2-n^2)^2}\right]mn$$

$m=n$, $x_{mn}=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi}{a}x\,dx$

$$=\frac{1}{a}\int_0^a\left[x-x\cos\frac{2n\pi}{a}x\right]dx$$

$$=\frac{1}{a}\left[\frac{x^2}{2}-\frac{a^2}{4n^2\pi^2}\cos\frac{2n\pi}{a}x\right]_0^a$$

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

$$P_{mn}=\mu(\dot{x})_{mn}$$

$$=\mu\left(\frac{dx}{dt}\right)_{mn}$$

$$=\mu\frac{(x,\hat{H})_{mn}}{i\hbar}$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\mu(x\hat{H}-\hat{H}x)_{mn}$$

$$=\frac{\mu}{i\hbar}(E_n x_{mn}-E_m x_{mn})$$

$$=\frac{i\mu}{\hbar}(E_m-E_n)x_{mn}$$

无限深方势井的能量本征值为

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

$$E_m-E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}(m^2-n^2)$$

最后可得：$P_{mn}=\frac{i2\hbar}{a}\frac{[(-1)^{m-n}-1]mn}{(m^2-n^2)}\quad(m\neq n)$

$$P_{mm}=0$$

28、试用矩阵乘法的办法，根据谐振子能量表象中x的矩阵，求出x^2的矩阵。

[解]：已知谐振子能量表象中x的矩阵为

$$x_{kn}=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{k,n-1}+\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{k,n+1}$$

$$(x^2)_{mn}=\sum_k x_{mk}x_{kn}$$

$$=x_{m,n-1}\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n}{2}}+x_{m,n+1}\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

$$=\frac{1}{\alpha^2}\sqrt{\frac{(n-1)n}{4}}\delta_{m,n-2}+\frac{1}{\alpha^2}\frac{n}{2}\delta_{m,n}+\frac{1}{\alpha^2}\frac{n+1}{2}\delta_{mn}$$

$$+\frac{1}{\alpha^2}\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\delta_{m,n+2}$$

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

$$+\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}\}$$

所以

$$(x^2)_{mn}=\begin{cases}\frac{1}{2\alpha^2}\sqrt{(n-1)n} & m=n-2\\ \frac{1}{2\alpha^2}(2n+1) & m=n\\ \frac{1}{2\alpha^2}\sqrt{(n+1)(n+2)} & m=n+2\\ 0 & \text{其它情形}\end{cases}$$

29、设任何一个厄密矩阵能被一个幺正矩阵对角化，由此证明，两个厄密矩阵能被同一个幺正矩阵对角化的充要条件是它们彼此对易。

[证]：设A、B两个矩阵是对易的，并且A能被幺正矩阵L对

角化。证明如下：

已知： $AB-BA=0$

$(LAL^{-1})_{\alpha\beta}=A'_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta}$

则 $AB=BA$

$LABL^{-1}=LBAL^{-1}$

$LAL^{-1}LBL^{-1}=LBL^{-1}LAL^{-1}$

$\sum_{\alpha'}(LAL^{-1})_{\alpha\alpha'}(LBL^{-1})_{\alpha'\beta}=\sum_{\beta'}(LBL^{-1})_{\alpha\beta'}(LAL^{-1})_{\beta'\beta}$

$A'_{\alpha\alpha}(LBL^{-1})_{\alpha\beta}=(LBL^{-1})_{\alpha\beta}A'_{\beta\beta}$

$(LBL^{-1})_{\alpha\beta}(A'_{\alpha\alpha}-A'_{\beta\beta})=0$

若要 $(LBL^{-1})_{\alpha\beta}\neq 0$，

则 $A'_{\alpha\alpha}=A'_{\beta\beta}$

即 $\alpha=\beta$

∴ $(LBL^{-1})_{\alpha\beta}=B'_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta}$

B能被同一个正矩阵L对角化

若A，B能被同一个正矩阵对角化则它们是对易的。证明如下：

已知： $(LAL^{-1})_{\alpha\beta}=A'_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta}$

$(LBL^{-1})_{\alpha\beta}=B'_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta}$

令 $AB-BA=C$

那么 $(LAL^{-1}LBL^{-1})_{\alpha\beta}-(LBL^{-1}LAL^{-1})_{\alpha\beta}=(LCL^{-1})_{\alpha\beta}$

$A'_{\alpha\alpha}B'_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta}-B'_{\alpha\alpha}A'_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta}=(LCL^{-1})_{\alpha\beta}$

$(LCL^{-1})_{\alpha\beta}=0$ （α,β 任意）

∴ $C=0$ A，B对易

3. 写出在X表象中，$\hat{X}$，$\hat{P}$及$\hat{H}$的矩阵元，

（设 $\hat{H}=\dfrac{\hat{P}_x^2}{2m}+V(x)$）

〔解〕

因为 $(x-x')\delta(x-x')=0$，所以 x 表象中的基矢是 $\delta(x-x')$

由此可得：

$$x_{x'x''}=\int\delta(x-x')\,x\,\delta(x-x'')\,dx$$
$$=x'\delta(x'-x'')$$
$$(\hat{p})_{x'x''}=\int\delta(x-x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\delta(x-x'')\,dx$$
$$=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')$$
$$(\hat{H})_{x'x''}=\int\delta(x-x')\,\hat{H}\,\delta(x-x'')\,dx$$
$$=\int\delta(x-x')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\delta(x-x'')\,dx$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\delta(x'-x'')+V(x')\delta(x'-x'')$$

31、写出 p 表象中 x，$\hat{p}$，$\hat{H}$ 的矩阵表示。

〔解〕 $\hat{p}$ 表象中的基矢是：

$$\psi_p=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{ipx/\hbar}$$
$$(x)_{p'p''}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-ip'x/\hbar}\,x\,e^{ip''x/\hbar}\,dx$$
$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}e^{i(p''-p')x/\hbar}\,dx$$
$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p''-p')$$
$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p'-p'')$$
$$(\hat{p})_{p'p''}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-ip'x/\hbar}\,\hat{p}\,e^{ip''x/\hbar}\,dx$$
$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-ip'x/\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)e^{ip''x/\hbar}\,dx$$
$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int p''e^{i(p''-p')x/\hbar}\,dx$$
$$=p''\delta(p''-p')$$
$$=p'\delta(p'-p'')$$
$$(\hat{H})_{p'p''}=\frac{p'^2}{2m}\delta(p'-p'')+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)\delta(p'-p'')$$

另一种做法是：

$$(p-p')\delta(p-p')=0$$

基矢是 $\delta(p-p')$

$$\hat{x}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$$

$$\hat{p}=p$$

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)$$

也可以得到同样的结果

32、设 $\hat{H}=\hat{p}^2/2\mu+V(x)$，试用纯矩阵的办法，证明下列求和规则。

$$\sum_n(E_n-E_m)|x_{nm}|^2=\hbar^2/2\mu$$

其中 x 是 $\vec{r}$ 的一个笛卡尔分量，$\sum_n$ 指对一切可能态求和，E_n 是相应于 n 态的能量。

〔证〕：

$$[\hat{H}\,x]=\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu}\,x\right]$$

$$=-\frac{1}{2\mu}[x,\hat{p}^2]$$

$$=-i\hbar\frac{\hat{p}}{\mu}$$

$$[(\hat{H}x)x]=-\frac{i\hbar}{\mu}[\hat{p}\,x]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{\mu}$$

$$\therefore\quad \langle n|[(\hat{H}x)x]|m\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}\delta_{mn}$$

上述对易关系又可以表为

$$[(\hat{H}x)x]=Hx^2-2xHx+x^2H$$

$$\therefore\quad \langle n|Hx^2-2xHx+x^2H|m\rangle$$

$$=\sum_k\langle n|H|k\rangle\langle k|x^2|m\rangle-2\sum_k\sum_l\langle n|x|k\rangle\langle k|H|l\rangle\langle l|x|m\rangle$$

$$+\sum_k\langle n|x^2|k\rangle\langle k|H|m\rangle$$

$$=E_n\langle n|x^2|m\rangle-2\sum_k\langle n|x|k\rangle E_k\langle k|x|m\rangle+\langle n|x^2|m\rangle E_m$$

$$=-\frac{\hbar^2}{\mu}\delta_{nm}$$

所以

$$2E_n\langle n|x^2|n\rangle-2\sum_k E_k\langle n|x|k\rangle\langle k|x|n\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}$$

$$2\sum_k(E_n-E_k)\langle n|x|k\rangle\langle k|x|n\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}$$

$$\sum_k(E_k-E_n)|x_{kn}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}$$

另一种做法是：

$$A=\sum_n(E_n-E_m)|x_{nm}|^2$$

$$=\sum_n\langle m|x|n\rangle\langle n|(E_n-E_m)x|m\rangle$$

$$=-\sum_n\langle m|x|n\rangle\langle n|(x\hat{H})|m\rangle$$

$$=-\sum_n\langle m|x|n\rangle\frac{1}{2\mu}\langle n|(x\hat{p}^2)|m\rangle$$

$$=-\frac{i\hbar}{\mu}\sum_n\langle m|x|n\rangle\langle n|\hat{p}|m\rangle$$

$$=-\frac{i\hbar}{\mu}\langle m|x\hat{p}|m\rangle$$

$$A=\sum_n\langle m|(E_n-E_m)x|n\rangle\langle n|x|m\rangle$$

$$=+\frac{i\hbar}{\mu}\langle m|\hat{p}x|m\rangle$$

$$\therefore\quad 2A=\frac{i\hbar}{\mu}\langle m|\hat{p}x-x\hat{p}|m\rangle$$

$$=\frac{i\hbar}{\mu}\cdot(-i\hbar)$$

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

$$\therefore\quad A=\frac{\hbar^2}{2\mu}$$

33、在一维谐振子的哈密顿量

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

令 $\hat{P}=\hat{p}/\sqrt{\mu\hbar\omega}$　　$\hat{Q}=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$　　$\varepsilon=\frac{E}{\hbar\omega}$

它们均无量纲，此时

$$\hat{H}=\frac{1}{2}(\hat{P}^2+\hat{Q}^2)\hbar\omega$$

薛定谔方程表为

$$\frac{1}{2}(\hat{p}^2+\hat{Q}^2)\psi=\varepsilon\psi,$$

证明：

1° $[\hat{Q}\hat{p}]=i$

2° $\frac{1}{2}(\hat{p}^2+\hat{Q}^2)(\hat{Q}\pm i\hat{p})^n\psi=(\varepsilon\mp n)(\hat{Q}\pm i\hat{p})^n\psi$

3° 求出谐振子的能级及归一化的波函数

4° 令 $\hat{a}=(\hat{Q}+i\hat{p})/\sqrt{2}$， $\hat{a}^+=(\hat{Q}-i\hat{p})/\sqrt{2}$

求 $(\hat{a}\,\hat{a}^+)=?$

利用 $\hat{a}^+$ 及基态波函数将第 n 个激发态表示出来；

5° 求 $\hat{p}$, $\hat{Q}$ 在能量表象中的矩阵元。

[证]:

1° $(\hat{Q},\hat{p})=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}(x\,\hat{p})=\frac{1}{\hbar}i\hbar=i$

2° $(\hat{Q}+i\hat{p})(\hat{Q}-i\hat{p})=\hat{Q}^2+\hat{p}^2-i(\hat{Q}\,\hat{p})$

$$=\hat{Q}^2+\hat{p}^2+1$$

$(\hat{Q}-i\hat{p})(\hat{Q}+i\hat{p})=\hat{Q}^2+\hat{p}^2+i(\hat{Q}\,\hat{p})$

$$=\hat{Q}^2+\hat{p}^2-1$$

$\therefore\ [(\hat{Q}+i\hat{p}),(\hat{Q}-i\hat{p})]=2$

令 $(\hat{Q}+i\hat{p})=\hat{A}_-$ $\quad(\hat{Q}-i\hat{p})=\hat{A}_+$

则 $(\hat{A}_-\,\hat{A}_+)=2$

$\hat{p}^2+\hat{Q}^2=\hat{A}_-\hat{A}_+-1=\hat{A}_+\hat{A}_-+1$

$\therefore\ \frac{1}{2}(\hat{A}_-\hat{A}_+-1)\hat{A}_-^n\psi=\frac{1}{2}\hat{A}_-\hat{A}_+\hat{A}_-^n\psi-\frac{1}{2}\hat{A}_-^n\psi$

$\frac{1}{2}\hat{A}_-\hat{A}_+\hat{A}_-^n\psi=\frac{1}{2}\hat{A}_-(\hat{A}_-\hat{A}_+-2)\hat{A}_-^{n-1}\psi$

$$=\frac{1}{2}\hat{A}_-^2\hat{A}_+\hat{A}_-^{n-1}\psi-\hat{A}_-^n\psi$$

$$=\frac{1}{2}\hat{A}_-^2(\hat{A}_-\hat{A}_+-2)\hat{A}_-^{n-2}\psi-\hat{A}_-^n\psi$$

$$=\frac{1}{2}\hat{A}_-^3\hat{A}_+\hat{A}_-^{n-2}\psi-2\hat{A}_-^n\psi$$

$$=\cdots\cdots$$

$$=\frac{1}{2}\hat{A}_-^{n+1}\hat{A}_+\psi-n\hat{A}_-^n\psi$$

$$=\hat{A}_-^n\frac{1}{2}(\hat{p}^2+\hat{Q}^2+1)\psi-n\hat{A}_-^n\psi$$

$$=\hat{A}_-^n\varepsilon\psi+\frac{1}{2}\hat{A}_-^n\psi-n\hat{A}_-^n\psi$$

$$\therefore\quad \frac{1}{2}(\hat{p}^2+\hat{Q}^2)(\hat{Q}+i\hat{p})^n\psi=(\varepsilon-n)(\hat{Q}+i\hat{p})^n\psi$$

同理可证

$$\frac{1}{2}(\hat{p}^2+\hat{Q}^2)(\hat{Q}-i\hat{p})^n\psi=(\varepsilon+n)(\hat{Q}-i\hat{p})^n\psi$$

3° $\hat{H}=\frac{1}{2}(\hat{p}^2+\hat{Q}^2)$的本征值总是正的。设$\psi_0$是最低能级的波函数，则有

$$(\hat{Q}+i\hat{p})\psi_0=0$$

$$\text{即}\ \left(\frac{\partial}{\partial Q}+Q\right)\psi_0=0$$

$$\psi_0=C_0e^{-Q^2/2}$$

$$\hat{H}\psi_0=\frac{1}{2}C_0\left(-\frac{\partial^2}{\partial Q^2}e^{-Q^2/2}+Q^2e^{-Q^2/2}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\psi_0$$

$$\therefore\quad \varepsilon_0=\frac{1}{2}$$

这样求出的谐振子能量是

$$\varepsilon_n=n+1/2\qquad n\geqslant 0$$

相应的波函数为

$$\psi_n=C_n(\hat{Q}-i\hat{p})^ne^{-Q^2/2}$$

求归一化系数：

$$\int\psi_n^*\psi_n\,dQ=1$$

$$C_0^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Q^2}dQ=C_0^2\sqrt{\pi}=1$$

$$C_0=\frac{1}{(\pi)^{1/4}}$$

$$\psi_0=\frac{1}{(\pi)^{1/4}}e^{-\frac{Q^2}{2}}$$

ψ_n可以用ψ_{n-1}来表示

$$\psi_n = C_n(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_{n-1}$$

归一化条件要求：

$$|C_n|^2\int|(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_{n-1}|^2 dQ = 1$$

$$\int|(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_{n-1}|^2 dQ$$

$$=\int\psi^*_{n-1}(\hat{Q}+i\hat{P})(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_{n-1}dQ$$

$$=\int\psi^*_{n-1}(\hat{Q}^2+\hat{P}^2+1)\psi_{n-1}dQ$$

$$=\int\psi^*_{n-1}(2\hat{H}+1)\psi_{n-1}dQ$$

$$=2(n-1/2)+1$$

$$=2n$$

$$\therefore\quad C_n^2 2n = 1$$

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2n}}$$

而

$$\psi_n = C_n(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_{n-1}$$

$$= C_nC_{n-1}(\hat{Q}-i\hat{P})^2\psi_{n-2}$$

$$= \cdots\cdots$$

$$= C_nC_{n-1}\cdots C_1(\hat{Q}-i\hat{P})^n\psi_0$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}(\hat{Q}-i\hat{P})^n e^{-Q^2/2}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\frac{1}{(\pi)^{1/4}}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n e^{-Q^2/2}$$

4° 从2°

$$[(\hat{Q}+i\hat{P}),(\hat{Q}-i\hat{P})] = 2$$

$$\therefore\quad [\hat{Q}\ \ \hat{Q}^+] = 1$$

$$\because\quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(\hat{Q}-i\hat{P})^n\psi_0$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{Q}^{+n}\psi_0$$

5° $\because\quad \psi_{n+1} = C_{n+1}(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_n$

$$\therefore\quad \int\psi^*_{n+1}\psi_{n+1}dQ = \int C_{n+1}\psi^*_{n+1}(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_n dQ = 1$$

$$(\hat{Q}-i\hat{P})_{n+1\,n}=\frac{1}{C_{n+1}}$$
$$=\sqrt{2(n+1)}$$

$$\because\ (\hat{Q}+i\hat{P})\psi_{n+1}=C_{n+1}(\hat{Q}+i\hat{P})(\hat{Q}-i\hat{P})\psi_n$$
$$=C_{n+1}(\hat{Q}^2+\hat{P}^2+1)\psi_n$$
$$=C_{n+1}(2n+2)\psi_n$$

$$\therefore\ (\hat{Q}+i\hat{P})_{n,n+1}=C_{n+1}\cdot 2(n+1)$$
$$=\sqrt{2(n+1)}$$

$$\hat{A}_+=\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&0&0&0&\cdot\\ \sqrt{1}&0&0&0&\cdot\\ 0&\sqrt{2}&0&0&\cdot\\ 0&0&\sqrt{3}&0&\cdot\\ -&-&-&-&\cdot\end{pmatrix}$$

$$\hat{A}_-=\sqrt{2}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&\cdot\\ 0&0&\sqrt{2}&0&\cdot\\ 0&0&0&\sqrt{3}&\cdot\\ 0&0&0&0&\cdot\\ -&-&-&-&-\end{pmatrix}$$

$$\hat{Q}=\frac{1}{2}(A_++A_-)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&-\\ \sqrt{1}&0&\sqrt{2}&0&-\\ 0&\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&-\\ 0&0&\sqrt{3}&0&-\\ -&-&-&-&-\end{pmatrix}$$

$$Q_{mn}=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{n} & m=n+1\\ \frac{\sqrt{n+1}}{2} & m=n-1\\ 0 & \text{其它情形}\end{cases}$$

$$\hat{P}=\frac{1}{2i}(A_--A_+)=\frac{1}{i\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}&0&0&-\\ -\sqrt{1}&0&\sqrt{2}&0&-\\ 0&-\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&-\\ 0&0&-\sqrt{3}&0&-\end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_{mn}=\begin{cases}i\sqrt{\frac{n}{2}} & m=n+1\\ -i\sqrt{\frac{n+1}{2}} & m=n-1\\ 0 & \text{其它情形}\end{cases}$$

34. 设么正标符 $\hat{U}(t)$ 对 t 可导，则标符 $\hat{H}=i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}\hat{U}^+$ 为厄密标符。反之，若 $\hat{U}$ 满足方程

$$i\hbar\frac{d\hat{U}(t)}{dt}=\hat{H}\hat{U}$$

$\hat{H}$为厄密（可能依赖于t），则$\hat{U}^+\hat{U}$满足方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}\hat{U}^+=[\hat{H}\hat{U}\hat{U}^+]$$

〔证〕：

∵ $\hat{U}(t)$是幺正算符

∴ $\hat{U}^+\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^+=1$

∵ $\hat{U}(t)$对t可导，

∴ $\frac{d\hat{U}^+}{dt}\hat{U}+\hat{U}^+\frac{d\hat{U}}{dt}=\hat{U}\frac{d\hat{U}^+}{dt}+\frac{d\hat{U}}{dt}\hat{U}^+=0$

∵ $\hat{H}=i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}\hat{U}^+$

而 $\hat{H}^+=-i\hbar(-\frac{d\hat{U}}{dt}\hat{U}^+)$

$=i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}\hat{U}^+$

$=\hat{H}$

∴ $\hat{H}$是厄密算符。

∵ $\hat{U}$满足 $i\hbar\frac{d\hat{U}(t)}{dt}=\hat{H}\hat{U}$

∴ $\hat{U}^+$满足 $-i\hbar\frac{d\hat{U}^+(t)}{dt}=\hat{U}^+\hat{H}$

∴ $i\hbar\hat{U}\hat{U}^+=i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}\hat{U}^++i\hbar\hat{U}\frac{d}{dt}\hat{U}^+$

$=\hat{H}\hat{U}\hat{U}^+-\hat{U}\hat{U}^+\hat{H}$

$=[\hat{H}\hat{U}\hat{U}^+]$

35、设U为幺正算符

$$U=\frac{1}{2}(U+U^+)+i(\frac{U-U^+}{2i})=A+iB$$

证明：(1) A与B为厄密算符，$A^2+B^2=1$

(2) $[A,B]=0$，因而A，B可同时对角化。

(3) 设A，B的共同本征态为$|A'B'\rangle$，本征值分别为A'，B'，则$U'=A'+iB'$，$|U'|=1$

即 $A'^2+B'^2=1$

令 $U'=e^{iH'}=\dfrac{1+i\,tg\,H'/2}{1-i\,tg\,H'/2}$ （H′为实数）

$A'=\cos H'$ $\quad B'=\sin H'$

(4) 证明 U 可以表为

$$U=e^{iH} \qquad \text{(H厄密)}$$

$$=\frac{1+i\,tg\,H/2}{1+i\,tg\,H/2}$$

〔证〕：

(1) U 是幺正算符 $\quad\therefore\; UU^+=U^+U=1$

$$A=\frac{1}{2}(U+U^+)$$

$$A^+=\frac{1}{2}(U^++U)=\frac{1}{2}(U+U^+)$$

$$=A$$

$$B=\frac{U-U^2}{2i}$$

$$B^+=-\frac{U^+-U}{2i}$$

$$=\frac{U-U^+}{2i}=B$$

∴ A，B 是厄密算符．

$$A^2=\frac{1}{2}(U+U^+)\frac{1}{2}(U+U^+)$$

$$=\frac{1}{4}(U^2+UU^+-U^+U+U^{+2})$$

$$=\frac{1}{4}(U^2+U^{+2})+\frac{1}{2}$$

$$B^2=\frac{1}{2i}(U-U^+)\frac{1}{2i}(U-U^+)$$

$$=-\frac{1}{4}(U^2-UU^+-U^+U+U^{+2})$$

$$=-\frac{1}{4}(U^2+U^{+2})+\frac{1}{2}$$

$\therefore\quad A^2+B^2=1$

(2) $\quad AB=\frac{1}{2}(U+U^+)\frac{1}{2i}(U-U^+)$

$$= \frac{1}{4i}(U^2 - UU^+ + U^+U - U^{+2})$$
$$= \frac{1}{4i}(U^2 - U^{+2})$$
$$BA = \frac{1}{2i}(U - U^+)\frac{1}{2}(U + U^+)$$
$$= \frac{1}{4i}(U^2 - U^{+2} + UU^+ - U^+U)$$
$$= \frac{1}{4i}(U^2 - U^{+2})$$

$\therefore \quad AB - BA = 0$

因而 A, B 可同时对角化。

(3) $|A'B'\rangle$ 是 A，B 的共同本征态即：

$$A|A'B'\rangle = A'|A'B'\rangle$$
$$B|A'B'\rangle = B'|A'B'\rangle$$
$$U|A'B'\rangle = (A+iB)|A'B'\rangle$$
$$= (A'+iB')|A'B'\rangle$$
$$= U'|A'B'\rangle$$

$\therefore \quad U' = A' + iB'$

$\because \quad A^2 + B^2 = 1$

$\therefore \quad (A^2 + B^2)|A'B'\rangle = |A'B'\rangle$

左边 $= (A'^2 + B'^2)|A'B'\rangle$

$\therefore \quad A'^2 + B'^2 = 1$

$$|U'| = \sqrt{U'^+U'} = \sqrt{A'^2 + B'^2} = 1$$

令 $\quad U' = e^{iH'}$

则 $\quad U' = \cos H' + i\sin H'$

$\therefore \quad A' = \cos H'$

$\quad B' = \sin H'$

而 $\quad \dfrac{1 + i\,tg\,H'/2}{1 - i\,tg\,H'/2} = \dfrac{1 - tg^2 H'/2}{1 + tg^2 H'/2} + i\dfrac{2\,tg\,H'/2}{1 + tg^2 H'/2}$

$$= (\cos^2 H'/2 - \sin^2 H'/2) + i\,2\cos H'/2 \sin H'/2$$
$$= \cos H' + i\sin H'$$
$$= A' + iB'$$
$$U'$$

(4) H 是厄密算符，它的本征值是 H'，本征函数是 $|H'\rangle = |A'B'\rangle$，在这些本征函数展开的空间中有

$$U = e^{iH}$$
$$= \sum_{H'} e^{iH'}|H'\rangle\langle H'|$$
$$= \sum_{H'} \frac{1+i\,tg\,H'/2}{1-i\,tg\,H'/2}|H'\rangle\langle H'|$$
$$= \sum_{H'} \frac{1+i\,tg\,H/2}{1-i\,tg\,H/2}|H'\rangle\langle H'|$$
$$= \frac{1+i\,tg\,H/2}{1-i\,tg\,H/2}$$

36. 证明：

(1) 若一个 N 阶矩阵与所有的 N 阶对角矩阵对易，则必为对角矩阵。

(2) 若一个 N 阶矩阵与所有的 N 阶矩阵对易，则必为常数矩阵。

[证]：

(1) 若 N 阶矩阵 A 与所有 N 阶对角矩阵对易，则也与对角元均不相同的对角矩阵 B 对易。

即 $$AB = BA$$
$$(AB)_{\alpha\beta} = (BA)_{\alpha\beta}$$
$$\sum_\gamma A_{\alpha\gamma}B_{\gamma\beta} = \sum_\gamma B_{\alpha\gamma}A_{\gamma\beta}$$

因为 B 是对角矩阵，所以

$$A_{\alpha\beta}B_{\beta\beta} = B_{\alpha\alpha}A_{\alpha\beta}$$
$$A_{\alpha\beta}(B_{\beta\beta} - B_{\alpha\alpha}) = 0$$

因为 B 的所有矩阵元均不相同，所以

若 $\beta \neq \alpha$，则 $B_{\beta\beta} \neq B_{\alpha\alpha}$

$$\therefore A_{\alpha\beta} = 0$$

若 $\beta = \alpha$ 则 $A_{\alpha\alpha}$ 不一定为 0

$$\therefore \quad A_{\alpha\beta}=A_{\alpha\alpha}\,\delta_{\alpha\beta}$$

A 是对角矩阵。

(2) 若 N 阶矩阵 A 与所有 N 阶矩阵对易，则一定也与所有 N 阶对角矩阵对易，所以，A 一定是对角矩阵。

再设 B 是一个所有矩阵元均不为 0 的 N 阶矩阵，A 与 B 也对易。即：

$$AB=BA$$

$$(AB)_{\alpha\beta}=(BA)_{\alpha\beta}$$

$$A_{\alpha\alpha}B_{\alpha\beta}=B_{\alpha\beta}A_{\beta\beta}$$

$$B_{\alpha\beta}(A_{\alpha\alpha}-B_{\beta\beta})=0$$

$$B_{\alpha\beta}\neq 0$$

$$\therefore \quad A_{\alpha\alpha}=B_{\beta\beta}=C$$

$$A=C\,I$$

A 是常数矩阵。

37. 厄密标符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$，满足 $\hat{A}^2=\hat{B}^2=1$，$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，求：

(1) 在 A 表象中 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的矩阵表示式，并求 $\hat{B}$ 的本征函数表示式。

(2) 在 B 表象中 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的矩阵表示式，并求 A 的本征函数表示式。

(3) A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵。

[解]:

(1) 在 A 表象中 $\hat{A}$ 具有对角矩阵的形式

$\because \quad \hat{A}^2=1$

设 $\hat{A}\varphi=\lambda\varphi$，则

$$\hat{A}^2\varphi=\lambda\lambda\varphi=\lambda^2\varphi$$

$\therefore \quad \lambda^2=1 \qquad \lambda=\pm 1$

$\hat{A}$ 的本征值为 ± 1，在 $\hat{A}$ 对角化的表象中，讨论最简单的情

求 $\hat{B}$ 的本征函数的表示式：

$\hat{B}$ 的本征值是 ± 1

$\lambda=1$ $\quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad c_1=c_2$

取适当相角后， $c_1=c_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|B'1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

或 $\quad \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=0 \qquad \begin{matrix} c-c_2=0 \\ c_1=c_2=\frac{1}{\sqrt{2}} \end{matrix}$

$\lambda=-1$ $\quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ -c_2 \end{pmatrix}=-\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad c_1=c_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|B'-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

(2) 与(1)相同在 B' 表象中。

$$\hat{B}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{A}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ 或 } \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$|A'=1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |A'=-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

(3) $\quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=S^{+}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}S$

$$S\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}S$$

令 $S=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

由上式可得：

$$\begin{pmatrix} a & -b \\ c & -d \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} c & d \\ a & b \end{pmatrix}$$

$$a=c \qquad d=-b$$

$$S=\begin{pmatrix} a & b \\ a & -b \end{pmatrix}$$

S 是幺正矩阵 $S^+S=1$ 得

$$\begin{pmatrix} 2|a|^2 & 0 \\ 0 & 2|b|^2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

则可得 $a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$$

38. 设 $\hat{K}=\hat{L}\hat{M}$，$\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$。若 $\hat{K}\varphi=\lambda\varphi$，$\lambda$为$\hat{K}$的本征值。则 $u=\hat{L}\varphi$ 也是$\hat{K}$的本征函数，本征值为$\lambda-1$。$v=\hat{M}\varphi$ 也是$\hat{K}$的本征函数，本征值为$\lambda+1$。

〔解〕：
$$\begin{aligned}\hat{K}u&=\hat{K}\hat{L}\varphi=\hat{L}\hat{M}\hat{L}\varphi=\hat{L}(\hat{L}\hat{M}-1)\varphi\\&=\hat{L}\hat{K}\varphi-\hat{L}\varphi=\lambda\hat{L}\varphi-\hat{L}\varphi\\&=(\lambda-1)u\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{K}v&=\hat{K}\hat{M}\varphi=\hat{L}\hat{M}\hat{M}\varphi\\&=(1+\hat{M}\hat{L})\hat{M}\varphi\\&=\hat{M}\varphi+\hat{M}k\varphi\\&=\hat{M}\varphi+\hat{M}\lambda\varphi\\&=(\lambda+1)v\end{aligned}$$

39. 设λ是一个小量，求证：

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots$$

〔证〕：将$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}$展成幂级数

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\hat{C}_n$$

其中 $\hat{C}_n$ 是待定的算符

上式左乘 $(\hat{A}-\lambda\hat{B})$，得

$$\begin{aligned}1&=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{C}_n\\&=\hat{A}\hat{C}_0+\sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n(\hat{A}\hat{C}_n-\hat{B}\hat{C}_{n-1})\end{aligned}$$

比较等式两边λ的同幂项的系数，得到

$$\hat{A}\hat{C}_0=1$$
$$\hat{A}\hat{C}_n-\hat{B}\hat{C}_{n-1}=0$$

所以
$$\hat{C}_0=\hat{A}^{-1}$$
$$\hat{C}_n=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{C}_{n-1}$$

$$=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{C}_{n-2}$$

$$=\cdots\cdots$$

$$=\underbrace{\hat{A}^{-1}\hat{B}\cdots\hat{A}^{-1}\hat{B}}_{n对}\hat{A}^{-1}$$

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots$$

40、证明：

$$e^{\hat{L}}\hat{A}e^{-\hat{L}}=\hat{A}+[\hat{L}\hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{L}[\hat{L}A]]+\frac{1}{3!}[\hat{L}[\hat{L}[[\hat{L}\hat{A}]]+\cdots$$

[证]：

令算符 $\hat{A}(\lambda)=e^{\lambda\hat{L}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{L}}$ 　　λ为参量

$$\frac{d}{d\lambda}\hat{A}(\lambda)=\hat{L}\hat{A}(\lambda)-\hat{A}(\lambda)\hat{L}=[\hat{L}\hat{A}(\lambda)]$$

$$\frac{d^2}{d\lambda^2}\hat{A}(\lambda)=\frac{d}{d\lambda}\frac{d}{d\lambda}\hat{A}(\lambda)=\frac{d}{d\lambda}[\hat{L}\hat{A}(\lambda)]$$

$$=[\hat{L},\frac{d}{d\lambda}\hat{A}(\lambda)]$$

$$=[\hat{L},[\hat{L}\hat{A}(\lambda)]$$

$$\frac{d^n}{d\lambda^n}\hat{A}(\lambda)=[\hat{L}[\hat{L}\cdots[\hat{L}\hat{A}(\lambda)]\cdots]$$

而 $e^{\hat{L}}\hat{A}e^{-\hat{L}}=\hat{A}(1)$

将 $\hat{A}(1)$写成泰勒级数的形式

$$\hat{A}(1)=\hat{A}(0)+\frac{d}{d\lambda}\hat{A}(0)+\frac{1}{2!}\frac{d^2}{d\lambda^2}\hat{A}(0)+\cdots$$

$$=\hat{A}+[\hat{L}\hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{L}[\hat{L}\hat{A}]]+\cdots$$

证完。

41、设算符$\hat{A}$，$\hat{B}$都与它们的对易式$(\hat{A},\hat{B})$对易。

证明：　　$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}=e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B})}$

[证]：　　令 $f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda}=\hat{A}f(\lambda)+e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}-e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}(\hat{A}+\hat{B})e^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$$

$$=\hat{A}f(\lambda)-e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}\hat{A}e^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$$

$$=\hat{A}f(\lambda)-e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{B}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$$

从40题可知：

$$e^{\lambda\hat{B}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{B}}=\hat{A}+\lambda[\hat{B}\hat{A}]+\frac{\lambda^2}{2!}[\hat{B}[\hat{B}\hat{A}]]+\cdots$$
$$=\hat{A}+\lambda[\hat{B}\hat{A}]$$

因为 $\hat{B}$ 与 $[\hat{B}\hat{A}]$ 对易

代入上式得

$$\frac{df}{d\lambda}=e^{\lambda\hat{A}}\lambda[\hat{A}\hat{B}]e^{-\lambda\hat{A}}f(\lambda)$$
$$=\lambda[\hat{A}\hat{B}]f(\lambda)$$

对上式积分：

$$f(\lambda)=e^{\frac{1}{2}\lambda^2[AB]}$$

即 $$e^{\lambda\hat{A}}\cdot e^{\lambda\hat{B}}\cdot e^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}=e^{\frac{1}{2}\lambda^2[AB]}$$

等式两边乘以 $e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$，并令 $\lambda=1$，则得

$$e^{\hat{A}}\cdot e^{\hat{B}}=e^{\frac{1}{2}[\hat{A}\hat{B}]}\cdot e^{\hat{A}+\hat{B}}$$

因为 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 与 $[\hat{A}\hat{B}]$ 对易，所以

$$e^{\hat{A}}\cdot e^{\hat{B}}=e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A}\hat{B}]}$$

42. 矩阵 A 的本征值为 A_i' $(i=1,2\cdots)$，令 $B=e^A$，其本征值为 B_i' $(i=1,2\cdots)$，则 $B_i'=e^{A_i'}$。

由此证明 $\quad \det B=e^{TrA}$

[证]：由26题可知：

$$\det B=\det(S^+BS)$$

可以选一表象使 B 是对角的，则

$$\det B=\prod_i B_i'=e^{\sum_i A_i}$$

同样从26题可知

$$TrA=Tr(L^{-1}AL)$$

即 A 的阵迹是不随表象而异的，在 A 对角的表象中

$$TrA=\sum_i A_i'$$

由此可得：$\quad \det B=e^{TrA}$

43. 设(u,u) (v,v)取有限值，证明

$$\mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle$$

$$\mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle$$

〔证〕：

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle u| \\
&= \sum_n \langle n|u\rangle\langle u|n\rangle \\
&= \sum_n \langle u|n\rangle\langle n|u\rangle \\
&= \langle u|u\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle v\rangle \\
&= \sum_n \langle n|u\rangle\langle v|n\rangle \\
&= \sum_n \langle v|n\rangle\langle n|u\rangle \\
&= \langle v|u\rangle
\end{aligned}$$

44. 设称符$\hat{A}(\xi)$依赖于一个连续变化的参数ξ，它对ξ的导数定义为：

$$\frac{d}{d\xi}\hat{A}(\xi) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)}{\varepsilon}$$

证明：

1° $\dfrac{d}{d\xi}e^{i\hat{\sigma}\xi} = i\hat{\sigma}e^{i\hat{\sigma}\xi}$

2° 设$\hat{A}(\xi)$，$\hat{B}(\xi)$对ξ可导，则$\dfrac{d}{d\xi}(\hat{A}\hat{B}) = \dfrac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{B}+\hat{A}\dfrac{d\hat{B}}{d\xi}$

特例

$$\frac{d}{d\xi}\hat{A}^2 = \frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{A}+\hat{A}\frac{d\hat{A}}{d\xi}$$

3° 设$\hat{A}$之逆存在，$\hat{A}$对ξ可导，则

$$\frac{d}{d\xi}\hat{A}^{-1} = -\hat{A}^{-1}\frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{A}^{-1}$$

〔证〕：

1° $$\begin{aligned}
e^{i\hat{\sigma}\xi} &= e^{\hat{A}(\xi)} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{A}^n(\xi)
\end{aligned}$$

即 $$\frac{d\hat{A}(\xi)}{d\xi}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{i\hat{O}(\xi+\varepsilon)-i\hat{O}\xi}{\varepsilon}$$

$$=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{i\hat{O}\varepsilon}{\varepsilon}=i\hat{O}$$

$$\frac{d\hat{A}^n}{d\xi}=ni\hat{O}\hat{A}^{n-1}$$

$$\therefore\quad \frac{d}{d\xi}e^{i\hat{O}\xi}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{d\hat{A}^n}{d\xi}$$

$$=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}i\hat{O}\hat{A}^{n-1}$$

2° 令 $\hat{C}=\hat{A}\hat{B}$

$$\hat{C}+\Delta C=(\hat{A}+\Delta\hat{A})(\hat{B}+\Delta\hat{B})$$

$$\Delta C=\hat{A}\Delta\hat{B}+\Delta\hat{A}\hat{B}+\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$$

$$=\hat{A}\Delta\hat{B}+\Delta\hat{A}\hat{B}$$

$\Delta A\Delta B$ 是二级小量

$$\lim_{\Delta\xi\to 0}\frac{\Delta C}{\Delta\xi}=\hat{A}\frac{d\hat{B}}{d\xi}+\frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{B}$$

3° $\hat{A}$ 有逆存在则

$$\hat{A}\hat{A}^{-1}=\hat{A}^{-1}\hat{A}=1$$

$$\hat{A}^{-1}=\hat{A}^{-1}\hat{A}\hat{A}^{-1}$$

$$\frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi}=\frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi}\hat{A}\hat{A}^{-1}+\hat{A}^{-1}\frac{d\hat{A}}{d\xi}A^{-1}+\hat{A}^{-1}\hat{A}\frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi}$$

$$\frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi}=\frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi}+\hat{A}^{-1}\frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{A}^{-1}+\frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi}$$

$$\therefore\quad \frac{d\hat{A}^{-1}}{d\xi}=-\hat{A}^{-1}\frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{A}^{-1}$$

45 设 $[\hat{A}\hat{B}]_+\equiv\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ 证明

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

$$[\hat{a}\hat{A},\hat{b}\hat{B}]=\frac{1}{2}[\hat{a}\hat{b}]_-[\hat{A}\hat{B}]+\frac{1}{2}[\hat{a}\hat{B}][\hat{A}\hat{B}]_+$$

其中 $\hat{a}\hat{b}$ 与 $\hat{A}\hat{B}$ 对易

（以上恒等式在处理费密子对易关系时有用）

[证]:

1° $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}$

右边 $=\hat{A}\hat{B}\hat{C}+\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}-\hat{C}\hat{B}\hat{A}+\hat{C}\hat{A}\hat{B}+\hat{C}\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}$

$=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}$

$\therefore$ 等式成立

2° 左边 $=\hat{a}\hat{A}\hat{b}\hat{B}-\hat{b}\hat{B}\hat{a}\hat{A}$

$=\hat{a}\hat{b}\hat{A}\hat{B}-\hat{b}\hat{a}\hat{B}\hat{A}$

右边 $=\frac{1}{2}(\hat{a}\hat{b}+\hat{b}\hat{a})(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})+\frac{1}{2}(\hat{a}\hat{b}-\hat{b}\hat{a})(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})$

$=\frac{1}{2}\hat{a}\hat{b}\hat{A}\hat{B}-\frac{1}{2}\hat{a}\hat{b}\hat{B}\hat{A}+\frac{1}{2}\hat{b}\hat{a}\hat{A}\hat{B}-\frac{1}{2}\hat{b}\hat{a}\hat{B}\hat{A}+\frac{1}{2}\hat{a}\hat{b}\hat{A}\hat{B}+\frac{1}{2}\hat{a}\hat{b}\hat{B}\hat{A}-\frac{1}{2}\hat{b}\hat{a}\hat{A}\hat{B}-\frac{1}{2}\hat{b}\hat{a}\hat{B}\hat{A}$

$=\hat{a}\hat{b}\hat{A}\hat{B}-\hat{b}\hat{a}\hat{B}\hat{A}$

$\therefore$ 等式成立。

46. 设一体系在空间转动，$\vec{a}$ 与 $\vec{b}$ 是随体系转动的任意两矢量，彼此对易，但与角动量不对易。证明：

$$(\hat{\vec{J}}\cdot\vec{a})(\hat{\vec{J}}\cdot\vec{b})-(\hat{\vec{J}}\cdot\vec{b})(\hat{\vec{J}}\cdot\vec{a})=i\hat{\vec{J}}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})\cdots \qquad (1)$$

并由此证明：角动量在转动坐标轴（ξ, η, ζ）上的分量的对易式

$$[\hat{J}_\xi\ \hat{J}_\eta]=-i\hbar\hat{J}_\zeta\cdots \qquad (2)$$

与固定空间坐标轴上分量的对易式差一个负号

[证]：选一坐标系其轴为 1, 2, 3

$$J\cdot(\vec{a}\times\vec{b})=J_1(a_2b_3-a_3b_2)+J_2(a_3b_1-a_1b_3)+J_3(a_1b_2-a_2b_1)$$

$$(\hat{\vec{J}}\cdot\vec{a},\hat{\vec{J}}\cdot\vec{b})=[J_1a_1+J_2a_2+J_3a_3,\ J_1b_1+J_2b_2+J_3b_3]$$

$$=[J_1a_1,J_1b_1]+[J_1a_1,J_2b_2]+[J_1a_1\ J_3b_3]$$

$$[J_2a_2\ J_1b_1]+[J_2a_2\ J_2b_2]+[J_2a_2\ J_3b_3]$$

$$\{J_3 a_3 J_1 b_1\} + \{J_3 a_3 J_2 b_2\} + \{J_3 a_3 J_3 b_3\}$$

$$= J_1\{a_1 J_2\} b_2 + J_2\{J_1 b_2\} a_1 + \{J_1 J_2\} b_2 a_1$$

$$J_1\{a_1 J_3\} b_3 + J_3\{J_1 b_3\} a_1 + \{J_1 J_3\} b_3 a_1$$

$$J_2\{a_2 J_1\} b_1 + J_1\{J_2 b_1\} a_2 + \{J_2 J_1\} b_1 a_2$$

$$J_2\{a_2 J_3\} b_3 + J_3\{J_2 b_3\} a_2 + \{J_2 J_2\} b_3 a_2$$

$$J_3\{a_3 J_1\} b_1 + J_1\{J_3 b_1\} a_3 + \{J_3 J_1\} b_1 a_3$$

$$J_3\{a_3 J_2\} b_2 + J_2\{J_3 b_2\} a_3 + \{J_3 J_2\} b_2 a_3$$

$$= J_1(i\hbar a_3 b_2) + J_2(-i\hbar b_3 a_1) + i\hbar J_3 b_2 a_1$$

$$J_1(-i\hbar a_2 b_3) + J_3(-i\hbar b_2 a_1) + (-i\hbar J_2 b_3 a_1)$$

$$J_2(-i\hbar a_3 b_1) + J_1(-i\hbar b_3 a_2) - i\hbar J_3 b_1 a_2$$

$$J_2(i\hbar a_1 b_3) + J_3(+i\hbar b_1 a_2) + i\hbar J_1 b_3 a_2$$

$$J_3 i\hbar a_2 b_1 + J_1 i\hbar b_2 a_3 + i\hbar J_2 b_1 a_3$$

$$J_3(-i\hbar a_1 b_2) + J_2(-i\hbar b_1 a_3) + (-i\hbar J_1 b_2 a_3)$$

$$= i\hbar J_1(a_3 b_2 - a_2 b_3) + i\hbar J_2(a_1 b_3 - a_3 b_1) + i\hbar J_3(a_2 b_1 - a_1 b_2)$$

$$= -i\hbar \vec{J}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$$

所以(1)得证。

选 $\vec{a} = \xi$　　$\vec{b} = \eta$　　则 $\vec{a}\times\vec{b} = \zeta$.

$\therefore (\vec{J}\cdot\vec{a}) = J_\xi$　　$(\vec{J}\cdot\vec{b}) = J_\eta$　　$\vec{J}\cdot(\underline{a}\times\underline{b}) = J_\zeta$.

由(1)即可直接得到

$$\{J_\xi \ J_\eta\} = -i\hbar J_\zeta$$

第五章　4. 对称性与守恒定律

1、证明力学量A（不显含t）的平均值对时间的二次微商为：

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

H为哈密顿量

[证]: 若力学量$\hat{A}$不显含t，则

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

令 $\overline{[A\ \ H]}=\bar{C}$

则 $$\frac{d^2\bar{A}}{dt^2}=\frac{1}{i\hbar}\,\frac{d\bar{C}}{dt}$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{i\hbar}\overline{[C\ H]}$$

$$=-\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[A,H],H]}$$

$$\therefore\quad -\hbar^2\frac{d^2\bar{A}}{dt^2}=\overline{[[A,H],H]}$$

2. 证明在不连续谱的能量本征态下（束缚定态）不显含t的物理量对t的导数的平均值为0。

[证]:

束缚定态为：

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$\hat{A}\psi_n(x,t)=E_n\psi_n(x,t)$$

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\int\psi_n^*(x,t)[\hat{A},H]\psi_n(x,t)dx$$

$$=E\int\psi_n^*(x,t)(\hat{A}-\hat{A})\psi_n(x,t)dx$$

$$=0$$

3. 粒子的哈密顿量为 $H=\frac{p^2}{2m}+V(r)$，证明

$$\frac{d}{dt}\overline{\vec{r}\cdot\vec{p}}=\overline{\frac{p^2}{m}}-\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$$

证明对于定态：

$$2\overline{T}=\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}\quad (\text{Virial定理})$$

T是动能标符。

〔证〕：
$$\frac{d}{dt}\vec{r}\cdot\vec{p}=\frac{1}{i\hbar}[\vec{r}\cdot\vec{p},H]$$
$$=\frac{1}{i\hbar}[xp_x+yp_y+zp_z,H]$$
$$[xp_x,H]=x[p_xH]+[xH]p_x$$
$$=x[p_xV(r)]+[x\frac{p_x^2}{2m}]p_x$$
$$=x(-i\hbar\frac{\partial V(r)}{\partial x})+i\hbar\frac{p_x^2}{m}$$

同样可得：
$$[yp_y,H]=i\hbar(\frac{p_y^2}{m}-y\frac{\partial V}{\partial y})$$
$$[zp_z,H]=i\hbar(\frac{p_z^2}{m}-z\frac{\partial V}{\partial z})$$
$$\therefore\quad \frac{d}{dt}\overline{\vec{r}\vec{p}}=\frac{\overline{p^2}}{m}-\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$$

从第2题可知，对于定态：
$$\frac{d}{dt}\overline{(\vec{r}\cdot\vec{p})}=0$$
$$\therefore\quad \frac{\overline{p^2}}{m}=\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$$
$$2\overline{T}=\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$$

4、设粒子的势场 $V(x,y,z)$ 是 x,y,z 的 n 次齐次函数，证明：$n\overline{V}=2\overline{T}$（维里定理）$V$ 是位能，T是动能。并应用于特例：

1° 谐振子 $\overline{V}=\overline{T}$

2° 库仑场 $\overline{V}=-2\overline{T}$

3° $V=Cr^n$，$n\overline{V}=2\overline{T}$

[证]： 因为 $V(x,y,z)$ 是 x,y,z 的齐次函数，所以

$$nV=\sum_{i=1}^{3}x_i\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

$$x_1=x,\quad x_2=y,\quad x_3=z$$

$$\hat{H}=T+V$$

$$=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x,y,z)$$

$$\dot{x}_i=\frac{1}{i\hbar}[x_i,H]=\frac{\hat{p}_i}{m}$$

$$\dot{\hat{p}}_i=\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i,H]=-\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

由此可以得到：

$$2\hat{T}-n\hat{V}=\sum_{i=1}^{3}\frac{\hat{p}_i^2}{m}-\sum_{i=1}^{3}x_i\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

$$=\sum_{i=1}^{3}(\dot{x}_i\hat{p}_i+x_i\dot{\hat{p}}_i)$$

选 $\hat{H}=\hat{T}+V$ 的正交归一的本征函数 ψ_n 为基，用矩阵法来证。由于运动是有限的，所以函数属于分立谱，矩阵元是有限的。

将 $\langle 2\hat{T}-nV\rangle$ 对 $|m\rangle$ 求平均

$$\langle m|2\hat{T}-nV|m\rangle$$

$$=\sum_{i=1}^{3}\sum_{l}\langle m|\dot{x}_i|l\rangle\langle l|\hat{p}_i|m\rangle+\langle m|x_i|l\rangle\langle l|\dot{\hat{p}}_i|m\rangle$$

$$\langle m|\dot{x}_i|l\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle m|x_iH-Hx_i|l\rangle$$

$$=\frac{1}{i\hbar}(E_l-E_m)\langle m|x_i|l\rangle$$

$$\langle l|\dot{\hat{p}}_i|m\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle l|\hat{p}_iH-H\hat{p}_i|m\rangle$$

$$=\frac{1}{i\hbar}(E_m-E_l)\langle l|\hat{p}_i|m\rangle$$

$$\therefore\ \langle m|2\hat{T}-nV|m\rangle$$

$$=\sum_{i=1}^{3}\sum_{l}\frac{1}{i\hbar}(E_l-E_m)\langle m|x_i|l\rangle\langle l|\hat{p}_i|m\rangle+$$

$$\frac{1}{i\hbar}(E_m-E_l)\langle m|x_i|l\rangle\langle l|\dot{\hat{p}}_i|m\rangle$$

$$2(T) = n(V)$$

特例：

1° 谐振子： $V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ $\qquad n = 2$

$$\therefore \quad 2\overline{T} = 2\overline{V} \qquad \overline{T} = \overline{V}$$

2° 库仑场

$$V \sim \frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \qquad n = -1$$

$$\therefore \quad 2\overline{T} = -\overline{V} \qquad \overline{V} = -2\overline{T}$$

3° $V = cr^n = c(x^2+y^2+z^2)^{n/2}$ 是 n 次齐次

$$\therefore \quad n\overline{V} = 2\overline{T}$$

5、证明：对于波包（一维）

$$\frac{d\overline{x^2}}{dt^2} = \frac{1}{m}(\overline{x\hat{p}} + \overline{\hat{p}x})$$

〔证〕：

$$\frac{dx^2}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar}[x^2 \hat{H}]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}[x^2 \frac{\hat{p}^2}{2m}]$$

$$= \frac{1}{i2m\hbar}\{x[x\hat{p}^2] + [x\hat{p}^2]x\}$$

$$= \frac{1}{i2m\hbar}\{x2\hat{p}i\hbar + i\hbar 2\hat{p}x\}$$

$$= \frac{1}{m}(x\hat{p} + \hat{p}x)$$

$$\therefore \quad \frac{d\overline{x^2}}{dt^2} = \frac{1}{m}(\overline{x\hat{p}} + \overline{\hat{p}x})$$

6. 求海森伯表象中，自由粒子的坐标算符。

〔解〕： $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$， $U(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$

$$\hat{x}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{x}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$= e^{i\frac{\hat{p}^2}{2m}t/\hbar}\, i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\, e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}t/\hbar}$$

$$= e^{i\frac{\hat{p}^2}{2m}t/\hbar}\left(e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}t/\hbar}\, i\hbar\frac{\hat{p}}{m}t/\hbar + i\hbar\frac{\partial}{\partial p}e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}t/\hbar}\right)$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\hat{p}}{m}t$$

$$\hat{x}_{(t)} = \hat{x} + \frac{\hat{p}}{m}t$$

7. 求海森伯表象中，谐振子的坐标与动量算符。

〔解〕: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$

在海森伯表象中算符的运动方程为：

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{x}(t)]$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{p}(t)]$$

$$\hat{H}(t) = e^{i\hat{H}t}\hat{H}e^{-i\hat{H}t} = \hat{H}$$

$$\therefore \frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}[\hat{H}, \hat{x}]e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}[\hat{H}, \hat{p}]e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

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

$$[\hat{H}\,\hat{p}] = [\frac{1}{2}m\omega^2x^2\ \hat{p}] = i\hbar m\omega^2x$$

$$\therefore \frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{\hat{p}(t)}{m}$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = -m\omega^2\hat{x}(t)$$

$$\frac{d^2\hat{x}(t)}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = -\omega^2\hat{x}(t)$$

$$\frac{d^2\hat{x}(t)}{dt^2} + \omega^2\hat{x}(t) = 0$$

$$\therefore \hat{x}(t) = C_1\cos\omega t + C_2\sin\omega t$$

$$\hat{p}(t) = m\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = -m\omega C_1\sin\omega t + m\omega C_2\cos\omega t$$

c_1、c_2 由初始条件定

$$\hat{x}_{(t)}\big|_{t=0}=\hat{x}=c_1$$

$$\hat{p}(t)\big|_{t=0}=\hat{p}=c_2 m\omega$$

$$\therefore\quad \hat{x}_{(t)}=\hat{x}\cos\omega t+\frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t$$

$$\hat{p}(t)=\hat{p}\cos\omega t-m\omega\hat{x}\sin\omega t$$

8. 多粒子体系，如不受外力，则总动量 $\hat{p}=\sum_i\hat{p}_i$ 守恒。

$$\hat{H}=\sum_i\frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}+\sum_{i<j}V(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)$$

〔解〕：

$$\hat{H}=\sum_i\frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V(\sqrt{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2+(z_i-z_j)^2})$$

$$[\hat{H}\ \hat{p}_x]$$

$$=\Big[\sum_i\frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V_{ij},\ \sum_k\hat{p}_{kx}\Big]$$

$$=\frac{1}{2}\Big[\sum_{i\neq j}V_{ij},\ \sum_k\hat{p}_{kx}\Big]$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\{[V_{ij}\ \hat{p}_{ix}]+[V_{ij}\ \hat{p}_{jx}]\}=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\Big[i\hbar\frac{\partial V_{ij}}{\partial x_i}+i\hbar\frac{\partial V_{ij}}{\partial x_j}\Big]$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\Big\{i\hbar\frac{\partial V_{ij}}{\partial r}\cdot\frac{(x_i-x_j)}{r}+i\hbar\frac{\partial V_{ij}}{\partial r}\cdot\frac{-(x_i-x_j)}{r}\Big\}$$

$$=0$$

同样可得：

$$[\hat{H}\ \hat{p}_y]=[\hat{H}\ \hat{p}_z]=0$$

$$\therefore\ \hat{p}\ \text{守恒}$$

9. 多粒子系，如所受外力矩为 0，则总角动量

$$\hat{L}=\sum_i\hat{l}_i\ \text{守恒。}$$

〔解〕：设 $V_{外}=V(\vec{r}_1\cdots\vec{r}_n)$，外力矩为 0 的意思是 $V_{外}=V(r_1\cdots r_n)$ 仅与 r,θ,φ 中的 r 有关，与 θ,φ 无关，即力仅在径向 r

方向，所以 $\vec{M}=E\times\vec{r}=0$。

而 $\hat{\vec{L}}=\sum_i\hat{\vec{l}}_i=\sum_i(\hat{l}_{ix},\hat{l}_{iy},\hat{l}_{iz})$ 均只与 θ,φ 有关，

$$\therefore\ [V_{外},\hat{L}]=0$$

又已知 $[\hat{H}_0,\hat{L}]=0$

$$\therefore\ [\hat{H},\hat{L}]=0$$

$\hat{L}$ 守恒。

10. 对于经典力学体系，若 A，B 为守恒量，则 $\{A,B\}$（泊松括号）也是守恒量（但不一定是新的守恒量。对于量子体系，若 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 为守恒量，则 $[\hat{A},\hat{B}]$ 也是。

[解]：已知 $[\hat{H}\ \hat{A}]=[\hat{H}\ \hat{B}]=0$

所以 $[\hat{H}\ \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}]$

$$=[\hat{H}\ \hat{A}\hat{B}]-[\hat{H}\ \hat{B}\hat{A}]$$

$$=\hat{A}[\hat{H}\ \hat{B}]+[\hat{H}\ \hat{A}]\hat{B}-\hat{B}[\hat{H}\hat{A}]-[\hat{H}\hat{B}]\hat{A}$$

$$=0$$

$[\hat{A},\hat{B}]$ 是守恒量。

11. N 粒子系处于下列外场中，指出那些力学量（或它们的组合）是守恒量。（动量、能量、角动量、宇称）

1° 自由粒子（无相互作用，也不受外力）

2° 无限、均匀柱对称场

3° 无限，均匀平面场

4° 中心力场

5° 均匀交换场

6° 椭球场

[解]：守恒量的定义 $[\hat{F},\hat{H}]=0$

N 粒子体系的 $\hat{H}$ 为

$$\hat H = \sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2\right) + \sum_{i<k}^{N} V(|\vec r_i - \vec r_k|) + V_{外}(\vec r_1 \cdots \vec r_n)$$

$$= \hat H_0 + V_{外}$$

已知：$[\hat\ell_\alpha\ \hat p^2]=0$ $[\hat p\ \hat p^2]=0$ $[I\ \hat p^2]=0$

$[\hat p\ V]=0$ $[I\ V]=0$ $[\hat\ell_\alpha\ V]=0$

∴ $\hat p, \hat\ell, \hat\ell^2, \hat I$ 与 $\hat H_0$ 对易，因而只需讨论这些力学量与$V_{外}$的对易式。

1° $V_{外}=0$ $\frac{\partial \hat H}{\partial t}=0$

$\hat H = \frac{\hat p^2}{2m}$

∴ $[\hat H\ \hat H]=0$

$[\hat p_\alpha\ \hat H]=0$ $\alpha = x, y, z$

$[\hat\ell_\alpha\ \hat H]=0$ $\alpha = x, y, z$

$[\hat\ell^2\ \hat H]=0$

$[\hat I\ \hat H]=0$

∴守恒量是：能量E，角动量的三个分量 $\hat\ell_x$, $\hat\ell_y$, $\hat\ell_z$ 及 $\hat\ell^2$，动量的三个分量 $\hat p_x$, $\hat p_y$, $\hat p_z$，以及宇称 $\hat I$。

2° 取 $V_{外} = V(r, \varphi, z) = V(r)$

而 $\hat p_z = -i\hbar\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i}$ $\hat\ell_z = -i\hbar\sum_i\frac{\partial}{\partial\varphi_i}$

$[\hat p_z\ V(r)]=0$

$[\hat\ell_z\ V(r)]=0$

$[\hat I\ V(r)]=0$

$\frac{\partial \hat H}{\partial t}=0$

∴守恒量是：能量E，p_z ℓ_z I。

3° 取无限均匀平面为 X—y平面

$$V_{外}=\sum_{i=1}^{n} V_i(|z_i|)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t}=0$$

$$\hat{p}_x=-i\hbar\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}$$

$$\hat{p}_y=-i\hbar\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial y_i}$$

$$\hat{l}_z=-i\hbar\sum_{i=1}^{N}\left(x_i\frac{\partial}{\partial y_i}-y_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right)$$

$\hat{I}$，$\hat{p}_x$．$\hat{p}_y$．$\hat{l}_z$ 与 $V_{外}$ 对易

∴ 守恒量是：$\hat{p}_x$．$\hat{p}_y$．$\hat{p}_z$，$\hat{I}$。能量

4°
$$V_{外}=\sum_{i=1}^{N} V_i(r_i)$$

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0$$

$\hat{L}^2$，$\hat{L}_x$．$\hat{L}_y$．$\hat{L}_z$．$\hat{I}$ 均与 $V_{外}$ 对易

∴守恒量是：能量，$\hat{L}_x$．$\hat{L}_y$．$\hat{L}_z$ $\hat{L}$（因而 $\hat{L}^2$），$\hat{I}$。

5° 设外场的方向沿z轴；用 $\varepsilon(t)$ 表示场的强度，e_i 表示体系中粒子的电荷，则有：

$$V_{外}=-\varepsilon(t)\sum_{i=1}^{N} e_i z_i$$

只有 $\hat{p}_x$，$\hat{p}_y$．$\hat{L}_z$ 与 $V_{外}$ 对易

∴ 守恒量是：$\hat{L}_z$，$\hat{p}_x$．$\hat{p}_y$

° 取坐标原点在椭球中心，由于椭球有三个互相垂直的对称面，所以取

$$V_{外}=\sum_{i=1}^{N} V_i(|x_i|,|y_i|,|z_i|)$$

只有

$$[\hat{I}\ V_{外}]=0$$

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0$$

∴ 守恒量是E、I。

12. 对于平面转子（转动惯量为I），设

$$\psi(\varphi,0)=A\sin^2\varphi，求\psi(\varphi,t)$$

〔解〕：平面转子的哈密顿量为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\varphi,t)=\hat{H}\psi(\varphi,t)$$

令：$\psi(\varphi,t)=\psi(\varphi)f(t)$

$$f(t)=Ce^{-iEt/\hbar}$$

则：$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\psi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=E\psi(\varphi)$

解得 $\psi(\varphi)=e^{\pm iK\varphi}$

$$E=\frac{\hbar^2K^2}{2I}$$

因为周期性条件可得 $K=m$，$m=0,\pm1,\pm2\cdots$

特解：$\psi_m(\varphi,t)=e^{im\varphi-i\frac{\hbar m^2}{2I}t}$

通解：$\psi(\varphi,t)=\sum\limits_m C_m\psi_m(\varphi,t)$

C_m 必须由初始条件定

$$\psi(\varphi,0)=\sum_m C_m e^{im\varphi}=A\sin^2\varphi$$
$$=\frac{A}{2}(1-\cos2\varphi)$$
$$=\frac{A}{2}-\frac{A}{2}(\frac{1}{2}e^{2i\varphi}+\frac{1}{2}e^{-2i\varphi})$$

$C_0=\frac{A}{2}$　　$C_2=-\frac{A}{4}$，　　$C_{-2}=-\frac{A}{4}$

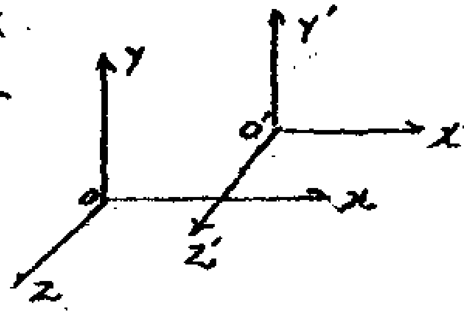
$$\therefore\ \psi(\varphi,t)=\frac{A}{2}(1-\cos2\varphi\cdot e^{-i2\hbar t/I})$$

从归一化条件 $\int_0^{2\pi}|\psi(\varphi,t)|^2d\varphi=1$

可得：$\frac{A}{2}=\frac{1}{\sqrt{3\pi}}$

最后得到：$\psi(\varphi,t)=\frac{1}{\sqrt{3\pi}}(1-\cos2\varphi\cdot e^{-\frac{i2\hbar}{I}t})$

13. 证明在伽利略变换下，薛定谔方程具有不变性。即设惯性坐标系K'以速度V相对于惯性系K（沿正x轴方向）运动。空间任何一点在两个坐标系中的坐标满足



$$\begin{cases} x = x' + vt' \\ t = t' \end{cases} \quad y = y',\ z = z' \qquad (1)$$

势能在K'，K两坐标系中的表示式有下列关系

$$V'(x',t') = V'(x - vt, t) = V(x,t) \qquad (2)$$

证明：在K'中薛定谔方程为

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t'} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V'\right)\psi \qquad (3)$$

则在K中

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\psi \qquad (4)$$

其中：
$$\psi = e^{i\left(\frac{mv}{\hbar}x - \frac{mv^2}{2\hbar}t\right)}\psi'(x - vt, t) \qquad (5)$$

〔证〕：根据波函数的统计解释，ψ与ψ'的意义完全相同。$|\psi(x,t)|^2 \equiv W(x,t)$，是$t$时刻在$x$点找到粒子的几率密度。$|\psi'(x',t')|^2 = W'(x',t')$是$t'$时刻在$x'$点找到粒子的几率密度。但是，在给定时刻、给定地点发现粒子的几率应与参照系的选择无关，所以相应的几率应该相等。即

$$W'(x',t') = W(x,t) \qquad (6)$$

从(1)式有：
$$W'(x - vt, t) = W(x,t) \qquad (6')$$

由此可以得出，ψ'，ψ两个波函数彼此只应差绝对值为1的相因子

$$\psi(x,t) = e^{iS}\psi'(x',t')$$
$$= e^{iS(x,t)}\psi'(x - vt, t) \qquad (7)$$

$$\psi'(x-vt,t)=e^{-iS(x,t)}\psi(x,t) \qquad (7')$$

以(1)引入独立变量(x,t)，则

$$\frac{\partial}{\partial x'}=\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial t'}=v\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x'^2}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

(3)式变为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi'(x',t')+V'(x',t')\psi'(x',t')$$

$$=i\hbar v\frac{\partial}{\partial x}\psi'(x',t')+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(x',t') \qquad (8)$$

将(7')代入(8)可得

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+i\hbar\left(\frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x}-v\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}+\Big[V(x,t)$$

$$+i\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-\hbar v\frac{\partial S}{\partial x}-\hbar\frac{\partial S}{\partial t}\Big]\psi$$

$$=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (9)$$

选择适当的$S(x,t)$，使得(9)→(4)

$$\frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x}-v=0 \qquad (10)$$

$$\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-\hbar v\frac{\partial S}{\partial x}-\hbar\frac{\partial S}{\partial t}=0 \qquad (10')$$

从(10)可得

$$S=\frac{mv}{\hbar}x+\varphi(t)$$

$\varphi(t)$是t的任意函数，将S代入(10')可得：

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{mv^2}{2\hbar}$$

$$\varphi(t)=-\frac{mv^2}{2\hbar}t$$

$$\therefore\quad S=\frac{mv}{\hbar}x-\frac{mv^2}{2\hbar}t$$

最后可得：$\psi(x,t)=e^{i\left(\frac{mv}{\hbar}x-\frac{mv^2}{2\hbar}t\right)}\psi'(x-vt,t)$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\psi(x,t)$$

14．证明周期场中的Bloch（布洛赫）波函数（见3—4节）

$$\psi(x)=e^{ikx}\Phi_{K}(x)$$

$$\Phi_K(x+a)=\Phi_K(x)$$

是$\hat{D}_{x(a)}$的本征函数，相应的本征值为e^{-ika}。

〔证〕：$\hat{D}_{x(a)}\psi(x)=\psi(x-a)$

$$=e^{ik(x-a)}\Phi_K(x+a)$$

$$=e^{-ika}e^{ikx}\Phi_K(x)$$

$$=e^{-ika}\cdot\psi(x)$$

15．验证积分方程，$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+i[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)d\tau]$ 有下列解

$$\hat{B}(t)=e^{i\hat{A}t}B(0)e^{-i\hat{A}t}$$

其中$\hat{A}$与时间无关。

〔解〕：从第四章40题可知

$$e^{\hat{L}}\hat{A}e^{-\hat{L}}=\hat{A}+[\hat{L},\hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{L},[\hat{L},A]]+\cdots$$

$$\therefore\quad \hat{B}(t)=\hat{B}(0)+[i\hat{A},\hat{B}(0)]t+\frac{1}{2!}[i\hat{A}(i\hat{A},\hat{B}(0)]]t^2+\cdots$$

$$\int_0^t\hat{B}(\tau)d\tau=\hat{B}(0)t+\frac{1}{2!}[i\hat{A},\hat{B}(0)]t^2+\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2!}[i\hat{A}(i\hat{A},\hat{B}(0)]t^3+\cdots$$

$$\therefore\quad \hat{B}_0+i[\hat{A}\int_0^t\hat{B}(\tau)d\tau]$$

$$=\hat{B}_0+[i\hat{A}t,\hat{B}(0)]+\frac{1}{2}[i\hat{A}[i\hat{A}\hat{B}(0)]t^2+\frac{1}{3!}[i\hat{A}\cdot[i\hat{A}(i\hat{A},\hat{B}(0))]]t^3+\cdots$$

$$=\hat{B}(t)$$

第六章　6. 中心力场

1. 质量分别为 m_1 与 m_2 的两个粒子组成的体系，质心坐标 $\vec{R}$ 及相对坐标 $\vec{r}$ 为

$$\vec{R}=(m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2)/(m_1+m_2)$$
$$\vec{r}=\vec{r}_2-\vec{r}_1$$

试求总动量 $\vec{P}=\vec{p}_1+\vec{p}_2$ 及总角动量 $\vec{L}=\vec{L}_1+\vec{L}_2$ 在 $\vec{R}$, $\vec{r}$ 表象中的算符表示

〔解〕：

$$\begin{aligned}\hat{\vec{P}}&=\hat{\vec{p}}_1+\hat{\vec{p}}_2\\&=-i\hbar(\nabla_1+\nabla_2)\\&=-i\hbar\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\nabla_R+\frac{m_2}{m_1+m_2}\nabla_R\right)\\&=-i\hbar\nabla_R\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\vec{L}}&=\hat{\vec{L}}_1+\hat{\vec{L}}_2\\&=\vec{r}_1\times\hat{\vec{p}}_1+\vec{r}_2\times\hat{\vec{p}}_2\end{aligned}$$

由关系式

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

其中 $\mu=\dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}$　　$\hat{\vec{p}}=\mu\hat{\dot{\vec{r}}}=-i\hbar\nabla_r$

代入(1)式即得　$\hat{\vec{L}}=\vec{R}\times\hat{\vec{P}}+\vec{r}\times\hat{\vec{p}}$

2. 证明：

$$\frac{1}{2}[\nabla^2,r]=\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}$$
$$\frac{1}{2}(\nabla^2,\vec{r})=\vec{\nabla}$$

〔证〕：在球坐标中

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\therefore \quad \frac{1}{2}[\nabla^2, r]$$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\cdot r\right]$$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)r - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]$$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 + r^3\frac{\partial}{\partial r}\right) - r\frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2\frac{\partial}{\partial r}\right]$$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r} + 3\frac{\partial}{\partial r} + r\frac{\partial^2}{\partial r^2} - r\frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2\frac{\partial}{\partial r}\right]$$
$$= \frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}$$

在直角坐标系中

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
$$\frac{1}{2}[\nabla^2, \vec{r}]$$
$$= \frac{1}{2}\left[\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right]\vec{i} + \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2}, y\right]\vec{j} + \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}, z\right]\vec{k}\right]$$
$$= \vec{\nabla}$$

在经典力学中，在中心力场中经典粒子的哈密顿量为：

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{l^2}{2mr^2} + V(r)$$

其中 $$p_r = \frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p}$$

在过渡到量子力学时，p_r 需要换为

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\vec{r}\frac{1}{r}\right)$$
$$= \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

问 $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r}\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}$ 是否厄密算符？

$\hat{p}_r$ 是否厄密算符？

[解]：由 $(ABC)^+ = C^+B^+A^+$ 可得

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}\right)^+ = \left(\frac{1}{r}\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}\right)^+$$
$$= \hat{\vec{p}}^+\cdot\hat{\vec{r}}^+\left(\frac{1}{r}\right)^+$$
$$= \hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{r}}\frac{1}{r}$$

$$=\frac{1}{r}\hat{r}\cdot\hat{p}+\frac{\hbar}{i}\frac{2}{r}$$

∴ 它不是厄密标符

$$\hat{p}_r^+=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\hat{r}\cdot\hat{p}+\hat{p}\cdot\hat{r}\frac{1}{r}\right)^+$$

$$=\frac{1}{2}\left(\hat{p}^+\cdot\hat{r}^+\left(\frac{1}{r}\right)^++\left(\frac{1}{r}\right)^+\hat{r}^+\cdot\hat{p}^+\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\hat{r}\cdot\hat{p}+\hat{p}\cdot\hat{r}\frac{1}{r}\right)$$

$$=\hat{p}_r$$

∴ $\hat{p}_r$ 是厄密标符

4. 在经典力学中 $\vec{l}^2=(\vec{r}\times\vec{p})^2=\vec{r}^2\cdot\vec{p}^2-(\vec{r}\cdot\vec{p})^2$。在量子力学中此式是否成立？在什么条件下此式成立？

〔解〕: $\hat{l}^2=(\hat{r}\times\hat{p})^2$

$$=(\hat{r}\times\hat{p})\cdot(\hat{r}\times\hat{p})$$

$$=\hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2+\hat{l}_z^2$$

$$\hat{l}_x\cdot\hat{l}_x=(yp_z-zp_y)\cdot(yp_z-zp_y)$$

$$=y^2p_z^2+z^2p_y^2-yp_zzp_y-zp_yyp_z$$

$$=x^2p_x^2+y^2p_z^2+z^2p_y^2-xxp_xp_x-yyp_zp_y-zyp_yp_z+$$

$$i\hbar(yp_y+zp_z)$$

类似 $\hat{l}_y\cdot\hat{l}_y=y^2p_y^2+z^2p_x^2+x^2p_z^2-yyp_yp_y-zxp_xp_z-xzp_zp_x+$

$$i\hbar(zp_z+xp_x)$$

$$\hat{l}_z\hat{l}_z=z^2p_z^2+x^2p_y^2+y^2p_x^2-zzp_zp_z-xyp_yp_x-yxp_xp_y+$$

$$i\hbar(xp_x+yp_y)$$

∴ $\hat{l}^2=\hat{r}^2\cdot\hat{p}^2-(\hat{r}\cdot\hat{p})^2+2i\hbar\,\hat{r}\cdot\hat{p}$

其中 $(\hat{r}\cdot\hat{p})^2=\sum_{ik}\hat{r}_i\hat{r}_k\hat{p}_k\hat{p}_i$

所以，量子力学的 $\hat{l}^2$ 与经典力学不同，但是，当粒子所处的状态是 $\hat{r}\cdot\hat{p}$ 的本征态，本征值为0时，则与经典形式同。

当$\hbar\to$时，则量子力学中的$\bar{l^2}$与经典同。

5、求出氢原子基态波函数在动量表象中的表示式，利用上述结果计算$\overline{p_x^2}$，用在X表象中氢原子波函数，计算$\overline{x^2}$，验证测不准关系。

〔解〕：氢原子基态波函数为

$$\psi_0(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\pi^{1/2}a^{3/2}}e^{-r/a} \qquad a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

而动量$\vec{p}$的本征函数为

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

∴它在动量表象中的表示式为

$$\Phi(\vec{p})=\frac{1}{\pi^2(2\hbar a)^{3/2}}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}e^{-ipr\cos\theta/\hbar}e^{-r/a}r^2\sin\theta d\theta d\varphi dr$$

$$=\frac{\hbar}{\pi 2^{1/2}(\hbar a)^{3/2}ip}\int_0^\infty[e^{-(\frac{1}{a}-\frac{ip}{\hbar})r}-e^{-(\frac{1}{a}+\frac{ip}{\hbar})r}]rdr$$

$$=\frac{1}{i\pi p(2\hbar)^{1/2}a^{3/2}}\cdot\left[\frac{1}{(\frac{1}{a}-\frac{ip}{\hbar})^2}-\frac{1}{(\frac{1}{a}+\frac{ip}{\hbar})^2}\right]$$

$$=\frac{2\hbar^2\sqrt{2a\hbar}}{\pi a^3(p^2+\hbar^2/a^2)^2}$$

于是 $$\overline{p_x}=\int_{-\infty}^{\infty}|\Phi(p)|^2p_xdp_xdp_ydp_z$$

$$=0$$ 由于被积函数对p_x是奇函数

$$\overline{p_x^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}|\Phi(p)|^2p_x^2dp_xdp_ydp_z$$

$$=\frac{1}{3}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Phi(\vec{p})|^2p^2dp_xdp_ydp_z$$

$$=\frac{8\hbar^5}{3\pi^2a^5}\int_0^{2\pi}\int_0^\pi\int_0^\infty\frac{p^4}{(p^2+\frac{\hbar^2}{a^2})^4}dp\sin\theta d\theta d\varphi$$

$$=\frac{32\hbar^5}{3a^5\pi}\int_0^\infty\frac{p^4}{(p^2+\frac{\hbar^2}{a^2})^4}dp$$

$$=\frac{32\hbar^5}{3a^5\pi}\cdot\frac{\pi}{32\cdot\frac{\hbar^5}{a^3}}$$

$$=\frac{\hbar^2}{3a^2}$$

而 $\bar{x}=\frac{1}{\pi a^3}\int e^{-\frac{2r}{a}}x\,dx\,dy\,dz$

由于被积函数对x是奇函数，$\therefore\ \bar{x}=0$

而 $\overline{x^2}=\frac{1}{\pi a^3}\int e^{-\frac{2r}{a}}x^2\,dx\,dy\,dz$

$$=\frac{1}{3a^3\pi}\int e^{-\frac{2r}{a}}r^2\,dx\,dy\,dz$$

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

$$=\frac{4}{3a^3}\cdot\left(\frac{a}{2}\right)^5\cdot 4!$$

$$=a^2$$

$\therefore\ \sqrt{\overline{x^2}\cdot\overline{p^2}}=\sqrt{\frac{\hbar^2}{3a^2}\cdot a^2}=\sqrt{\frac{\hbar^2}{3}}>\frac{\hbar}{2}$

6\. 在动量表象中，写出氢原子的能量本征方程，并证明角动量的各分量均为守恒量。

[证]：在动量表象中的能量本征方程的表示式为

$$\left(E-\frac{\hbar^2K^2}{2m}\right)\Phi(\vec{K})=\int d^3\vec{K}'\cdot V(\vec{K}-\vec{K}')\Phi(\vec{K}') \qquad (1)$$

而 $V(\vec{K}-\vec{K}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i(\vec{K}-\vec{K}')\cdot\vec{r}}\frac{-e^2}{r}d^3\vec{r}$

$$=\frac{-2e^2}{(2\pi)^2}\cdot\frac{1}{|\vec{K}-\vec{K}'|^2} \qquad (2)$$

(由 $\int\frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{r}=\frac{4\pi}{q^2}$

$\therefore$ 方程为 $\frac{\hbar^2K^2}{2m}\Phi(\vec{K})-\frac{e^2}{2\pi^2}\int d^3\vec{K}'\frac{1}{|\vec{K}-\vec{K}'|^2}\Phi(\vec{K}')=E\phi(\vec{K}) \qquad (3)$

现以$\hat{L}_x$来证明，它是守恒量

先看积分：$\int d^3\vec{K}'\frac{1}{|\vec{K}-\vec{K}'|^2}\hat{L}_x\Phi(\vec{K}')$

$$=\int d^3\vec{k}'\,\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\left(+i\hbar k_z'\frac{\partial}{\partial k_y'}-i\hbar k_y'\frac{\partial}{\partial k_z'}\right)\Phi(\vec{k}')$$

$$=\int d^3\vec{k}'\,(+i\hbar k_z')\frac{\partial}{\partial k_y'}\left[\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\Phi(\vec{k}')\right]+$$

$$\int d^3\vec{k}'\,(-i\hbar k_y')\frac{\partial}{\partial k_z'}\left[\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\Phi(\vec{k}')\right]+$$

$$\int d^3\vec{k}'\,(-i\hbar)k_z'\left(\frac{\partial}{\partial k_y'}\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\right)\Phi(\vec{k}')+$$

$$\int d^3\vec{k}'\,(i\hbar)k_y'\left(\frac{\partial}{\partial k_z'}\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\right)\Phi(\vec{k}')$$

前两个积分显然为0（因积分后 $k_y', k_z'\to\infty$）

$$\therefore\quad\int d^3\vec{k}'\,\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\hat{L}_x\Phi(\vec{k}')$$

$$=\int d^3\vec{k}'\,(-i\hbar)k_z'\frac{-2k_y'+2k_y}{|\vec{k}-\vec{k}'|^4}\Phi(\vec{k}')+$$

$$\int d^3\vec{k}'\,(i\hbar)k_y'\frac{-2k_z'+2k_z}{|\vec{k}-\vec{k}'|^4}\Phi(\vec{k}')$$

$$=\int d^3\vec{k}'\,(-i\hbar)k_y\frac{-2k_z+2k_z'}{|\vec{k}-\vec{k}'|^4}\Phi(\vec{k}')+$$

$$\int d^3\vec{k}'\left(i\hbar k_z\frac{-2k_y+2k_y'}{|\vec{k}-\vec{k}'|^4}\right)\Phi(\vec{k}')$$

$$=\int d^3\vec{k}'\left(+i\hbar k_z\frac{-2k_y+2k_y'}{|\vec{k}-\vec{k}'|^4}\right)\Phi(\vec{k}')+$$

$$\int d^3\vec{k}'\left(-i\hbar k_y\frac{-2k_z+2k_z'}{|\vec{k}-\vec{k}'|^4}\right)\Phi(\vec{k}')$$

$$=\int d^3\vec{k}'\left\{k_z\left(+i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y}\right)-k_y\left(+i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z}\right)\right\}\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\Phi(\vec{k}')$$

$$=\left(k_z i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y}-k_y i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z}\right)\int d^3\vec{k}'\,\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}\Phi(\vec{k}')$$

∴ 若 $\Phi(\vec{k})$ 是方程解，则有

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}\left(k_z i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y}-k_y i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z}\right)\Phi(\vec{k})-\int d^3\vec{k}'\,\frac{1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}$$

$$\left(k_z' i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y'}-k_y' i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z'}\right)\Phi(\vec{k}')$$

$= E\left(k_z i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y} - k_y i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z}\right)\Phi(\vec{k})$ （注意：$\left(k_z i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y}\right.$ $\left. - k_y i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z}\right)k^2 = 0$）

即 $\left(k_z i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y} - k_y i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z}\right)\Phi(\vec{k})$ 也是解

由于 $\Phi(\vec{k})$ 是方程的任何一个解，这表明

$\left(k_z i\hbar\frac{\partial}{\partial k_y} - k_y i\hbar\frac{\partial}{\partial k_z}\right)$ 是与 $\hat{H}$ 对易，即 $\hat{L}_x$ 是守恒量

同理可证 $\hat{L}_y$，$\hat{L}_z$ 是守恒量。

7、设氢原子处于基态，求电子处于经典力学不允许区（$E-V=T<0$）的几率

〔解〕：氢原子基态波函数 $\psi_0 = \frac{1}{\pi^{1/2}a^{3/2}}e^{-\frac{r}{a}}$

其中 $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

而相应能量 $E_0 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a}$

$\therefore\ T(r) = -\frac{e^2}{2a} + \frac{e^2}{r}$

$\therefore$ 当 $r > 2a$ 是经典力学所不允许的区域。因此，电子处于经典力学所不允许的区域的几率为：

$$P = \frac{1}{\pi a^3}\int_{2a}^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} e^{-2r/a}\, r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\, dr$$

$$= \frac{4}{a^3}\cdot\left(\frac{a}{2}\right)^3\int_4^{+\infty} e^{-\rho}\rho^2 d\rho$$

$$= 13\cdot e^{-4} \simeq 0.238$$

8、证明：对于库仑场 $\bar{V} = 2\bar{E}$，$\bar{T} = -\bar{E}$（$\bar{E} = \bar{T} + \bar{V}$ 是总能量）

〔证〕：设电子处于 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 态

则 $\bar{V} = \int R_{nl}^2(r)\,|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2\left(-\frac{e^2}{r}\right)r^2 dr\, d\Omega$

$= -\int_0^{\infty} re^2 R_{nl}^2(r)\,dr$

$= -\frac{e^2}{a\cdot n^2} = 2E_n$

而 $\overline{V}+\overline{T}=E_n$

$\therefore\quad \overline{T}=-E_n=\dfrac{e^2}{2a_0n^2}$

9. 对于氢原子，计算 $\overline{r^\lambda}=\int_0^\infty r^{\lambda+2}[R_{nl}]^2dr,\quad \lambda=\pm1,\pm2$

[解]：根据 $\overline{r^\lambda}$ 的递推关系（A. Messiah Vol. I P486）

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\overline{r^\lambda}-(2\lambda+1)a_0\overline{r^{\lambda-1}}+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]a_0^2\overline{r^{\lambda-2}}=0$$

其中 a_0 为波尔半径

由氢原子能级 $E_n=-\dfrac{e^2}{2a_0n^2}$

$\therefore\quad \overline{r^{-1}}=\dfrac{e^2}{a_0n^2}$

而 $\overline{r^0}=\overline{1}=1$ （归一化）

于是 $\dfrac{2}{n^2}\overline{r}-3a_0\overline{r^0}+\dfrac{1}{4}\left[(2l+1)^2-1\right]a_0^2\overline{r^{-1}}=0$

$\therefore\quad \overline{r}=\dfrac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]a_0$

而 $\dfrac{3}{n^2}\overline{r^2}-5a_0\overline{r^1}+\dfrac{1}{2}\left[(2l+1)^2-2^2\right]a_0^2\overline{r^0}=0$

$\therefore\quad \overline{r^2}=\dfrac{1}{2}\left[5n^2+1-3l(l+1)\right]n^2a_0^2$

至于 $\overline{r^{-2}}$ 不能由上述公式推出，可根据公式（5.7）（L.D. Landau. E. Lifshits P.504）直接导出：

得 $\overline{r^{-2}}=\dfrac{2}{(2l+1)n^3a_0^2}$

10、根据氢原子光谱的理论，讨论

(1) 给出 positronium 的能级（positronium（电子偶素）指出 e^+-e^- 形式的束缚态。）

(2) μ—介原子的能谱

(3) Muonium（指 μ^+-e^- 束缚态）的能谱

[解]：由氢原子光谱理论知识，能级的表示式为

$$E_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\qquad \mu=\frac{m_em_p}{m_e+m_p}\quad n=1,2\cdots$$

于是 Positronium 的能级为：

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{4\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

μ－介原子的能级为

$$E_n = -\frac{\mu_n e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} \qquad \mu_n = \frac{m_\mu m_p}{m_\mu + m_p}$$

Muonium 的能级为

$$E_n = -\frac{\mu_{\mu e} e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} \qquad \mu_{\mu e} = \frac{m_\mu m_e}{m_\mu + m_e}$$

11、在 Y_{11} 态中 $\bar{l}_x = ?$ 怎样理解？

〔解1〕：在 Y_{11} 态中，$\bar{l}_x = 0$（因 $l_x = (l_+ + l_-)/2$，$\therefore \bar{l}_x = 0$）

由于平均值是大量的完全相同的体系中测量值的平均，而 Y_{11} 态中 l_x 测量 l_x 的可得值为 ±1，0。而取±1的几率相同，所以平均为 0。

〔解2〕：在 $Y_{11} = -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta e^{i\varphi} = \frac{-1}{r}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(x+iy)$

当将 $x \to z'$，$y \to x'$，$z \to y'$

则 $Y_{11}(\theta,\varphi) = \frac{-1}{r}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(x+iy)$

$$= \frac{1}{-r}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(z'+ix')$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10}(\theta',\varphi') + \frac{i}{2}Y_{11}(\theta',\varphi') - \frac{i}{2}Y_{1-1}(\theta',\varphi')$$

$$\therefore \bar{l}_x = \bar{l}_{z'} = \frac{1}{2}\times 0 + \frac{1}{4}\times 1 + \frac{1}{4}\times(-1) = 0$$

〔解3〕：在 $l=1$ 的子空间，$\bar{l}_x$ 在 $(\hat{l}^2, \hat{l}_z)$ 的表象中的表示式为

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{pmatrix} \qquad (\text{取}\ \hbar = 1)$$

从而可求出本征值($\hat{l}_x$)为 +1，0，-1 的相应的本征函数为

$$\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}\frac{\sqrt{2}}{2}\\ 0\\ -\frac{\sqrt{2}}{2}\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ -\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

因此，Y_{11}（其相应表示为 $\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$）中测量 $\hat{l}_x$ 取值 +1，0，-1 的几率振幅分别为 $\frac{1}{2}$，$\frac{\sqrt{2}}{2}$，$\frac{1}{2}$。

由于取值 +1 和 -1 的几率相等。因此 $\overline{l_x}=0$

12. 在（$\hat{l}^2$，$\hat{l}_z$）表象中，$l=1$ 的子空间是几维？求 $\hat{l}_x$ 在此子空间的矩阵表示，再利用矩阵形式求出本征值及本征态。

[解]：在（$\hat{l}^2$，$\hat{l}_z$）表象中，由于 $l=1$ 时，l_z 可取 1，0，-1　∴ $l=1$ 的子空间是3维的。

根据　$\hat{l}_x=(\hat{l}_++\hat{l}_-)/2$

而　$l_\pm|lm\rangle=\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,|l\,m\pm1\rangle$

得 $(\hat{l}_x)=\begin{pmatrix}0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}\\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0\end{pmatrix}$ $(\hbar=1)$　由 $\hat{l}_x\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$

得 λ 取值 +1，0，-1，其分别相应的本征函数为：$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}$，$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\ 1\\ -\sqrt{2}\end{pmatrix}$　$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}$。

13. 证明 $\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)=$ 常数（与 θ，φ 无关），由此证明：在（n，l）能级上填满电子的情况下，电荷的分布是各向同性的。

[证明]：在 l 子空间 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 构成一完备组，当球坐标的极轴 Z 换到 Z'（转 θ'，φ'），即由 $(r,\theta,\varphi)\longrightarrow(r,\gamma,\delta)$ 时，那在新的球坐标系中也有一个子空间 $Y_{lm}(\gamma,\delta)$

于是有　$Y_{lm}(\gamma,\delta)=\sum_{m'=-l}^{l}a_{mm'}Y_{lm'}(\theta,\varphi)$

对于 $m=0$，则有

$$Y_{l0}(\gamma,\delta)=\sum_{m'=-l}^{l}a_{0m'}Y_{lm'}(\theta,\varphi) \qquad (1)$$

根据 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的正交归一性，可得

$$a_{0m'}=\int Y_{lm'}^{*}(\theta,\varphi)Y_{l0}(\gamma,\delta)d\Omega(\theta,\varphi) \qquad (2)$$

同样，$Y_{lm'}^{*}(\theta,\varphi)=\sum_{m''=-l}^{l}b_{m'm''}Y_{lm''}^{*}(\gamma,\delta)$ (3)

代入(2)式，考虑到 $d\Omega(\theta,\varphi)=d\Omega(\gamma,\delta)$

$$\therefore \quad a_{0m'}=b_{m'0} \qquad (4)$$

当 $\theta=\theta'$，$\varphi=\varphi'$ 时，即 $\gamma=\delta=0$ 时，我们有：

$$Y_{lm''}^{*}(0,0)=\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\delta_{m''0} \qquad (5)$$

$\therefore$ 由(3)式得 $b_{m'0}=Y_{lm'}^{*}(\theta',\varphi')\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}}$ (6)

由(4)得 $a_{0m'}$ 并代入(1)，则有

$$Y_{l0}(\gamma,\delta)=\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}(\theta',\varphi')Y_{lm}(\theta,\varphi)\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (7)$$

由(7)式即证得：

$$\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}^{*}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{2l+1}{4\pi}=\text{常数（与}\theta,\varphi\text{无关）}$$

当 (nl) 能级上填满电子，则在 (θ,φ) 方向 γ—$\gamma+d\gamma$ 区域中的电荷密度为：

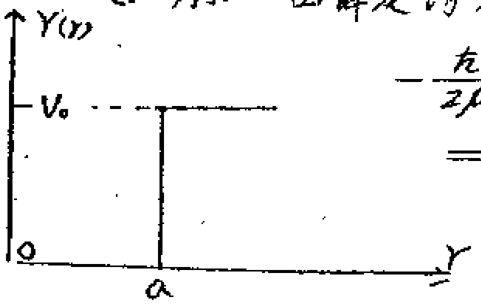
$$2\sum_{m=-l}^{l}R_{nl}^{2}(r)|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^{2}\gamma^{2}d\gamma d\Omega$$
$$=\frac{2l+1}{2\pi}R_{nl}^{2}(r)\gamma^{2}d\gamma d\Omega$$

由此看出，电荷分布是各向同性的。

14. 证明一个球方势井（半径为 a，深度为 V_0）恰好具有一条 $l\neq 0$ 能级的条件是 V_0，a 满足

$$j_{l-1}\left(\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}\,a\right)=0$$

[证明]: 由薛定谔方程



$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Phi(r,\theta,\varphi)+V(r)\Phi(r,\theta,\varphi)=E\Phi(r,\theta,\varphi) \qquad (1)$$

$$V(r)\begin{cases}V_0 & r>a\\ 0 & r<a\end{cases}$$

设：$\Phi(r,\theta,\varphi)=AR(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$

则得径向方程

$$R''(\rho)+\frac{2}{\rho}R'(\rho)+\left[1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R(\rho)=0,\ \rho=kr,\ k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$$

当 $r>a$

$$R''(\rho_1)+\frac{2}{\rho_1}R'(\rho_1)+\left[1-\frac{l(l+1)}{\rho_1^2}\right]R(\rho_1)=0,\ \rho_1=ik_1r,\ k=\sqrt{2\mu(V_0-E)}/\hbar$$

当 $r>a$

考虑到 $r=0$ R有界；$r\to+\infty$，$R\to 0$ 则有解

$$R(r)=\begin{cases}j_l(kr) & r<a\\ h_l^{(1)}(ik_1r) & r>a\end{cases} \qquad (3)$$

由 $r=a$，波函数的连续条件，则有

$$\left.\frac{d\ln[(kr)^{l+1}j_l(kr)]}{dr}\right|_{r=a}=\left.\frac{d\ln[(ik_1r)^{l+1}h_l^{(1)}(ik_1r)]}{dr}\right|_{r=a}$$

从而得：

$$\frac{k\sqrt{\frac{\pi}{2}}(ka)^{l+\frac{1}{2}}J_{l-\frac{1}{2}}(ka)}{(ka)^{l+1}j_l(ka)}=\frac{ik_1\sqrt{\frac{\pi}{2}}(ik_1a)^{l+\frac{1}{2}}H_{l-\frac{1}{2}}(ka)}{(ik_1a)^{l+1}h_l^{(1)}(ka)}$$

即 $$\frac{kj_{l-1}(ka)}{j_l(ka)}=\frac{ik_1h_{l-1}^{(1)}(ik_1a)}{h_l^{(1)}(ik_1a)}$$

要恰好有一条使 ≈0 的能级，在极端条件下，

即 $E_l\longrightarrow V_0$ 于是有条件

$$\left.\frac{kj_{l-1}(ka)}{j_l(ka)}\right|_{E_l=V_0}=\left.\frac{ik_1\cdot(-i)\cdot(2l-3)!!(ik_1a)^{l+1}}{(ik_1a)^l(-i)(2l-1)!!}\right|_{k_1=0}=0$$

所以要恰好有一条 $l \neq 0$ 的能级，V_0, a 必须满足条件

$$j_{l-1}\left(\sqrt{2\mu V_0}\, a/\hbar\right)=0$$

15. 用平面极坐标，讨论轴对称谐振子势中粒子能量本征值及本征函数，讨论能级简并度

〔解〕：不失一般性，可假设对称轴为 z

则 $V(x,y,z)=\frac{1}{2}\mu\omega_\perp^2(x^2+y^2)+\frac{1}{2}\mu\omega_{\parallel}^2 z^2$

在平面极坐标中，薛定谔方程为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]+\frac{1}{2}\mu\omega_\perp^2 r^2+\frac{1}{2}\mu\omega_{\parallel}^2 z^2\right\}\psi=E\psi \quad (1)$$

选 $(\hat{H}, \hat{H}_z, \hat{l}_z)$ 的共同本征函数

令 $\psi(r,\theta,z)=AR(r)\Theta(\theta)W(z)$

代入(1)式得

$$\hat{l}_z \qquad \Theta(\theta)=e^{im\theta} \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \quad (2)$$

$$\hat{H}_z \qquad W(z)=e^{-\frac{1}{2}\mu\omega_{\parallel}z^2/\hbar}\cdot H_n\left[(\mu\omega_{\parallel}/\hbar)^{\frac{1}{2}}z\right] \quad n=0,1,\cdots \quad (3)$$

$$\text{並有} \qquad R''(\rho)+\frac{1}{\rho}R'(\rho)-(\rho^2+m^2/\rho^2)R(\rho)+\varepsilon R(\rho)=0 \quad (4)$$

其中 $\rho=(\mu\omega_\perp/\hbar)^{\frac{1}{2}}r$，$\varepsilon=2\left[E-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_{\parallel}\right]/\hbar\omega_\perp$

令 $\xi=\rho^2$

方程(4)即变换成

$$\xi R''(\xi)+R'(\xi)+\frac{1}{4}(\varepsilon-\xi-m^2/\xi)R(\xi)=0 \quad (5)$$

当 $\xi\to+\infty$ 解的渐近形式为 $e^{-\frac{1}{2}\xi}$

$\xi\to0$ 解的形式为 $\xi^{|m|/2}$

于是可令 $R=e^{-\frac{1}{2}\xi}\xi^{|m|/2}W(\xi)$

代入(5)式即得

$$\xi W''(\xi)+(|m|+1-\xi)W'(\xi)+\left(\frac{1}{4}\varepsilon-\frac{|m|}{2}-\frac{1}{2}\right)W(\xi)=0$$

这即为合流超几方程，要使解在$\xi=0$有界在$\xi\to\infty$时，$R(\xi)\to 0$，则取解为

$$W(\xi)=F(-(\tfrac{1}{4}\varepsilon-\tfrac{|m|}{2}-\tfrac{1}{2}),\ |m|+1,\xi)$$

而$\frac{1}{4}\varepsilon-\frac{|m|}{2}-\frac{1}{2}=k \qquad k=0,1,2\cdots$

所以本征值为

$$E_{Nn}=(2k+|m|+1)\hbar\omega_\perp+(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_{\parallel}$$
$$=(N+1)\hbar\omega_\perp+(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_{\parallel} \tag{6}$$

其中 $N=2k+|m| \qquad N\geq|m|$ (7)

相应的本征函数为

$$\psi_{Nnm}(r.\theta.z)=Ae^{-\mu(\omega_\perp r^2+\omega_{\parallel}z^2)/(2\hbar)+im\theta}\cdot$$
$$H_n(\sqrt{\mu\omega_{\parallel}/\hbar}\,z)\cdot$$
$$F(\tfrac{|m|-N}{2},\ |m|+1,\ \tfrac{\mu\omega_\perp r^2}{\hbar})$$

在一定N、n下，其简併度由(1)式易得为$N+1$重 $\quad N=0,1,2,\cdots$

16、设粒子在无限长的圆筒中运动，筒半径为a，求粒子能另

[解]：平面极坐标系中，薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}+\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{d\theta^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\psi(r.\theta.z)=E\psi(r.\theta.z) \quad (1)$$
$$r<a$$

$$\psi(r.\theta.\varphi)=0 \qquad r\geq a$$

令$\psi=A\cdot R(r)\Theta(\theta)W(z)$

代入方程得

$$\Theta(\theta)=e^{im\theta} \qquad m=0,\pm1,\pm2\cdots$$
$$W(z)=e^{ikz} \qquad k\text{为}|k|\leq\sqrt{2\mu E}/\hbar$$

令$\rho=\sqrt{2\mu E/\hbar^2-k^2}\,r$，代入(1)式，则得

$$R''(\rho)+\frac{1}{\rho}R(\rho)+\left(1-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho)=0 \qquad (2)$$

这即为 $|m|$ 阶贝塞尔方程，要在 $\rho=0$ 处有界，则取解为

$$R(\rho)=J_{|m|}(\rho)$$

根据边界条件，则有

$$R(\sqrt{2\mu E/\hbar^2-k^2}\ a)$$
$$=J_{|m|}(\sqrt{2\mu E/\hbar^2-k^2}\ a)=0$$

于是粒子能量为 $E_{k,|m|,j}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[k^2+\left(\frac{\gamma_{|m|j}}{a}\right)^2\right]$

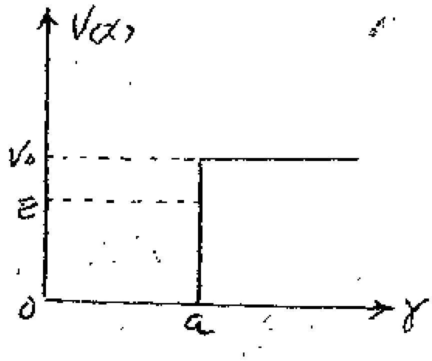
其中 $\gamma_{|m|j}$ 为 $|m|$ 阶贝塞尔函数的第 j 个零点，k 为实数，

$m=0,\pm1,\pm2\cdots\cdots$

而相应的波函数

$$\psi_{k,|m|,j}(r,\theta,z)=A\cdot J_{|m|}\left(\frac{\gamma_{|m|j}}{a}r\right)e^{i(kz+m\theta)} \qquad (5)$$

17. 对一维势井（半径宽度为 a，深度为 V_0），无论 V_0a^2 取什么值总有一个束缚态，对于球方势井（半径为 a，深度为 V_0）只当 $V_0a^2\geq\pi^2\hbar^2/2m$ 时，才有一个束缚态。对于二维情况有无类似结论，解释其物理意义。



[解]：二维圆方势井的薛定谔方程为：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{d\theta^2}\right]\psi=E\psi \qquad r\leq a$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{d\theta^2}\right]\psi+(V_0-E)\psi=0 \qquad r>a$$

令 $\psi(r,\theta)=AR(r)\Theta(\theta)$ 代入方程，得

$\Theta(\theta)=e^{+im\theta} \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots\cdots$

并有 $\frac{d^2}{dr^2}R(r)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}R(r)+\left[k^2-\frac{m^2}{r^2}\right]R(r)=0,\quad r\leq a,\quad k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$

$$\frac{d^2}{dr^2}R(r)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}R(r)+\left\{(ik_1)^2-\frac{m^2}{r^2}\right\}R(r)=0 \qquad r>a,\quad k_1=\sqrt{2\mu(V_0-E)}/\hbar$$

这即为贝塞尔方程

在 $r\leq a$ 区域，要使 $r=0$ 处有界，可取解为

$$R(r)=J_{|m|}(kr)$$

而在 $r>a$ 区域，要保证是束缚态，可取

$$R(r)=H^{(1)}_{|m|}(ik_1r)$$

根据波函数及其导数在 $r=a$ 处连续的条件，则有

$$\left.\frac{d\ln(kr)^{|m|}J_m(kr)}{dr}\right|_{r=a}=\left.\frac{d\ln(ik_1r)^{|m|}H^{(1)}_m(ik_1r)}{dr}\right|_{r=a}$$

于是得

$$k(ka)^{|m|}J_{|m|-1}(ka)=ik_1(ik_1a)^{|m|}H^{(1)}_{|m|-1}(ik_1a)$$

要有 $|m|\neq 0$ 的解，其条件是 V_0，a 应满足

$$J_{|m|-1}(\sqrt{2\mu V_0}/\hbar\, a)=0$$

要有 $|m|=0$ 的解，则由连续条件

$$\left.\frac{d\ln J_0(kr)}{dr}\right|_{r=a}=\left.\frac{d\ln H^{(1)}_0(ik_1r)}{dr}\right|_{r=a}$$

则得 $\quad J_1(\sqrt{2\mu V_0}/\hbar\, a)=0$

而我们已知 $J_n(x)$ 的最小的一个非零的零点是 $J_0(x)=0$ 的第一个零点，即 $x_1\approx 2.405$

所以要二维圆方势井（半径为 a，深度为 V_0）有解的条件为

$$\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}a^2\geq(2.405)^2$$

即 $$V_0a^2\geq\frac{\hbar^2}{2\mu}(2.405)^2$$

这表明：要把粒子束缚在三维球方势井和二维圆方势井中，则位势必须有一定的深度和宽度，便可以形成束缚态。也就是说，粒子被束缚在二维圆方势井中，其能量不能取任意小，而

最小取 $\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}(2.405)^2$ （如 a 给定），所以要形成束缚态，必须 $V_0 \geq \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}(2.405)^2$。

18. 粒子在半径为 a，高度为 h 的圆筒中运动，在筒内粒子是自由的，在筒壁及筒外势能是无限大，求粒子的能量本征值及本征函数。

[解]：在平面极坐标下，能量本征方程为

$$\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{d\theta^2}+\frac{d^2}{dz^2}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)\psi(r,\theta,z)=0$$

$$r<a \text{ 和 } 0<z<h$$

$$\psi=0 \qquad r\geq a \text{ 或 } z\leq 0,\ z\geq h$$

令 $\psi(r,\theta,z)=AR(r)\Theta(\theta)W(z)$

则有 $\Theta(\theta)=e^{im\theta}$ $\qquad m=0,\pm1,\pm2\cdots$ $\qquad (1)$

$W(z)=\sin(kz+\delta)$ $\qquad (2)$

由 $z=0$ 或 $z=h$ 处 $\qquad W=0$ $\qquad$ 从而得

$\delta=0 \qquad k=\frac{n\pi}{h} \qquad n=0,\pm1,\cdots$ $\qquad (3)$

$\therefore$ $R''(r)+\frac{1}{r}R'(r)+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\left(\frac{n\pi}{h}\right)^2-\frac{m^2}{r^2}\right]R(r)=0$ $\qquad (4)$

令 $k_1=\sqrt{2\mu E/\hbar^2-(n\pi/h)^2}$ $\qquad \rho=k_1 r$

考虑到 $r=0$ 处，解应有界，则(4)式的解为

$R_{k,m}(r)=J_{(m)}(k_1 r)$ $\qquad (5)$

根据边界条件 $\qquad R_{k,m}(a)=0$

即要求： $\qquad J_{|m|}(k_1 a)=0$

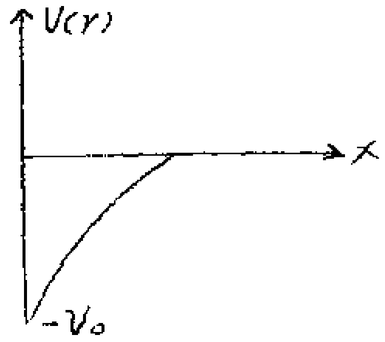
设：$\gamma_{|m|,j}$ 为 $|m|$ 阶贝塞尔函数第 j 个零点值，则

$$E_{n,m,j}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\frac{n\pi}{h}\right)^2+\left(\frac{\gamma_{|m|j}}{a}\right)^2\right]$$

相应的本征函数为

$$\psi_{n,m,j}(r,\theta,z)=A_0\sin(\frac{n\pi}{h}z)J_{|m|}(\frac{\gamma_{|m|,j}}{a}r)e^{im\theta}$$

19、设 $V(r)=-V_0e^{-r/a}$，求基态（$l=0$ 的波函数（$V_0>0$））



[解]：薛定谔方程在球对称势中的径向方程（$l=0$）为

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr})R+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0e^{-r/a})R=0 \quad (1)$$

令：　$R=A\chi(r)/r$

代入得　$\chi''(r)+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0e^{-r/a})\chi(r)=0$

令：　$\xi=e^{-r/2a}$　　　$0\le\xi\le1$

于是方程变换为

$$\chi''(\xi)+\frac{1}{\xi}\chi'(\xi)+(\frac{2\mu V_0a^2}{\hbar^2}+\frac{1}{\xi^2}\cdot\frac{2\mu V_0E}{\hbar^2})\chi(\xi)=0$$

令：　$s=\xi(2\mu V_0a^2)^{\frac{1}{2}}/\hbar$

$$\therefore\ \chi''(s)+\frac{1}{s}\chi'(s)+(1-\frac{1}{s^2}\frac{8\mu|E|a^2}{\hbar^2})\chi(s)=0 \quad (2)$$

方程(2)为 $\sqrt{8\mu|E|a^2}/\hbar$ 阶的贝塞尔方程，由于要求在 $S=0$，即 $r\to\infty$ 时 $\chi(s)$ 以比 r 慢的速度趋于无穷，所以其解为

$$\chi(s)=J_\nu(s)$$

又由于要求 $r=0$ 时，$R(r)$ 有界，即要求

$$s=\sqrt{8\mu V_0a^2}/\hbar\ 时，\quad J_\nu(s)=0 \quad (3)$$

由(3)式，当 V_0、a 给定，就可确定 ν，如其值为 ν_0，则相应能量为

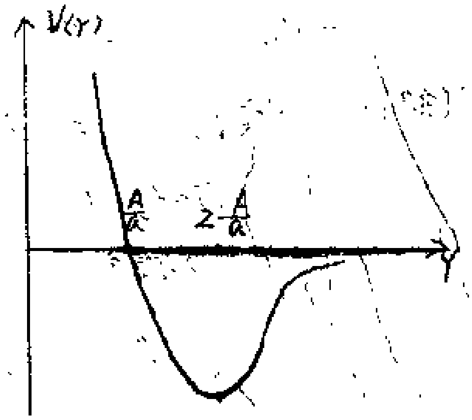
$$E_0=-\frac{\hbar^2}{8\mu a^2}\nu_0^2$$

相应波函数为

$$\psi_{E_0}(r,\theta,\varphi)=CJ_{\nu_0}(\sqrt{8\mu V_0a^2}/\hbar\cdot e^{-r/2a})/r.$$

20、设 $V(r) = -\frac{a}{r} + \frac{A}{r^2}$ $(a, A > 0)$ 求粒子能易本征值。

[解]：由于 $E>0$ 是连续谱，所以仅讨论 $E<0$



在极坐标中，薛定谔方程的径向方程为

$$R''(r) + \frac{2}{r}R'(r) + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{a}{r} - \frac{2\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{A}{r^2}\right]\cdot R(r) = 0$$

令 $\rho = 2\sqrt{-2\mu E}\cdot r/\hbar$

代入得：

$$R''(\rho) + \frac{2}{\rho}R'(\rho) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\mu a}{\sqrt{-2\mu E}\hbar\rho} - \left(l(l+1) + \frac{2\mu A}{\hbar^2}\right)\frac{1}{\rho^2}\right]R(\rho) = 0 \quad (1)$$

由方程可知 $\rho \to \infty$，R 的渐近式当为 $e^{-\frac{1}{2}\rho}$

$\rho \to 0$，解的形式为 ρ^s，而

$s(s+1) = \left[l(l+1) + 2\mu A/\hbar^2\right]$ 的正根解

即 $s = \left(\sqrt{(2l+1)^2 + 8\mu A/\hbar^2} - 1\right)/2$

所以可令 $R(\rho) = A\rho^s e^{-\frac{1}{2}\rho} W(\rho)$ 代入(1)得

$$\rho W''(\rho) + (2s+2-\rho)W'(\rho) - \left(s+1-\frac{\mu a}{\sqrt{-2\mu E}\hbar}\right)W(\rho) = 0$$

这为合流超比方程，要使 $R(\rho)$ 在 $\rho \to \infty$ 趋于0则有解

$$W(\rho) = F\left(s+1-\mu a/(\sqrt{-2\mu E}\hbar),\ 2s+2,\ \rho\right)$$

且 $s+1-\mu a/(\sqrt{-2\mu E}\hbar) = -n \qquad n = 0, 1, 2, \cdots$

∴ 本征值为

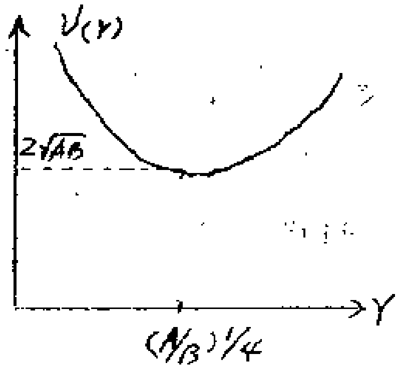
$$E_{nl} = \lambda - \frac{\mu a^2}{2\hbar^2(n+s+1)^2}$$

而 $s = \left(\sqrt{(2l+1)^2 + 8\mu A/\hbar^2} - 1\right)/2$

21. 设 $V(r)=Br^2+A/r^2$ $(A, B>0)$ 求粒子能量本征值

[解]: 由于 $r\to 0$ 及 $r\to +\infty$

$V(r)$ 都趋于 $+\infty$，所以仅有分立能级。



球极坐标下，薛定谔方程的径向分布为：

$$R''(r)+\frac{2}{r}R'(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-Br^2-\frac{A}{r^2}\right)R(r)=0$$

令 $\rho=\sqrt{2\mu B}/\hbar\, r^2$ 代入方程得

$$\rho R''(\rho)+\frac{3}{2}R'(\rho)+\frac{1}{4}\left\{\sqrt{2\mu/B}\,E/\hbar-\rho-\left[l(l+1)+\frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]/\rho\right\}R=0 \qquad (1)$$

由方程知解在 $\rho\to\infty$ 有渐近式为 $e^{-\frac{1}{2}\rho}$

$\rho\to 0$ 的形式为 ρ^s

其中 s 为 $s^2+\frac{1}{2}s-\frac{1}{4}[l(l+1)+2\mu A/\hbar^2]=0$ 的正数解

即 $s=\left[\sqrt{(2l+1)^2+8\mu A/\hbar^2}-1\right]/4$

于是可令 $R(\rho)=e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^s w(\rho)$

代入(1)式得

$$\rho w''(\rho)+\left(2s+\frac{3}{2}-\rho\right)w'(\rho)+\left(\frac{1}{4}\sqrt{\frac{2\mu}{B\hbar^2}}E-\frac{3}{4}-s\right)w(\rho)=0$$

这即为合流超比方程

要使 $R(\rho)$ 在 $\rho\to\infty$ 时趋于零，以及在 $\rho\to 0$ 时 $R(\rho)$ 有界，则有解

$$W(\rho)=F\left(s+\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\sqrt{\frac{2\mu}{B\hbar^2}}E,\ 2s+3/2,\ \rho\right)$$

其中 $-s-\frac{3}{4}+\frac{1}{4}\sqrt{\frac{2\mu}{B\hbar^2}}E=n$ $\qquad n=0,1,2\cdots\cdots$

∴能量本征值为 $E_{nl}=\sqrt{\frac{B\hbar^2}{2\mu}}\left(4n+2+\sqrt{(2l+1)^2+8\mu A/\hbar^2}\right)$

22、对于粒子系，令 $X=\sum_i m_i x_i/M$，$Y=\sum_i m_i Y_i/M$，$(M=\sum_i m_i)$ 代表质心坐标

证明：$e^{i\hat{p}_x a/\hbar}Xe^{-i\hat{p}_x a/\hbar}=X+a$

$e^{i\hat{L}_z\theta/\hbar}Xe^{-i\hat{L}_z\theta/\hbar}=X\cos\theta-Y\sin\theta$

其中：$\hat{p}_x=\sum_i\hat{p}_{ix}$ 是动量 x 分量之和

$\hat{L}_z=\sum_i(x_ip_{iy}-y_ip_{ix})$ 是角动量 Z 分量之和

[证1]：根据 $e^{\hat{B}}\hat{C}e^{-\hat{B}}=\hat{C}+[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{B},(\hat{B},\hat{C})]/2!+\cdots\cdots$

于是 $e^{i\hat{p}_x a/\hbar}Xe^{-i\hat{p}_x a/\hbar}$

$=X+[i\hat{p}_x a/\hbar,X]+[i\hat{p}_x a/\hbar,(i\hat{p}_x a/\hbar,X)]/2!+\cdots\cdots$

$=X+a+[i\hat{p}_x a/\hbar,a]/2!+\cdots\cdots$

$=X+a$

$e^{i\hat{L}_z\theta/\hbar}Xe^{-i\hat{L}_z\theta/\hbar}$

$=X+i\frac{\theta}{\hbar}[L_z,X]+[i\frac{\theta}{\hbar}L_z,(i\frac{\theta}{\hbar}L_zX)]/2!+\cdots\cdots$

$=X+(i\frac{\theta}{\hbar}i\hbar Y)+i(\frac{\theta}{\hbar})^2(-X)(i\hbar)^2/2!+$

$(i\frac{\theta}{\hbar})^3(-Y)/3!(i\hbar)^3+\cdots\cdots$

$=X-Y\theta-\frac{1}{2!}X\theta^2+\frac{1}{3!}Y\theta^3+\frac{1}{4!}X\theta^4\cdots\cdots$

$=X\cos\theta-Y\sin\theta$

[证2]：由 $e^{i\hat{p}_x a/\hbar}Xe^{-i\hat{p}_x a/\hbar}\psi(x_1\cdots x_n,y_1\cdots y_n,z_1\cdots z_n)$

$=e^{i\hat{p}_x a/\hbar}X\psi(x_1-a,x_2-a,\cdots,y_1y_2\cdots y_n,z_1,z_2\cdots z_n)$

$=\sum_i m_i(x_i+a)/M\cdot\psi(x_1\cdots x_n,y_1\cdots y_n,z_1\cdots z_n)$

$=(X+a)\psi(x_1\cdots x_n,y_1\cdots y_n,z_1\cdots z_n)$

由于 ψ 任意，$\therefore e^{i\hat{p}_x a/\hbar}Xe^{-i\hat{p}_x a/\hbar}=X+a$

同样

$e^{i\hat{L}_x\theta/\hbar}Xe^{-i\hat{L}_x\theta/\hbar}\psi(x_1\cdots x_n,y_1\cdots y_n,z_1\cdots z_n)$

$=e^{i\hat{L}_x\theta/\hbar}X\psi(x_1\cos\theta+y_1\sin\theta,x_2\cos\theta+y_2\sin\theta,\cdots$

$-x_1\sin\theta+y_1\cos\theta,\cdots z_1-z_n)$

$= \sum_i m_i(x_i\cos\theta - y_i\sin\theta)/M \cdot \psi(x_1 \cdots x_n, y_1 \cdots y_n, z_1 \cdots z_n)$

$= X\cos\theta - Y\sin\theta$

证 3：在动量表象，力学量 X 可表示为 $i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}$

$\therefore \quad e^{ip_x a/\hbar} X e^{-ip_x a/\hbar}$

$= e^{ip_x a/\hbar}(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x})e^{-ip_x a/\hbar}$

$= i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x} + [i\hbar \cdot (-ia/\hbar)]$

$= X + a$

23、氢原子哈密顿量为 $H = P^2/2\mu - e^2/r$

定义：$\vec{K} = \frac{1}{2\mu e^2}(\vec{l}\times\vec{p} - \vec{p}\times\vec{l}) + \vec{r}/r$

证明：① K 为守恒量

② $\vec{K}\cdot\vec{l} = \vec{l}\cdot\vec{K} = 0$

③ $[K_x, K_y] = -\frac{2H}{\mu e^4} i\hbar l_z$ 等等

④ 在束缚态（$E<0$）子空间中定义

$\vec{A} = \sqrt{\frac{-\mu e^4}{2E}}\vec{K}$ 证明 $[A_x, A_y] = i\hbar l_z$ 等等

⑤ 令 $\vec{J} = \frac{1}{2}(\vec{l} + \vec{A})$，$\vec{J}' = \frac{1}{2}(\vec{l} - \vec{A})$

证明：$\vec{J}$（J'）各分量满足角动量关系

$J^2 = J'^2 \qquad J^2 + J'^2 = -\frac{\hbar^2}{2} - \frac{\mu e^4}{4E}$

并由此导出 Bohr 氢原子能级公式

[证]：① $[\hat{H}, \hat{K}] = [\frac{\hat{p}^2}{2\mu}, \hat{K}] - [\frac{e^2}{r}, \hat{K}]$

由于 $\hat{p}^2$ 与 $\vec{l}$，$\vec{p}$ 都对易

$\therefore \quad [\hat{H}, \hat{K}]$

$= \frac{1}{2\mu}[\hat{p}^2, \frac{\vec{r}}{r}] - \frac{e^2}{2\mu}[\frac{1}{r}, \hat{l}\times\hat{p}] + \frac{e^2}{2\mu}[\frac{1}{r}, \hat{p}\times\hat{l}]$

$= \frac{\hbar^2}{\mu}\cdot\frac{\vec{r}}{r^3} + \frac{e^2}{2\mu}(\hat{l}\times\hat{p}\frac{1}{r}) - \frac{e^2}{2\mu}(\hat{p}\times\hat{l}\frac{1}{r})$

由于 $\hat{l}_i$ 仅含对角度的微商　　$\therefore \hat{l}_i \frac{1}{r} = 0$

$\therefore [\hat{H}, \hat{K}] = -\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\vec{r}}{r^3} + \frac{i\hbar}{2\mu}\frac{\vec{l}\times\vec{r}}{r^3}$

而 $(\hat{l}\times\vec{r}) = -2i\hbar\vec{r}$

$\therefore \quad [\hat{H}, \hat{K}] = 0$

即　$\hat{K}$ 是一守恒量

② 由于 $\hat{l}$ 与 $\frac{1}{r}$ 对易，且 $\hat{l}\cdot\vec{r} = \vec{r}\cdot\hat{l}$

$\therefore \quad 2\mu e^2(\vec{l}\cdot\vec{K})$

$= \vec{l}\cdot(\vec{l}\times\vec{p}) - \vec{l}\cdot(\vec{p}\times\vec{l})$

$= l_x(l_y p_z - l_z p_y) + l_y(l_z p_x - l_x p_z) + l_z(l_x p_y - l_y p_x)$

$- l_x(p_y l_z - p_z l_y) - l_y(p_z l_x - p_x l_z) - l_z(p_x l_y - p_y l_x)$

由 $[l_\alpha, l_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar p_\gamma$

$\therefore \quad 2\mu e^2(\vec{l}\cdot\vec{K}) = i\hbar\vec{l}\cdot\vec{p} - 2i\hbar\vec{p}\cdot\vec{l} + i\hbar\vec{p}\cdot\vec{l} = 0$

同理　$2\mu e^2(\vec{l}\cdot\vec{K}) = 0$

③　$[K_x, K_y]$

$= \frac{1}{4\mu^2 e^4}[(\vec{l}\times\vec{p})_x - (\vec{p}\times\vec{l})_x + \frac{2\mu e^2 x}{r}, (\vec{l}\times\vec{p})_y - (\vec{p}\times\vec{l})_y + \frac{2\mu e^2 y}{r}]$

$= \frac{1}{4\mu^2 e^4}\{[2i\hbar p_x + 2p_z l_y - 2p_y l_z, 2i\hbar p_y + 2p_x l_z - 2p_z l_x]$

$+ [2i\hbar p_x + 2p_z l_y - 2p_y l_z, \frac{2\mu e^2 y}{r}]$

$+ [\frac{2\mu e^2 x}{r}, 2i\hbar p_y + 2p_x l_z - 2p_z l_x]\}$

$= \frac{1}{4\mu^2 e^4}\{4i\hbar(p_x, p_x l_z) + 4(p_z l_y, p_x l_z) + 4(p_z l_y, p_z l_x)$

$-4i\hbar(p_y l_z, p_y) - 4(p_y l_z, p_x l_z) + 4(p_y l_z, p_z l_x)$

$+2\mu e^2(-i\hbar^2\frac{xy}{r^3} + 2i\hbar\frac{yz}{r^3}l_y - 2i\hbar\frac{y^2}{r^3}l_z$

$+2i\hbar\frac{1}{r}l_z + 2\frac{i\hbar}{r}x l_y + 2\hbar^2\frac{xy}{r^3} + 2\hbar^2\frac{xy}{r^3}$

$-2i\hbar\frac{1}{r}y p_x + 2i\hbar\frac{1}{r}l_z - 2i\hbar\frac{x^2}{r^3}l_z + 2i\hbar\frac{xz}{r^3}l_x)$

$= \frac{1}{4\mu^2 e^4}\{4\hbar^2 p_y p_y - 4i\hbar^2 p_z^2 l_z + 4i\hbar p_x p_z l_x + 4i\hbar p_z^2 l_z$

$-4i p_z p_y l_y - 4i\hbar p_z p_x l_x - 4\hbar^2 p_y p_x - 4i\hbar p_x^2 l_z$

$-4i p_y^2 l_z + 4i\hbar p_y p_z l_y - 4i\hbar p_z^2 l_z + 4i\hbar \cdot 2\mu e^2 \frac{1}{r} l_z)$

$= \frac{1}{4\mu^2 e^4}(-4i\hbar p^2 l_z + 4i\hbar \cdot 2\mu e^2 \frac{1}{r} l_z)$

$= \frac{1}{\mu e^4}(-2 \cdot \frac{p^2}{2\mu} + \frac{2e^2}{r}) i\hbar l_z$

$= \frac{-2H}{\mu e^4} i\hbar l_z$ 以此类推

④ $[A_x, A_y] = -\frac{\mu e^4}{2E} \times (-\frac{2H}{\mu e^4}) i\hbar l_z$

$= \frac{H}{E} i\hbar l_z$

在能量为E的束缚态子空间，所以H的测量值只能为E，即起一常数作用。

$\therefore \quad [A_x, A_y] = i\hbar l_z$

⑤ $[l_x, A_y]$

$= \frac{1}{2\mu e^2}([l_x \cdot 2i\hbar p_y + 2 l_x p_z - 2 p_z l_x] + [l_x \cdot \frac{y}{r}])\sqrt{\frac{-\mu e^4}{2E}}$

$= \sqrt{\frac{-\mu e^4}{2E}}\{\frac{i\hbar}{2\mu e^2}(2i\hbar p_z + 2 p_y l_x - 2 p_x l_y) + i\hbar \frac{z}{r}\}$

$= i\hbar A_z$ 以此类推。

$[J_x, J_y]$

$= \frac{1}{4}[l_x, A_y] + \frac{1}{4}[A_x, l_y] + \frac{1}{4}[l_x, l_y] + \frac{1}{4}[A_x, A_y]$

$= \frac{1}{2} i\hbar l_z + \frac{1}{2} i\hbar A_z$

$= i\hbar J_z$

$[J'_x, J'_y]$

$= \frac{1}{4}[l_x, l_y] + \frac{1}{4}[l_x, -A_y] + \frac{1}{4}[A_x, A_y] + \frac{1}{4}[A_x, -l_y]$

$= \frac{1}{2} i\hbar l_z - \frac{1}{2} i\hbar A_z$

$= i\hbar J'_z$ 以此类推

由于 $\vec{l} \cdot \vec{R} = \vec{R} \cdot \vec{l} = 0$，即 $\vec{l} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{l} = 0$

$\therefore \; J^2 = J'^2$

$$J^2+J'^2=\frac{1}{2}(\ell^2+A^2)$$
$$=\frac{1}{2}\ell^2-\frac{\mu e^4}{4E}\vec{K}\cdot\vec{K}$$

考虑到 $[\ell_i\ p_j]=\varepsilon_{ijk}i\hbar p_k$, $[\ell_i,\frac{1}{r}]=0$

$$(\vec{\ell}\times\vec{p})_x-(\vec{p}\times\vec{\ell})_x=2(i\hbar p_x+p_z\ell_y-p_y\ell_z)$$
$$(\vec{\ell}\times\vec{p})_y-(\vec{p}\times\vec{\ell})_y=2(i\hbar p_y+p_x\ell_z-p_z\ell_x)$$
$$(\vec{\ell}\times\vec{p})_z-(\vec{p}\times\vec{\ell})_z=2(i\hbar p_z+p_y\ell_x-p_x\ell_y)$$

$\therefore\ J^2+J'^2$

$$=\frac{\ell^2}{2}-\frac{\mu e^4}{4E}\left[\frac{1}{\mu^2e^4}(\hbar^2p^2+p^2\ell^2)-\frac{2}{\mu e^2}\left(\frac{\hbar^2}{r}+\frac{\ell^2}{r}\right)+1\right]$$
$$=\frac{\ell^2}{2}-\frac{\mu e^4}{4E}\left[\frac{2\hbar^2}{\mu e^4}\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}\right)+\frac{2}{\mu e^4}\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}\right)\ell^2+1\right]$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2}-\frac{\mu e^4}{4E}$$

由于 $[H,J^2]=0$ $\quad[H,J'^2]=0\quad[J^2,J'^2]=0$

$\therefore$ 可取 H,J^2,J'^2 表象

又由于 $\vec{J},\vec{J}'$ 具有角动量的对易关系

$\therefore\ \vec{J}^2=\vec{J}'^2=J(J+1)\hbar^2$ (在 J^2,J'^2 表象中)

根据上式得

$$2J(J+1)\hbar^2=-\frac{\hbar^2}{2}-\frac{\mu e^4}{4E}$$

$$\therefore\ E_J=\frac{-\mu e^4}{8(J+\frac{1}{2})^2\hbar^2}=\frac{-\mu e^4}{2(2J+1)^2\hbar^2}$$

令 $2J+1=n$

$$\therefore\ E_n=-\frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2}.$$

第七章　6、粒子在电磁场中的运动

1. 证明：在磁场 $\vec{B}$ 中带电粒子的速度算符的各分量满足下列对易式：

$$[\hat{v}_x,\ \hat{v}_y]=\frac{i\hbar q}{\mu^2 c}B_z,$$

$$[\hat{v}_y,\ \hat{v}_z]=\frac{i\hbar q}{\mu^2 c}B_x,$$

$$[\hat{v}_z,\ \hat{v}_x]=\frac{i\hbar q}{\mu^2 c}B_y.$$

其中 q 为粒子电荷，μ 为质量。

[证]：粒子的哈密顿量为：

$$H=\frac{1}{2\mu}(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A})^2+q\phi$$

$(\vec{A}、\phi)$ 分别为矢势与标势，粒子的速度算符定义为：

$$\hat{\vec{v}}=\dot{\vec{x}}=[\vec{x},H]/i\hbar$$

$$=\frac{1}{2\mu i\hbar}[\vec{x},(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\vec{A})^2]$$

例如：

$$\hat{v}_x=\dot{x}=\frac{1}{2\mu i\hbar}[\vec{x},(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\vec{A})^2]$$

$$=\frac{1}{2\mu i\hbar}[\vec{x},(\hat{p}_x-\frac{q}{c}A_x)^2]$$

$$=\frac{1}{2\mu i\hbar}\{(\hat{p}_x-\frac{q}{c}A_x)[x,(\hat{p}_x-\frac{q}{c}A_x]$$

$$+[x,(\hat{p}_x-\frac{q}{c}A_x)](\hat{p}_x-\frac{q}{c}A_x)\}$$

$$=\frac{1}{\mu}(\hat{p}_x-\frac{q}{c}A_x)$$

$$\therefore\quad \hat{\vec{v}}=\frac{1}{\mu}(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\vec{A})$$

因此　$\mu^2[\hat{v}_x,\hat{v}_y]=[p_x-\frac{q}{c}A_x,\ p_y-\frac{q}{c}A_y]$

$$=[p_x,p_y]-\frac{q}{c}([A_x,p_y]+[p_x,A_y])+\frac{q^2}{c^2}[A_x,A_y]$$

$$=-\frac{q}{c}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}A_y+i\hbar\frac{\partial}{\partial y}A_x)$$

$$=i\hbar\frac{q}{c}(\nabla\times\vec{A})_z=\frac{i\hbar q}{c}B_z$$

即 $[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c} B_z$

类似可证明另外两式。

2、利用上题结果，求出均匀磁场中带电粒子的能量本征值，(取磁场方向为 z 轴方向)。

[解]：磁场 $\vec{B}$ 沿 z 轴方向，令 $B_z = B$，$B_x = B_y = 0$，

因此 $$[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} B$$

$$[\hat{v}_y, \hat{v}_z] = [\hat{v}_x, \hat{v}_z] = 0$$

e 为粒子的电荷，粒子的哈密顿量表为 (μ 为粒子质量)：

$$H = \frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 = \frac{1}{2}\mu\hat{\vec{v}}^2$$

$$= H_1 + H_2$$

$$H_1 = \frac{1}{2}\mu(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2), \quad H_2 = \frac{1}{2}\mu \hat{v}_z^2$$

H_1 与 H_2 是对易的，可以分别求出 H_1 与 H_2 的本征值，而 H 的本征值可以表为 H_1 与 H_2 本征值之和。

先求 H_1 的本征值。考虑到 $\hat{v}_x$ 与 $\hat{v}_y$ 的对易式，

令 $$\hat{v}_x = \sqrt{\frac{|e|\hbar B}{\mu^2 c}}\, Q \qquad \hat{v}_y = \sqrt{\frac{|e|\hbar B}{\mu^2 c}}\, P \qquad (设 e > 0)$$

则 $$[Q, P] = i$$

而 $$H_1 = \left(\frac{|e|\hbar B}{\mu c}\right)\frac{1}{2}(Q^2 + P^2)$$

与一维谐振子的哈密顿量形式上完全一样，因此，利用谐振子的结果，可求出 H_1 的能量本征值为

$$\frac{|e|\hbar B}{\mu c}(n + \frac{1}{2}) \qquad n = 0, 1, 2 \cdots$$

其次求 H_2 的本征值。由于 B 为沿 z 轴方向的均匀磁场，可以取 $$A_x = -By \qquad A_y = 0 \qquad A_z = 0$$

因此
$$\mu\hat{v}_z=\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_z=\hat{p}_z$$
$$H_2=\frac{1}{2}\mu\hat{v}_z^2=\frac{\hat{p}_z^2}{2\mu}$$

是自由粒子的哈密顿量。本征值为 $\frac{1}{2\mu}p_z^2$，p_z 取 $(-\infty,+\infty)$ 中的一切实数值。

因此 H 的本征值为 $(e>0)$
$$E=E_{np_z}=\frac{|e|B}{2\mu c}\hbar(2n+1)+\frac{p_z^2}{2\mu},\quad(n=0,1,2\cdots)$$
p_z 取 $(-\infty,+\infty)$ 中一切实数值。

3．证明：在规范变换下，
$$\rho=\psi^*\psi$$
$$\vec{j}=\frac{1}{2\mu}[\psi^*\hat{\vec{p}}\psi-\psi\hat{\vec{p}}\psi^*]-\frac{e}{\mu c}\vec{A}\psi^*\psi$$
$$\mu\overline{\vec{v}}=\overline{(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})}$$

都不改变。

[证]：在规范变换下
$$\vec{A}\to\vec{A}'=\vec{A}+\nabla f,\quad(f\text{ 是 }\vec{r},t\text{ 的任意函数})$$
$$\phi\to\phi'=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\quad\cdots\cdots\quad(1)$$
可以证明，波函数 ψ 只需作下列变换
$$\psi\to\psi'=e^{\frac{ie}{\hbar c}f}\psi\quad\cdots\cdots\quad(2)$$
则 ψ' 满足的薛定谔方程，形式上与 ψ 相同。即
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'=\left[\frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A}')^2+e\phi'\right]\psi'\quad\cdots\quad(3)$$
证明时要利用
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'-e\phi'\psi'=e^{\frac{ief}{\hbar c}}(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi-e\phi\psi)\quad\cdots\quad(4)$$
$$(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A}')\psi'=e^{\frac{ief}{\hbar c}}(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})\psi\quad\cdots\quad(5)$$

$$(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A}')^2\psi'=e^{\frac{ief}{\hbar c}}(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2\psi \cdots\cdots \quad (6)$$

显然，在变换(2)之下，$\rho=\psi^*\psi$ 保持不变。

$$\vec{j}=\frac{1}{2\mu}[\psi^*(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})\psi+\psi(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^*\psi^*]$$

$$(\hat{p}^*=-\hat{p} \qquad \vec{A}^*=\vec{A})$$

在规范变换下，变成

$$\vec{j}'=\frac{1}{2\mu}[\psi'^*(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A}')\psi'+\psi'(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A}')^*\psi'^*]$$

利用(5)式 $=\frac{1}{2\mu}[\psi^*(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})\psi+\psi(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^*\psi^*]$

$=\vec{j}$

类似可证明 $\mu\overline{\vec{v}}=(\overline{\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}})$

$$=\int\psi^*(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})\psi\, d\tau$$

在规范变换下也不改变。

4、利用柱坐标系求解均匀磁场中带电粒子能量的本征值（取磁场方向为z轴）。

[解]：取柱坐标系(ρ, φ, z)，梯度算符表为

$$\nabla=\vec{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z} \cdots\cdots \quad (1)$$

磁场方向沿z轴，矢势$\vec{A}$可取为

$$\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$$

$$=\frac{1}{2}B\vec{k}\times(\rho\vec{e}_\rho+z\vec{k})=\frac{1}{2}B\rho\vec{e}_\varphi \cdots\cdots \quad (2)$$

即 $\quad A_\varphi=\frac{1}{2}B\rho \qquad A_\rho=A_z=0 \cdots\cdots \quad (2')$

此时 $(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})=(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}A_\varphi\vec{e}_\varphi)$

$$(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2=[-i\hbar\vec{k}\frac{\partial}{\partial z}+\vec{e}_\varphi(-i\hbar\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{eB}{2c}\rho)-i\hbar\frac{\partial}{\partial\rho}\vec{e}_\rho]^2$$

利用 $\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\rho=\vec{e}_\varphi$，$\quad \frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi=-\vec{e}_\rho$

可求出 $(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+(-i\hbar\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{eB}{2c}\rho)^2$

$$+\vec{e}_\varphi[(-i\hbar\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi})\cdot(-i\hbar\vec{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho})]$$

$$=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}-\frac{\hbar^2}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{e^2B^2}{4c^2}\rho^2$$

$$+\frac{ie\hbar B}{c}\frac{\partial}{\partial\varphi}-\hbar^2\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\cdots\qquad(4)$$

所以能量本征方程表为：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi+\frac{ie\hbar B}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi+\frac{e^2B^2\rho^2}{8\mu c^2}\psi$$

$$=E\psi\cdots\cdots\qquad(5)$$

不难验证，P_z与L_z是守恒量。因此可以取(H,P_z,L_z)为力学量完全集，把能量本征态确定下来，所以令：

$$\psi(\rho,\varphi,z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}e^{ik_zz}R(\rho)\cdots\qquad(6)$$

$$m=0,\pm1,\pm2\cdots\cdots$$

k_z 取$(-\infty,+\infty)$中的实数值

代入(5)式，得：

$$\left(-k_z^2+\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R+\left(\frac{eBm}{\hbar c}-\frac{e^2B^2}{4c^2\hbar^2}\rho^2+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)R$$

$$=0\cdots\cdots\qquad(7)$$

令 $\beta=\frac{2\mu E}{\hbar^2}-k_z^2,\quad\gamma=\frac{|e|B}{2\hbar c}\cdots\qquad(8)$

则 $R''+\frac{1}{\rho}R'+(\beta-\gamma^2\rho^2-2\gamma m-\frac{m^2}{\rho^2})R=0\cdots\qquad(9)$

引进无量纲变量 $\xi=\gamma\rho^2\cdots\qquad(10)$

及无量纲参量 $\lambda=\frac{\beta}{4\gamma}+\frac{m}{2}>0\cdots\qquad(11)$

经过计算化简，(9)式将化为

$$\xi\frac{d^2}{d\xi^2}R+\frac{dR}{d\xi}+(\lambda-\frac{\xi}{4}-\frac{m^2}{4\xi})R=0\cdots\qquad(12)$$

先讨论一下方程在奇点$\xi=0$及$\xi=\infty$邻域的行为。

当 $\xi\to 0$ 时，方程可近似表成

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{dR}{d\xi}\right)-\frac{m^2}{4\xi}R=0 \quad\text{---} \qquad (13)$$

其解可表为（为保证 $\xi\to 0$，R 有界

$$R\sim\xi^{|m|/2}$$

当 $\xi\to\infty$ 时，方程（12）可近似表成

$$\xi\frac{d^2R}{d\xi^2}-\frac{\xi}{4}R=0，\text{即}\ \frac{d^2R}{d\xi^2}-\frac{1}{4}R=0 \quad\text{---} \qquad (15)$$

在 $\xi\to\infty$ 时有界的解可表为

$$R\sim e^{-\frac{1}{2}\xi}$$

因此令方程（12）的解表成

$$R=e^{-\xi/2}\xi^{|m|/2}W(\xi) \quad\text{---} \qquad (17)$$

代入（12）式，经计标化简，得：

$$\xi W''+(1+|m|-\xi)W'+\left(\lambda-\frac{|m|+1}{2}\right)W=0 \quad\text{---} \qquad (18)$$

属于合流超几何方程。在 $\xi=0$ 邻域中有界的解为合流超几何函数

$$W=F\left(-\lambda+\frac{|m|+1}{2},\ |m|+1,\ \xi\right) \quad\text{---} \qquad (19)$$

而为了使只在 $\xi\to\infty$ 时有限，要求 W 中断为一个多项式，即要求

$$-\lambda+\frac{|m|+1}{2}=-n\ \text{（负整数）}\quad\text{---} \qquad (20)$$

$$n=0,1,2,\cdots$$

即：
$$\lambda=n+\frac{|m|+1}{2}=\left(n+\frac{1}{2}\right)+|m|/2\geqslant 0 \qquad (21)$$

利用（11）式及（8）式

$$\beta=4\gamma\lambda-2m\gamma=4\gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)+2\gamma(|m|-m)$$

而
$$E=\frac{\hbar^2k_z^2}{2\mu}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\beta$$

$$= \frac{p_z^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2}{2\mu} 4\gamma\left[(n+\frac{1}{2}) + \frac{|m|-m}{2}\right], \quad p_z = \hbar k_z$$

$$= \frac{p_z^2}{2\mu} + \frac{|e|B}{\mu c}\hbar\left[(n+1/2) + \frac{|m|-m}{2}\right]$$

$$n = 0, 1, 2, \cdots\cdots,$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots\cdots,$$

p_z 取 $(-\infty, +\infty)$ 一切实数值

5、设带电粒子在相互垂直的均匀电场 $\mathscr{E}$ 及均匀磁场 B 中运动，求其能谱及波函数。（取磁场方向为 z 轴方向，电场方向为 x 轴方向）

〔解〕：磁场方向取为 z 轴方向，此均匀磁场的矢势可以取为：

$$A_x = A_z = 0 \qquad A_y = Bx \quad \cdots\cdots \tag{1}$$

于是粒子的哈密顿量可表为（粒子带电荷 e）

$$H = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_y - \frac{|e|B}{c}x\right)^2 + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} - e\mathscr{E}x$$

$$= \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2\mu}\left(\frac{|e|B}{c}x - \hat{p}_y - \frac{\mu c\mathscr{E}}{B}\right)^2 - \frac{\mu c^2\mathscr{E}^2}{2B^2}$$

$$- \frac{c\mathscr{E}\hat{p}_y}{B} + \frac{1}{2\mu}\hat{p}_z^2 \quad \cdots\cdots \tag{2}$$

令 $$\hat{\pi} = \frac{|e|B}{c}x - \hat{p}_y - \frac{\mu e\mathscr{E}}{B} \quad \cdots\cdots \tag{3}$$

则 $$H = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\hat{\pi}^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} - \frac{c\mathscr{E}}{B}\hat{p}_y - \frac{\mu c^2\mathscr{E}^2}{2B^2}$$

$$= H_1 + H_2 \quad \cdots\cdots \tag{4}$$

$$H_1 = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\hat{\pi}^2}{2\mu} \quad \cdots\cdots \tag{5}$$

$$H_2 = \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} - \frac{c\mathscr{E}}{B}\hat{p}_y - \frac{\mu c^2\mathscr{E}^2}{2B^2} \quad \cdots \tag{6}$$

H_1 与 H_2 是对易的，可以分别求它们的本征值，然后相加。

不难证明，$$[\hat{\pi}, \hat{p}_x] = \frac{i\hbar eB}{c} \quad \cdots\cdots \tag{7}$$

令 $$\hat{\pi} = \sqrt{\frac{\hbar|e|B}{c}}\,Q, \qquad \hat{p}_x = \sqrt{\frac{\hbar|e|B}{c}}\,P \quad \cdots \tag{8}$$

则 $[Q, P] = i$ ------ (9)

而 H_1 可表成 $H_1 = \frac{\hbar|e|B}{\mu c}\frac{1}{2}(P^2 + Q^2)$ --- (10)

与线性谐振子形式上相同，因而 H_1 的本征值为

$$\hbar\frac{|e|B}{\mu c}(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

H_2 的本征值是很容易求的，即

$$\frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{c\varepsilon}{B}p_y - \frac{\mu c^2\varepsilon^2}{2B^2},$$

相应的本征函数为

$$\psi_{p_z p_y}(y, z) \sim e^{i(p_y y + p_z z)/\hbar}。$$

H 的本征值为：

$$E_{n p_y p_z} = \hbar\frac{|e|B}{\mu c}(n + \frac{1}{2}) + \frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{c\varepsilon}{B}p_y - \frac{\mu c^2\varepsilon^2}{2B^2}$$

$n = 0, 1, 2, \cdots$

p_z, p_y 取 $(-\infty, +\infty)$ 中一切实数值。

相应的能量本征函数为

$$\psi_{n p_y p_z}(x, y, z) \sim e^{i(p_y y + p_z z)/\hbar} \cdot e^{-\frac{1}{2}\frac{|e|B}{\hbar c}(x - \frac{cp_y}{eB} - \frac{\mu c^2\varepsilon}{eB^2})}$$

$$\cdot H_n\left(\sqrt{\frac{|e|B}{\hbar c}}(x - \frac{cp_y}{eB} - \frac{\mu c^2\varepsilon}{eB^2}\right)$$

H_n 是厄密多项式

6、设带电粒子在均匀磁场 $\vec{B}$ 及三维各向同性谐振子场 $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 r^2$ 中运动，求能谱公式。

[解]：若采用柱坐标系，本题解法与第（4）题很相似，只是哈密顿量中多了一项

$$\frac{1}{2}\mu\omega_0^2 r^2 = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2(\rho^2 + z^2) \quad \cdots \quad (1)$$

参照第(4)题(5)式，可以写出本题的哈密顿量

$$H=H_z-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}$$
$$+\frac{ie\hbar B}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\left(\frac{e^2B^2}{8\mu c^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\right)\rho^2 \qquad (2)$$

$$H_z=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2z^2\ (一维谐振子) \qquad (3)$$

可以看出，H_z, L_z 是守恒量。取(H, H_z, L_z)为力学量完全集，求其共同本征态。

$$\psi(\rho,\varphi,z)\sim\psi_k(z)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}R(\rho) \qquad (4)$$

$\psi_k(z)$ 是谐振子波函数，相应的能量本征值为：

$$\left(k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0,\qquad k=0,1,2\cdots \qquad (5)$$

总能量为：$E=(k+\frac{1}{2})\hbar\omega_0-m\hbar\omega+E'$ (6)

其中 $\qquad \omega=eB/2\mu c$ (7)

E' 是下列方程的本征值：

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right]+\left(\frac{e^2B^2}{8\mu c^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\right)\rho^2\right\}R$$
$$=E'R \qquad (8)$$

令 $\qquad \hbar^2\gamma'^2/2=\frac{e^2B^2}{8\mu c^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2=\frac{\hbar^2\gamma^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2$

或 $\qquad \gamma'^2=\gamma^2+\frac{\mu^2}{\hbar^2}\omega_0^2=\frac{\mu^2}{\hbar^2}\omega^2+\frac{\mu^2}{\hbar^2}\omega_0^2$ (9)

$$\gamma'=\frac{\mu}{\hbar}\sqrt{\omega^2+\omega_0^2}$$

作变数代换 $\qquad \xi=\gamma'\rho^2$ (10)

及参量代换 $\qquad E=\frac{\hbar^2}{2\mu}\beta,\qquad \lambda=\beta/4\gamma'$ (11)

则方程(8)将化成：$\xi\frac{d^2R}{d\xi^2}+\frac{dR}{d\xi}+\left(\lambda-\frac{\xi}{4}-\frac{m^2}{4\xi}\right)R=0$ (12)

与第(4)题(12)式全同。因此，引用第(4)题(21)式结果，λ取值为：

$$\lambda=(n+\frac{1}{2})+|m|/2,\qquad n=0,1,2\cdots$$

因此
$$E'=\frac{\hbar^2}{2\mu}\beta=\frac{\hbar^2}{2\mu}4\gamma\lambda$$
$$=\frac{\hbar^2}{\mu}\gamma(2n+1+|m|)$$
$$=\hbar(\omega^2+\omega_0^2)^{1/2}(2n+1+|m|)$$

而总能量为：

$$E=(k+\frac{1}{2})\hbar\omega_0+\hbar(\omega^2+\omega_0^2)^{1/2}(2n+1+|m|)-m\hbar\omega,$$
$$\omega=eB/2\mu c,$$
$$n=0,1,2,\cdots\cdots$$
$$k=0,1,2,\cdots\cdots$$
$$m=0,\pm1,\pm2\cdots\cdots$$

第八章 7. 自旋

1、在σ_z表象中，求σ_x的本征态。

〔解〕：在σ_z表象中，σ_x的矩阵表示为$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$。

代入本征方程

$$\sigma_x\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} \tag{1}$$

即
$$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}, \tag{2}$$

∴
$$b=\lambda a,\quad a=\lambda b。 \tag{3}$$

因此
$$\lambda^2=1,\quad \lambda=\pm1 \tag{4}$$

用$\lambda=+1$代回(3)式，得　$a=b$

$\lambda=-1$代回(3)式，得　$a=-b$。

再利用归一化条件，可求出σ_x的两个本征态为

$$\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \lambda=+1,$$

$$\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},\quad \lambda=-1。$$

2、在σ_z表象中，求$\vec\sigma\cdot\vec n$的本征态。$\vec n(\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta)$是$(\theta,\varphi)$方向的单位矢。

解：在σ_z表象中，$\vec\sigma\cdot\vec n$的矩阵表示为

$$\vec\sigma\cdot\vec n=\sigma_x\sin\theta\cos\varphi+\sigma_y\sin\theta\sin\varphi+\sigma_z\cos\theta$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{1}$$

代入本征方程

$$\vec\sigma\cdot\vec n\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} \tag{2}$$

得
$$\begin{aligned}a\cos\theta+b\sin\theta e^{-i\varphi}&=\lambda a\\ a\sin\theta e^{i\varphi}-b\cos\theta&=\lambda b\end{aligned} \tag{3}$$

作为a、b的齐次方程，有解的必要条件为

$$\begin{vmatrix} \cos\theta-\lambda & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta-\lambda \end{vmatrix}=0$$

即 $$-\cos^2\theta+\lambda^2-\sin^2\theta=0$$

或 $$\lambda^2=1,\quad \lambda=\pm 1 \qquad (4)$$

用 $\lambda=+1$ 代入(3)式，得

$$a/b=\frac{\sin\theta e^{-i\varphi}}{1-\cos\theta}=\frac{2\sin\theta/2\cdot\cos\theta/2}{2\sin^2\theta/2}e^{-i\varphi}$$

$$=\frac{\cos\theta/2}{\sin\theta/2}e^{-i\varphi}$$

采用适当的相角后，$\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$ 的本征态之一可表为

$$\begin{pmatrix} \cos\theta/2 \; e^{-i\varphi/2} \\ \sin\theta/2 \; e^{i\varphi/2} \end{pmatrix},\qquad \lambda=+1\text{。}$$

类似可求出另一个本征态

$$\begin{pmatrix} \sin\theta/2 \quad e^{-i\varphi/2} \\ -\cos\theta/2 \quad e^{i\varphi/2} \end{pmatrix},\qquad \lambda=-1\text{。}$$

3、在自旋态 $\chi_{1/2}(S_z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 下，求 $\overline{\Delta S_x^2}$ 与 $\overline{\Delta S_y^2}$。

〔解〕: $$\overline{\Delta S_x^2}=\overline{(S_x-\overline{S_x})^2}=\overline{S_x^2}-\overline{S_x}^2$$

但 $S_x^2=\frac{\hbar^2}{4}$，（常数矩阵）

$$\overline{S_x}=\frac{\hbar}{2}(1,0)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}(1,0)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=0$$

所以 $$\overline{\Delta S_x^2}=\hbar^2/4\text{。}$$

类似可证明 $$\Delta S_y^2=\hbar^2/4\text{。}$$

4、求在下列状态中，$\vec{J}^2$ 与 J_z 的测值

(1) $\psi_1=\chi_{1/2}(S_z)Y_{11}(\theta,\varphi)$，

(2) $\psi_2=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_{1/2}(S_z)Y_{10}(\theta,\varphi)+\chi_{-1/2}(S_z)Y_{11}(\theta,\varphi)\right]$

(3) $\psi_3=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_{-1/2}(S_z)Y_{10}(\theta,\varphi)+\chi_{1/2}(S_z)Y_{1-1}(\theta,\varphi)\right]$

(4) $\psi_4=\chi_{-1/2}(S_z)Y_{1-1}(\theta,\varphi)$。

[解]：首先我们注意，这四个态都是$\hat{l}^2$的本征态，轨道角动量量子数$l=1$。其次，它们都是$\hat{j}_z$的本征态，本征值分别为（单位$\hbar$）m_j，

$$m_j=3/2,\ 1/2,\ -1/2,\ -3/2。$$

即在上列四个态下，$\hat{j}_z$的测值分别为（单位$\hbar$）

$$3/2,\ 1/2,\ -1/2,\ -3/2。$$

至于$\hat{j}^2$的测值，不是一眼就能看出，需要用（$\hat{l}^2$，$\hat{j}^2$，$\hat{j}_z$）的共同本征态来展开。利用它们共同本征态的表示式

$j=l+1/2$，ϕ_{ljm_j}

$$=\sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\alpha Y_{j-1/2,m_j-1/2}+\sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\beta Y_{j-1/2,m_j+1/2}\qquad(1)$$

$j=l-1/2$，ϕ_{ljm_j}

$$=-\sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j+2}}\alpha Y_{j+1/2,m_j-1/2}+\sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j+2}}\beta Y_{j+1/2,m_j+1/2}\qquad(2)$$

其中$\alpha\equiv\chi_{1/2}(S_z)$，$\beta=\chi_{-1/2}(S_z)$。

对于$l=1$情况，上式简化为

$j=3/2$，$\phi_{1\,3/2\,m_j}$

$$=\sqrt{\frac{3/2+m_j}{3}}\alpha Y_{1,m_j-1/2}+\sqrt{\frac{3/2-m_j}{3}}\beta Y_{1,m_j+1/2}\qquad(3)$$

$j=1/2$，$\phi_{1\,1/2\,m_j}$

$$=-\sqrt{\frac{3/2-m_j}{3}}\alpha Y_{1,m_j-1/2}+\sqrt{\frac{3/2+m_j}{3}}\beta Y_{1,m_j+1/2}\qquad(4)$$

以下分别讨论 $m_j=3/2, \pm 1/2, -3/2$ 几种情况。

(1) $m_j=3/2$。由于 $j\geq|m_j|$，所以只能是 $j=3/2$。

利用(3)式：

$$\phi_{1\,3/2\,3/2}=\alpha Y_{11}$$

这正是 ψ_1 态，所以 ψ_1 态是 $\hat{j}^2$ 本征态，本征值为 $j(j+1)\hbar^2$，$j=3/2$。

(2) $m_j=1/2$，按(3)式

$$\phi_{1\,3/2\,1/2}=\sqrt{\frac{2}{3}}\alpha Y_{10}+\sqrt{\frac{1}{3}}\beta Y_{11}\ ,\quad (j=3/2)。$$

正是 ψ_2 态，所以 ψ_2 是 $\hat{j}^2$ 的本征态。$j=3/2$。

(3) $m_j=-1/2$，按(3)式

$$\phi_{1\,3/2\,-1/2}=\sqrt{\frac{1}{3}}\alpha Y_{1-1}+\sqrt{\frac{2}{3}}\beta Y_{10}\ ;\quad (j=3/2)$$

正是 ψ_3 态，所以 ψ_3 是 $\hat{j}^2$ 的本征态。$j=3/2$

(4) $m_j=-3/2$，按(3)式

$$\phi_{1\,3/2\,-3/2}=\beta Y_{1-1}\ ,\quad (j=3/2)$$

正是 ψ_4 态，所以 ψ_4 也是 $\hat{j}^2$ 本征态，$j=3/2$。

6. 求证：$\Lambda_l^+=\dfrac{l+1+\vec{\sigma}\cdot\vec{l}}{2l+1}$，$\Lambda_l^-=\dfrac{l-\vec{\sigma}\cdot\vec{l}}{2l+1}=1-\Lambda_l^+$，$(\hbar=1)$

分别是角动量子数为 l 的子空间中的投影到 $j=l\pm\frac{1}{2}$ 态上去的算符。

[证]：利用 $\hat{j}^2=\vec{l}^2+\vec{S}^2+2\vec{S}\cdot\vec{l}$

$$=\vec{l}^2+\frac{3}{4}+\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\ ,\quad (\hbar=1)$$

$$\therefore\quad \vec{\sigma}\cdot\vec{l}=\hat{j}^2-\vec{l}^2-3/4$$

作用于 ϕ_{ljm_j} 上，$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\,\phi_{ljm_j}=(j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4})\phi_{ljm_j}$

对于 $j=l+1/2$，得 $\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\,\phi_{ljm_j}=l\,\phi_{ljm_j}$，

$j=l-1/2$，得 $\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\,\phi_{ljm_j}=-(l+1)\phi_{ljm_j}$

$$\therefore\quad \Lambda_l^{+}\phi_{ljm_j}=\begin{cases}\phi_{ljm_j}, & j=l+1/2,\\ 0, & j=l-1/2.\end{cases}$$

$$\Lambda_l^{-}\phi_{ljm_j}=\begin{cases}0, & j=l+1/2\\ \phi_{ljm_j}, & j=l-1/2.\end{cases}$$

6. 一个具有两个电子的原子，处于自旋单态（$S=0$）。证明：自旋轨道耦合作用 $V_{S\cdot L}=\xi(r)\vec{S}\cdot\vec{L}$ 对能量无贡献。

[证明]：利用 $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$，

平方得 $\quad \vec{S}\cdot\vec{L}=\frac{1}{2}(\vec{J}^2-\vec{L}^2-S^2)$

作用于 ψ_{JLS} 态上，得 $\vec{S}\cdot\vec{L}\,\psi_{JLS}$

$$=\frac{1}{2}[J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)]\psi_{JLS}$$

对于自旋单态，$S=0$，$J=L$

$\therefore\quad \vec{S}\cdot\vec{L}\,\psi_{LL0}=0$

$\therefore\quad V_{S\cdot L}$ 对能量无贡献

7. 设有两个自旋为 1/2 的粒子（$\hbar=1$），彼此作用为 $V(r)=V_c(r)+V_T(r)S_{12}$，$V_c(r)$ 与 $V_T(r)$ 分别表示中心力与张量力。证明：

(1) 宇称 π，总自旋 $\hat{S}^2$，总角动量 $\hat{J}^2$ 及 $\hat{J}_z$ 均为守恒量。但 $\hat{L}^2$ 与 $\hat{S}$ 分别不是。

(2) 在自旋单态之下，张量力为零。

[证]：(1) $\quad S_{12}=\dfrac{3(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{r})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{r})}{r^2}-\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$，$(\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2)$

$$=6(\vec{S}\cdot\vec{r})^2/r^2-2\hat{S}^2,\quad \text{(见§4节,(18)式)}$$

显然 $\pi S_{12}\pi^{-1}=S_{12}$，即 $[\pi,S_{12}]=0 \quad \therefore [\pi,V(r)]=0$

其次 $[\hat{S}^2, \hat{S}]=0$，$[\hat{S}^2, S_{12}]=0$，$[\hat{S}^2, V(r)]=0$。

再其次，证明 $[\hat{J}, S_{12}]=0$。

例如，$[\hat{J}_z, S_{12}]=0$，只需证明 $[\hat{J}_z, \hat{S}\cdot\vec{r}]=0$，$[\hat{J}_z, \hat{S}^2]=0$。

果然，$[\hat{J}_z, \hat{S}\cdot\vec{r}]=[\hat{J}_z, \hat{S}_x x+\hat{S}_y y+\hat{S}_z z]$

$$=[\hat{S}_z, \hat{S}_x]x+[\hat{S}_z, \hat{S}_y]y+[\hat{S}_z, \hat{S}_z]z$$

$$+[\hat{L}_z, x]\hat{S}_x+[\hat{L}_z, y]\hat{S}_y+[\hat{L}_z, z]\hat{S}_z$$

$$=i\hbar\hat{S}_y x-i\hbar\hat{S}_x y+i\hbar y\hat{S}_x-i\hbar x\hat{S}_y=0$$

$$[\hat{J}_z, \hat{S}^2]=[\hat{L}_z, \hat{S}^2]+[\hat{S}_z, \hat{S}^2]=0$$

完全相似，不难证明 $[\hat{L}\cdot S_{12}]\neq 0$，$[\hat{S}, S_{12}]\neq 0$

因而 $[\hat{L}, V(r)]\neq 0$，$[\hat{S}, V(r)]\neq 0$。

所以，π，$\hat{S}^2$，$\hat{J}$（因而 $\hat{J}^2$，$\hat{J}_z$）是守恒量，但 $\hat{L}$ 与 $\hat{S}$ 分别不是守恒量。

（2）在自旋单态之下，不难证明 $\overline{S_{12}}=0$

$$\because\ S_{12}=6(\hat{S}\cdot\hat{r})^2-2\hat{S}^2,\quad (\hat{r}=\vec{r}/r\text{，单位矢})$$

$$=6(\hat{S}_x\hat{x}+\hat{S}_y\hat{y}+\hat{S}_z\hat{z})^2-2\hat{S}^2$$

$$=\frac{3}{2}(\hat{S}_+\hat{r}_-+\hat{S}_-\hat{r}_++2\hat{S}_z\hat{z})^2-2\hat{S}^2,$$

其中 $\hat{S}_\pm=S_x\pm iS_y$，$\hat{r}_\pm=\hat{x}\pm i\hat{y}$。

$\hat{S}_\pm$ 分别代表升标符与降标符。~~在自旋单态~~（$S=0, M_S=0$）之下，显然 $\overline{S_+}=\overline{S_-}=\overline{S_z}=0$，$\overline{S^2}=S(S+1)=0$。

$\therefore\ \overline{S_{12}}=0$，$\therefore\ \overline{V_T(r)S_{12}}=0$

8\. 两个自旋为 S 的全同粒子组成的体系，对称及反对称的自旋波函数各有几个？在 $S=1/2$，$3/2$ 情况下，对称与反对

称的自旋波函数各有几个？

〔解〕：自旋为 s 的粒子，自旋态（$\hat{S}_z$ 本征态）有 $(2s+1)$ 个，记为 χ_{m_s}，$m_s=s, s-1, \cdots, -s+1, -s$。

两个粒子的自旋态（例如取为 $\hat{S}_{1z}$，$\hat{S}_{2z}$ 的共同本征态）有 $(2s+1)^2$ 个，其中对称态有

$$\chi_{m_s}(1)\chi_{m_s}(2),\quad m_s=s, s-1, \cdots, -s+1, -s。$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{m_s}(1)\chi_{m_s'}(2)+\chi_{m_s'}(1)\chi_{m_s}(2)\right]$$

$$m_s\neq m_s'=s, s-1, \cdots, -s+1, -s.$$

一共是 $(2s+1)+\frac{1}{2}(2s+1)2s=(s+1)(2s+1)$ 个。

反对称态有

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{m_s}(1)\chi_{m_s'}(2)-\chi_{m_s'}(1)\chi_{m_s}(2)\right]$$

$$m_s\neq m_s'=s, s-1, \cdots, -s+1, s。$$

共有 $\frac{1}{2}(2s+1)2s=s(2s+1)$ 个

总数仍为 $(2s+1)(s+1)+(2s+1)s=(2s+1)^2$

对于 $s=3/2$ 粒子，对称自旋态有10个，反对称自旋态有6个。

$s=1/2$ 粒子，对称态有3个，反对称态有1个。

9、证明 $[\vec{a}\cdot\vec{\sigma}, \vec{\sigma}]=-2i\vec{a}\times\vec{\sigma}$，$\vec{a}$ 是与 $\vec{\sigma}$ 对易的矢量。

〔证1〕：利用泡利矩阵对易式

$$[\sigma_i, \sigma_j]=2i\epsilon_{ijk}\sigma_k,$$

ϵ_{ijk} 是 Levi—Civita 符号。所以

$$
\begin{aligned}
[\vec{a}\cdot\vec{\sigma}, \sigma_j]&=[a_i\sigma_i, \sigma_j] \quad (a_i\sigma_i\ \text{表示对}\ i\ \text{求和}\ \textstyle\sum_{i=1}^{3})\\
&=a_i[\sigma_i, \sigma_j]\\
&=a_i 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k
\end{aligned}
$$

$$= -2i\epsilon_{jik}a_i\sigma_k$$

$$= -2i(\vec{a}\times\vec{\sigma})_j$$

所以 $[\vec{a}\cdot\vec{\sigma},\vec{\sigma}] = -2i\,\vec{a}\times\vec{\sigma}$ 。

〔证2〕：如对 Levi－Civita 符号不熟悉，可直接计算。

$$[\vec{a}\cdot\vec{\sigma},\sigma_x] = a_x[\sigma_x,\sigma_x] + a_y[\sigma_y,\sigma_x] + a_z[\sigma_z,\sigma_x]$$

$$= 0 - 2i a_y\sigma_z + 2i a_z\sigma_y$$

$$= -2i(\vec{a}\times\vec{\sigma})_x$$

因而 $[\vec{a}\cdot\vec{\sigma},\vec{\sigma}] = -2i\vec{a}\times\vec{\sigma}$ 。

考虑到 $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$

$$[\vec{a}\cdot\vec{S},\vec{S}] = \frac{\hbar^2}{4}[\vec{a}\cdot\vec{\sigma},\vec{\sigma}]$$

$$= \frac{\hbar^2}{4}(-2i)\vec{a}\times\vec{\sigma}$$

$$= -i\hbar\,\vec{a}\times\vec{S}$$

$$= i\hbar\,\vec{S}\times\vec{a}$$

10、证明：(1) $e^{i\sigma_j\alpha} = \cos\alpha + i\sigma_j\sin\alpha$，$(j = x, y, z)$

(2) $e^{i\vec{\theta}\cdot\vec{\sigma}} = \cos\theta + i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta$

$\theta = |\vec{\theta}|$，$\hat{\theta} = \vec{\theta}/\theta$ （单位矢量）

〔证〕：对 $e^{i\sigma_j\alpha}$ 作泰勒展开

$$e^{i\sigma_j\alpha} = 1 + i\sigma_j\alpha + \frac{1}{2!}(i\sigma_j\alpha)^2 + \cdots$$

利用 $\sigma_j^{2k} = 1$，$k = 0, 1, 2, \cdots$

$\sigma_j^{2k+1} = \sigma_j$，$k = 0, 1, 2, \cdots$

不难看出

$$e^{i\sigma_j\alpha} = \left(1 - \frac{1}{2!}\alpha^2 + \frac{1}{4!}\alpha^4 \cdots\right) + i\sigma_j\left(\alpha - \frac{1}{3!}\alpha^3 + \frac{1}{5!}\alpha^5 \cdots\right)$$

$$= \cos\alpha + i\sigma_j\sin\alpha$$

类似，利用 $(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})^{2k} = 1$，

$$(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})^{2k+1}=(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}),\quad k=0,1,2,\cdots$$

也很容易证明

$$e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{\theta}}=\cos\theta+i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta$$

$\hat{\theta}$表示某个方向$\vec{\theta}$的单位矢，$\vec{\theta}$与$\vec{\sigma}$对易。

11、证明：$\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})-\vec{A}=\vec{A}-(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\vec{\sigma}=i\vec{A}\times\vec{\sigma}$，

$\vec{A}$是与$\vec{\sigma}$对易的任何矢量算符

[证]：

例如 $\sigma_x(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})-A_x=\sigma_x(\sigma_x A_x+\sigma_y A_y+\sigma_z A_z)-A_x$

$$=\sigma_x\sigma_y A_y+\sigma_x\sigma_z A_z$$

$$=i(\sigma_z A_y-\sigma_y A_z)=i(\vec{A}\times\vec{\sigma})_x\text{。}$$

12、设 $U=e^{-\frac{i}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{\theta}}=\cos\theta/2-i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta/2$，证明：

(1) $U^+U=1$

(2) $U^+\vec{\sigma}U=(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\hat{\theta}+(\hat{\theta}\times\vec{\sigma})\times\hat{\theta}\cos\theta+\hat{\theta}\times\vec{\sigma}\sin\theta$

[证]： $U^+=\cos\theta/2+i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta/2$

$\therefore U^+U=(\cos\theta/2+i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta/2)(\cos\theta/2-i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta/2)$

$=\cos^2\theta/2+(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})^2\cdot\sin^2\theta/2$，（利用$(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})^2=1$

$=\cos^2\theta/2+\sin^2\theta/2=1$。

而 $U^+\vec{\sigma}U=(\cos\theta/2+i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta/2)\vec{\sigma}(\cos\theta/2-i\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta}\sin\theta/2)$

$=\vec{\sigma}\cos^2\theta/2+i\sin\theta/2\cdot\cos\theta/2[\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta},\vec{\sigma}]+(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\vec{\sigma}\cdot$

$(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\sin^2\theta/2$

利用(9)及(11)题结果

$=\vec{\sigma}\cos^2\theta/2+\sin\theta\,\hat{\theta}\times\vec{\sigma}+(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})(2\hat{\theta}-(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\vec{\sigma})\sin^2\theta/2$

$=\sin\theta\,\hat{\theta}\times\vec{\sigma}+\vec{\sigma}\cos^2\theta/2+(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\hat{\theta}(1-\cos\theta)-\vec{\sigma}\sin^2\theta/2$

$=\sin\theta\,\hat{\theta}\times\vec{\sigma}+(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\hat{\theta}+\cos\theta(\vec{\sigma}-(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\hat{\theta})$

$$=\sin\theta\,\hat{\theta}\times\vec{\sigma}+(\vec{\sigma}\cdot\hat{\theta})\hat{\theta}+\cos\theta(\hat{\theta}\times\vec{\sigma})\times\hat{\theta}$$

因为 $\hat{\theta}\times(\hat{\theta}\times\vec{\sigma})=(\hat{\theta}\cdot\vec{\sigma})\hat{\theta}-(\hat{\theta}\cdot\hat{\theta})\vec{\sigma}$

$$=(\hat{\theta}\cdot\vec{\sigma})\theta-\vec{\sigma}$$

13. 证明：不存在非零的2维矩阵，能和三个泡利矩阵都反对易。即设 $A\vec{\sigma}+\vec{\sigma}A=0$，则 $A=0$。

[证]: 按假设，$A\sigma_z+\sigma_z A=0$.

右乘 σ_x 得 $A\sigma_z\sigma_x+\sigma_z A\sigma_x=0$,

利用 A 与 σ_x 反对易， $iA\sigma_y-\sigma_z\sigma_x A=0$

$iA\sigma_y-i\sigma_y A=0$, 或 $A\sigma_y-\sigma_y A=0$

即 A 与 σ_y 对易，但按假定，A 与 σ_y 反对易，

$$A\sigma_y+\sigma_y A=0$$

因此 $A\sigma_y=0$

再右乘 σ_y，得 $A=0$。

14. 证明：找不到一个表象，在其中(1)三个泡利矩阵均为实矩阵，或(2)两个是纯虚矩阵，而另一个为实矩阵。

[证]: 利用 $\sigma_x\sigma_y\sigma_z=i$，(此式与表象无关)

可知 σ_x, σ_y 与 σ_z 不能都为实矩阵。

也可以断定，不能有两个为纯虚，而另一个为实矩阵。

从 $[\sigma_i,\sigma_j]=2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ 也可作出上述结论。

15. 证明：σ_x, σ_y, σ_z 与 I (2×2单位矩阵)构成2×2矩阵的完全集，即任何2×2矩阵均可用它们的线性组合来表达，任何 2×2 矩阵M可以表成

$$M=\frac{1}{2}[(T_rM)I+T_r(M\vec{\sigma})\cdot\vec{\sigma}] \qquad (1)$$

〔证〕：2×2 矩阵，有4个元素，所以只能有4个彼此线性无关的矩阵。下面证明，$\vec{\sigma}$ 与 I 是彼此线性无关的。

设 $$a_0 I + \vec{a}\cdot\vec{\sigma} = 0 \quad (2)$$

即 $$\begin{pmatrix} a_0+a_z & a_x-ia_y \\ a_x+ia_y & a_0-a_z \end{pmatrix} = 0$$

$\therefore$ $a_0+a_z=0$，$a_0-a_z=0 \Longrightarrow a_0=0$，$a_z=0$，

$a_x-ia_y=0$，$a_x+ia_y=0 \Longrightarrow a_x=0$，$a_y=0$。

所以不存在非零的4个数（a_0 及 $\vec{a}$），使(2)式成立，即 $\vec{\sigma}$ 与 I 是彼此线性独立的。

利用 $\quad T_r I=2$；$T_r\vec{\sigma}=0$，不难验证

$$M=\frac{1}{2}\{(T_r M)I+T_r(M\vec{\sigma})\cdot\vec{\sigma}\}$$
$$=\frac{1}{2}\{(T_r M)I+T_r(M\sigma_x)\cdot\sigma_x+T_r(M\sigma_y)\cdot\sigma_y+T_r(M\sigma_z)\sigma_z\}$$

16、求证：与 σ_x，σ_y 及 σ_z 都对易的矩阵，只能常数矩阵 CI，C 为任意常数，I 为 2×2 单位矩阵。

〔证〕：按上题结果，任何 2×2 矩阵均可表为

$$M=\frac{1}{2}\{(T_r M)I+T_r(M\vec{\sigma})\cdot\vec{\sigma}\}$$
$$=\frac{1}{2}\{(T_r M)I+T_r(M\sigma_x)\sigma_x+T_r(M\sigma_y)\sigma_y+T_r(M\sigma_z)\sigma_z\} \quad (1)$$

右乘 σ_x，$M\sigma_x=\frac{1}{2}\{(T_r M)\sigma_x+T_r(M\sigma_x)-T_r(M\sigma_y)i\sigma_z+T_r(M\sigma_z)i\sigma_y\}$

左乘 σ_x，$\sigma_x M=\frac{1}{2}\{(T_r M)\sigma_x+T_r(M\sigma_x)+iT_r(M\sigma_y)\sigma_z-T_r(M\sigma_z)i\sigma_y\}$

但按假定，$M\sigma_x=\sigma_x M$，由此得出

$$T_r(M\sigma_y)\sigma_z-T_r(M\sigma_z)\sigma_y=0 \quad (2a)$$

类似可得出 $$T_r(M\sigma_z)\sigma_x-T_r(M\sigma_x)\sigma_z=0 \quad (2b)$$

$$T_r(M\sigma_x)\sigma_y-T_r(M\sigma_y)\sigma_x=0 \quad (2c)$$

(2a) σ_y 得： $Tr(M\sigma_y)i\sigma_x + Tr(M\sigma_z) = 0$

(2b) σ_x 得： $Tr(M\sigma_z) - Tr(M\sigma_x)i\sigma_y = 0$

上两式相加 $2Tr(M\sigma_z) + i[-Tr(M\sigma_x)\sigma_y + Tr(M\sigma_y)\sigma_x] = 0$

用 (2c)，得： $Tr(M\sigma_z) = 0$

类似可证 $Tr(M\sigma_x) = Tr(M\sigma_y) = 0$

即 $Tr(M\vec{\sigma}) = 0$

$\therefore \quad M = \frac{1}{2}(TrM)I = CI, \quad (C = \frac{1}{2}TrM)$。

17. 证明：$Tr[(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})] = 2(\vec{A}\cdot\vec{B})$，$\vec{A}$、$\vec{B}$ 是与 $\vec{\sigma}$ 对易的任何矢量（与自旋自由度无关）。

〔证〕：利用公式

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) = (\vec{A}\cdot\vec{B}) + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B}),$$

以及 $TrI = 2$，$Tr\vec{\sigma} = 0$，

可知 $Tr[(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})] = 2(\vec{A}\cdot\vec{B})$

18、证明：$Tr[(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})(\vec{\sigma}\cdot\vec{C})] = 2i(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C}$，$\vec{A}$．$\vec{B}$．$\vec{C}$ 是与 $\vec{\sigma}$ 对易的矢量算符。

〔证〕：利用

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})(\vec{\sigma}\cdot\vec{C}) = [(\vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})](\vec{\sigma}\cdot\vec{C})$$

$$= (\vec{A}\cdot\vec{B})(\vec{\sigma}\cdot\vec{C}) + i\{(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C} + i\vec{\sigma}\cdot[(\vec{A}\times\vec{B})\times\vec{C}]\}$$

$$= i(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C} + \{(\vec{A}\cdot\vec{B})\vec{C} + i[(\vec{A}\times\vec{B})\times\vec{C}]\}\cdot\vec{\sigma}$$

以及 $Tr\vec{\sigma} = 0$ 可得

$$Tr[(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})(\vec{\sigma}\cdot\vec{C})] = 2i(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C}$$

19. 满足下列条件的 n 维矩阵 U，称为 SU_n 矩阵。

$$U^+U = UU^+ = 1, \quad \det U = 1.$$

试求 SU_2 的一般表示式。

〔解〕: 设 $U=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

由条件 $U^+U=1$

$$\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} |a|^2+|c|^2 & a^*b+c^*d \\ b^*a+d^*c & |b|^2+|d|^2 \end{pmatrix}=1$$

$$\therefore \quad |a|^2+|c|^2=|b|^2+|d|^2=1 \qquad (2)$$

$$a^*b+c^*d=0, \quad b^*a+d^*c=0 \qquad (3)$$

因而 $\quad d=-a^*b/c^* \qquad (4)$

再根据条件 $\quad \det U=ad-bc=1 \qquad (5)$

得 $\quad -(aa^*b/c^*+bc)=1$

$$-\frac{b}{c^*}\left(|a|^2+|c|^2\right)=1$$

利用(2),得 $\quad b/c^*=-1$, 或 $b=-c^* \qquad (6)$

代回(4)式,得 $\quad d=a^* \qquad (7)$

因此(1)式可以写成 $\quad U=\begin{pmatrix} a & -c^* \\ c & a^* \end{pmatrix} \qquad (8)$

其中 $\quad |a|^2+|c|^2=1$

所以可以令 $\quad a=\cos\omega e^{i\xi}, \quad -c^*=+\sin\omega e^{+i\eta} \qquad (9)$

把U表成 $\quad U=\begin{pmatrix} \cos\omega e^{i\xi} & \sin\omega e^{i\eta} \\ -\sin\omega e^{-i\eta} & \cos\omega e^{-i\xi} \end{pmatrix} \qquad (10)$

(ω, ξ, η) 是描述 SU_2 的三个参数。

20. 设矩阵A、B、C满足 $A^2=B^2=C^2=1$, $BC-CB=iA$

(1) 求证: $AB+BA=AC+CA=0$,

(2) 在A表象中,求出B与C的矩阵(设无简并)。

〔解〕: (1) 对 $BC-CB=iA$, 分别用B左乘和右乘, 利用 $B^2=1$,

得: $\quad C-BCB=iBA, \quad BCB-C=iAB$

上两式相加得 $\quad AB+BA=0$

类似可证明　　$AC+CA=0$

(2) 在A对角化的表象中，A的矩阵元为

$$A_{ik}=A_i\delta_{ik}$$

而　　$$(A^2)_{ij}=\sum_k A_{ik}A_{kj}=\sum_k A_i\delta_{ik}A_k\delta_{kj}$$

$$=A_iA_j\delta_{ij}=A_i^2\delta_{ij}$$

但按假设　　$A^2=1$，　　$\therefore\ (A^2)_{ij}=\delta_{ij}$

因此　　$A_i^2=1$，　$A_i=\pm1$

由于假设无简并，　$\therefore$ A为2×2矩阵.

因此　　$A=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$。

设B表为　　$B=\begin{pmatrix}\alpha&\beta\\\gamma&\delta\end{pmatrix}$;

代入　　$AB+BA=0$

得　　$$-\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha&\beta\\\gamma&\delta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha&\beta\\\gamma&\delta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

即　　$$\begin{pmatrix}-\alpha&-\beta\\\gamma&\delta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha&-\beta\\\gamma&-\delta\end{pmatrix}$$

$\therefore$　　$\alpha=0$，　$\delta=0$，

因而　　$B=\begin{pmatrix}0&\beta\\\gamma&0\end{pmatrix}$

再利用条件　　$B^2=1$

$$\begin{pmatrix}0&\beta\\\gamma&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&\beta\\\gamma&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\beta\gamma&0\\0&\gamma\beta\end{pmatrix}=1$$

$\therefore$　　$\beta\gamma=1$，　或　$\gamma=1/\beta$

$\therefore$　　$B=\begin{pmatrix}0&\beta\\\beta^{-1}&0\end{pmatrix}$，　($\beta$待定)

类似可求出C的一般形式为

$$C=\begin{pmatrix}0 & \lambda\\ \lambda^{-1} & 0\end{pmatrix},\quad（\lambda待定）$$

再利用 $BC-CB=iA$ 得

$$\begin{pmatrix}0 & \beta\\ \beta^{-1} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \lambda\\ \lambda^{-1} & 0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0 & \lambda\\ \lambda^{-1} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \beta\\ \beta^{-1} & 0\end{pmatrix}=i\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

即 $$\begin{pmatrix}\beta\lambda^{-1}-\lambda\beta^{-1} & 0\\ 0 & \beta^{-1}\lambda-\lambda^{-1}\beta\end{pmatrix}=i\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

$\therefore$ $\beta\lambda^{-1}-\lambda\beta^{-1}=i$，或 $\beta^2-\lambda^2=i\beta\lambda$

这是B与C矩阵中的参数 β 和 λ 需要满足的关系式。

21．矩阵A与B满足 $A^2=0$，$AA^+ +A^+A=1$，$B=A^+A$，

(1) 证明 $B^2=B$，(2) 并在B表象中求出A的矩阵表示。

〔解〕：(1) 因 $B=A^+A$，所以 $B^+=B$（厄密矩阵）

$$B^2=A^+AA^+A=A^+(1-A^+A)A$$
$$=A^+A-A^+A^+AA=A^+A,\quad(\because A^2=0)$$
$$=B$$

(2) 设 $BX=\lambda X$（λ为本征值，必为实数）

$\therefore$ $B^2X=\lambda BX=\lambda^2X$

但 $B^2X=BX=\lambda X$

$\therefore$ $\lambda^2=\lambda$，即 $\lambda=0,1$。

设无简并，则B矩阵表为

$$B=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

令 $$A=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$$

根据 $BA=0$，得 $c=0$，$d=0$

又利用 $A^2=0$，得 $a^2=0$，$ab=0$

这只有 $a=0$ 才行 （否则 $A\equiv 0$）

$$\therefore \quad A=\begin{pmatrix}0&b\\0&0\end{pmatrix}.$$

又 $$A^+A=\begin{pmatrix}0&0\\b^*&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&b\\0&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\0&|b|^2\end{pmatrix}=B=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$\therefore \quad |b|^2=1$$

令 $b=e^{i\alpha}$ （α 为实数）

$$\therefore \quad A=\begin{pmatrix}0&e^{i\alpha}\\0&0\end{pmatrix}$$

22．自旋为 $\hbar/2$，内禀磁矩为 μ_0 的粒子，在空间分布均匀但随时间改变的磁场 $\vec{B}(t)$ 中运动．证明粒子的波函数可以表成空间函数与自旋函数之积，写出它们满足的波动方程。

［解］：设粒子电荷为 q，则其哈密顿量为

$$H=H_0-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}, \qquad (1)$$

$$H_0=\frac{1}{2\mu}(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A})^2+q\phi,$$

$\vec{A}$、ϕ 分别为电磁场的矢势及标势。由于 $\vec{B}$ 与空间坐标无关，粒子的波函数可以表成

$$\psi(x,y,z,S_z,t)=\varphi(x,y,z,t)\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix} \qquad (2)$$

它们分别满足

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x,y,z,t)=H_0\varphi(x,y,z,t), \qquad (3)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix} \qquad (4)$$

23．同上题，设 $\vec{B}$ 沿 z 轴方向，在 $t=0$ 时，自旋波函数为

$$\begin{pmatrix}a(0)\\b(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e^{-i\alpha}\cos\delta\\e^{i\alpha}\sin\delta\end{pmatrix} \qquad (1)$$

求 $\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}$，它是自旋沿什么方向分量的本征态？在此态

下，$\overline{S_x}=?$，$\overline{S_y}=?$，$\overline{S_z}=?$

[解]：按上题结果

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=-\mu_0 B\sigma_z\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=-\mu_0 B\begin{pmatrix}a(t)\\-b(t)\end{pmatrix}$$

$$\therefore\quad i\hbar\frac{d}{dt}a=-\mu_0 Ba,$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}b=\mu_0 Bb$$

积分后，得 $$a(t)=a(0)e^{i\mu_0/\hbar\int_0^t Bdt},$$

$$b(t)=b(0)e^{-i\mu_0/\hbar\int_0^t Bdt};$$

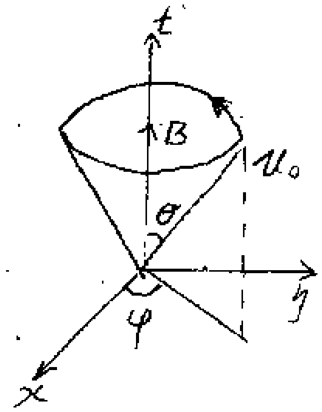
由初条件，$$a(0)=e^{-i\alpha}\cos\delta,\quad b(0)=e^{i\alpha}\sin\delta,$$

所以 $$\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\delta e^{i\mu_0/\hbar\int_0^t Bdt-i\alpha}\\ \sin\delta e^{-i\mu_0/\hbar\int_0^t Bdt+i\alpha}\end{pmatrix}\tag{2}$$

与第2题的结果比较，这个态是自旋沿(θ,φ)方向分量的本征态。而

$$\theta=2\delta,\quad \varphi=2\alpha-\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t Bdt\tag{3}$$

可以看出，这个方向是在改变，即自旋取向在绕z轴进动，如图



角速度为：

$$\omega=\frac{d\varphi}{dt}=-\frac{2\mu_0 B}{\hbar}\tag{4}$$

在自旋态(2)之下，

$$\overline{S_x}=\hbar/2\,(a^*(t),b^*(t))\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar}{2}(a^*b+ab^*)$$

$$=\hbar/2\left(\cos\delta\sin\delta e^{-i2\mu_0/\hbar\int_0^t Bdt-i2\alpha}+c.c\right)$$

$$=\hbar/2\sin2\delta\cdot\cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t Bdt-2\alpha\right]$$

类似可求出

$$\overline{S_y}=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\delta\cdot\sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B\,dt-2\alpha\right]$$

$$\overline{S_z}=\frac{\hbar}{2}\cos 2\delta$$

$\overline{S_z}$不随时间改变。这是由于S_z仍然是守恒量的缘故。

24、与(22)题类似，设磁场大小不变，但在xy平面中以下列规律变化：

$$B_x=B\cos\omega t,\quad B_y=B\sin\omega t,\quad B_z=0 \tag{1}$$

求粒子的自旋波函数。

[解]：利用(22)题(4)式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

$$=-\mu_0\left[\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}B\cos\omega t+\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}B\sin\omega t\right]\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

$$=-\mu_0\begin{pmatrix}0&B_0e^{-i\omega t}\\B_0e^{i\omega t}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} \tag{2}$$

即

$$i\hbar\frac{da}{dt}=-\mu_0Be^{-i\omega t}b,$$

$$i\hbar\frac{db}{dt}=-\mu_0Be^{i\omega t}a, \tag{3}$$

为了方便，令

$$a=ue^{-i\omega t/2},\qquad b=ve^{i\omega t/2} \tag{4}$$

可以把指数因子消去，得

$$i\hbar\frac{du}{dt}+\frac{\hbar\omega}{2}u+\mu_0Bv=0$$

$$i\hbar\frac{dv}{dt}-\frac{\hbar\omega}{2}v+\mu_0Bu=0 \tag{5}$$

第(1)式对t求微商，用第2式代入，得

$$i\hbar\frac{d^2u}{dt^2}+\frac{\hbar\omega}{2}\frac{du}{dt}+\mu_0B\frac{dv}{dt}$$

$$=i\hbar\frac{d^2u}{dt^2}+\frac{\hbar\omega}{2}\frac{du}{dt}+\frac{\mu_0B}{i\hbar}\left(\frac{\hbar\omega}{2}v-\mu_0Bu\right)$$

$$=i\hbar\frac{d^2u}{dt^2}+\frac{\hbar\omega}{2}\frac{du}{dt}+\frac{\hbar\omega}{2i\hbar}\left(-i\hbar\frac{du}{dt}-\frac{\hbar\omega}{2}u\right)-\frac{\mu_0^2B^2}{i\hbar}u=0$$

$$\frac{d^2u}{dt^2}+\left[\frac{\omega^2}{4}+\frac{\mu_0^2B^2}{\hbar^2}\right]u=0 \qquad (6)$$

令 $\Omega=\sqrt{\hbar^2\omega^2+4\mu_0^2B^2}$，或 $\Omega=\sqrt{\omega^2+\frac{4\mu_0^2B^2}{\hbar^2}}$ (7)

则 $$\frac{d^2u}{dt^2}+\frac{\Omega^2}{4}u=0 \qquad (8)$$

解出 $$u=C_1e^{i\Omega t/2}+C_2e^{-i\Omega t/2} \qquad (9)$$

因而 $$a(t)=e^{-i\omega t/2}\left[C_1e^{i\Omega t/2}+C_2e^{-i\Omega t/2}\right] \qquad (10)$$

$$=C_1e^{i(\Omega-\omega)t/2}+C_2e^{-i(\Omega+\omega)t/2}$$

利用(3)式，$$b(t)=-\frac{i\hbar}{\mu_0B}e^{i\omega t}\frac{da}{dt}$$

$$=-\frac{i\hbar}{\mu_0B}\left[i\frac{(\Omega-\omega)}{2}C_1e^{i(\Omega-\omega)t/2}-\frac{i(\Omega+\omega)}{2}\cdot C_2e^{-i(\Omega+\omega)t/2}\right]e^{i\omega t}$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu_0B}e^{i\omega t/2}\left[C_1(\Omega-\omega)e^{i\Omega t/2}-C_2(\Omega+\omega)e^{-i\Omega t/2}\right]$$

C_1与C_2由初条件及归一化条件确定。

25. 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子在磁场 $\vec{B}(t)$ 中运动，在海森伯表象中求自旋随时间变化的方程。设 $\vec{B}=B_0\vec{k}$（沿z轴方向），求 $\vec{S}(t)$。

[解] 在海森伯表象中 $\vec{S}(t)$ 满足的运动方程为

$$\frac{d\vec{S}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\vec{S},H] \qquad (1)$$

$$H=-\vec{\mu}\cdot\vec{B}=-g_s\vec{S}\cdot\vec{B}，\quad (g_s\text{用}\frac{e}{2mc}\text{为单位}) \qquad (2)$$

利用第(5)题结果

$$\frac{d\vec{S}}{dt}=\frac{-g_s}{i\hbar}[\vec{S},\vec{S}\cdot\vec{B}]=g_s\vec{S}\times\vec{B} \qquad (3)$$

如把 $e/2mc$ 单位写进去，则

$$\frac{d\vec{S}}{dt}=\frac{g_s e}{2mc}\vec{S}\times\vec{B}$$

此时，对于电子，$g_s=-2$

设 $\vec{B}=B_0\vec{k}$，则 $\vec{S}\times\vec{B}=-B_0\vec{k}\times(S_x\vec{i}+S_y\vec{j}+S_z\vec{k})$

$$=B_0(S_y\vec{i}-S_x\vec{j})$$

$$\begin{cases}\dfrac{dS_x}{dt}=\dfrac{g_s eB_0}{2mc}S_y=g_s\omega S_y, \quad \omega=eB_0/2mc & \text{(a)} \quad (4)\\ \dfrac{dS_y}{dt}=-\dfrac{g_s eB_0}{2mc}S_x=-g_s\omega S_x & \text{(b)} \quad (5)\\ \dfrac{dS_z}{dt}=0 & \text{(c)}\end{cases}$$

(5a) 式对 t 微商，利用 (5b) 得

$$\frac{d^2S_x}{dt^2}=g_s\omega\frac{dS_y}{dt}=-g_s^2\omega^2S_x \qquad (6)$$

令 $\quad S_x(t)=C_1\cos(g_s\omega t)+C_2\sin(g_s\omega t)$

由初条件 $\Rightarrow \quad S_x(0)=C_1$

由方程 (5a) $\quad \dfrac{dS_x}{dt}=-g_s\omega C_1\sin(g_s\omega t)+g_s\omega C_2\cos(g_s\omega t)$

$$=g_s\omega S_y(t)$$

及初条件 $\quad g_s\omega S_y(0)=g_s\omega C_2\Rightarrow C_2=S_y(0)$

$\therefore \quad S_x(t)=S_x(0)\cos(g_s\omega t)+S_y(0)\sin(g_s\omega t)$

同样 $\quad S_y(t)=-S_x(0)\sin(g_s\omega t)+S_y(0)\cos(g_s\omega t)$

$$S_z(t)=S_z(0)$$

或
$$\begin{pmatrix}S_x(t)\\S_y(t)\\S_z(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos(g_s\omega t) & \sin(g_s\omega t) & 0\\ -\sin(g_s\omega t) & \cos(g_s\omega t) & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}S_x(0)\\S_y(0)\\S_z(0)\end{pmatrix}$$

第九章 8. 定态微扰论

1、设非简谐振子的哈密顿量为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2+\beta x^2 \qquad (\beta—常数)$$

取 $\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$

$\hat{H}'=\beta x^3$，

试用微扰论计算其能量及能量本征函数。

〔解〕：已知 $\hat{H}_0\psi_n^{(0)}=E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$

$$\psi_n^{(0)}=N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}H_n(\alpha x) \qquad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$$

$$E_n^{(0)}=(n+1/2)\hbar\omega_0$$

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

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

所以；$x^3\psi_n(x)=\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}\left[\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3}+3n\sqrt{n}\psi_{n-1}+\right.$

$$\left.3(n+1)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}\cdot\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}\right]$$

一级微扰：

$$\langle\psi_n|x^3|\psi_n\rangle=0$$

$\therefore\quad E_n^{(1)}=0,\qquad (n=0,1,2\cdots)$

二级微扰：

$$\langle\psi_{n-3}|\beta x^3|\psi_n\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}\sqrt{n(n-1)(n-1)}\,\beta$$

$$\langle\psi_{n-1}|\beta x^3|\psi_n\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}3n\sqrt{n}\,\beta$$

$$\langle\psi_{n+1}|\beta x^3|\psi_n\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}3(n+1)\sqrt{n+1}\,\beta$$

$$\langle\psi_{n+3}|\beta x^3|\psi_n\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\,\beta$$

$$|H'_{n-3,n}|^2=\frac{1}{8\alpha^6}n(n-1)(n-2)\beta^2$$

$$|H'_{n-1,n}|^2=\frac{1}{8\alpha^6}9n^3\beta^2$$

$$|H'_{n+1,n}|^2=\frac{1}{8\alpha^6}9(n+1)^3\beta^2$$

$$|H'_{n+3,n}|^2=\frac{1}{8\alpha^6}(n+1)(n+2)(n+3)\beta^2$$

$$E_n^{(0)}-E_{n-3}^{(0)}=8\hbar\omega_0$$

$$E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}=\hbar\omega_0$$

$$E^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}=-\hbar\omega_0$$

$$E_n^{(0)}-E_{n+3}^{(0)}=-3\hbar\omega_0$$

∴ 二级微扰能量：

$$E_n^{(2)}=\sum_{n'}\frac{|\langle\psi_n'|\beta x^3|\psi_n\rangle|^2}{E_n-E_n'}$$

$$=-\frac{30n^2+30n+11}{8}\frac{\hbar^2\beta^2}{m^3\omega_0^4}$$

波函数的一级修正为：

$$\psi_n^{(1)}=\sum_k\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}$$

$$=\frac{1}{3K\omega_0}\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}\sqrt{n(n-1)(n-2)}\beta\psi_{n-3}^{(0)}+\frac{1}{\hbar\omega_0}\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^2}3n\sqrt{n}\beta\psi_{n-1}^{(0)}$$

$$-\frac{1}{\hbar\omega_0}\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}3(n+1)\sqrt{n+1}\beta\psi_{n+1}^{(0)}-\frac{1}{3K\omega_0}\frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}\cdot$$

$$\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}^{(0)}$$

非简谐振子的能量本征值和本征函数为

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega_0-\frac{30n^2+30n+1}{8}\frac{\hbar^2\beta^2}{m^3\omega_0^4}$$

$$\psi_n=\psi_n^{(0)}+\frac{\beta}{\hbar\omega_0 2\sqrt{2}\alpha^3}\left\{\frac{\sqrt{n(n-1)(n-2)}}{3}\psi_{n-3}^{(0)}+3n\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}-3(n+1)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}\right.$$

$$-\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{3}}\psi_{n+3}^{(0)}\Big]$$

2、一维无限深势井（$0<x<a$）中的粒子，受到微扰

$$H'(x)=\begin{cases}2\lambda\frac{x}{a} & 0<x<a/2\\ 2\lambda(1-\frac{x}{a}) & a/2<x<a\end{cases}$$

作用。求基态能量的一级修正。

［解］：一维无限深势井的能量本征值及本征函数为：

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

$$\psi_n^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

基态为 $E_1^{(0)}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}$，$\psi_1^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}$

基态能量的一级修正为：

$$E_1^{(1)}=\int_0^a[\psi_1^{(0)}(x)]^2H'(x)dx$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^{a/2}\sin^2\frac{\pi x}{a}(2\lambda\frac{x}{a})dx+$$

$$\frac{2}{a}\int_{a/2}^{a}\sin^2\frac{\pi x}{a}2\lambda(1-\frac{x}{a})dx$$

作变换：$u=\frac{\pi x}{a}$ $\quad x=\frac{a}{\pi}u$ $\quad dx=\frac{a}{\pi}du$

$v=\pi-\frac{\pi x}{a}$ $\quad x=-\frac{a}{\pi}v+a$ $\quad dx=-\frac{a}{\pi}dv$

代入 $E_1^{(1)}$：$E_1^{(1)}=\frac{4\lambda}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}\sin^2u\cdot u\,du-\frac{4\lambda}{\pi^2}\int_{\pi/2}^{0}\sin^2(\pi-v)v\,dv$

$$=\frac{8\lambda}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}u\sin^2u\,du$$

$$=(\frac{1}{2}+\frac{2}{\pi^2})\lambda$$

3. 设有一个三维转子，处于基态。转动惯量为 I，它沿（转子）轴方向有一个电偶极矩 D。现在加上一个外电场 E，

能级是二重简併的。

$$\hat{H}' = -\vec{p}\cdot\vec{\varepsilon} - \vec{\mu}\vec{B}$$
$$= -\vec{p}\cdot\vec{\varepsilon} - \mu_z B$$
$$= -(p\varepsilon\cos\varphi - i\hbar\frac{eB}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi})$$
$$\because \mu_z = -i\hbar\frac{e}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

可以证明：$\langle -m|H'|m\rangle = 0$

所以，仍可以用非简併微扰论来处理。

$$\langle m'|H'|m\rangle = \begin{cases} -\frac{1}{2}p\varepsilon\delta_{m'm+1} \\ -\frac{\hbar eB}{2\mu c}m\delta_{m'm} \\ -\frac{1}{2}p\varepsilon\delta_{m'm-1} \end{cases}$$

一级微扰能量

$$E_m^{(1)} = H_{mm} = -\frac{\hbar eB}{2\mu c}m$$

二级微扰能量

$$E_m^{(2)} = \sum_{m'\neq m}\frac{|\langle m'|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_{m'}^{(0)}}$$
$$= \frac{|\langle m+1|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_{m+1}^{(0)}} + \frac{|\langle m-1|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_{m-1}^{(0)}}$$
$$= \frac{p^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2}\frac{1}{4m^2-1}$$

所以平面转子的能量为

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I}m^2 - \frac{\hbar eB}{2\mu c}m + \frac{p^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2}\frac{1}{4m^2-1}$$

$$m = 0, \pm1, \pm2 \cdots$$

5. 一维谐振子，$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$ 处于基态。设再加上一个弹性力作用，$H' = \frac{1}{2}bx^2$，试用微扰论计算 H' 对能量的一维修正，並与严格解比较。

能级是二重简併的。

$$\hat{H}' = -\vec{p}\cdot\vec{\varepsilon} - \vec{\mu}\vec{B}$$
$$= -\vec{p}\cdot\vec{\varepsilon} - \mu_z B$$
$$= -\left(p\varepsilon\cos\varphi - i\hbar\frac{eB}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\because \mu_z = -i\hbar\frac{e}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

可以证明： $\langle -m|H'|m\rangle = 0$

所以，仍可以用非简併微扰论来处理。

$$\langle m'|H'|m\rangle = \begin{cases} -\frac{1}{2}p\varepsilon\delta_{m'm+1} \\ -\frac{\hbar eB}{2\mu c}m\delta_{m'm} \\ -\frac{1}{2}p\varepsilon\delta_{m'm-1} \end{cases}$$

一级微扰能易

$$E_m^{(1)} = H_{m'm} = -\frac{\hbar eB}{2\mu c}m$$

二级微扰能易

$$E_m^{(2)} = \sum_{m'\neq m}\frac{|\langle m'|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_{m'}^{(0)}}$$
$$= \frac{|\langle m+1|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_{m+1}^{(0)}} + \frac{|\langle m-1|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_{m-1}^{(0)}}$$
$$= \frac{\hbar^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2}\frac{1}{4m^2-1}$$

所以平面转子的能易为

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I}m^2 - \frac{\hbar eB}{2\mu c}m + \frac{p^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2}\frac{1}{4m^2-1}$$
$$m = 0, \pm1, \pm2 \cdots$$

5. 一维谐振子，$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$ 处于基态。设再加上一个弹性力作用，$H' = \frac{1}{2}bx^2$，试用微扰论计算 H' 对能易的一级修正，并与严格解比较。

〔解〕：$\hat{H}_0$的本征值和本征函数为：

$$\psi_n^{(0)}=N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2} \qquad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}=\left(\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/4} \qquad \omega_0=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$E_n^{(0)}=(n+1/2)\hbar\omega_0$$

从 $x\psi_n^{(0)}$ 的递推关系可得

$$x^2\psi_n^{(0)}=\frac{1}{2\alpha^2}\left[\sqrt{n(n-1)}\,\psi_{n-2}^{(0)}+(2n+1)\psi_n^{(0)}+\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\psi_{n+2}^{(0)}\right]$$

∴ H'对能量的一级修正项是：

$$E_n^{(1)}=\frac{1}{2}b\langle\psi_n|x^2|n\rangle$$
$$=\frac{\hbar b}{4m\omega_0}(2n+1)$$
$$E_0^{(1)}=\frac{\hbar b}{4m\omega_0}$$

严格解为：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}(k+b)x^2$$

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega$$

$$\omega=\sqrt{\frac{k+b}{m}}=\sqrt{\frac{k}{m}\left(1+\frac{b}{k}\right)}=\omega_0\left(1+\frac{b}{k}\right)^{1/2}$$

$$\omega=\omega_0\left(1+\frac{1}{2}\frac{b}{k}-\frac{1}{8}\cdot\frac{b^2}{k^2}+\cdots\right)$$

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0\left(1+\frac{1}{2}\frac{b}{m\omega_0^2}-\frac{b^2}{8m^2\omega_0^4}+\cdots\right)$$

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\frac{1}{4}\frac{\hbar b}{m\omega_0}-\frac{1}{16}\frac{\hbar b^2}{m^2\omega_0^3}+\cdots$$

∴微扰论的一级修正项正好是严格解的一级项。

6、设有自由粒子，在长度为L的一维区域中运动，波函数满足周期性边条件。

$$\psi(-L/2)=\psi(L/2)$$

波函数形式可取为

$$\psi_+^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos kx \qquad \psi_-^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin kx$$

$$k=\frac{2\pi n}{L} \qquad n=0,1,\cdots$$

设粒子还受到一个"陷阱"的作用，

$$H'(x)=-V_0 e^{-x^2/a^2} \qquad a\ll L$$

试用简併微扰论计算能量一级修正。

〔解〕:
$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

它的能量本征值是

$$E_n^{(0)}=\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}n^2$$

是二重简併的，令 $\psi_1=\psi_+^{(0)}$，$\psi_2=\psi_-^{(0)}$。先计算矩阵元：

$$H'_{11}=\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2}\cos^2kx\,(-V_0e^{-x^2/a^2})\,dx$$

$$H'_{22}=-V_0\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2}\sin^2kx\cdot e^{-x^2/a^2}\,dx$$

$$H'_{12}=-V_0\frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2}\sin kx\cos kx\,e^{-x^2/a^2}\,dx=0$$

其中的积分为

$$I_1(k,a,L)=\int_{-L/2}^{L/2}\cos^2kx\,e^{-x^2/a^2}\,dx$$

$$=2\int_0^{L/2}\cos^2kx\,e^{-x^2/a^2}\,dx$$

$$=2\int_0^{L/2a}\cos^2ka\xi\,e^{-\xi^2}\,d\xi$$

同样
$$I_2(k,a,L)=\int_{-L/2}^{L/2}\sin^2kx\,e^{-x^2/a^2}\,dx$$

$$=2a\int_0^{L/2a}\sin^2ka\xi\,e^{-\xi^2}\,d\xi$$

$$\lim_{\frac{a}{L}\to 0}I_2(k,a,L)=\frac{\sqrt{\pi}\,a}{2}(1-e^{-k^2a^2})$$

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{21}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

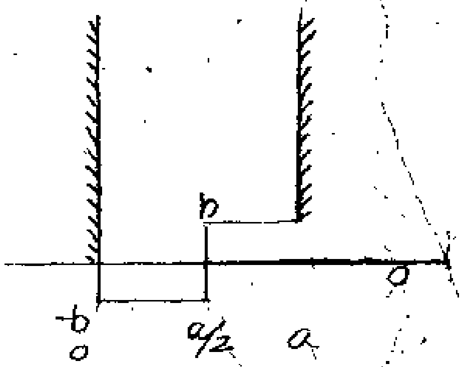
$$H'_{12} = H'_{21} = 0$$

$$\therefore \quad E^{(1)} = H'_{11} \text{ 或 } H'_{22}$$

$$E^{(1)} = -V_0\frac{\sqrt{\pi}a}{L}(1-e^{-k^2a^2})$$

7、在一维无限深势井

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



中流动的粒子，受到微扰 H' 作用

$$H'(x)=\begin{cases} -b & 0<x<a/2 \\ +b & a/2 \quad x<a \end{cases}$$

讨论粒子在空间位置几率分布的改变

〔解〕：一维无限深势井的能量本征值和本征函数是

$$\psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}n^2 \qquad n=1,2,3\cdots \mu \text{为粒子质}$$

量。微扰论的波函数一级修正公式为：

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n}\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}$$

先计算矩阵元 H'_{kn}，而 $k\neq n$ 时，下面的积分为：

$$\int_{S_1}^{S_2} 2\sin\frac{k\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{a}x\,dx$$

$$= \frac{a}{(k-n)\pi}\left[\sin\frac{k-n}{a}\pi S_2 - \sin\frac{k-n}{a}\pi S_1\right] - \frac{a}{(k+n)\pi}\cdot$$

$$\left[\sin\frac{k+n}{a}\pi S_2 - \sin\frac{a+n}{a}\pi S_1\right]$$

$$\therefore \quad H'_{kn}=\frac{b}{a}\left[\int_0^{a/2} 2\sin\frac{k\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{a}x\,dx+\int_{a/2}^{a} 2\sin\frac{k\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{a}x\,dx\right]$$

$$=\frac{2b}{a}\left[\frac{a}{(k+n)\pi}\sin\frac{k+n}{2}\pi-\frac{a}{(k-n)\pi}\sin\frac{k-n}{2}\pi\right]$$

$$=\frac{2b}{\pi}(-1)^{(k-n+1)/2}\left\{\frac{(-1)^{n}}{k+n}-\frac{1}{(k-n)}\right\}$$ 此式 $k-n=$奇

成立。

$$H'_{kn}=0 \qquad k-n=\text{偶时}$$

波函数的改变为:

$n=$偶

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x+\sum_{k=\text{奇}}\frac{8bn\mu(-1)^{\frac{k-n+1}{2}}}{\hbar^2\pi^3(n^2-k^2)^2}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi}{a}x\right)$$

$n=$奇

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x+\sum_{k=\text{偶}}\frac{8bk\mu}{\hbar^2\pi^3(n^2-k^2)^2}(-1)^{\frac{k-n-1}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi}{a}x$$

8. 在类氢离子中，电子与原子核的库仑作用能为

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}$$

当原子核的电荷增加 e ($Z\to Z+1$)时，库仑能增加

$$H'=-\frac{e^2}{r}$$

试用微扰论计算它引起的能量一级修正，并与严格解比较。

(解): 设电子处于 E_n 能级，径向波函数 R_{nl}。微扰对能量的一级修正为

$$\Delta E=\langle nl|-\frac{e^2}{r}|nl\rangle=-e^2\langle nl|\frac{1}{r}|nl\rangle$$

利用第六章习题 $=-e^2\dfrac{1}{n^2a}$，其中 $a=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2 Z}$

$$=-\frac{e^2}{n^2}\frac{\mu e^2 Z}{\hbar^2}$$

$$=-\frac{\mu e^4 Z}{n^2\hbar^2}$$

按严格解，类氢原子能量为 $E_n=-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{Z^2}{n^2}$

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$$\therefore \quad \Delta E_{exact}=-\frac{e^2}{2a_0}\left\{\frac{(Z+1)^2-Z^2}{n^2}\right\}$$

$$= -\frac{e^2}{a_0}\cdot\frac{(Z+1/2)}{n^2}$$

$$= -\frac{e^2}{n^2\hbar^2}\mu e^2\left(Z+\frac{1}{2}\right)$$

$$= -\frac{\mu e^4}{n^2\hbar^2}(Z+1/2)$$

9. 一个粒子在二维无限深势井中运动

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & 0<x,\ y<a\\ \infty & 其它地方\end{cases}$$

设加上微扰

$$H'=\lambda xy \qquad (0\leq x,\ y\leq a)$$

求基态及第一激发态的能量修正。

〔解〕：二维无限深方位阱的能量本征值及本征函数为：

$$E^{(0)}_{n_xn_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}(n_x^2+n_y^2)$$

$$\psi^{(0)}_{n_xn_y}=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi n_x}{a}x\sin\frac{\pi n_y}{a}y$$

$$n_x,n_y=1,2,\cdots$$

基态：
$$E^{(0)}_{11}=\frac{\hbar^2\pi^2}{\mu a^2}$$

$$\psi^{(0)}_{121}(x,y)=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}$$

第一激发态：$E^{(0)}_{12}=E^{(0)}_{2,1}=\frac{5}{2}\cdot\frac{\hbar^2\pi^2}{\mu a^2}$

$$\psi^{(0)}_{1,2}=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\ \overset{令}{=}\ \psi_1^{(0)}$$

$$\psi^{(0)}_{2,1}=\frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}=\psi_2^{(0)}$$

是二重简併的态。

基态能量修正：

$$E^{(1)}_{1,1}=\int_0^a dx\int_0^a dy\,\frac{4}{a^2}\sin^2\frac{\pi x}{a}\sin^2\frac{\pi y}{a}\lambda x\,y$$

$$=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx\cdot\int_0^a y\sin^2\frac{\pi y}{a}dy$$

$$= \frac{4\lambda}{a^2} \cdot \frac{a^2}{4} \cdot \frac{a^2}{4}$$

$$= \frac{\lambda a^2}{4}$$

第一激发态的能量修正

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$H'_{11} = \frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x \sin^2\frac{\pi x}{a}\,dx \int_0^a y \sin^2\frac{2\pi y}{a}\,dy$$

$$= \frac{\lambda a^2}{4}$$

$$H'_{22} = \frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x \sin^2\frac{2\pi x}{a}\,dx \int_0^a y \sin^2\frac{\pi y}{a}\,dy$$

$$= \frac{\lambda a^2}{4} = H'_{11}$$

$$H'_{12} = \frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a dx\, x \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{2\pi x}{a}\int_0^a y \sin\frac{\pi y}{a} \sin\frac{2\pi y}{a}\,dy$$

$$= \frac{256}{81\pi^4}\lambda a^2$$

$\because$ $H'_{11} = H'_{22}$，利用例2结果

$$\therefore \quad E^{(1)} = \frac{\lambda a^2}{4} \pm \frac{256}{81\pi^4}\lambda a^2$$

$$= \frac{\lambda a^2}{4}\left(1 \pm \frac{1024}{81\pi^4}\right)$$

$$= \frac{\lambda a^2}{4}(1 \pm 0.13)$$

10、处于基态的氢原子，受到沿Z轴方向的均匀电场$\mathcal{E}$的作用，不计及电子自旋

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}z$$

$H' = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E}r\cos\theta$ 是微扰。验证基态的一级近似波函数为

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}\left[1 - \frac{\lambda\cos\theta}{e^2}\left(ar + \frac{r^2}{2}\right)\right]$$

($\lambda = e\mathcal{E}$； $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ 是玻尔半径)。求能量的二级修正为

$-9/4a^3\varepsilon^2$。从而可求出极化率为 $9/2\, a^3$

[证]： 令 $\lambda=e\varepsilon$，在球极坐标中氢原子的哈密顿量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}\right)-\frac{e^2}{r}+\lambda r\cos\theta$$

$$=-\frac{ae^2}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}\right)-\frac{e^2}{r}+\lambda r\cos\theta$$

$$=H_0+H'$$

$$H_0=-\frac{ae^2}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}\right)-\frac{e^2}{r}$$

$$H'=\lambda r\cos\theta$$

题中所给的 ψ 可表为：$\psi=\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}-\frac{\lambda}{e^2}\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}\left(ar+\frac{r^2}{2}\right)\cos\theta$

$$\psi=\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}-\frac{\lambda}{e^2}\sqrt{\frac{4}{3a^3}}e^{-r/a}\left(ar+\frac{r^2}{2}\right)Y_{10}$$

$$=\psi^{(0)}+\psi^{(1)}$$

其中 $\psi^{(0)}=\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}$，正好是没有微扰时的氢原子的基态波函数。

$\psi^{(1)}=-\frac{\lambda}{e^2}\sqrt{\frac{4}{3a^3}}e^{-r/a}\left(ar+\frac{r^2}{2}\right)Y_{10}$：是一级修正波函数

将 H, ψ 代入薛定谔方程：

$$H\psi=E\psi$$

保留 λ 的一次方项

$$(H_0+H')(\psi^{(0)}+\psi^{(1)})=H_0\psi^{(0)}+H_0\psi^{(1)}+H'\psi^{(0)}$$

$$=E(\psi^{(0)}+\psi^{(1)})$$

利用 $\quad H_0\psi^{(0)}=-\frac{e^2}{2a}\psi^{(0)}$

$$H'\psi^{(0)}=\lambda\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}r\cos\theta=\lambda\sqrt{\frac{4}{3a^3}}re^{-r/a}Y_{10}$$

$$H_0\psi^{(1)}=\lambda\sqrt{\frac{4}{3a^3}}\left[\frac{a}{2}\left(\frac{\partial}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{2}{2r}-\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}\right)+\frac{1}{r}\right]e^{-r/a}\left(ar+\frac{r^2}{2}\right)Y_{10}$$

$$=\lambda\sqrt{\frac{4}{3a^3}}\left[-\frac{1}{4a}r^2e^{-r/a}-\frac{r}{2}e^{-r/a}\right]Y_{10}$$

$$H_0\psi^{(1)}+H'\psi^{(0)}=\lambda\sqrt{\frac{4}{3a^3}}\frac{1}{2a}\left(ar+\frac{r^2}{2}\right)e^{-r/a}Y_{10}$$

$$= -\frac{e^2}{2a}\psi^{(1)}$$

$$\therefore \quad H\psi = -\frac{e^2}{2a}\psi$$

而 $E = -\frac{e^2}{2a}$，正好是氢原子基态能量。ψ 是一级近似波函数能量的一级修正 $E^{(1)} = 0$。

能量的二级修正为：

$$E^{(2)} = \langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(1)}\rangle$$

$$= \iint \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}\lambda r\cos\theta\left(-\frac{\lambda}{e^2}\sqrt{\frac{4}{3a^3}}e^{-r/a}\cdot\right.$$

$$\left.(ar + r^2/2)\right)Y_{10}r^2 dr\, d\Omega$$

$$= -\frac{\lambda^2}{e^2}\frac{4}{3a^3}\int|Y_{10}|^2 d\Omega\int_0^\infty e^{-2r/a}r(ar + \frac{r^2}{2})r^3 dr$$

$$\int|Y_{10}|^2 d\Omega = 1$$

$$\int_0^\infty e^{-2r/a}ar^4 dr = \frac{3}{4}a^6$$

$$\int_0^\infty e^{-2r/a}\frac{1}{2}r^5 dr = \frac{15}{16}a^6$$

$$\therefore \quad E^{(2)} = -\frac{\lambda^2}{e^2}\frac{4}{3a^3}\left(\frac{3}{4} + \frac{15}{16}\right)a^6$$

$$= -\frac{9}{4}a^3\varepsilon^2$$

氢原子电偶极矩的定义为

$$D_z = \langle\psi|-ez|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi^{(0)} + \psi^{(1)}|-er\cos\theta|\psi^{(0)} + \psi^{(1)}\rangle$$

$$= 2\langle\psi^{(0)}|-er\cos\theta|\psi^{(1)}\rangle$$

利用上面计算 $E^{(2)}$ 时的结果可得

$$D_z = \frac{9}{2}a^3\varepsilon$$

$$= \alpha\varepsilon$$

$$\alpha = \frac{9}{2}a^3$$

11. 设氢原子处于 $n=3$ 态，求它的 Stark 分裂。

〔解〕： 氢原子处于 $n=3$ 态时，能量为

$$E_3^{(0)}=-\frac{e^2}{2a}\cdot\frac{1}{9}$$

它是九重简併的状态，相应波函数是：

$n=3$

l	2	1	0	2	1	2	1	2	2
m	0	0	0	1	1	-1	-1	2	-2
No	1	2	3	4	5	6	7	8	9

$\psi_1=\psi_{320}=R_{32}Y_{20}$　　　　$\psi_2=\psi_{310}=R_{31}Y_{10}$

$\psi_3=\psi_{300}=R_{30}Y_{00}$　　　　$\psi_4=\psi_{321}=R_{32}Y_{21}$

$\psi_5=\psi_{311}=R_{31}Y_{11}$　　　　$\psi_6=\psi_{32-1}=R_{32}Y_{2-1}$

$\psi_7=\psi_{31-1}=R_{31}Y_{1-1}$　　　　$\psi_8=\psi_{322}=R_{32}Y_{22}$

$\psi_9=\psi_{32-2}=R_{32}Y_{2-2}$

而

$$R_{32}=\frac{4}{81\sqrt{30}\,a^{3/2}}\left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a}$$

$$R_{31}=\frac{8}{27\sqrt{6}\,a^{3/2}}\,\frac{r}{a}\left(1-\frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)e^{-r/3a}$$

$$R_{30}=\frac{2}{3\sqrt{3}\,a^{3/2}}\left[1-\frac{2}{3}\frac{r}{a}+\frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right]\cdot e^{-r/3a}$$

外场为：

$$H'=e\varepsilon r\cos\theta=e\varepsilon a\frac{r}{a}\cos\theta=\lambda W$$

$$W=\frac{r}{a}\cos\theta$$

已知：

$$\cos\theta\, Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}\,Y_{l+1,m}+\sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l-1)(2l+1)}}\,Y_{l-1,m}$$

可得

$$\cos\theta\, Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{3}}\,Y_{10}$$

$$\cos\theta\, Y_{11}=\sqrt{\frac{1}{5}}\,Y_{21}$$

$$\cos\theta\, Y_{10} = \sqrt{\frac{4}{3\cdot5}}\, Y_{20} + \sqrt{\frac{1}{3}}\, Y_{00}$$

$$\cos\theta\, Y_{1-1} = \sqrt{\frac{1}{5}}\, Y_{2-1}$$

$$\cos\theta\, Y_{22} = \sqrt{\frac{1}{7}}\, Y_{32}$$

$$\cos\theta\, Y_{21} = \sqrt{\frac{8}{5\cdot7}}\, Y_{31} + \sqrt{\frac{1}{5}}\, Y_{11}$$

$$\cos\theta\, Y_{20} = \sqrt{\frac{9}{5\cdot7}}\, Y_{30} + \sqrt{\frac{4}{3\cdot5}}\, Y_{10}$$

$$\cos\theta\, Y_{2-1} = \sqrt{\frac{8}{5\cdot7}}\, Y_{3-1} + \sqrt{\frac{1}{5}}\, Y_{1-1}$$

$$\cos\theta\, Y_{2-2} = \sqrt{\frac{1}{7}}\, Y_{3-2}$$

所以在 $W_{\mu\nu}$ 中只有 $W_{12}=W_{21}$，$W_{23}=W_{32}$，$W_{45}=W_{54}$，$W_{67}=W_{76}$，不为0。

先标径向积分：

$$\int_0^\infty R_{32}\frac{r}{a}R_{31}\, r^2 dr = -\frac{9}{2}\sqrt{5}$$

$$\int_0^\infty R_{31}\frac{r}{a}R_{30}\, r^2 dr = -9\sqrt{2}$$

计算矩阵元 $W_{\mu\nu}$

$$W_{12} = -3\sqrt{3} \qquad W_{23} = -3\sqrt{6}$$

$$W_{45} = -\frac{9}{2} \qquad W_{67} = -\frac{9}{2}$$

所以久期方程分成五块：

$$\begin{vmatrix}
-E^{(1)} & -3\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-3\sqrt{3} & -E^{(1)} & -3\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -3\sqrt{6} & -E^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & -9/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -9/2 & -E^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & -9/2 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -9/2 & -E^{(1)} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)}
\end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & -3\sqrt{3} & 0 \\ -\sqrt{3} & -E^{(1)} & -3\sqrt{6} \\ 0 & -3\sqrt{6} & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$E^{(1)3} - 27E^{(1)} - 54E^{(1)} = 0$$

$$E^{(1)}(E^{(1)2} - 81) = 0$$

$$E^{(1)} = 0,\ 9,\ -9。$$

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & -9/2 \\ -9/2 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$E^{(1)} = -9/2,\ 9/2$$

结果$n=3$的能级分裂成五条

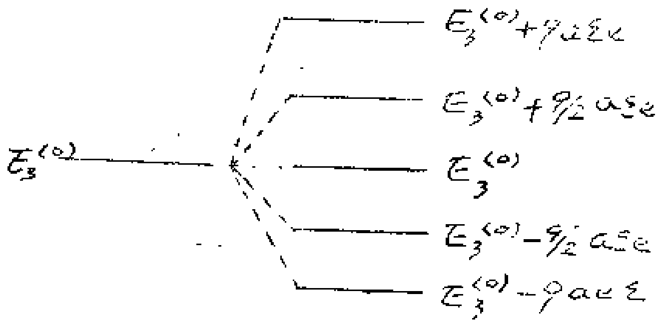
$$E_{31} = E_3^{(0)} - 9ae\varepsilon$$

$$E_{32} = E_3^{(0)} - \frac{9}{2}ae\varepsilon$$

$$E_{33} = E_3^{(0)}$$

$$E_{34} = E_3^{(0)} + \frac{9}{2}ae\varepsilon$$

$$E_{35} = E_3^{(0)} + 9ae\varepsilon$$



12、实际原子核虽然比原子小得多，但並非点电荷，它有一定的大小，假设可视为一个均匀分布的球，半径R，试用微扰论估算这种（非点电荷）效应对原子1S能级的修正。

〔解〕：半径为R的均匀分布电荷Ze的电势可表为：

$$V(r) = \begin{cases} \frac{Ze}{R}\left(3/2 - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) & r < R \\ Ze/r, & r > R \end{cases}$$

$R \ll a_0 = 0.53 \times 10^{-8}\ cm$（玻尔半径），把非点电荷效应看成微扰$H'$，

$$H' = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R}\left(3/2 - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) + \frac{Ze^2}{r}, & r < R \\ 0, & r > R \end{cases}$$

假设1S电子的零级近似波函数可以看成类氢离子的波函数（即略去外层电子的屏蔽效应）

$$\psi_{100}=\frac{z^{3/2}}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-zr/a_0}\text{，相应能量 }E_{1S}^{(0)}=-\frac{ze^2}{2a_0}$$

按微扰论一级修正公式

$$E_{1S}^{(1)}=\frac{z^3}{\pi a_0^3}\int_0^\infty e^{-2zr/a_0}H'r^2dr\int d\Omega$$

$$=-\frac{z^4e^2}{\pi a_0^3}\cdot 4\pi\int_0^R e^{-2zr/a_0}\left[\left(\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right)\frac{1}{R}-\frac{1}{r}\right]\cdot r^2dr$$

因为 $\quad e^{-2zR/a_0}\simeq 1\quad (2R\ll a_0)$

所以 $$E_{1S}^{(1)}=-\frac{4z^4e^2}{a_0^3}\int_0^R\left[\left(\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right)\frac{1}{R}-\frac{1}{r}\right]r^2dr$$

$$=\frac{2}{5}\frac{z^4e^2R^2}{a_0^3}$$

13、设在 $\hat{H}_0$ 表象中，$\hat{H}$ 的矩阵表为

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & a \\ 0 & E_2^{(0)} & b \\ a^* & b^* & E_3^{(0)} \end{pmatrix},\quad E_1^{(0)}<E_2^{(0)}<E_3^{(0)}$$

试用微扰论求能量的二级修正

解：能量二级修正的公式是

$$E_k^{(2)}=\sum_n{}'\frac{|W_{kn}|^2}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}$$

$\therefore$ $$E_1^{(2)}=\frac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}$$

$$E_2^{(2)}=\frac{|b|^2}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}$$

$$E_3^{(2)}=\frac{|a|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|b|^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

14、设在H_0表象中

$$H=\begin{pmatrix} E_1^{(0)}+a & b \\ b & E_2^{(0)}+a \end{pmatrix},\ (a,b\text{为实数})$$

用微扰论求能级修正（到二级近似），严格求解，与微扰论计算值比较。

〔解〕：微扰论计算的结果是：

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

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

严格求解的结果是：

$$[(E_1^{(0)}+a)-E][(E_2^{(0)}+a)-E]-b^2=0$$

$$E^2-(E_1^{(0)}+E_2^{(0)}+2a)E+(E_1^{(0)}+a)(E_2^{(0)}+a)-b^2=0$$

$$E=\frac{E_1^{(0)}+E_2^{(0)}}{2}+a\pm\frac{1}{2}(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})\left(1+\frac{4b^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}\right)^{1/2}$$

若$|b|\ll|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|$则可展开，取一次项

$$E=\frac{E_1^{(0)}+E_2^{(0)}}{2}+a\pm\frac{1}{2}(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})\left(1+\frac{1}{2}\cdot\frac{4b^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}+\cdots\right)$$

$$=\frac{E_1^{(0)}+E_2^{(0)}}{2}+a\pm\frac{1}{2}(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})\pm\frac{b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\cdots$$

这正好是到二级修正的结果。

15、一体系在无微扰时有三条能级，即在H_0表象中。

$$H_0=\begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix},\ E_2>E_1$$

在计及微扰后，哈密顿量表为

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

分别(1) 用二级非简併微扰论求 H 本征值，

(2) 把 H 严格对角化，求 H 的精确的本征值，然后进行比较。

[解]：　二级非简併微扰论求得的 H 本征值为：

$$W_1 = E_1 + \frac{|a|^2}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}$$

$$W_2 = E_1 + \frac{|b|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

$$W_3 = E_2 + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

严格对角化求 H 的本征值

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

$$(E_1^{(0)} - \lambda)\left[(E_1^{(0)} - \lambda)(E_2^{(0)} - \lambda) - |a|^2 - |b|^2\right] = 0$$

$$\lambda_1 = E_1^{(0)}$$

$$\lambda_{2\,3} = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \frac{1}{2}\left\{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2 + 4(|a|^2 + |b|^2)\right\}^{1/2}$$

$$= \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \frac{1}{2}(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})\left\{1 + \frac{4(|a|^2 + |b|^2)}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}\right\}^{1/2}$$

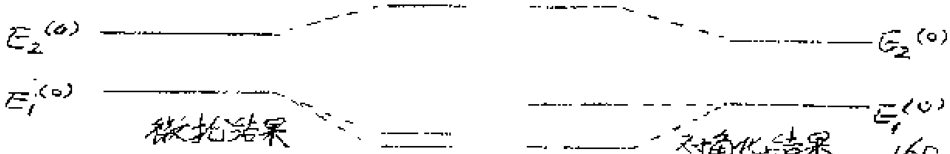
$$= \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \frac{1}{2}(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})\left\{1 + \frac{2(|a|^2 + |b|^2)}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2} + \cdots\right\}$$

$$= \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \frac{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}{2} \pm \frac{|a|^2 + |b|^2}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})} \pm \cdots$$

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

$$\lambda_3 = E_2^{(0)} + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \cdots$$

图：



16. 设在H_0表象中，H_0的矩阵表示为

$$H_0=\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 2\varepsilon_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2\varepsilon_3 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix},$$

是$n\times n$矩阵，$\varepsilon_i\neq\varepsilon_j$，又设微扰$H'$表成

$$H'=\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & \cdots \\ -1 & -1 & -1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix},$$

即所有矩阵元均匀为-1，求$H=H_0-H'$的本征值与本征函数。

[解]：

$$H=\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & \cdots \\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & \cdots \\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

久期方程

$$\det(E-H_{ij})\equiv\begin{vmatrix} E-2\varepsilon_1+1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & E-2\varepsilon_2+1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & E-2\varepsilon_3+1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}=0$$

即

$$\begin{vmatrix} \lambda+1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}=0$$

其中 $\lambda_i=E-2\varepsilon_i$，$(i=1,2,\cdots n)$

化解此方程，令$\Delta(n)$表示n阶行列式

$$\Delta(n)\equiv\begin{vmatrix} \lambda_1+1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}$$

$$=\lambda_1\Delta(n-1)+\lambda_2\begin{vmatrix}1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & \lambda_3+1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & \lambda_4+1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{vmatrix}$$

$$=\lambda_1\Delta(n-1)+\lambda_2\begin{vmatrix}0 & -\lambda_3 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & \lambda_3+1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & \lambda_4+1 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{vmatrix}$$

$$=\lambda_1\Delta(n-1)+\lambda_2\lambda_3\begin{vmatrix}1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & \lambda_4+1 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{vmatrix}$$

$$=\cdots\cdots$$

$$=\lambda_1\Delta(n-1)+\lambda_2\lambda_3\cdots\lambda_n$$

$$\therefore\quad \frac{\Delta(\lambda)}{\prod_i \lambda_i}=\frac{1}{\lambda_1}+\frac{\lambda_1}{\prod_i\lambda_i}\Delta(n-1)$$

$$=\frac{1}{\lambda_1}+\frac{\lambda_1}{\prod\lambda_i}\left\{\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n+\lambda_2\Delta(n-2)\right\}$$

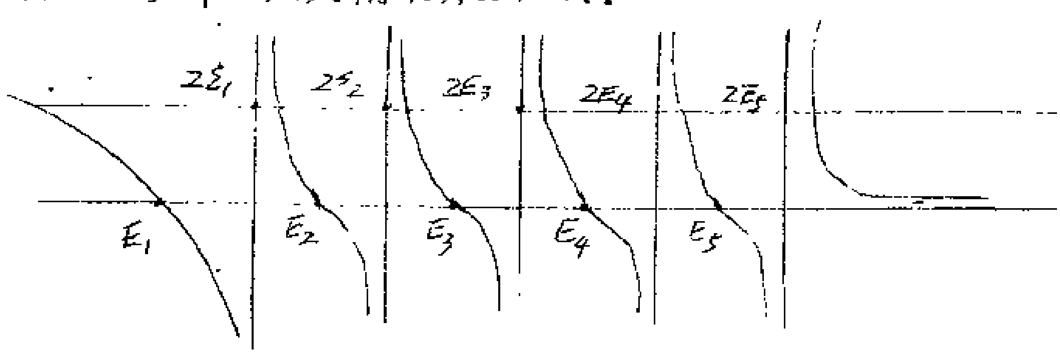
$$=\frac{1}{\lambda_1}+\frac{1}{\lambda_2}+\frac{\lambda_1\lambda_2}{\prod\lambda_i}\Delta(n-2)=\cdots$$

最后利用 $\Delta(1)=\lambda_n+1$，得出

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\lambda_i}+1=0$$

即
$$\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{E-2\varepsilon_i}\right)=-1$$

这就是确定能量本征值E的本征方程，E的本征值为E_α ($\alpha=1,2,\cdots n$)可利用图解法近似求出，如下图（$n=5$情况）。也可用数字计算法更精确求出E_α。



设本征函数ψ表成 $\psi=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$

本征方程 $(E-H)\psi=0$，可表成

$$\sum_{j=1}^{n}\left[(E-2\varepsilon_j)\delta_{ij}+1\right]c_j=0$$

$$\therefore\qquad (E-2\varepsilon_i)c_i=-\sum_{j=1}^{n}c_j$$

$$c_i=\frac{\left(-\sum_j^n c_j\right)}{(E-2\varepsilon_i)}\propto\frac{1}{E-2\varepsilon_i}$$

用本征值，例如E_α，代入上式，则相应的本征函数为

$$c_i^{(\alpha)}\propto\frac{1}{E_\alpha-2\varepsilon_i}$$

再利用归一化条件，得

$$c_i^{(\alpha)}=\frac{1}{\left[\sum_i\frac{1}{(E_\alpha-2\varepsilon_i)}\right]^{1/2}}\cdot\frac{1}{(E-2\varepsilon_i)},\qquad i=1,2,\cdots n$$

17. 设

$$\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 2\varepsilon_4-1 \end{pmatrix}$$

利用上题结果及微扰论，计标H本征值。

提示：选 $H=H_0+H'$

$$H'=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\qquad H_0=H-H'=\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 2\varepsilon_4-1 \end{pmatrix}$$

H_0可用上题方法求解，然后用微扰论求出能量修正。

第十章 9. 散射问题

1、 用玻恩近似法，求在下列势场中~~散射微分截~~面

1° $V(r)=\begin{cases}-V_0 & r<a \\ 0 & r>a\end{cases}$

2° $V(r)=V_0e^{-\alpha r^2}$ $\alpha>0$

3° $V(r)=\beta\frac{e^{-\alpha r}}{r}$

4° $V(r)=V_0e^{-\alpha r}$

5° $V(r)=\frac{\alpha}{r^2}$

〔解〕:

1° $f(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'}V(\vec{r}')d^3x'$

$$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2$$

对中心力场，因 $V(r)$ 与 θ、φ 无关，则 $f(\theta)$ 可以简化为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2q}\int_0^\infty dr'r'V(r')\sin qr'$$

$$=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2q}\int_0^a r'\sin qr'dr'$$

$$=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2q^3}(\sin qa-qa\cos qa)$$

$$\sigma(\theta)=\frac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4q^6}(\sin qa-qa\cos qa)^2$$

$$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$$

2° $f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2q}V_0\int_0^\infty r'\sin qr'e^{-\alpha r'^2}dr'$

$$=-\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\frac{\mu V_0}{2\alpha\hbar^2}e^{-q^2/4\alpha}$$

$$\sigma(\theta)=-\frac{\pi\mu^2V_0^2}{4\alpha^3\hbar^2}e^{-q^2/2\alpha}$$

积分时利用了公式：

$$\int_0^\infty e^{-a^2x^2}\cos bx\,dx = \frac{\sqrt{\pi}e^{-b^2/4a^2}}{2a} \qquad a>0$$

3° $$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\beta\int_0^\infty e^{-\alpha r'}\sin qr'\,dr'$$

$$= -\frac{2\mu}{\hbar^2}\beta\frac{1}{\alpha^2+q^2}$$

$$\sigma(\theta) = \frac{4\mu^2\beta^2}{\hbar^4}\frac{1}{(\alpha^2+q^2)^2} = \frac{4\mu^2\beta^2}{\hbar^4}\frac{1}{(\alpha^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2})^2}$$

积分时用到公式

$$\int_0^\infty e^{-ax}\sin bx\,dx = \frac{b}{a^2+b^2} \qquad a>0$$

4° $$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}V_0\int_0^\infty r'e^{-\alpha r'}\sin qr'\,dr'$$

$$= -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}V_0\frac{2\alpha q}{(\alpha^2+q^2)^2}$$

$$= -\frac{4\mu\alpha V_0}{\hbar^2(\alpha^2+q^2)^2}$$

$$\sigma(\theta) = \frac{16\mu^2V_0^2}{\hbar^4}\frac{\alpha^2}{(\alpha^2+q^2)^4} = \frac{16\mu^2V_0^2}{\hbar^4}\frac{\alpha^2}{(\alpha^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2})^4}$$

积分时利用了公式

$$\int_0^\infty xe^{-ax}\sin bx\,dx = \frac{2ab}{(a^2+b^2)^2} \qquad a>0$$

5° $$f(\theta) = -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q}\int_0^\infty\frac{\sin qr'}{r'}dr'$$

$$= -\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 q}\cdot\frac{\pi}{2} = -\frac{\mu\alpha\pi}{\hbar^2 q}$$

$$\sigma(\theta) = \frac{\mu^2\alpha^2\pi^2}{\hbar^4 q^2} = \frac{\mu^2\alpha^2\pi^2}{4\hbar^4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

积分时利用公式

$$\int_0^\infty\frac{\sin ax}{x}dx = \frac{\pi}{2} \qquad a>0$$

2. 用玻恩近似法处理慢速电子对氢原子（处于基态）的散射

证明：

1° 氢原子的形状因子为 $F(\theta)=\dfrac{1}{(1+q^2a^2/4)^2}$

其中 $q=2k\sin\dfrac{\theta}{2}$，　$k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$，　$a=\hbar^2/\mu e^2$（玻尔半径）

2° 微分截面为：$\sigma(\theta)=\dfrac{4a^2(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}$，

3° 总截面为：　$\sigma_t=\dfrac{\pi a^2}{3}\,\dfrac{7k^4a^4+18k^2a^2+12}{(k^2a^2+1)^3}$

4° 在高能极限下　$\sigma_{(t)}\simeq\dfrac{7\pi}{3k^2}$

[解]：1° 氢原子基态波函数为 $\psi(r)=\sqrt{\dfrac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}$，

相应的几率密度分布为　$\rho(r)=\dfrac{1}{\pi a^3}e^{-2r/a}$

所以形状因子为：

$$F(\theta)=\int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\rho(r)d^3x=\frac{1}{\pi a^3}\int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}-2r/a}d^3x$$
$$=\frac{1}{[1+q^2a^2/4]^2}$$

2° 对于氢原子，$Z=1$ 所以微分截面 $\sigma(\theta)$ 为：

$$\sigma(\theta)=\frac{4\mu^2e^4}{\hbar^4q^4}\left|1-F(\theta)\right|^2$$
$$=\frac{4\mu^2e^4}{\hbar^4q^4}\left[1-\frac{1}{(1+q^2a^2/4)^2}\right]^2$$
$$=\frac{4\mu^2e^4}{\hbar^4q^4}\cdot\frac{(\frac{1}{2}q^2a^2+q^4a^4/16)^2}{(1+q^2a^2/4)^4}$$
$$=\frac{4\mu^2e^4}{\hbar^4}\cdot\frac{(8a^2+q^2a^4)^2}{(4+q^2a^2)^4}\quad(\text{利用 } a=\hbar^2/\mu e^2 \text{ 得})$$
$$=4a^{-2}(8a^2+q^2a^4)^2/(4+q^2a^2)^4$$
$$=\frac{4a^2(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}$$

3°　$\sigma(t)=\int\sigma(\theta)d\Omega=8\pi a^2\int_0^\pi\dfrac{(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}\sin\theta d\theta$

利用 $\sin\theta d\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}d\theta$

$$= 4\sin\frac{\theta}{2}d\sin\frac{\theta}{2}$$

$$= 4\frac{q}{2k}d\frac{q}{2k} = \frac{1}{k^2}q\,dq \qquad (q = 2k\sin\theta/2)$$

$$q|_{\theta=\pi} = 2k$$

$$\therefore \quad \sigma(t) = \left(\frac{8\pi a^2}{k^2}\right)\int_0^{2k}\frac{(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}q\,dq$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\int_0^{4k^2a^2}\frac{(8+x)^2}{(4+x)^4}dx \quad \left[令\ q^2a^2 = x \quad \therefore q\,dq = \frac{1}{2a^2}dx\right]$$

令 $y = 4+x \quad dy = dx$ 则

$$\sigma(t) = \frac{4\pi}{k^2}\int_4^{4(k^2a^2+1)}\frac{(y+4)^2}{y^4}dy$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\int_4^{4(k^2a^2+1)}\left(\frac{1}{y^2}+\frac{8}{y^3}+\frac{16}{y^4}\right)dy$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\left[-\frac{1}{y}-\frac{4}{y^2}-\frac{16}{3y^3}\right]\Bigg|_4^{4(k^2a^2+1)}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\left\{\frac{1}{4(k^2a^2+1)}-\frac{4}{4^2(k^2a^2+1)^2}-\frac{16}{3}\frac{1}{4^3(k^2a^2+1)^3}+\frac{1}{4}+\frac{4}{4^2}+\frac{1}{4^3}\frac{16}{3}\right\}$$

$$= \frac{\pi}{k^2}\left\{-\frac{1}{k^2a^2+1}-\frac{1}{(k^2a^2+1)^2}-\frac{1}{3}\frac{1}{(k^2a^2+1)^3}+\frac{7}{3}\right\}$$

$$= \frac{\pi}{3k^2}\frac{1}{(k^2a^2+1)^3}\left\{-3(k^2a^2+1)^2-3(k^2a^2+1)-1+7(k^2a^2+1)^3\right\}$$

$$= \frac{\pi a^2}{3}\frac{7(k^2a^2)^2+18k^2a^2+12}{(k^2a^2+1)^3}$$

4° 若 $ka \gg 1$（高能极限）

$$\sigma(t) \doteq \frac{\pi a^2}{3}\frac{7k^4a^4}{(k^2a^2)^3} = \frac{7}{3}\frac{\pi}{k^2}$$

3、证明散射振幅的玻恩二级修正表示式为：

$$f^{(2)}(\theta) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{(2\pi)^3}\right)\int\frac{V(\vec{k}-\vec{k}'')V(\vec{k}''-\vec{k}_0)}{k''^2-k^2}d^3k'',$$

其中：$V(\vec{q}) = \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}V(\vec{r})\,d^3x$

并求出汤川势二级近似下的截面表示式。

证]：积分形式的薛定谔方程为：

$$\psi(\vec{r})=e^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|x-x'|}U(r')\psi(r')d\vec{r}'$$

它的解满足散射的边条件。用迭代法求之：

$$\psi^{(0)}=e^{ikz}$$

$$\psi^{(1)}_{(\vec{r})}=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}U(\vec{r}')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}d\vec{r}' \quad (\vec{k}=k\vec{z})$$

$$\psi^{(2)}_{(r)}=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}U(\vec{r}')\psi^{(1)}(r')d\vec{r}'$$

$$=(-\frac{1}{4\pi})^2\int d\vec{r}'\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}U(\vec{r}')\int\frac{e^{ik|\vec{r}'-\vec{r}''|}}{|\vec{r}'-\vec{r}''|}U(\vec{r}'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}''}d\vec{r}''$$

而 $$G_k(\vec{r},\vec{r}')=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2-k'^2}d\vec{k}'$$

$$|\vec{r}-\vec{r}'|=(r^2-2\vec{r}\cdot\vec{r}'+r'^2)^{1/2}$$

$$=r(1-2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}+\frac{r'^2}{r^2})^{1/2}$$

$$\cong r-\hat{r}\cdot\vec{r}' \qquad \hat{r}=\vec{r}/r$$

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}=\frac{e^{ikr}}{r}\cdot e^{-ik\hat{r}\cdot\vec{r}'}$$

$$=\frac{e^{ikr}}{r}\cdot e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} \qquad |\vec{k}'|=k$$

並定义 $$U(\vec{k}'-\vec{k})=\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}U(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}dr$$

代入 $\psi^{(1)}$ 可得：

$$\psi^{(1)}=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}U(r)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}d\vec{r}$$

$$=-\frac{1}{4\pi}U(\vec{k}'-\vec{k})\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\therefore \quad f^{(1)}(\theta)=-\frac{1}{4\pi}U(\vec{k}'-\vec{k})$$

$$=-\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{k}'-\vec{k})$$

代入$\psi^{(2)}$可得

$$\psi^{(2)}=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d\vec{r}'e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')\int G_k(\vec{r}',\vec{r}'')U(\vec{r}'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}''}d\vec{r}''$$

$$=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d\vec{r}'e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')\int d\vec{r}''\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{e^{i\vec{k}''\cdot(\vec{r}'-\vec{r}'')}}{k^2-k''^2}d\vec{k}''U(\vec{r}'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}''}$$

$$=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d\vec{k}''\int d\vec{r}'e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}U(\vec{r}')e^{i\vec{k}''\cdot\vec{r}'}\frac{1}{k^2-k''^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot$$

$$\int e^{-i\vec{k}''\cdot\vec{r}''}U(\vec{r}'')e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}''}d\vec{r}''$$

$$=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\cdot\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}''U(\vec{k}'-\vec{k}'')\frac{1}{k^2-k''^2}U(\vec{k}''-\vec{k})$$

$$=\left[-\frac{1}{4\pi}\frac{1}{(2\pi)^3}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2\int U(\vec{k}'-\vec{k}'')\frac{1}{k^2-k''^2}U(\vec{k}''-\vec{k})d\vec{k}''\right]\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\therefore\quad f(\theta)=-\frac{1}{4\pi}\frac{1}{(2\pi)^3}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2\int U(\vec{k}'-\vec{k}'')\frac{1}{k^2-k''^2}U(\vec{k}''-\vec{k})d\vec{k}''$$

因而可得截面公式为：

$$\sigma(\theta)=|f^{(1)}(\theta)+f^{(2)}(\theta)|^2$$

4. 设势为 $V(r)=V_0/r^2$ 用分波法求l波的相移。

〔解〕 分波法是说入射平面波

$$e^{ikz}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}A_l j_l(kr)Y_{l0}$$

中每一个分波，在中心力场的影响下，各自产生一个相移。波函数可表为：

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}R_l(kr)Y_{l0}(\theta)$$

根据边界条件

$$R_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{A_l}{kr}e^{i\delta_l}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

解R_l满足的径向方程，可求出δ_l。即

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}R_l\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-U(r)\right]R_l=0$$

$$R_l\xrightarrow{kr\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

现在 $\qquad U(r)=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2r^2}$

径向方程可写为：

$$\frac{d^2}{dr^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_l+\left[k^2-\frac{l(l+1)+V_0\frac{2\mu}{\hbar^2}}{r^2}\right]R_l=0$$

令 $\rho=kr \qquad R_l=u(\rho)/\sqrt{\rho}$

则可得： $\frac{d^2u}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{du}{d\rho}+\left[1-\frac{1}{\rho^2}\left(l(l+1)+\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0+\frac{1}{4}\right)\right]u=0$

令 $\nu^2=(l+1/2)^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0$

则： $\frac{d^2u}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{du}{d\rho}+\left[1-\frac{\nu^2}{\rho^2}\right]u=0$

这正是贝塞尔方程，它有两个线性无关的解：

$J_\nu,\ J_{-\nu} \qquad \nu=\sqrt{(l+1/2)^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0}$

$R_l\sim\frac{1}{\sqrt{\rho}}J_{\pm\nu}(\rho)$

在 $r=0$ 附近解析的解为 $R_l\sim\frac{1}{\sqrt{\rho}}J_\nu$

$$R_l\xrightarrow{\rho\to\infty}\frac{1}{\rho}\cos\left[\rho-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right]$$

$$=\frac{1}{\rho}\sin\left[\rho-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2}\right]$$

$$=\frac{1}{\rho}\sin\left(\rho-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

$$\therefore\quad \delta_l=\frac{\pi}{2}+\frac{l\pi}{2}-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}=\frac{\pi}{2}(l-\nu)$$

$$=\left[(l+1/2)-\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}\right]\cdot\frac{\pi}{2}$$

5. 在只考虑S波、P波及d波情况下，给出截面与散射角 θ 的依赖关系的一般表达式：

[解] 已知 $\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2$

取 $l=0,1,2$

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}\left|e^{i\delta_0}\sin\delta_0P_0+3e^{i\delta_1}\sin\delta_1P_1+5e^{i\delta_2}\sin\delta_2P_2\right|^2$$

$P_0(\cos\theta)=1$

$P_1(\cos\theta)=\cos\theta$

$P_2(\cos\theta)=\frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1)$

代入后可得：

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}[(\sin^2\delta_0-5\sin\delta_0\sin\delta_2\cos(\delta_0-\delta_2)+\frac{25}{4}\sin\delta_2)$$
$$+(6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1)-15\sin\delta_1\sin\delta_2\cos(\delta_1-\delta_2)\cos\theta$$
$$+(15\sin\delta_0\cos(\delta_0-\delta_2)+9\sin^2\delta_1-\frac{75}{2}\sin^2\delta_2)\cos^2\theta$$
$$+45\sin\delta_1\sin\delta_2\cos(\delta_1-\delta_2)\cos^3\theta+\frac{225}{4}\sin^2\delta_2\cos^4\theta]$$

6、利用分波法公式〔10.2节（16）式及（18）式〕证明光学定理（optical theolem）

$$Im f(0)=\frac{k}{4\pi}\sigma_t$$

〔解〕：从10.2节（16）式得

$$f(\theta)=\frac{1}{K}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)$$
$$=\frac{1}{K}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\cos\delta_l\sin\delta_l P_l(\cos\theta)+i\frac{1}{K}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\cdot$$
$$\sin^2\delta_l P_l(\cos\theta)$$

$$\therefore\quad Im f(\theta)=\frac{1}{K}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l P_l(\cos\theta)$$

$$\because\quad P_l(1)=1$$

$$\therefore\quad Im f(0)=\frac{1}{K}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

从10.2节（18）式得

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{K^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

$$\therefore\quad Im f(0)=\frac{k}{4\pi}\sigma_t$$

7. 计算在低能情况下球方势井的散射截面。球方势阱取为(参阅10.3节)

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & r<a \quad (V_0>0)\\ 0 & r>a\end{cases}$$

与玻恩近似计算结果(本节1题)比较。

〔证明〕：(1) S波相移为 $\delta_0=tg^{-1}\left(\frac{K\,tg\,K'a}{K'}\right)-Ka$

其中：$K=\sqrt{2\mu E}/\hbar$，$K'=\sqrt{2\mu(E+V_0)}/\hbar$

(2) $K\to 0$ 时 $\delta_0\simeq Ka\left(\frac{tg\,K_0a}{K_0a}-1\right)$，$K_0=\sqrt{2\mu V_0}/\hbar$，

$$\sigma_0=\frac{16}{9}\pi\frac{\mu^2V_0^2a^6}{\hbar^4}$$

并证明与波恩近似（第一题的计算结果一致）。

(3) 指出截面随能量变化的规律。与方势阱中粒子的角动量 $l=0$ 的能级比较，讨论共振现象。

〔证〕：与10.3节相似：

$\because$ $K=\sqrt{2\mu E}/\hbar$ $\qquad K_0=\sqrt{2\mu V_0}/\hbar$，$V_0>0$

但 $K'=\sqrt{K^2+K_0^2}=\sqrt{2\mu(E+V_0)}/\hbar$ (1)

对低能散射只考虑S波。令径向波函数为

$R=\chi_0/r$，则

$$\begin{aligned}&\chi_0''+(K^2+K_0^2)\chi_0=0 \qquad r<a\\&\chi_0''+K^2\chi_0=0 \qquad r>a\end{aligned}\tag{2}$$

满足边界条件 $\chi_0(0)=0$ 的解为

$$\chi_0\begin{cases}A'\sin K'r & r<a\\ \sin(Kr+\delta_0) & r>a\end{cases}\tag{3}$$

由 $r=a$ 处 χ_0 对数微商连续的条件，得

$$K'tg(Ka+\delta_0)=K\,tg\,K'a$$

$$\therefore\ \delta_0=tg^{-1}\left(\frac{K\,tg\,K'a}{K'}\right)-Ka\tag{4}$$

$$\sigma_0=\frac{4\pi}{K^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{K^2}\sin^2\left[tg^{-1}\left(\frac{K\,tg\,K'a}{K'}\right)-Ka\right]\tag{5}$$

2) $K\to 0$，$tg^{-1}\left(\frac{K\,tg\,K'a}{K'}\right)\simeq\frac{K}{K_0}tg\,K_0a$

$$\therefore\ \delta_0\simeq Ka\left(\frac{tg\,K_0a}{K_0a}-1\right)\tag{6}$$

而 $\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} f_0^2 = \frac{4\pi}{k^2} a^2 \left[\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1\right]^2$

$$\cong 4\pi a^2 \left(\frac{1}{3} k_0^2 a^2\right)^2 \quad (\text{利用 } \tan x = x + \tfrac{1}{3}x^3 \quad x \to 0)$$

$$= \frac{4}{9}\pi k_0^4 a^6$$

$$= \frac{16}{9}\pi \frac{\mu^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4} \qquad (7)$$

而按 Born 近似（第一题）

$$\sigma(\theta) = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4 q^6}(\sin qa - qa\cos qa)^2 \qquad q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \qquad (8)$$

当 $qa \ll 1$ 时，$\sin qa = qa - \frac{1}{3!}(qa)^3$

$$-qa\cos qa = qa - \frac{1}{2!}(qa)^3$$

$$\therefore \quad (\sin qa - qa\cos qa) = \frac{1}{3}(qa)^3$$

$$\therefore \quad \sigma(\theta) = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4}\frac{1}{9}a^6 \quad \text{与}(\theta)\text{无关} \qquad (9)$$

总截面：$\sigma = 4\pi\sigma(\theta) = \frac{16\pi\mu^2 V_0^2 a^6}{9\hbar^4}$ (10)

(3) 按(6)式与(7)式，当势阱深度 V_0 增加时，截面将增大。

当 $k_0 a = \frac{\pi}{2}$ 时，按照(7)式，$\sigma_0 \to \infty$（实际上不对）出现共振。

与球方势阱中粒子能级比较，(6.2)节，对于 $l=0$ 的情况，球方势阱中运动粒子与半壁无限高方势阱（3.1节例一）中粒子的运动相同，它出现第一条能级条件是：

$$y = ka/k_0 a = \frac{\pi/2}{k_0 a} = 1$$

即 $k_0 a = \frac{\pi}{2}$ 其中 $k_0 = \sqrt{2\mu V_0/\hbar^2}$

与上面结果完全相同。

继续加深势阱，截面又减小，当 $\tan k_0 a \approx k_0 a$ 时 σ_0 又趋于零，当势阱深度增加到又可以出现一条新的能级时，截面又趋于无穷大。

注意：当 $K_0a\approx\frac{\pi}{2}$ 时，公式(6)、(7)是不适用的（因 tgK_0a 很大）但仍可用：

$$\delta_0=tg^{-1}\left(\frac{K\,tgK'a}{K'}\right)$$

$$\approx tg^{-1}\left(\frac{K\,tgK_0a}{K_0}\right)$$

$$\sigma_0=\frac{4\pi}{K^2}\sin^2\delta_0$$

当 $K_0a=\pi/2$ 时，$\delta_0=\pi/2$，$\sigma_0\approx\frac{4\pi}{K^2}$

$$\sigma_0\cong\frac{4\pi}{K^2+\varepsilon^2}$$

其中 $\quad \varepsilon=\frac{K'}{tgK'a}\longrightarrow 0$

$$\delta_0=tg^{-1}\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)=\frac{\pi}{2}-\alpha$$

$$tg\delta_0=tg\left(\frac{\pi}{2}-\alpha\right)=K/\varepsilon$$

8. 计算球壳势垒散射的高角动量分波的相移，球壳势垒为：

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\Omega}{a}\delta(r-a)$$

〔解〕 在 $r\neq a$ 处，

l 分波的径向方程与自由粒子同，径向波函数可取如下：

$$R_l(r)=\begin{cases}A_l j_l(Kr) & r<a\\ j_l(Kr)\cos\delta_l-n_l(Kr)\sin\delta_l & r>a\end{cases}\qquad(1)$$

利用 $j_l(Kr)$、$n_l(Kr)$ 在 $Kr\longrightarrow\infty$ 时的渐近行为，可得

$$R_l(r)\xrightarrow{r\longrightarrow\infty}\frac{1}{Kr}\sin\left(Kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\qquad(2)$$

δ_l 是 l 分波的相移。

令 $R_l(r)=\chi_l(r)/r$，则 χ_l 满足下列方程

$$\chi_l''+\left[K^2-\frac{\Omega}{a}\delta(r-a)-\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}\hbar^2\right]\chi_l=0\qquad(3)$$

积分 $\quad\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dr\quad(\varepsilon\to0)$ 得

$$\chi_l'(a+\varepsilon)-\chi_l'(a-\varepsilon)=\frac{\Omega}{a}\chi_l(a)\qquad(4)$$

与前面类似，令 $L_l = r\chi_l'(r)/\chi_l(r) = \dfrac{d\ln\chi_l}{d\ln r}$ (5)

则(3)式的边界条件变为 $L_l(在 r=a 处)=\Omega$ 为常数 (6)

在 $r<a$ 区域：$\dfrac{d\ln\chi_l}{d\ln r}\Big|_{r=a} = \dfrac{d(\ln x j_l(x))}{d\ln x}$，$x=ka$

$$= 1 + \frac{x}{j_l}\cdot j_l'$$

在 $r>a$ 区域：

$$\frac{d\ln\chi_l}{d\ln r}\Big|_{r=a} = \frac{d}{d\ln x}\ln[x(j_l(x)\cos\delta_l - n_l(x)\sin\delta_l)]$$

$$= 1 + \frac{x(\cos\delta_l j_l' - \sin\delta_l n_l')}{\cos\delta_l j_l - \sin\delta_l n_l}$$

这样的条件(6)就变成

$$x\left[\frac{\cos\delta_l\cdot j_l'(x) - \sin\delta_l\cdot n_l'(x)}{\cos\delta_l\cdot j_l(x) - \sin\delta_l\cdot n_l(x)} - \frac{j_l'(x)}{j_l(x)}\right] = \Omega \qquad (7)$$

或 $$x\frac{j_l' - n_l'\,\mathrm{tg}\,\delta_l}{j_l - n_l\,\mathrm{tg}\,\delta_l} = \Omega + x\frac{j_l'}{j_l}$$

解出 $\mathrm{tg}\,\delta_l$ 得

$$\mathrm{tg}\,\delta_l = \frac{\Omega j_l^2}{\Omega j_l n_l + x(j_l' n_l - j_l n_l')}$$

$$= \frac{\Omega j_l^2}{\Omega j_l n_l - \frac{1}{x}} \quad (利用\ j_l' n_l - j_l n_l' = -\frac{1}{x^2})$$

$$= \frac{j_l^2}{j_l n_l - \frac{1}{\Omega x}} \qquad (8)$$

9、用玻恩近似法计算粒子对δ势 $V(\vec r) = V_0\delta(\vec r)$ 的散射截面，截面有何特点？与低能粒子的散射截面及库仑势的散射截面的特点比较。

〔解〕：将 $V(\vec r)$ 代入玻恩一级近似公式：

$$\sigma(\theta) = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int V(\vec r)e^{i\vec q\cdot\vec r}d^3x\right|^2$$

$$= \frac{\mu^2 V_0^2}{4\pi^2\hbar^4} = 常数$$

$\sigma(\theta)$与角度无关，角分布是各向同性的。

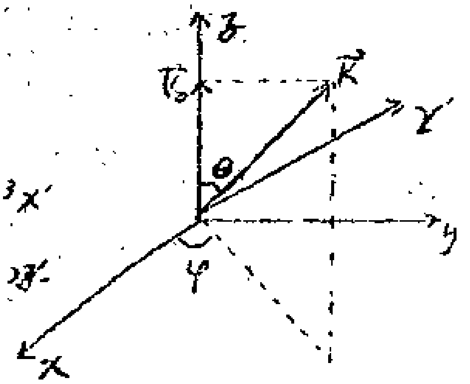
总截面为 $\sigma_{t}=\mu^2V_0^2/\pi\hbar^4$

低能粒子散射截面集中在小角度，即向前散射。

10．考虑中子束对双原子分子 H_2 的散射，中子束沿子轴方向入射，两个氢原子核位于 $x=\pm a$ 处，中子与电子无相互作用，只考虑中子与氢原子核（即质子）的作用，系統視为，取为

$$V(\vec{r})=-V_0[\delta(x-a)\delta(y)\delta(z)+\delta(x+a)\delta(y)\delta(z)]$$

为简单计不考虑反冲，试用玻恩一级近似公式计算散射振幅及微分截面。



〔解〕：玻恩一级近似的公式为：

$$f=-\frac{1}{4\pi}\int e^{i(\vec{k}_0-\vec{k})\cdot\vec{r}'}\frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r}')d^3x'$$

$$=\frac{V_0}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int e^{-ik_xx'-ik_yy'+i(k_0-k_z)z'}$$

$$(\delta(x'-a)\delta(y')\delta(z')+\delta(x'+a)\cdot$$

$$\delta(y')\delta(z'))dx'dy'dz'$$

$$=\frac{V_0}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(e^{-ik_xa}+e^{ik_xa})$$

$$=\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\cdot 2\cos k_xa$$

$$=\frac{mV_0}{\pi\hbar^2}\cos k_xa$$

$$=\frac{mV_0}{\pi\hbar^2}\cos(ka\sin\theta\cos\varphi)$$

$$\therefore\quad \sigma(\theta,\varphi)=|f|^2$$

$$=\left(\frac{mV_0}{\pi\hbar^2}\right)^2\cos^2(ka\sin\theta\cos\varphi)$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{mV_0}{\pi\hbar^2}\right)^2[1+\cos(2ka\sin\theta\cos\varphi)]$$

11．设有两个电子，自旋态分别为：

$$\chi_1=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\quad 与\ \chi_2=\begin{pmatrix}\cos\theta/2\cdot e^{-i\varphi/2}\\ \sin\theta/2\cdot e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

1° 证明两个电子处于自旋单态 $S=0$，及三重态 $S=1$ 的几率分别为

$$W_a=\frac{1}{2}(1-\cos^2\theta/2)$$
$$W_s=\frac{1}{2}(1+\cos^2\theta/2)$$

2°. 设有两束这样的极化电子散射，证明

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{4}[(3+\cos\theta)\sigma_3+(1-\cos\theta)\sigma_1]$$

其中 σ_3 与 σ_1 分别表示两个电子处于三重态及单态下的散射截面。

〔解〕：

$$\chi_{(1)}\xi_{(2)}=\underbrace{\frac{1}{2}[\chi_{(1)}\xi_{(2)}+\xi_{(1)}\chi_{(2)}]}_{\text{自旋三重态 对称}}+\underbrace{\frac{1}{2}[\chi_{(1)}\xi_{(2)}-\xi_{(1)}\chi_{(2)}]}_{\text{自旋单态 反对称}}$$

∴ 处于 $S=1$ 的态的几率 W_s 为：

$$\begin{aligned}W_s&=\frac{1}{4}|\chi_{(1)}\xi_{(2)}+\xi_{(1)}\chi_{(2)}|^2\\&=\frac{1}{4}[2+\chi^+_{(1)}\xi_{(1)}\xi^+_{(2)}\chi_{(2)}+C.C]\\&=\frac{1}{4}[2+(1\,0)\begin{pmatrix}\cos\theta/2\cdot e^{i\theta/2}\\ \sin\theta/2\cdot e^{i\theta/2}\end{pmatrix}(\cos\theta/2\,e^{-i\theta/2}\ \sin\theta/2\,e^{-i\theta/2})\cdot\\&\qquad\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+C.C]\\&=\frac{1}{4}[2+\cos^2\theta/2+C.C]\\&=\frac{1}{2}(1+\cos^2\theta/2)\end{aligned}$$

同样处理 $S=0$ 态的几率

$$W_a=\frac{1}{2}(1-\cos^2\theta/2)$$

$$\begin{aligned}\therefore\ \sigma(\theta)&=\frac{1}{2}(1+\cos^2\theta/2)\sigma_3+\frac{1}{2}(1-\cos^2\theta/2)\sigma_1\\&=\frac{1}{4}(2+1+\cos\theta)\sigma_3+\frac{1}{4}(2-1-\cos\theta)\sigma_1\\&=\frac{1}{4}(3+\cos\theta)\sigma_3+\frac{1}{4}(1-\cos\theta)\sigma_1\end{aligned}$$

12. 中子(n)与质子(p)的散射截面与自旋有密切关系，实验表明，在低能情况下，它们处于单态。

$\chi_0(S=0)$及三重态$\chi_{1M}(S=1)$下的散射总截面分别为：

$\sigma_1=4\pi|f_1|^2\simeq 71\times10^{-24}cm^2 \qquad f_1=-2.37\times10^{-12}cm$

$\sigma_3=4\pi|f_3|^2\simeq 3.6\times10^{-24}cm^2 \qquad f_3=0.538\times10^{-12}cm$

（取自 L. Hulthen d. M. Sugawara, Handbuch der Physik Bd 39.1 Springer — Verlag (1957)）

为了描述极化中子与质子的散射，引进散射振幅算符

$$\hat{f}=\frac{f_1+3f_3}{4}+\frac{f_3-f_1}{4}\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_p$$

1° 证明 $\hat{f}\chi_0=f_1\chi_0 \qquad \hat{f}\chi_{1M}=f_3\chi_{1M}$

2° 证明 $\hat{f}^2=\frac{1}{4}(3f_3^2+f_1^2)+\frac{1}{4}(f_3^2-f_1^2)\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_p$

3° 设极化质子的自旋（沿Z轴方向）态为$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，极化中子的自旋（沿$\theta$、$\varphi$方向）态为$\begin{pmatrix}\cos\theta/2\cdot e^{-i\varphi/2}\\ \sin\theta/2\cdot e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$证明n、p散射总截面

$$\sigma_t=\frac{1}{4}[(3f_3^2+f_1^2)+(f_3^2-f_1^2)\cos\theta]$$

［解］：设 $\vec{S}=\frac{1}{2}(\vec{\sigma}_n+\vec{\sigma}_p)$

$\vec{S}^2=\frac{1}{4}(\vec{\sigma}_p^2+\vec{\sigma}_n^2+\vec{\sigma}_p\cdot\vec{\sigma}_n)$

$\vec{\sigma}_p\cdot\vec{\sigma}_n=2\vec{S}^2-3$

$\therefore \quad \vec{\sigma}_p\cdot\vec{\sigma}_n\chi_0=-3\chi_0$

$\vec{\sigma}_p\cdot\vec{\sigma}_n\chi_{1M}=1\chi_{1M}$

$\hat{f}\chi_0=[\frac{f_1+3f_3}{4}-\frac{3(f_3-f_1)}{4}]\chi_0=f_1\chi_0$

$\hat{f}\chi_{1M}=(\frac{f_1+3f_3}{4}+\frac{f_3-f_1}{4})\chi_{1M}=f_3\chi_{1M}$

2° $\hat{f}^2=[\frac{f_1+3f_3}{4}+\frac{f_3-f_1}{4}\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_p]^2$

$=\frac{(f_1+3f_3)^2}{16}+2\frac{(f_1+3f_3)(f_3-f_1)}{4\cdot4}\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_p+\frac{(f_3-f_1)^2}{16}(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_p)^2$

$=\frac{(f_1+3f_3)^2}{16}+\frac{(f_1+3f_3)(f_3-f_1)}{8}+\frac{(f_3-f_1)^2\cdot3}{16}-\frac{(f_3-f_1)^2}{8}\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_p$

$$= \frac{1}{4}(3f_3^2+f_1^2)+\frac{1}{4}(f_3^2-f_1^2)\overline{\sigma_n\cdot\sigma_p}$$

3° np体系的自旋态为 $\chi=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\cdot e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\cdot e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}_n$

总截面 $\sigma_{总}=4\pi\overline{f^2}$

先求 $\overline{\sigma_p\cdot\sigma_n}=\overline{\sigma_{px}\sigma_{nx}}+\overline{\sigma_{py}\sigma_{ny}}+\overline{\sigma_{pz}\sigma_{nz}}$

$$=\overline{\sigma_{pz}\sigma_{nz}} \qquad \because \overline{\sigma_{px}}=\overline{\sigma_{py}}=0$$

$$(1\ 0)\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(\cos\tfrac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2},\ \sin\tfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2})\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\ e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\ e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

$$=(\cos^2\tfrac{\theta}{2}-\sin^2\tfrac{\theta}{2})$$

$$=\cos\theta$$

$$\therefore \overline{f^2}=\frac{1}{4}(3f_3^2+f_1^2)+\frac{1}{4}(f_3^2-f_1^2)\cos\theta$$

$$\sigma_{总}=\pi\{(3f_3^2+f_1^2)+(f_3^2-f_1^2)\cos\theta\}$$

$$=\frac{1}{4}\{(3\sigma_3+\sigma_1)+(\sigma_3-\sigma_1)\cos\theta\} \qquad \begin{matrix}\theta=0 & \sigma_{总}=\sigma_3\\ \theta=\pi & \sigma_{总}=\frac{1}{2}(\sigma_3+\sigma_1)\end{matrix}$$

13、同上题，设碰撞前质子与中子的自旋态分别为 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p$ 与 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n$ 证明碰撞后 n.p 自旋反向的几率为：

$$\frac{1}{2}\,\frac{|f_3-f_1|^2}{f_3^2+f_1^2}$$

〔解〕：初态自旋

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n=\frac{1}{\sqrt2}\chi_s+\frac{1}{\sqrt2}\chi_a$$

$$\chi_s=\frac{1}{\sqrt2}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\right\}$$

$$\chi_a=\frac{1}{\sqrt2}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\right\}$$

散射波为：

$$\frac{e^{ikr}}{r}\frac{1}{\sqrt2}\{f_3\chi_s+f_1\chi_a\}$$

$$=\frac{e^{ikr}}{r}\left\{\frac{f_3}{2}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\right]+\frac{f_1}{2}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\right]\right\}$$

$$=\frac{e^{ikr}}{r}\left(\frac{f_3+f_1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n+\frac{f_3-f_1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\right.$$

∴ 自旋反向的几率为：

$$(f_3-f_1)^2/(f_3+f_1)^2+(f_3-f_1)^2$$
$$=\frac{1}{2}\frac{(f_3-f_1)^2}{f_3^2+f_1^2}$$

14. 慢中子对氢分子散射，设散射振幅近似等于中子被两个质子散射振幅之和，即散射振幅可表为：

$$\hat{f}=\frac{f_1+3f_3}{2}+\frac{f_3-f_1}{4}\{\vec{\sigma}_n\cdot(\vec{\sigma}_{p_1}+\vec{\sigma}_{p_2})\}$$

令 $\hat{S}=\frac{1}{2}(\vec{\sigma}_{p_1}+\vec{\sigma}_{p_2})$ （$\hbar=1$）表示两个质子总自旋

1° 证明 $(\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S})^2=\hat{S}^2-\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S}$

2° 证明 $\hat{f}^2=\frac{1}{4}\{(3f_3+f_1)^2+(5f_3^2-2f_1^2-2f_1f_3)\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S}+(f_3-f_1)^2\hat{S}^2\}$

3° 证明不极化的中子对仲氢及正氢 $S=1$ 的散射截面之比为 $1+\frac{2(f_3-f_1)^2}{(3f_3+f_1)^2}$

〔解〕：

$$1°:(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_S)^2=\frac{1}{4}(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_1}+\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_2})^2$$
$$=\frac{1}{4}(3-2(\vec{\sigma}_n\vec{\sigma}_{p_1})+3-2(\vec{\sigma}_n\vec{\sigma}_{p_2})+(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_1})(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_2})$$
$$+(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_2})(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_1})$$

$$(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_1})(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_2})=[(\vec{\sigma}_{nx}\vec{\sigma}_{p_1x}+\vec{\sigma}_{ny}\vec{\sigma}_{p_1y}+\vec{\sigma}_{nz}\vec{\sigma}_{p_1z})(\vec{\sigma}_{nx}\vec{\sigma}_{p_2x}+$$
$$\sigma_{ny}\sigma_{p_2y}+\sigma_{nz}\sigma_{p_2z})]$$
$$=\sigma_{1x}\sigma_{2x}+i\sigma_{nz}\sigma_{1x}\sigma_{2y}-i\sigma_{ny}\sigma_{1x}\sigma_{1z}-i\sigma_{nz}\sigma_{1y}\sigma_{2x}$$
$$+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+i\sigma_{nx}\sigma_{1y}\sigma_{2z}+i\sigma_{ny}\sigma_{1z}\sigma_{2x}-i\sigma_x\sigma_{1z}\cdot$$
$$\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}$$
$$=(\vec{\sigma}_{p_1}\cdot\vec{\sigma}_{p_2})+i\vec{\sigma}_n\cdot(\vec{\sigma}_{p_1}\times\vec{\sigma}_{p_2})$$

$$(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_2})(\vec{\sigma}_n\cdot\vec{\sigma}_{p_1})=(\vec{\sigma}_{p_2}\cdot\vec{\sigma}_{p_1})+i\vec{\sigma}_n\cdot(\vec{\sigma}_{p_1}\times\vec{\sigma}_{p_2})$$

$$\hat{S}^2=\frac{1}{4}(\vec{\sigma}_{p_1}+\vec{\sigma}_{p_2})^2=\frac{1}{4}(\sigma_{p_1}^2+\sigma_{p_2}^2+2\vec{\sigma}_{p_1}\vec{\sigma}_{p_2})$$
$$=\frac{1}{4}(6+2\vec{\sigma}_{p_1}\cdot\vec{\sigma}_{p_2})$$
$$2\vec{\sigma}_{p_1}\vec{\sigma}_{p_2}=4\hat{S}^2-6$$

而 $(\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S})^2=\frac{1}{4}(6-2\vec{\sigma}_n(\vec{\sigma}_{p_1}+\vec{\sigma}_{p_2})+2\vec{\sigma}_{p_1}\cdot\vec{\sigma}_{p_2}]$

$$=\frac{1}{4}(6-4\sigma_n\cdot\hat{S}+4\hat{S}^2-6)$$
$$=\hat{S}^2-\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S}$$

2°: $$\hat{f}=\frac{f_1+3f_3}{2}+\frac{f_3-f_1}{2}\{\vec{\sigma}_n\cdot(\vec{\sigma}_{p_1}+\vec{\sigma}_{p_2})\}$$
$$=\frac{f_1+3f_3}{2}+\frac{f_3-f_1}{2}\vec{\sigma}_n\cdot\vec{S}$$
$$\hat{f}^2=\left(\frac{f_1+3f_3}{2}\right)^2+\frac{(f_3-f_1)^2}{2}(\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S})^2+2\frac{(f_1+3f_3)}{2}\cdot\frac{f_3-f_1}{2}\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S}$$
$$=\frac{1}{4}\{(f_1+3f_3)^2+(f_3-f_1)^2-(f_3-f_1)^2\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S}+2(f_1+3f_3)\cdot$$
$$(f_3-f_1)\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S}\}$$
$$=\frac{1}{4}[(f_1+3f_3)^2+\vec{\sigma}_n\cdot\hat{S}(5f_3^2-3f_1^2-2f_1f_3)+(f_3-f_1)^2\hat{S}^2]$$

3°: 仲氢 $S=0$ 无特殊的空间方向，与入射中子的极化无关

$$\sigma_{仲}=4\pi\overline{f^2}\Big|_{S=0}=\pi(f_1+3f_3)^2$$

正氢 $S=1$，取总自旋方向为 Z 轴，入射中子方向为 (θ,φ)

中子自旋波函数为

$$\xi_{(n)}=\begin{pmatrix}\cos\theta/2\ e^{-i\varphi/2}\\ \sin\theta/2\ e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

氢分子处于三重态 χ_3，且是 S_z 的本征态

$$\hat{S}^2\chi_3=2\chi_3$$
$$\overline{S_x}=\overline{S_y}=0$$

体系的自旋态为 $\xi_{(n)}\chi_{3M_S}(p_1p_2)$

$$\overline{\sigma_n\cdot S}=\overline{\sigma_z S_z}=(\cos^2\theta/2-\sin^2\theta/2)M_S=\cos\theta M_S$$

$$\sigma_{正}=\pi\left[(f_1+3f_3)^2+(5f_3^2-3f_1^2-2f_1f_3)M_s\cos\theta+2(f_3-f_1)^2\right]$$

若中子未极化，则 $\overline{\cos\theta}=0$

$$\therefore\quad \sigma_{正}=\pi\left[(f_1+3f_3)^2+2(f_3-f_1)^2\right]$$

$$\therefore\quad \frac{\sigma_{正}}{\sigma_{仲}}=1+\frac{2(f_3-f_1)^2}{(f_1+3f_3)^2}$$

第十一章 10. 量子跃迁

1. 具有电荷 q 的离子，在其平衡位置附近作一维简谐运动，在光的照射下发生跃迁。入射光能量密度（单位频率）为 $\rho(\nu)$，波长较长。求：

(1) 跃迁选择定则，

(2). 设离子原来处于基态，求每秒跃迁到第一激发态的几率。

〔解〕: (1) 具有电荷为 q 的离子，在波长较长的光的照射下，从 $n\longrightarrow n'$ 的跃迁速率为

$$w_{n'n}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}|x_{n'n}|^2\rho(\omega_{n'n})$$

其中，$\omega_{n'n}=(n'-n)\ \omega_0$

而根据 $x\psi_n(x)=\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_0}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right]$

∴跃迁选择定则为：$n'=n\pm1$

(2) 在初态 $n=0$（基态）时，即

$$x\psi_0(x)=\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_0}}\sqrt{\frac{1}{2}}\ \psi_1(x)$$

$$\therefore\quad |x_{10}|^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}$$

于是，每秒钟跃迁到第一激发态的几率

$$W_{10}=\frac{4\pi^2 q^2}{3\hbar^2}\cdot\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}\rho(\omega_0)$$

$$=\frac{2\pi^2 q^2}{3\mu\hbar\omega_0}\rho(\omega_0)$$

2、设一带电q的粒子，质量为m，在宽度为a的一维无限深势井中运动，在入射光的照射下，发生跃迁，光波长$\lambda\gg a$

(1) 求跃迁选择定则

(2) 设粒子原来处于基态，求跃迁速率公式

〔解〕： 设：入射光的单位频率的能量密度为$\rho(\omega)$，则单位时间跃迁几率为

$$W_{n'n}=\frac{4\pi^2 q^2}{3\hbar^2}|x_{n'n}|^2\rho(\omega)$$

对宽度为a的无限深势井，其波函数和能量为

$$\psi_{n(x)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},\quad E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}n^2\qquad n=1,2,\cdots$$

$$\therefore x_{n'n}=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin\frac{n'\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx$$

$$=\frac{1}{a}\int_0^a x\left[\cos\frac{(n'-n)}{a}\pi x-\cos\frac{(n'+n)}{a}\pi x\right]dx$$

$$=-\frac{8a}{\pi^2}\frac{n'n}{(n'^2-n^2)^2}\delta_{n',\,2k+1+n}$$

$\therefore$ (1) 选择定则为 $n'=2k+1+n$

而 $k=\begin{cases}0,1,2,\cdots\\-1,-2,\cdots,-\frac{n}{2}(\text{当}n\text{为偶})\ or\ -\frac{n-1}{2}(\text{当}n\text{为奇})\end{cases}$

(2) 基态的跃迁公式为

$$W_{2k,1}=\frac{256a^2}{3\pi^2\hbar^2}\cdot\frac{4k^2}{(4k^2-1)^4}\rho(\omega_{2k,1})\qquad k=1,2\cdots$$

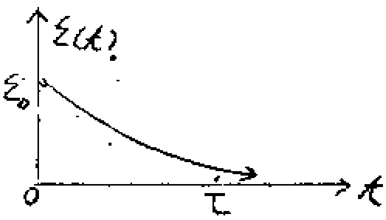
$$\omega_{2k,1}=\frac{\pi^2\hbar}{2\mu a^2}(4k^2-1)$$

3、设把处于基态的氢原子放在平板电容器中，取平板法线方向为Z轴方向。电场沿Z轴方向，可视为均匀。设电容器突然充电，然后放电。电场随时间变化如下：

$$E(t)=\begin{cases} 0 & t<0 \\ E_0 e^{-t/\tau} & t>0 \end{cases} \quad (\tau\text{常数})$$

求时间充分长以后，氢原子跃迁到2S态及2P态去的几率。

[解]：根据公式从 $n \longrightarrow n'$ 态的跃迁几率为



$$P_{n'n}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|H'_{n'n}(\omega_{n'n})\right|^2$$

而 $$H'(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_0^{+\infty}H'(t)e^{i\omega t}dt$$

$$=\frac{e}{2\pi}\int_0^{+\infty}\vec{E}_0\cdot\vec{r}\,e^{-(\frac{1}{\tau}-i\omega)t}dt$$

$$=\frac{e}{2\pi}E_0 z\cdot\frac{1}{(\frac{1}{\tau}-i\omega)}$$

$$\therefore P_{n'n}=\frac{e^2E_0^2}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{\frac{1}{\tau^2}+\omega_{n'n}^2}\left|z_{n'n}\right|^2$$

∴ 从基态 $\longrightarrow$ 2S态的跃迁几率为。

而从基态到2P态 $(m=0)$ 的跃迁几率为0

$$P_{2p,1s}=\frac{e^2E_0^2}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{\frac{1}{\tau^2}+\omega_{n'n}^2}(z)_{2p,1s}^2$$

而 $$\psi_{1s}=\frac{1}{a^{3/2}\sqrt{\pi}}e^{-r/a}$$

$$\psi_{2p}=\frac{1}{4a^{3/2}\sqrt{2\pi}}re^{-r/2a}\cos\theta$$

其中 a 为玻尔半径

$$\therefore (z)_{2p,1s}=\frac{1}{4\sqrt{2}\pi a^4}\int z r^3 e^{-3r/2a}\cos\theta\, dr\, d\Omega$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi a^4}\int r^4 e^{-3r/2a}\cos^2\theta\, dr\, d\Omega$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi a^4}\cdot\left(\frac{2a}{3}\right)^5\cdot 4!\cdot\frac{4\pi}{3}$$

$$= \frac{\sqrt{2}\cdot 2^7}{3^5}a$$

$$\therefore\quad P_{2p,1s} = \frac{2^{15}\cdot e^2 E_0^2 a^2\tau^2}{3^{10}\cdot\hbar^2\cdot\left[1+\left(\frac{3\tau e^2}{8\hbar a}\right)^2\right]}$$

4、计算氢原子的第一激发态的自发辐射系数。

[解]：设 $T\to\infty$，即 $kT \gg \hbar\omega_{k'k}$，则自发辐射时系数为：

$$A_{kk'} = \frac{4e^2\omega_{k'k}^3}{3\hbar c^3}\left|\vec{r}_{kk'}\right|^2$$

由于求第一激发态的自发辐射系数，这时

$$\omega_{k'k} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^3}\left(1-\frac{1}{4}\right) = \frac{3\mu e^4}{8\hbar^3}$$

由选择定则知，$2S\to 1S$ 的自发辐射时系数为零

而 $$A_{1s,2p} = \frac{4e^2}{3\hbar c^3}\left(\frac{3\mu e^4}{8\hbar^3}\right)^3\left|\langle 1s|\vec{r}|2p\rangle\right|^2$$

显然，最后因子矩阵元的值与 $2p$ 态的磁量子数 m 取何值无关。因此，对初态求平均，对末态求和等价于取特定 m 值计算。现取 $m=0$，于是

$$|2p\rangle_{m=0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\cdot\frac{1}{a^{5/2}}\, r e^{-r/2a}\cos\theta$$

而 $$|1s\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{a^{3/2}}e^{-r/a} \qquad 其中\ a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

这时 $\langle 1s|x|2p\rangle_{m=0} = 0 \qquad \langle 1s|y|2p\rangle_{m=0} = 0$

$$\langle 1s|z|2p\rangle_{m=0} = \frac{1}{4\pi\sqrt{2}a^4}\int r^4 e^{-3r/2a}\cos\theta\, dr\, d\Omega$$

$$= \frac{2^7\sqrt{2}a}{3^5}$$

$$\therefore \quad A_{1S,2P}=\left(\frac{2}{3}\right)^{8}\frac{e^{14}\mu^{3}\alpha^{2}}{\hbar^{10}c^{3}}$$

$$=\left(\frac{2}{3}\right)^{8}\frac{\mu\alpha^{10}}{c^{3}\hbar^{6}}$$

5、设有一自旋为$\hbar/2$的粒子，相应的磁矩为$\hat{\mu}=g\hat{s}$，粒子置于转动磁场中

$$B_x=B_0\cos\omega t,\quad B_y=B_0\sin\omega t,\quad B_z=B\ (\text{常数})$$

粒子和磁场的作用能为$-\hat{\mu}\cdot\vec{B}=-g\hat{s}\cdot\vec{B}$。设粒子原来处于$S_z=\hbar/2$的状态，讨论跃迁情况及跃迁几率。

〔解〕：设粒子处的初态为$|K\,\hbar/2\rangle$，末态为$|K'S_z'\rangle$而由$KS_z\to K'S_z'$跃迁几率振幅为

$$C_{K'S_z',KS_z}=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{K'S_z',KS_z}e^{i\omega_{K'S_z',KS_z}t}dt$$

由于 $H'=-\hat{\mu}\cdot\vec{B}=-g(S_xB_0\cos\omega t+S_yB_0\sin\omega t+S_zB)$

$$=-g\left(\frac{1}{2}B_0e^{i\omega t}S_-+\frac{1}{2}B_0e^{-i\omega t}S_++S_zB\right)$$

由于H'中仅与$\hat{S}$有关，所以，这相互作用不引起量子数K的变化，由于粒子原来处于$(K,S_z)=(K,\hbar/2)$，因此仅H'中$\frac{1}{2}B_0e^{i\omega t}S_-$可引起从$|K\frac{1}{2}\rangle\to|K-\frac{1}{2}\rangle$态的跃迁。而$S_zB$项仅使能级发生移动，这时，跃迁几率为

$$P_{K-\frac{1}{2},K\frac{1}{2}}=\frac{g^2B_0^2}{4\hbar^2}\left|\int_0^t\langle-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}|S_-|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle e^{i(\omega_{K-\frac{1}{2},K\frac{1}{2}}+\omega)t}dt\right|^2$$

$$=g^2B_0^2\frac{\sin^2(\omega_{K-\frac{1}{2}}-\omega_{K\frac{1}{2}}+\omega)t/2}{(\omega_{K-\frac{1}{2}}-\omega_{K\frac{1}{2}}+\omega)^2}$$

而 $\omega_{K-\frac{1}{2}}=\omega_K+g\hbar B/2\hbar=\omega_K+gB/2$

$$\omega_{K\frac{1}{2}}=\omega_K-g\hbar B/2\hbar=\omega_K-gB/2$$

$$\therefore\ P_{k-\frac{1}{2},k\frac{1}{2}}=g^2B_0^2\frac{\sin^2(gB+\omega)t/2}{(gB+\omega)^2}$$

6. 氢原子处于基态，加上交变电场 $\vec{\mathcal{E}}=\vec{\mathcal{E}}_0(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$，$\hbar\omega\gg$ 离化能，用微扰论一级近似计算氢原子每秒电离的几率

[解]：氢原子处于基态 ψ_1，在交变电场作用下，由于 $\hbar\omega\gg$ 离化能，所以，氢原子可能电离，即末态电子处于自由电子状态 ψ_{E_K}，当 t 很大时，单位时间发生电离的几率为

$$W=\int a_{\vec{K}}^2(t)\,\rho(\vec{K})\,d\Omega_K\,dE_K$$

而 $$a_{\vec{K}}^2(t)=\frac{\pi e^2}{\hbar^2}\left|\langle\psi_{\vec{K}}|\vec{\mathcal{E}}_0\cdot\vec{r}|\psi_1\rangle\right|^2\delta[(\omega-\omega_{E_KE_1})/2]$$

其中，$\rho(\vec{K})$ 为单位能量，单位立体角中的态密度，在箱归一化的情况下

$$\rho(\vec{K})=\left(\frac{L}{\sqrt{2}\pi\hbar}\right)^3\mu\cdot\sqrt{2\mu E_K}$$

$$\psi_{\vec{K}}(\vec{r})=\frac{1}{L^{3/2}}e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

$$\psi_1(\vec{r})=\frac{1}{(\pi a)^{3/2}}e^{-r/a}\quad 而\ a=\hbar^2/\mu e^2$$

而 $\langle\psi_K|\vec{\mathcal{E}}_0\cdot\vec{r}|\psi_1\rangle$

$$=\frac{1}{L^{3/2}}\int e^{-iKr\cos\theta}(\mathcal{E}_{0x}x+\mathcal{E}_{0y}y+\mathcal{E}_{0z}z)\frac{1}{(\pi a)^{3/2}}e^{-r/a}d\Omega\, r^2dr$$

由于 $\int_0^{2\pi}\cos\varphi\,d\varphi=\int_0^{2\pi}\sin\varphi\,d\varphi=0$

$\therefore\ \langle\psi_{\vec{K}}|\vec{\mathcal{E}}_0\cdot\vec{r}|\psi_1\rangle$

$$=\frac{1}{L^{3/2}}\cdot\frac{1}{(\pi a)^{3/2}}\int e^{-iKr\cos\theta}e^{-r/a}\mathcal{E}_{0z}r\cos\theta\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\,r^2dr$$

$$=\frac{2\pi\mathcal{E}_{0z}}{(\pi aL)^{3/2}}\int_0^\infty r^3e^{-r/a}dr\int_0^\pi e^{-iKr\cos\theta}\cos\theta\sin\theta\,d\theta$$

$$= \frac{2\pi \varepsilon_{0} z}{(\pi a L)^{3/2}} \int_0^\infty r^3 e^{-r/a} dr \cdot 2i \left[\frac{1}{kr} \cos kr - \left(\frac{1}{kr}\right)^2 \sin kr \right]$$

$$= \frac{4\pi i \varepsilon_{0} z}{(\pi a L)^{3/2}} \int_0^\infty \left(\frac{1}{k} r^2 \cos kr e^{-r/a} - \frac{1}{k^2} r \sin kr e^{-r/a} \right) dr$$

$$= \frac{4\pi i \varepsilon_{0z}}{(\pi a L)^{3/2}} \cdot \frac{2}{a} \left[\frac{\frac{1}{a^2} - 3k^2}{k(\frac{1}{a^2} + k^2)^3} - \frac{1}{k(\frac{1}{a^2} + k^2)^2} \right]$$

$$= \frac{-32\pi i \varepsilon_{0z}}{(\pi a L)^{3/2}} \cdot \frac{k}{a(\frac{1}{a^2} + k^2)^3}$$

$$\therefore \; w = \int \frac{\pi e^2}{\hbar^2} \cdot \frac{\pi^2 \varepsilon_{0z}^2 \cdot 2^{10}}{(\pi a L)^3} \cdot \frac{k^2}{a^2(\frac{1}{a^2} + k^2)^6} \cdot \left(\frac{L}{2\pi\hbar} \right)^3 \mu \sqrt{2\mu E_K}$$

$$\cdot \delta[(\omega - \omega_{E_K E_1})/2] \, d\Omega_K \, dE_K$$

$$= \frac{e^2 \varepsilon_{0z}^2 \mu \cdot 2^{11}}{\pi^2 \cdot \hbar^4 a^5} \cdot \frac{2\mu E_K}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{(\frac{1}{a^2} + \frac{2\mu E_K}{\hbar^2})^6} \sqrt{2\mu E_K}$$

$$= \frac{e^2 \varepsilon_{0z}^2 \cdot 2^{11} \sqrt{2} \cdot \mu^{5/2} \cdot a^7 \cdot \hbar^6}{\pi^2} \cdot \frac{E_K^{3/2}}{(\hbar^2 + 2\mu a^2 E_K)^6}$$

其中 $E_K = \hbar\omega + E_1$

7. 一维运动的体系，从 $|m\rangle$ 态跃迁到 $|n\rangle$ 态所相应的振子强度（oscillator strength）定义为：

$$f_{nm} = \frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar} |\langle n|x|m\rangle|^2$$

μ 为粒子质量，求证

$$\sum_n f_{nm} = 1 \quad (\sum_n \text{ 指对一切能量本征态求和})$$

（Thomas－Reiche－Kuhn 求和规则）

〔证〕 $\sum_n f_{nm}$

$$= \frac{2\mu}{\hbar^2} \sum_n (E_n - E_m) |\langle n|x|m\rangle|^2$$

$$= \frac{2\mu}{\hbar^2} \sum_n (\langle m|Hx|n\rangle\langle n|x|m\rangle - \langle m|xH|n\rangle\langle n|x|m\rangle)$$

$$= \frac{2\mu}{\hbar^2} \langle m|xHx - x^2H|m\rangle$$

$$=<m|x^2\frac{d^2}{dx^2}-x\frac{d^2}{dx^2}x|m>$$

$$=<m|m>-<m|x\frac{d}{dx}|m>-<m|\frac{d}{dx}x|m>$$

$$=1\cdot\frac{i}{\hbar}<m|xp_x+p_xx|m>$$

$$=1$$

（因 xp_x+p_xx 是厄密算符，$\frac{i}{\hbar}<m|xp_x+p_xx|m>$ 为纯虚数，但 $\sum_n f_{nm}$ 总是实数，$\therefore <m|xp_x-p_xx|m>$ 必为零）

注：$<m|Hx^2-x^2H|m>$

$$=\frac{1}{2\mu}<m|p_x^2x^2-x^2p_x^2|m>$$

$$=\frac{1}{2\mu}<m|p_x(xp_x-i\hbar)x-x^2p_x^2|m>$$

$$=\frac{1}{2\mu}<m|-i\hbar p_xx+p_xx(xp_x-i\hbar)-x(p_xx+i\hbar)p_x|m>$$

$$=\frac{1}{2\mu}<m|-i\hbar p_xx-i\hbar p_xx-i\hbar xp_x+(p_xx-xp_x)xp_x|m>$$

$$=\frac{-i\hbar}{\mu}<m|p_xx+xp_x|m>$$

$$=0$$

$\therefore\ <m|p_xx+xp_x|m>=0$

8\. (1) 证明 $[(H,e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}),e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}]=-p_0^2/\mu$

其中 $H=p^2/2\mu+V(\vec{r})$

(2) 证明 $\sum_n(E_n-E_m)\cdot(|<n|e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|m>|^2$

$$+|<m|e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|n>|^2)$$

$$=p_0^2/\mu$$

其中 $H|n>=E_n|n>$

(3) 在偶极近似下，上述关系式将回到

Thomas — Reich — Kuhn 求和规则

〔证〕：(1) $[(H, e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}), e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}]$

$$= 2H - e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar} H e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar} - e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar} H e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}$$

$$= \frac{p^2}{\mu} - e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}\frac{p^2}{2\mu}e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar} - e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}\frac{p^2}{2\mu}e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}$$

$$= \frac{p^2}{\mu} - \frac{(\vec{p}+\vec{p}_0)^2}{2\mu} - \frac{(\vec{p}-\vec{p}_0)^2}{2\mu}$$

$$= -p_0^2/\mu$$

(2) $\sum_n (E_n - E_m)(|\langle n|e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|m\rangle|^2 + |\langle m|e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}}|n\rangle|^2)$

$$= \langle m|e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar} H e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|m\rangle - \langle m|e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar} H|m\rangle$$

$$+ \langle m|e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar} H e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|m\rangle - \langle m|H e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}\cdot e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|m\rangle$$

$$= \langle m|e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}(H, e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}]|m\rangle$$

$$- \langle m|(H, e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}] e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|m\rangle$$

$$= -\langle m|((H, e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}), e^{-i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}]|m\rangle$$

$$= p_0^2/\mu$$

(3) 显然，关系式

$$\sum_n (E_n - E_m)[|\langle n|e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|m\rangle|^2 + |\langle m|e^{i\vec{p}_0\cdot\vec{r}/\hbar}|n\rangle|^2]$$

在偶极近似下为：

$$\sum_n (E_n - E_m)[|\frac{1}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\langle n|\vec{r}|m\rangle|^2 + |\frac{1}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\langle m|\vec{r}|n\rangle|^2]$$

$$= \sum_n (E_n - E_m)\frac{1}{3}\cdot\frac{p_0^2}{\hbar^2}(|\langle n|\vec{r}|m\rangle|^2 + |\langle m|\vec{r}|n\rangle|^2)$$

$$= \sum_n \frac{2p_0^2\omega_{nm}}{3\hbar}|\langle n|\vec{r}|m\rangle|^2$$

$$= \frac{p_0^2}{3\mu}\sum_n \frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar}((|\langle n|X|m\rangle|^2 + |\langle n|Y|m\rangle|^2$$

$$+ |\langle n|Z|m\rangle|^2)$$

$$=\frac{P_0^2}{\mu}\sum_n\frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar}|\langle n|x|m\rangle|^2$$

$$=\frac{P_0^2}{\mu}$$

$$\therefore\quad\sum_n\frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar}|\langle n|x|m\rangle|^2$$

$$=1$$

第十二章　11　多粒子体系

1. 试用变分法求一维谐振子的基态波函数和能量。

提示：试探波函数取为$e^{-\lambda x^2}$，λ是待定参数。

〔解〕：一维谐振子哈密顿量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2$$

$$\therefore\quad\langle\psi|H|\psi\rangle=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}(4\lambda^2x^2e^{-2\lambda x^2}-2\lambda e^{-2\lambda x^2})dx$$

$$+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2\lambda x^2}dx$$

$$=\frac{\hbar^2}{4\mu}\sqrt{2\pi\lambda}+\frac{1}{16\lambda^2}\mu\omega_0^2\sqrt{2\pi\lambda}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2\lambda x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}}$$

因此，$E(\lambda)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\lambda+\frac{1}{8\lambda}\mu\omega_0^2$

由　$dE(\lambda)/d\lambda=0$得

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}-\frac{1}{8\lambda^2}\mu\omega_0^2=0$$

$\lambda_0=\mu\omega_0/2\hbar$　即得：基态能量$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$

基态波函数 $\psi_0=\left(\frac{\mu\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{\mu\omega_0}{2\hbar}x^2}$

这与精确解完全一致

设氢原子的基态试探波函数取为

$$\psi(\lambda,r)=Ne^{-\lambda(r/a)^2}\qquad(a=\hbar^2/\mu e^2)$$

N 为归一化常数，λ 为变分参数。（注意：与三维各向同性谐振子的基态波函数形式相同）。求基态能量，与精确解比较。

解： 氢原子的哈密顿量为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}-\frac{e^2}{r}$$

$$\therefore\ \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{4\lambda^2N^2}{a^4}\int_0^\infty e^{-2\lambda\left(\frac{r}{a}\right)^2}r^4drd\Omega\right.$$

$$-\frac{6\lambda N^2}{a^2}\int_0^\infty e^{-2\lambda\left(\frac{r}{a}\right)^2}r^2drd\Omega$$

$$\left.-e^2N^2\int_0^\infty e^{-2\lambda\left(\frac{r}{a}\right)^2}rdrd\Omega\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{3\lambda}{a^2}-\frac{6\lambda}{a^2}\right)-\frac{a^2e^2}{4\lambda}N^2\cdot4\pi$$

而 $N^2=\frac{16\lambda^{3/2}}{a^3\sqrt{2\pi}}\cdot\frac{1}{4\pi}$

从而得 $E(\lambda)=\frac{3\lambda\hbar^2}{2\mu a^2}-\frac{4e^2}{a\sqrt{2\pi}}\lambda^{1/2}$

根据变分原理，基态能量相应于 $E(\lambda)$ 的极小值，于是有

$$\frac{dE(\lambda)}{d\lambda}=0,\quad\frac{3\hbar^2}{2\mu a^2}=\frac{2e^2}{a\sqrt{2\pi\lambda}}$$

$$\therefore\ \lambda=8/9\pi$$

于是我们可得 $E_1=-\frac{4e^2}{3\pi a}$，而精确解为 $E_1^e=-\frac{e^2}{2a}$

∴ 变分的值比精确值略大

5. 设在氘核中，质子和中子的作用表成

$$V(r)=-Ae^{-r/a}\quad (A=32\text{MeV},\ a=2.2\cdot 10^{-13}\text{cm})$$

试求氘核相对运动波函数为 $R(r)=Ce^{-\lambda r/2a}$，λ 为变分参数，C 为归一化常数：$C=\sqrt{\lambda^3/2a^3}$，$\int_0^\infty R^2(r)r^2dr=1$，用变分法计算氘核的基态能量。

[解]：∵ 氘核的哈密顿量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}-Ae^{-r/a}$$

其中 $\mu=m_p m_n/(m_p+m_n)$

在基态，其角动量为零，∴ $\psi_0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R(r)$

$$E(\lambda)=\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle=\langle R|H|R\rangle$$

$$=-C^2\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\int_0^\infty\left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2e^{-\lambda r/a}r^2dr\right.$$

$$\left.-\int_0^\infty\frac{\lambda}{a}e^{-\lambda r/a}r\,dr\right]-AC^2\int_0^\infty e^{-(\lambda+1)r/a}r^2dr$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}C^2\left(\frac{a}{2\lambda}-\frac{a}{\lambda}\right)-2AC^2\left(\frac{a}{\lambda+1}\right)^3$$

$$=\frac{\hbar^2}{8\mu a^2}\lambda^2-A\left(\frac{\lambda}{\lambda+1}\right)^3$$

由 $dE(\lambda)/d\lambda=0$ 得：$\frac{\hbar^2}{4\mu a^2}\lambda-3A\frac{\lambda^2}{(\lambda+1)^4}=0$

$$\frac{(\lambda+1)^4}{\lambda}=\frac{12A\mu a^2}{\hbar^2}=22.4\qquad \lambda=1.34$$

∴ 基态能量为 $\frac{\hbar^2}{8\mu a^2}(1.34)^2-A\left(\frac{1.34}{2.34}\right)^3\approx 2.17\text{ MeV}$

6. 平面转子的转动惯量 I，电偶极矩为 D，设沿 x 方向有电场 $\mathcal{E}$，薛定谔方程为

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\theta^2}-D\mathcal{E}\cos\theta\right)\psi=E\psi$$

θ是转子与x轴的夹角，设试探波函数为

$$\psi = A + B\cos\theta + C\sin\theta$$

求转子最低能级上界。

解：$E(A,B,C) = N^2 \langle \psi | -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\theta^2} - D\varepsilon\cos\theta | \psi \rangle$

$$= N^2 \left[\frac{\pi\hbar^2}{2I}(B^2+C^2) - 2\pi D\varepsilon AB \right]$$

而 $N^2 = \frac{1}{\pi(2A^2+B^2+C^2)}$

$$\therefore \quad E(A,B,C) = \frac{1}{2A^2+B^2+C^2}\left[\frac{\hbar^2}{2I}(B^2+C^2) - 2D\varepsilon AB \right] \qquad (1)$$

根据变分原理，对A、B、C分别求极小值

$$\begin{cases} \frac{\partial E(A,B,C)}{\partial A} = 0 \\ \frac{\partial E(A,B,C)}{\partial B} = 0 \\ \frac{\partial E(A,B,C)}{\partial C} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{I}(B^2+C^2)A + (2A^2-B^2-C^2)BD\varepsilon = 0 & (1') \\ \frac{\hbar^2}{I}A^2B + (B^2-2A^2-C^2)AD\varepsilon = 0 & (2') \\ (\frac{\hbar^2}{I}A + BD\varepsilon)AC = 0 & (3') \end{cases}$$

要使(3')成立，有三种情况：

(1) 当$A=0$，则要(1')成立，必须$B=0$

于是有界 $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\theta$

相应 $E = \frac{\hbar^2}{2I}$

(2) 当$C=0$，这时如A为0，即由(1')，必得$B=0$，这不合适。

当$C=0$，$B=0$，由(2')可导出$A=0$，所以不合适。

因此，当$C=0$，A、B都不取零

由(1')、(2')可得

$$\frac{\hbar^2}{I}AB - (2A^2-B^2)D\varepsilon = 0$$

有解 $B=\frac{-\hbar^2/I \pm \sqrt{\hbar^4/I^2+8D^2\varepsilon^2}}{2D\varepsilon}A$ (4)

代入(1)式得：

$$E=\frac{\hbar^2}{2I}\mp\frac{\sqrt{\hbar^4/I^2+8D^2\varepsilon^2}}{2+(\hbar^2/I\mp\sqrt{\hbar^4/I^2+8D^2\varepsilon^2})^2/4D^2\varepsilon^2}$$

(3) 如 $\frac{\hbar^2}{I}A+BD\varepsilon=0$

代入(1)式，得 $A=0$，即为①的情况。

所以，根据上述讨论可得出基态的最低上界为：

$$E=\frac{\hbar^2}{2I}-\sqrt{\hbar^4/I^2+8D^2\varepsilon^2}\Big/\left(2+(\hbar^2/I-\sqrt{\hbar^4/I^2+8D^2\varepsilon^2})^2/4D^2\varepsilon^2\right)$$

5、处于基态的氢原子，受到沿Z轴方向的均匀电场ε的作用，试用变分法计算其极化率。试将波函数取为 $(1+\lambda Z)\psi_{100}$，λ为变分参数，设电场ε较弱，计算过程略去ε的高次项

[解]：由哈密顿量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{L^2}{2\mu r^2}-\frac{e^2}{r}-e\varepsilon r\cdot\cos\theta$$

$$=H_0-e\varepsilon r\cos\theta$$

试探波函数 $\psi=N(1+\lambda Z)\psi_{100}$

我们可得：

$$E(\lambda)=\langle\psi|H|\psi\rangle$$

$$=N^2(\langle\psi_{100}|H|\psi_{100}\rangle+\lambda\langle\psi_{100}|ZH|\psi_{100}\rangle$$

$$+\lambda\langle\psi_{100}|HZ|\psi_{100}\rangle+\lambda^2\langle\psi_{100}|ZHZ|\psi_{100}\rangle)$$

$$=N^2(E_1-e\varepsilon\langle\psi_{100}|Z|\psi_{100}\rangle+\lambda E_1\langle\psi_{100}|Z|\psi_{100}\rangle$$

$$-\lambda e\varepsilon\langle\psi_{100}|Z^2|\psi_{100}\rangle+\lambda E_1\langle\psi_{100}|Z|\psi_{100}\rangle$$

$$-\lambda e\varepsilon\langle\psi_{100}|Z^2|\psi_{100}\rangle+\lambda^2\langle\psi_{100}|ZH_0Z|\psi_{100}\rangle$$

$$-\lambda^2 e\varepsilon\langle\psi_{100}|Z^3|\psi_{100}\rangle)$$

显然 $\langle\psi_{100}|z|\psi_{100}\rangle=\langle\psi_{100}|z^3|\psi_{100}\rangle=0$

$$\langle\psi_{100}|z^2|\psi_{100}\rangle=a^2\quad(\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}e^{-r/a},\ a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2})$$

$$\langle\psi_{100}|zHz|\psi_{100}\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}\langle\psi_{100}|z\frac{d}{dz}|\psi_{100}\rangle+\langle\psi_{100}|z^2H_0|\psi_{100}\rangle$$

$$=\frac{\hbar^2}{2\mu}+a^2E_1=0$$

而 $N^2\int(1+\lambda z)\psi_{100}^*(H\lambda z)\psi_{100}d\tau$

$=N^2(1+\lambda^2a^2)$

$=1$

$\therefore\quad N^2=\frac{1}{1+a^2\lambda^2}$

于是 $E(\lambda)=\frac{-1}{1+a^2\lambda^2}(\frac{e^2}{2a}+2e\varepsilon a^2\lambda)$

由 $dE(\lambda)/d\lambda=0$，可得 $2\varepsilon a^3\lambda^2+e\lambda-2\varepsilon a=0$

$$\therefore\quad\lambda=\frac{-e\pm\sqrt{e^2+16\varepsilon^2a^4}}{4\varepsilon a^3}$$

∵能量最低，则取 $\lambda_0=\frac{-e+\sqrt{e^2+16\varepsilon^2a^4}}{4\varepsilon a^3}$

$$\approx\frac{2a\varepsilon}{e}$$

$$E(\lambda_0)=\frac{-1}{1+\frac{4a^4\varepsilon^2}{e^2}}(\frac{e^2}{2a}+4a^3\varepsilon^2)$$

$$\approx-(\frac{e^2}{2a}+2a^3\varepsilon^2)$$

∴而得极化率 $\chi=4a^3=4\cdot(5.293)^3\cdot10^{-27}\ cm^3$

$$=5.93\cdot10^{-25}\ cm^3$$

6. 有一个一维非简谐振子 $H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\lambda x^4$ 处于基态，试用简谐振子的波函数

$$\psi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

为试探波函数，a为变分参数，求基态能量。

[解]: $E(a)=\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{a}{\pi^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a^2x^2}(a^4x^2-a^2)dx$$

$$+\frac{a\lambda}{\pi^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a^2x^2}x^4dx$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{a}{\pi^{1/2}}\left(\frac{a}{2}\pi^{1/2}-a\pi^{1/2}\right)+\frac{a\lambda}{\pi^{1/2}}\cdot\frac{3}{4a^5}\pi^{1/2}$$

$$=\frac{\hbar^2}{4m}a^2+\frac{3}{4a^4}\lambda$$

相应于$E(a)$极小值的a_0为

$$a_0=\left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/6}$$

∴ 基态能量 $E(a_0)=\frac{3^{4/3}}{4}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}\lambda^{1/3}$

$$\approx 1.081\cdot\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}\lambda^{1/3}$$

严格数值积分结果为$1.060\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}\lambda^{1/3}$，误差2%

7. 设粒子的势能函数$V(x,y,z)$是坐标的n次齐次函数，即

$$V(\lambda x,\lambda y,\lambda z)=\lambda^n V(x,y,z)$$

试用变分法证明：在束缚态下，动能T及势能V的平均值满足下列关系

$$2\overline{T}=n\overline{V}\quad(\text{维里定理})$$

(证): 设粒子处于束缚态$\psi(x,y,z)$（已归一）

则 $\overline{T}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int\psi^*(x,y,z)\nabla_r^2\psi(x,y,z)d\tau$

$$\overline{V}=\int\psi^*(x,y,z)V(x,y,z)\psi(x,y,z)d\tau$$

$$E=\overline{T}+\overline{V}$$

作尺度变换 $\vec{r}' = \lambda \vec{r}$

这时波函数 $\psi_\lambda(x,y,z) = \lambda^{3/2}\psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)$ （$\psi_\lambda(x,y,z)$ 是归一化）

于是我们有：

$$\bar{T}_\lambda = \int \psi_\lambda^*(x,y,z)\nabla_r^2\psi_\lambda(x,y,z)\,d\tau$$
$$= \int \psi^*(\lambda x, \lambda y, \lambda z)\nabla_{r'}^2\psi(x',y',z')\,d\tau'$$
$$= \lambda^2 \bar{T}$$

~~同样有~~ $\bar{V}_\lambda = \lambda^{-n}\bar{V}$

$$\therefore \quad E(\lambda) = \lambda^2\bar{T} + \lambda^{-n}\bar{V}$$

当 $\lambda=1$ 时，波函数(1)即回到粒子所处的状态，所以

$dE_\lambda/d\lambda\big|_{\lambda=1} = 0$ （即取极小值）

于是 $2\bar{T} - n\bar{V} = 0$ 从而证得

8. 设 $H = H_0 + H_1$，微扰 H_1 是正定的。用变分法证明：H_0 的基态能量低于 H 的基态能量。利用此结论，证明在中心力场中，束缚粒子的基态必为 S 态。

[证]：设 ψ_0 和 ψ 分别为 H_0 和 H 的基态波函数（已归一化），E_0 和 E 是相应的能量，则

$$E = \langle\psi|H|\psi\rangle$$
$$= \langle\psi|H_0|\psi\rangle + \langle\psi|H_1|\psi\rangle$$

由变分原理知：H_0 在 ψ_0 中最小，所以

$$\langle\psi|H_0|\psi\rangle > \langle\psi_0|H_0|\psi_0\rangle$$

而根据假设，H_1 是正定的，即 $\langle\psi|H_1|\psi\rangle \geq 0$

从而证得 $E > \langle\psi_0|H_0|\psi_0\rangle = E_0$

对于中心力场

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+V(r)+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}$$

显然 $\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}$ 是正定的，在S态它为0，是最小值，而且H的基态能量必高于或等于

$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+V(r)$ 的基态能量，所以H的基态能量为S态。

9、设粒子在吸引的中心场 $V(r)=-Ar^n$ （$n\geq -1$ 参数）中运动，选 $R(r)=Ne^{-\beta r}$ 为试探波函数，β 为变分参数，求解其基态能量。对 $n=-1$ $(A>0)$，库仑场）及 $n=2$ $(A<0$ 谐振子势）与严格解进行比较。

[解]：径向波函数的归一化常数N为

$$N^2=1/\int_0^\infty e^{-2\beta r}r^2dr=1/4\beta^3$$

而

$$E(\beta)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\beta^2+\frac{\hbar^2}{\mu}\beta N^2\int_0^\infty e^{-2\beta r}r\,dr$$

$$-AN^2\int_0^\infty e^{-2\beta r}r^{n+2}dr$$

$$=\frac{\hbar^2}{2\mu}\beta^2-\frac{A}{2(2\beta)^n}(n+2)!$$

由 $\frac{\partial E}{\partial\beta}=$ ，得 $\frac{\hbar^2}{\mu}\beta+n\frac{A}{(2\beta)^{n+1}}(n+2)!=0$

$$\therefore\quad \beta_0=\frac{1}{2}\left[-\frac{2\mu nA}{\hbar^2}(n+2)!\right]^{1/(n+2)}$$

可是

$$E(\beta_0)=\frac{\hbar^2}{8\mu}\left[-\frac{2\mu nA}{\hbar^2}(n+2)!\right]^{2/(n+2)}-\frac{A}{2}(n+2)!$$

$$\cdot\left[-\frac{2\mu nA}{\hbar^2}(n+2)!\right]^{-n/(n+2)}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{4\mu}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{n}\right)\left[-\frac{2\mu n A(n+2)!}{\hbar^2}\right]^{2/(n+2)}$$

当 $n=1$ 时. $E(\beta)=-\frac{\mu A^2}{2\hbar^2}=-\frac{A}{2a}$ $\left(a=\frac{\hbar^2}{\mu A}\right)$

所以与精确解完全一致。

当 $n=2$ 时. $E(\beta)=\frac{\hbar^2}{4\mu}\sqrt{\frac{-4A\mu 4!}{\hbar^2}}$

$$=\sqrt{3}\,\hbar\omega$$

$$=\frac{2}{\sqrt{3}}\,\frac{3}{2}\hbar\omega$$

是精确解的1.15倍。

10、设粒子处于势井 $V(r)=-V_0e^{-r/a}$ 中，$\frac{\hbar^2}{mV_0a^2}=\frac{3}{4}$，$m$ 为粒子质量，取试探波函数为 $e^{-\lambda r}$，求它最低能级的上界。

〔解〕：根据变分原理，我们先求

$$E(\lambda)=N^2\int_0^\infty e^{-\lambda r}He^{-\lambda r}r^2dr \quad (N\text{是对}r\text{的归一化}$$

常数)

$$=N^2\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\lambda^2\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr-2\lambda\int_0^\infty e^{-2\lambda r}rdr\right)\right.$$

$$\left.-V_0\int_0^\infty e^{-\left(\frac{1}{a}+2\lambda\right)r}r^2dr\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\lambda^2+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{2\lambda}N^2-\frac{2V_0}{\left(\frac{1}{a}+2\lambda\right)^3}N^2$$

而 $N^2=1/\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr=4\lambda^3$

$$\therefore\ E(\lambda)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\lambda^2-\frac{8V_0}{\left(\frac{1}{a}+2\lambda\right)^3}\lambda^3$$

根据变分原理，相应于最低能级的 λ_0，可由下式给出：

$$\left.\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}\right|=0$$

$$\frac{\hbar^2}{\mu}-\frac{24V_0}{a\left(\frac{1}{a}+2\lambda_0\right)^4}\lambda_0=0 \qquad \text{或}\ \lambda_0=0$$

于是 $\dfrac{24\lambda_0}{a^3(\frac{1}{a}+2\lambda_0)^4}=\dfrac{3}{4}$

$$\frac{2\lambda_0 a}{(1+2\lambda_0 a)^4}=\frac{1}{2^4}\qquad \therefore 2\lambda_0 a=1,\ \lambda_0=\frac{1}{2a}$$

从而得 $E(\lambda_0)=-\dfrac{V_0}{32}$　　而 $\lambda=0$ 时 $E(\lambda=0)=0$

所以最低能级上界为 $-V_0/32$

11、粒子在吸引的 Yukawa 势井中运动

$V(r)=-V_0 e^{-r/a}/(r/a)$，$(V_0>0, a>0)$

用试探波函数 $R(r)=e^{-\beta r/a}$，求解其基态能量。

β 为无量纲的变分参数，$\beta>0$

〔解〕 径向波函数归一化系数 N 由下式给出

$$N^2\int_0^\infty e^{-2\beta r/a}\, r^2 dr=N^2\frac{a^3}{4\beta^3}=1$$

$\therefore\quad N^2=4\beta^3/a^3$

而 $\quad E(\beta)=\langle\psi|H|\psi\rangle$

$$=N^2\Big[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\beta}{a}\right)^2\int_0^\infty e^{-2\beta r/a}\, r^2 dr$$

$$+\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\beta}{a}\int_0^\infty e^{-2\beta r/a}\, r\,dr$$

$$-V_0 a\int_0^\infty e^{-(2\beta+1)r/a}\, r\,dr\Big]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\beta}{a}\right)^2+\frac{\hbar^2}{4\mu}\frac{a}{\beta}N^2-V_0 a\left(\frac{a}{2\beta+1}\right)^2N^2$$

$$=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\beta}{a}\right)^2-V_0\left(\frac{2\beta}{2\beta+1}\right)^2\beta$$

于是 $\dfrac{\partial E(\beta)}{\partial\beta}=\dfrac{\hbar^2}{\mu a^2}\beta-4V_0\beta^2\dfrac{2\beta+3}{(2\beta+1)^3}=0$

令 $\frac{\hbar^2}{2\mu a^2 V_0}=A>0 \qquad 2\beta=x$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\left[\frac{\beta^3}{(2\beta+1)^2}\right]$$

$$=\frac{3\beta^2}{(2\beta+1)^2}+\frac{\beta^3(-2)\cdot 2}{(2\beta+1)^3}$$

$$=\frac{1}{(2\beta+1)^3}\left[3\beta^2(2\beta+1)-4\beta^3\right]$$

$$=\frac{1}{(2\beta+1)^3}\left[2\beta^3+3\beta^2\right]$$

$$=\frac{\beta^2}{(2\beta+1)}(2\beta+3)$$

则 $\quad Ax^3+(3A-1)x^2+3(A-1)x+A=0$

根据具体问题所给数据 V_0 及入，求出 A，解上述三次方程求出 x 的正实根，即求出 $\beta=x/2$ 的正实根，代入 $E(\beta)$ 其中极小值即基态能量。

12. 设试探波函数与本征函数 ψ_E 差一个小量，即：

$$\varphi=\psi_E+\varepsilon f \qquad (\varepsilon\ll 1)$$

ψ_E 及 f 已归一化，证明 $\overline{H}=(\varphi,\hat{H}\varphi)$ 与本征值 E 之差为 $O(\varepsilon^2)$

〔证〕: $\quad E(\varepsilon)=\langle\varphi|H|\varphi\rangle/\langle\varphi|\varphi\rangle$

$$=\left[E+\varepsilon E\int(\psi_E^*f+f^*\psi_E)d\tau+\varepsilon^2\int f^*\hat{H}f\,d\tau\right]/\left[1+\varepsilon\int(\psi_E^*f+f^*\psi_E)d\tau+\varepsilon^2\right]$$

$$=(E+\varepsilon A\cdot E+\varepsilon^2 B)/(1+\varepsilon A+\varepsilon^2)$$

其中 $\quad A=\int(\psi_E^*f+f^*\psi_E)d\tau, \qquad B=\int f^*Hf\,d\tau$

从而得: $\quad E(\varepsilon)=E+(B-E)\varepsilon^2+O(\varepsilon^3)=E+O(\varepsilon^2)$

13. 设哈密顿量 $\hat{H}$ 的最低 $(n-1)$ 个本征函数已知，写出变分法试探波函数的形式，用以求出第 n 条能级的上界。

〔解〕：这一试探函数不能含有最低的 $(n-1)$ 个本征函数，否则变分后，必取其中最低的本征函数作为主要部分。

先任取一波函数 $\psi(x)$（假设已归一）而 ψ_m 为 $(n-1)$ 个最低的本征函数，则试探波函数为

$$\Psi(x)=\psi(x)-\sum_{m=1}^{n-1}(\psi_m,\psi(x))\psi_m$$

其中 $\hat{H}\psi_m=E_m\psi_m \qquad m=1,2,\cdots n-1$

这个波函数显然与所有 ψ_m $(m=1,2,\cdots n-1)$ 正交，即没有它们作为分量，于是

$$E(x)=\frac{[\langle\psi(x)|H|\psi(x)\rangle-\sum_{m=1}^{n-1}|(\psi_m,\psi(x))|^2E_m]}{[1-\sum_{m=1}^{n-1}|(\psi_m,\psi_x)|^2]}$$

由 $E(x)$ 对 x 变分取极小值，可给出第 n 条能级的上界。

14. 在 Thomas-Fermi 模型下，试用电子密度 $\rho(r)$ 表述原子能量，度：原子模型电 忆

〔解〕：在相空间中，$(2\pi\hbar)^3$ 的体积元相应一个态，而每一个态可填两个自旋相反的电子。因此，在 dV 体积中电子数为

$$dN(r)=dV\cdot 2\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$=\frac{k_f^3}{3\pi^2}dV$$

∴电子密度为 $\rho(r)=\dfrac{k_f^3}{3\pi^2}$ (1)

由于相空间体积元 $d^3p\cdot dV$ 中填有动量为 $\vec{p}$ 的电子数为

$$2\frac{d^3p\,dV}{(2\pi\hbar)^3}$$

∴动能 $$T=\int\frac{\hbar^2k^2}{2m}\cdot\frac{2k^2\,dk\,d\Omega}{(2\pi)^3}dV$$

$$=\frac{\hbar^2}{10m\pi^2}\int k_F^5\,dV$$

$$=\frac{\hbar^2(3\pi^2)^{5/3}}{10m\pi^2}\int\rho_{(\vec{r})}^{5/3}\,dV \qquad (2)$$

电子在原子核的电场下，其库仑能为

$$-\int\frac{Z\rho(\vec{r})e^2}{r}dV \qquad (3)$$

电荷元为 $\rho(\vec{r})dV$ 和 $\rho(\vec{r}')dV'$ 之间的库仑能为

$$\frac{e^2\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')dVdV'}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

因此，总能量（电子间）为

$$\frac{e^2}{2}\int\frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')dvdv'}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \qquad (4)$$

于是，在 Thomas--Fermi 模型下，电子密度为 $\rho(\vec{r})$ 时则原子的能量为

$$E=\frac{(3\pi^2)^{5/3}\hbar^2}{10m\pi^2}\int\rho_{(\vec{r})}^{5/3}dV-Ze^2\int\frac{\rho(\vec{r})}{r}dV$$
$$+\frac{e^2}{2}\int\frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')dVdV'}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \qquad (5)$$

利用上题结果，证明：对于 Thomas —Fermi 模型，维里（Virial）定理成立

解：根据上题：

$$E=\frac{(3\pi^2)^{5/3}\hbar^2}{10m\pi^2}\int\rho_{(\vec{r})}^{5/3}dV-Ze^2\int\frac{\rho(r)}{r}dV$$
$$+\frac{e^2}{2}\int\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')dvdv'/|\vec{r}-\vec{r}'|$$

令 $\vec{r}=\lambda\vec{r}_1$

$$\therefore\quad E(\lambda)=\frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10m\pi^2}\int\frac{\rho^{2/3}_{(\vec{r}_1)}}{\lambda^2}dq-\frac{ze^2}{\lambda}\int\frac{dq}{r_1}+\frac{1}{2\lambda}\int\frac{dq\,dq'}{|\vec{r}_1-\vec{r}_1'|}$$

$$=\frac{1}{\lambda^2}\bar{T}+\frac{1}{\lambda}\bar{V}$$ (其中 $dq=\rho_{(\vec{r})}dV$，它不受 $\vec{r}=\lambda\vec{r}_1$ 变换影响)

$$\left.\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=1}=0$$ (因为 $\lambda=1$ 是真正能量，所以必须一级导数为0)

即得：$-2\bar{T}-\bar{V}=0$

从而证得：$2\bar{T}=-\bar{V}$

16、利用维里定理，证明：在中性原子的 Thomas—Fermi 模型下，电子间的库仑能 $=\frac{1}{7}$ 电子与原子核之间库仑能，

〔证〕：根据 Thomas—Fermi 模型（用原子单位 $e=m=\hbar=1$）

$$\rho_{(r)}=\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2z}{r}\varphi_{(r)}\right)^{3/2}$$

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}=\begin{cases}\frac{1}{r}\sum\limits_n\left(\frac{r'}{r}\right)^n P_n(\cos\theta) & r>r'\\ \frac{1}{r'}\sum\limits_n\left(\frac{r}{r'}\right)^n P_n(\cos\theta) & r<r'\end{cases}$$

$$\therefore\quad T=\frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2}\int\rho_{(r)}\cdot\frac{1}{(3\pi^2)^{2/3}}\cdot\frac{2z}{r}\varphi_{(r)}\cdot 4\pi r^2dr$$

$$=\frac{12\pi}{5}z\int\rho_{(r)}\varphi_{(r)}r\,dr$$

电子与原子核之间库仑能为

$$V_{e-N}=-4\pi z\int\rho_{(r)}r\,dr$$

电子之间库仑能为

$$V_{e-e}=\frac{4\pi}{2}\int\rho_{(r)}dV\left(\frac{1}{r}\int_0^r\rho_{(r')}r'^2dr'+\int_r^\infty\rho_{(r')}r'dr'\right)$$

$$=2\pi\int \rho_{(r)}dV\left(\frac{1}{r}\int_0^r \frac{(2Z)^{3/2}}{3\pi^2}\varphi^{3/2}_{(r')}r'^{\frac{1}{2}}dr'\right.$$

$$\left.+\int_r^\infty \frac{(2Z)^{3/2}}{3\pi^2}\varphi^{3/2}_{(r')}/r'^{\frac{1}{2}}dr'\right)$$

根据 Thomas—Fermi 模型 $\frac{d^2\varphi}{dx^2}=\frac{\varphi^{3/2}}{\sqrt{x}}$ （注意：$\varphi_{(0)}=1$, $\varphi'_{(\infty)}=0$）

$$r=\lambda x \qquad \lambda=\left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)^{1/3}$$

$$\therefore V_{e-e}=2\pi\frac{(2Z)^{3/2}}{3\pi^2}\int\rho_{(r)}dV\left(\frac{1}{r}\int_0^r\lambda^{3/2}\frac{d^2\varphi}{dr'^2}r'dr'\right.$$

$$\left.+\int_r^\infty\lambda^{3/2}\frac{d^2\varphi}{dr'^2}(dr')\right)$$

$$=2\pi\cdot\frac{(2Z)^{3/2}}{3\pi^2}\cdot\left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)^{1/2}\int\rho_{(r)}dV\left[\frac{1}{r}(r\varphi'_{(r)}-\varphi_{(r)})+\varphi_{(0)}\right.$$

$$\left.+\varphi'_{(\infty)}-\varphi'_{(r)}\right]$$

$$=2\pi Z\int\rho_{(r)}(1-\varphi_{(r)})r\,dr$$

$$\therefore\quad V=-2\pi Z\int\rho_{(r)}(1+\varphi_{(r)})r\,dV$$

根据维里定理 $\quad 2T=-V$

于是有 $\frac{24}{5}\pi Z\int\rho_{(r)}\varphi_{(r)}dr$

$$=2\pi Z\int\rho_{(r)}(1+\varphi_{(r)})r\,dV$$

$$\therefore\quad\int\rho_{(r)}\varphi_{(r)}r\,dr=\frac{5}{7}\int\rho_{(r)}r\,dr$$

从而有：$V_{e-e}=2\pi Z\int\left(\frac{5}{7}-1\right)\rho_{(r)}r\,dr$

$$=-\frac{1}{7}4\pi Z\int\rho_{(r)}r\,dr$$

$$=-\frac{1}{7}V_{e-N}$$

在 Thomas—Fermi 模型中，用无量纲函数 $\varphi_{(r)}$ 把电子密度 $\rho_{(r)}$ 表示出来。然后证明，包含有总电子数中有一定百分比的球的半径与 $Z^{-1/3}$ 成比例。

〔解〕：设球半径为r_0，其中含电子数为ΔZ，则

$$\Delta Z=4\pi\int_0^{r_0}\rho_{(r)}r^2dr$$

由Thomas—Fermi模型，$\rho_{(r)}=\frac{1}{3\pi^2}\left[\frac{2Z}{r}\varphi_{(r)}\right]^{3/2}$

$\therefore\ \Delta Z=\frac{4}{3\pi}(2Z)^{3/2}\int_0^{r_0}\varphi_{(r)}^{3/2}r^{1/2}dr$

令 $r=Z^{-1/3}x$

$\therefore\ \Delta Z=\frac{8\sqrt{2}}{3\pi}Z\int_0^{x_0}\varphi_{(x)}^{3/2}x^{1/2}dx$

从而有 $\frac{\Delta Z}{Z}=\frac{8\sqrt{2}}{3\pi}\int_0^{x_0}\varphi_{(x)}^{3/2}x^{1/2}dx$

若要求不同原子在一球体积中包含有总电子数中一定百分比

这就要求x_0为一常数，

而 $r_0=Z^{-1/3}x_0$

$\therefore\ r_0\propto Z^{-1/3}$。

18. 设原子核^8_4Be，可以看成两个α粒子（即^4_2He）组成，相对运动的轨道角动量量子数用L表示，证明L必需为偶数。（α粒子的自旋为0）

〔证〕：原子核^8_4Be的波函数可表为：

$$\Psi(\vec{r}_A,\vec{r}_B)=\Phi(\vec{r}_{AB})S_{AB}$$
$$=R(r_{AB})Y_{LM}(\theta,\varphi)S_{AB}$$

（$\vec{r}_A$，$\vec{r}_B$代表两个α粒子）

由于α粒子自旋为0，所以$S_{AB}=1$。当A、B两个α粒子交换时，相当于交换两个质子和二个中子，所以波函数应不变，

即 $\Psi(\vec{r}_A,\vec{r}_B)=\Psi(\vec{r}_B,\vec{r}_A)=(-1)^L R(r_{BA})Y_{LM}(\theta,\varphi)$

$$=R(r_{AB})Y_{LM}(\theta,\varphi)$$

$\therefore$ L必需取偶数。

19、比较 H_2，D_2，O_2，HD 诸分子的转动光谱线的强度变化规律（D 自旋为 $\hbar$，O 自旋为 0）

〔解〕：(1) H_2

由于 H 的自旋为 $\frac{1}{2}\hbar$，所以 H_2 可以有自旋为 1，0，$S=1$ 为对称的（有三个态，相应 $S_2=1,0,-1$）；$S=0$ 是反对称的（仅有一个态）

$$\therefore \quad \Psi_{H_2}=R_{(r)}Y_{IM}\varphi_{SS_2}$$

由于质子是费米子，交换其坐标，波函数变号：

$$\therefore \quad S=1 \text{ 时}, \quad I \text{ 为奇}$$

$$S=0 \text{ 时}, \quad I \text{ 为偶}$$

而跃迁不改变 S，所以反 S 相同的态可发生跃迁。

因此跃迁能量为 $\frac{\hbar^2}{2e}[I(I+1)-(I-2)(I-1)]$

$$=\frac{\hbar^2}{e}(2I-1)$$

∴谱线的最低能量是 $\frac{3\hbar^2}{e}$（$I=2\rightarrow I=0$）

而 I 为偶的是单态，I 为奇的是三重态，因此，H_2 的转动光谱线是从暗线开始，明暗交替，强度比为 3:1，线间能量为 $\frac{2\hbar^2}{e}$。

(2) D_2

由于 D 自旋为 $\hbar$，是玻色子，所以 D_2 的总自旋可为 2，1，0。当交换 D 时，波函数不变

$$\therefore \quad S=2,0 \text{ 时}, \quad I \text{ 为偶}$$

$$S=1 \text{ 时} \quad I \text{ 为奇}$$

谱线最低能量为 $\frac{3\hbar^2}{e}$（$I=2\longrightarrow I=0$）

从明线开始，然后明暗交替（强度之比为 $(S+1)/S=2:1$），线间能量间隔为 $\frac{2\hbar^2}{e}$

(3) O_2

由于O自旋为零，所以O_2分子的自旋为0，交换氧的坐标，波函数不变，因此，只有I=偶的转动态。其转动光谱线的能量从$\frac{3\hbar^2}{\mathscr{I}}$开始，光谱线的间隔为$\frac{4\hbar^2}{\mathscr{I}}$，强度相同。

(4) HD

由于D自旋为$\hbar$，H的自旋为$\hbar/2$，所以HD的总自旋为$\frac{3}{2}\hbar$，$\frac{1}{2}\hbar$，由于H、D是不同的，所以它们的坐标交换并不要求对称或反对称，因此谱线的能量为

$$\frac{\hbar^2}{2\mathscr{I}}\{I(I+1)-(I-1)I\}=\frac{\hbar^2}{\mathscr{I}}I$$，最低的谱线能量为$\frac{\hbar^2}{\mathscr{I}}$，

谱线强度相同，间隔$\frac{\hbar^2}{\mathscr{I}}$，两条能级的跃迁实际上有必组态跃迁，因此很亮。

20. 设有两个全同粒子，处于一维谐振子势井中，彼此之间还有与相互距离成正比例的作用力，即位能为：

$$V(x_1,x_2)=\frac{1}{2}k(x_1^2+x_2^2)+\frac{1}{2}\alpha(x_1-x_2)^2\qquad(\alpha\ll k)$$

求体系的能量本征值及本征函数，按波函数的交换对称性分别讨论。

〔解〕：作变换 $\xi=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+x_2)$，$\eta=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_2)$

$$V(x_1,x_2)=V(\xi_1,\xi_2)=\frac{1}{2}k(\xi^2+\eta^2)+\alpha\eta^2$$

$$=\frac{1}{2}k\xi^2+\frac{1}{2}(k+2\alpha)\eta^2$$

而 $$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\eta}\right)^2+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{\partial}{\partial\eta}\right)^2\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)$$

此时波函数可以分离变数，因此，得

$$\psi_{nm}(\xi,\eta)=Ne^{-\frac{1}{2}(\alpha_1^2\xi^2+\alpha_2^2\eta^2)}H_n(\alpha_1\xi)H_m(\alpha_2\eta)$$

其中 $\alpha_1=\left(\frac{\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/4}$， $\alpha_2=\left[\frac{\mu(k+2\lambda)}{\hbar^2}\right]^{1/4}$，$\mu$ 为粒子质量。

相应的能量本征值为

$$E_{nm}=\left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2}\hbar\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)k^{1/2}+\left(m+\frac{1}{2}\right)(k+2\lambda)^{1/2}\right]$$

$$n, m=0, 1, 2\cdots$$

但由于它们是全同粒子，因此满足一定的统计规律。

若自旋为整数，是玻色子，所以波函数在两粒子坐标交换时不变。所以总的波函数为：

$$\Psi_{nmss_2}(\xi,\eta)=N_{nm}e^{-\frac{1}{2}(\alpha_1^2\xi^2+\alpha_2^2\eta^2)}\cdot H_n(\alpha_1\xi)\cdot$$

$$H_m(\alpha_2\eta)\cdot\varphi_{ss_2} \qquad (1)$$

若 m 为奇时，S 为奇；m 为偶时，S 为偶。

若自旋为半整数时，是费米子，所以两粒子坐标交换变号。

因此，若波函数为(1)式，则

当 m 为奇时，S 为偶，

m 为偶时，S 为偶。

第十三章 12. 准经典近似

1. 如图所示的势场中运动的粒子，量子化条件应表为：

$$\oint p\,dx=\left(n+\frac{3}{4}\right)h, \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{1}$$

如 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，$(x\geq0)$，问粒子能级如何表示？

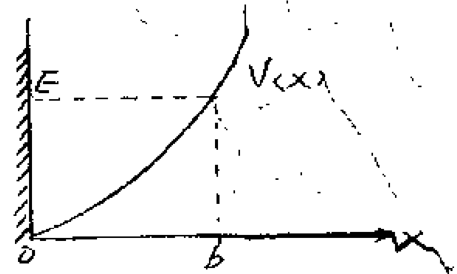


图 12·1

【解】：$V(x)\begin{cases}\text{缓变化函数} & (x>0)\\ \infty & (x\leq0)\end{cases}$ (2)

所以 $\psi\equiv0.\quad(x\leq0)$ (3)

当 $x>0$，用 W·K·B 波函数

$$\psi(x)=\frac{c}{\sqrt{p}}\sin\left(\int_0^x\frac{p\,dx}{\hbar}+\alpha\right)$$

$$=\frac{c}{\sqrt{p}}\sin\left(\int_0^x\frac{p\,dx}{\hbar}\right)\quad（保证\ \psi(0)=0，必须\ \alpha=0） \tag{4}$$

如从另一个转折点 b 出发，在势场中 $(x<b)$ 的 W·K·B 波函数表为

$$\psi(x)=\frac{c'}{\sqrt{p}}\sin\left(\int_x^b\frac{p\,dx}{\hbar}+\frac{\pi}{4}\right) \tag{5}$$

∴在 $(0,b)$ 之间，波函数的两个表示式能光滑地连接上的条件为

$$\int_0^x\frac{p\,dx}{\hbar}+\int_x^b\frac{p\,dx}{\hbar}+\frac{\pi}{4}=(n+1)\pi \qquad n=0,1,2,\cdots$$

即

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^b p\,dx=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi$$

或

$$\oint p\,dx=\left(n+\frac{3}{4}\right)h \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{6}$$

应用类似的论证，可求出无限深方势阱中粒子的量子化条件为

$$\oint p\,dx=nh \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{7}$$

在图 12·1 中，若 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2\quad(x>0)$，则

$$\oint p\,dx = 2\int_0^b \sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}\,dx \qquad b=\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \tag{8}$$

$$= 2m\omega\int_0^b \sqrt{b^2-x^2}\,dx$$

$$= 2m\omega\cdot\frac{1}{2}\left[x\sqrt{b^2-x^2}+b^2\sin^{-1}\frac{x}{b}\right]_0^b$$

$$= \frac{1}{2}\pi m\omega b^2$$

$$= \left(n+\frac{3}{4}\right)h \tag{9}$$

而 $E=\frac{1}{2}m\omega^2b^2=\frac{1}{\pi}\left(n+\frac{3}{4}\right)h\omega=\left(n+\frac{3}{4}\right)\cancel{2\hbar}\omega$

即 $E_n=\left(2n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n=0,1,2,\cdots)$

$$=\left(\frac{3}{2},\frac{7}{2},\frac{11}{2}\cdots\right)\hbar\omega \tag{10}$$

2、如 12.2 设

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

求粒子能量允许值

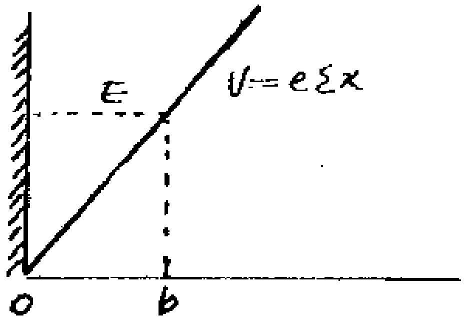


图 12.2

[解]：利用上题所得量子化条件：

$$\oint p\,dx=\left(n+\frac{3}{4}\right)h \qquad (n=0,1,2,\cdots)$$

即 $\int_0^b p\,dx=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar, \qquad b=\frac{E}{e\varepsilon}$

$$=\int_0^b\sqrt{2m(E-e\varepsilon x)}\,dx$$

$$=\sqrt{2me\varepsilon}\int_0^b\sqrt{b-x}\,dx$$

$$=\sqrt{2me\varepsilon}\cdot\frac{2}{3}b^{\frac{3}{2}}$$

$$=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar$$

平方得： $2me\varepsilon\cdot\frac{4}{9}b^3=\left(n+\frac{3}{4}\right)^2\pi^2\hbar^2$

$$b^3=\frac{9\pi^2\hbar^2}{8me\varepsilon}\left(n+\frac{3}{4}\right)^2$$

$$\therefore\ E = e\mathcal{E}b = e\mathcal{E}\cdot\left(\frac{9\pi^2\hbar^2}{8me\mathcal{E}}\right)^{\frac{1}{3}}\cdot\left(n+\frac{3}{4}\right)^{\frac{2}{3}}$$

即 $E_n = \frac{1}{2}\left(\frac{9\pi^2e^2\mathcal{E}^2\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}\left(n+\frac{3}{4}\right)^{\frac{2}{3}},\quad n=0,1,2,\cdots$

3、设在一维势阱中运动的粒子，处于較高激发能級 E_n。在准经典近似下，求其动能平均值的表示式。

〔解〕：粒子动能平均值表为

$$\overline{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_a^b \psi_n \frac{d^2}{dx^2}\psi_n\, dx \qquad (a, b \text{ 为转折点})$$

分部积分后得：

$$\overline{T} = \frac{\hbar^2}{2m}\int_a^b \left(\frac{d\psi_n}{dx}\right)^2 dx \tag{1}$$

在准经典近似下，$\psi_n(x)$ 用 W·K·B 波函数表示

$$\psi_n(x) = \frac{C_n}{\sqrt{P_n}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x P_n\, dx + \frac{\pi}{4}\right] \tag{2}$$

$$\frac{d\psi_n}{dx} = \frac{C_n\sqrt{P_n}}{\hbar}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x P_n dx + \frac{\pi}{4}\right] - \frac{1}{2}\frac{C_n}{P_n^{3/2}}\frac{dP_n}{dx}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x P_n dx + \frac{\pi}{4}\right]$$

对于高激发态，第二项远小于第一项，（因为 $\left|\frac{\hbar}{P_n^2}\frac{dP_n}{dx}\right| \ll 1$），

所以 $$\frac{d\psi_n}{dx} \approx \frac{C_n\sqrt{P_n}}{\hbar}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x P_n dx + \frac{\pi}{4}\right] \tag{3}$$

由于 $\cos^2\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x P_n dx + \frac{\pi}{4}\right]$ 是 x 的迅变函数，所以在 (1) 式求平均值中用平均值 $\frac{1}{2}$ 代替之。

$$\left(\because\ \overline{\cos^2\varphi} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi\, d\varphi = \frac{1}{2}\right)$$

因此 $$\overline{T} = \frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{d\psi_n}{dx}\right)^2 dx \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{C_n^2}{2\hbar^2}\int_a^b P\, dx$$

用量子化条件代入 $$= \frac{C_n^2}{4m}\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \tag{4}$$

剩下的问题是求 C_n^2。利用归一化条件

$$\int_a^b|\psi_n|^2dx=C_n^2\int_a^b\frac{dx}{P_n}\sin^2\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x P_n\,dx+\frac{\pi}{4}\right]$$

$$\approx\frac{C_n^2}{2}\int_a^b\frac{dx}{P_n}=1 \qquad (5)$$

而 $$\int_a^b P_n\,dx=\int_a^b\sqrt{2m(E_n-V(x))}\,dx=(n+1/2)\pi\hbar \qquad (6)$$

当n很大时，近似看成连续变化，对n求微商

$$m\frac{dE_n}{dn}\int_a^b\frac{dx}{\sqrt{2m(E_n-V)}}=\pi\hbar$$

即 $$\int_a^b\frac{dx}{P_n}=\pi\hbar/m\left(\frac{dE_n}{dn}\right) \qquad (7)$$

代入(5)式，求出

$$C_n^2\approx 2m\frac{dE_n}{dn}/\pi\hbar \qquad (8)$$

代入(4)式，求出

$$\overline{T}=\frac{1}{2}(n+1/2)\frac{dE_n}{dn} \qquad (9)$$

特例：1°谐振子 $E_n=(n+1/2)\hbar\omega$ $\quad \frac{dE_n}{dn}=\hbar\omega$

$$\therefore \quad \overline{T}=\frac{1}{2}(n+1/2)\hbar\omega=\frac{1}{2}E_n=\overline{V} \qquad (10)$$

与严格计算结果一致，与Viriol定理也一致。

2° 无限深方势阱，(9)式改为（参看第一题）

$$\overline{T}=\frac{1}{2}n\frac{dE_n}{dn} \qquad (11)$$

利用 $E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}$， $\quad \frac{dE_n}{dn}=\frac{\pi^2\hbar^2n}{ma^2}$

$$\therefore \quad \overline{T}=\frac{1}{2}n\frac{dE_n}{dn}=\frac{1}{2}n\frac{\pi^2\hbar^2n}{ma^2}=E_n \qquad (12)$$

$$\overline{V}=0$$

4. 设粒子在势场 $V(x)=ax^\gamma$（a、γ是常数）中运动，利用维里（Viriol）定理及准经典近似，求其能级公式。

〔解〕：按照维里定理，在所取势场形式下

$$2\bar{T}=\gamma\bar{V}$$

因此 $\quad E=\bar{T}+\bar{V}=\dfrac{2+\gamma}{\gamma}\bar{T}$ (2)

利用准经典近似结果（见上题），在 E_n 能级上（$n\gg1$）

$$\bar{T}=\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\frac{dE_n}{dn} \qquad (3)$$

代入(2)式

$$E_n=\frac{2+\gamma}{\gamma}\cdot\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\frac{dE_n}{dn}$$

即 $\quad \dfrac{dE_n}{E_n}=(\dfrac{2\gamma}{2+\gamma})\dfrac{dn}{n+1/2}=d\ln(n+1/2)^{\frac{2\gamma}{2+\gamma}}$

积分 $\quad E_n=C\cdot(n+1/2)^{\frac{2\gamma}{2+\gamma}} \qquad$ （C为积分常数）

例如： 对于谐振子 $\quad \gamma=2$

$$E_n=C\cdot(n+1/2)$$

对于一维"氢原子"，$\gamma=-1$

$$E_n=C\cdot(n+1/2)^{-2}$$

5. 在准经典近似下，求在势场 $V(x)=-V_0/ch^2(\frac{x}{a})$ 中粒子的能级

〔解〕 按照量子化条件

$$\int_{-b}^{b}\sqrt{2\mu[E_n+V_0/ch^2(\frac{x}{a})]}\,dx=(n+1/2)\pi\hbar \qquad (1)$$

转折点（$-b$，b）由下式确定：

$$E_n+V_0/ch^2(\frac{b}{a})=0 \qquad (E_n<0) \qquad (2)$$

或 $\quad ch\dfrac{b}{a}=\sqrt{V_0/|E_n|}$

积分 $\quad I=\displaystyle\int_{-b}^{b}\sqrt{2\mu[E_n+V_0/ch^2(\frac{x}{a})]}\,dx \qquad (3)$

可如下计算。对 E_n 微分，利用被积函数在转折点处为零的条

件可得 $$\frac{dI}{dE_n}=\mu\int_{-b}^{b}[2\mu(E_n+V_0/ch^2(\frac{x}{a})]^{-\frac{1}{2}}dx \tag{4}$$

作变数替积，令 $$\xi=sh(\frac{x}{a}) \tag{5}$$

$$\therefore \quad ch^2(\frac{x}{a})=1+\xi^2$$

$$d\xi=\frac{1}{a}ch(\frac{x}{a})dx=\frac{1}{a}\sqrt{1+\xi^2}\,dx$$

于是
$$\frac{dI}{dE_n}=\mu a\int_{-b}^{b}\frac{d\xi}{\sqrt{2\mu[E_n(1+\xi^2)+V_0}}$$

积分后，利用条件(2)，得
$$\frac{dI}{dE_n}=\frac{\pi\mu a}{\sqrt{-2\mu E_n}} \tag{6}$$

上式积分，得
$$I(E_n)=-\pi\sqrt{-2\mu a^2E_n}+C \tag{7}$$

积分常数 C 可如下确定，当 $E_n=-V_0$ 时，$b=0$.

因而 $\quad I(-V_0)=0$，所以，$C=\pi\sqrt{2\mu a^2V_0}$

于是：
$$I(E_n)=\pi\sqrt{2\mu a^2}(\sqrt{V_0}-\sqrt{-E_n}) \tag{8}$$
$$=(n+1/2)\pi\hbar$$

$$\therefore \quad -\sqrt{-E_n}=\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu a^2}}(n+1/2)-\sqrt{V_0}$$

$$\therefore \quad E_n=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}[(n+1/2)-\sqrt{\frac{2\mu a^2V_0}{\hbar^2}}]^2 \tag{9}$$

$$n=0,1,2,\cdots$$

$\sqrt{2\mu V_0}\frac{a}{\hbar}$ 代表能级 E_n 之下的能级总数，上式只在 $n\gg1$，即 $2\mu V_0\frac{a^2}{\hbar^2}\gg1$ 条件下成立。严格求解本题，得

$$E_n=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}[(n+1/2)-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1}]^2 \tag{10}$$

$$n=0,1,2,\cdots$$

当 $2\mu V_0a^2/\hbar^2\gg1$ 时，(11)式与(9)式完全一致。

6、在准经典近似下，计算下列势垒的穿透系数（粒子能量 $E<0$）

$V(x)=\begin{cases}-V_0 & x=0\\ -Fx & x>0\end{cases}$，这是在强电场作用下，电子穿透金属表面的简化模型

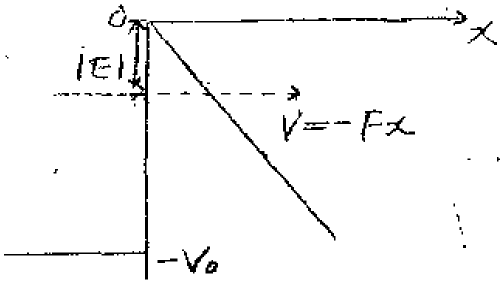


图 12—3

[解]：穿透系数为

$$T=e^{\frac{2}{\hbar}\int_0^b\left|\sqrt{2m(E-V(x))}\right|dx}$$
$$b=|E|/F$$

其中：
$$\int_0^b\left|\sqrt{2m(E-V(x))}\right|dx$$
$$=\sqrt{2m}\int_0^b\left|\sqrt{-|E|+Fx}\right|dx$$
$$=\sqrt{2mF}\int_0^b\sqrt{b-x}\,dx$$
$$=\sqrt{2mF}\,\frac{(-1)}{3/2}(b-x)^{3/2}\Big|_0^b$$
$$=\sqrt{2mF}\,\frac{2}{3}b^{3/2}$$

$$T=e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mF}\frac{2}{3}b^{3/2}}=e^{-\frac{4}{3\hbar}\sqrt{2mF}\left(\frac{|E|}{F}\right)^{3/2}}$$
$$T=e^{-\frac{4}{3}\sqrt{2m}|E|^{3/2}/\hbar F}$$

7. 上题中若计及电象势（图），则 $V(x)=-Fx-e^2/4x$，试计算电子穿透金属表面的系数

[解]：与上题类似

$$T=\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2m|E|-Fx-e^2/4x}\,dx\right\} \qquad (1)$$

转折点 a, b 由：$|E|-Fx-e^2/4x=0$ (2)

的两个根确定 $x=\dfrac{|E|\pm\sqrt{E^2-e^2F}}{2F}$

$$a=\frac{|E|-\sqrt{E^2-e^2F}}{2F} \qquad b=\frac{|E|+\sqrt{E^2-e^2F}}{2F} \qquad (3)$$

积分：$\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2m|E|\left(1-\frac{F}{|E|}x-\frac{e^2}{4|E|x}\right)}\,dx$

$$=\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m|E|}\int_a^b\left(1-\frac{F}{|E|}x-\frac{e^2}{4|E|x}\right)^{1/2}dx$$

令 $(F/|E|)x=\xi$，$d\xi=\frac{F}{|E|}dx$ (4)

积分化为：$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m|E|}\int_{\xi_1}^{\xi_2}\left(1-\xi-\frac{e^2}{4|E|^2}\frac{F}{\xi}\right)^{1/2}d\xi\cdot\frac{|E|}{F}$

$$=\frac{2\sqrt{2m}|E|^{3/2}}{\hbar F}\int_{\xi_1}^{\xi_2}\sqrt{(1-\xi-\lambda^2/\xi)}\,d\xi$$

参数 $\lambda^2=Fe^2/4|E|^2$ (5)

ξ_1、ξ_2是使 $1-\xi-\lambda^2/\xi=0$ 的根

$\xi_{1,2}=\frac{1}{2}(1\mp\sqrt{1-\lambda^2})$

为便于与上题比较，令 $k_0=\frac{4}{3}\sqrt{2m}|E|^{3/2}/\hbar F$ (7)

$$\varphi(\lambda)=\frac{3}{2}\int_{\xi_1}^{\xi_2}\sqrt{1-\xi-\lambda^2/\xi}\,d\xi \quad (8)$$

此时 $T=e^{-k_0\varphi(\lambda)}$ (9)

（$\varphi(\lambda)$称为完全椭圆积分） 当$\lambda=0$（$e=0$），即不考虑电象力的情况。此时 $a=0$，$b=|E|/F$，或 $\xi_1=0$、$\xi_2=1$

$$\varphi(0)=\frac{3}{2}\int_0^1\sqrt{1-\xi}\,d\xi=1$$

（9）式将与上式一致。

8. ~~放~~射性元素α衰变时，α粒子受到的势场可近似表为：

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & r<R\\ \alpha/r & r>R\end{cases}$$

$\alpha=2Ze^2$ Z是子核的原子序数，R是核"半径"

求α粒子穿透此库仑势垒的系数。

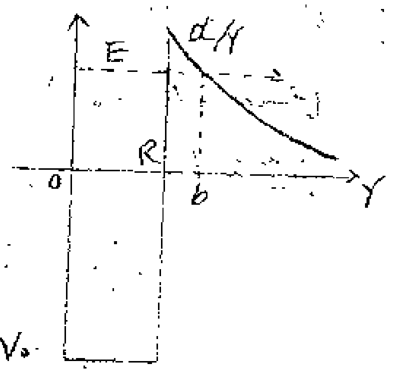


图12-4

(解)： $T = e^{-\frac{2}{\hbar}\left|\int_R^b \sqrt{2\mu(E-V)}\,dr\right|}$

$$= e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu}\int_R^b \sqrt{(\frac{\alpha}{r}-E)}\,dr}$$

其中 $b=\alpha/E$　μ是约化质量。

积分后得

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar}\alpha\sqrt{\frac{2\mu}{E}}\left[\cos^{-1}\sqrt{\frac{ER}{\alpha}}-\sqrt{\frac{ER}{\alpha}(1-\frac{ER}{\alpha})}\right]}$$

此式可化简为更简单的形式，令 $E=\frac{1}{2}\mu v^2$，v是α粒子逸出核外后的（相对子核）的飞行速度。

因此：$\sqrt{\frac{2\mu}{E}}=\frac{2}{v}$，$\frac{2\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{2\mu}{E}}=\frac{8Ze^2}{\hbar v}$

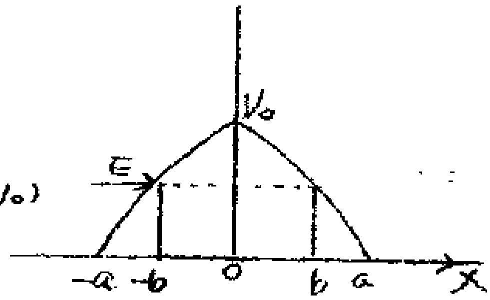
令 $\cos^2\alpha_0=\frac{ER}{\alpha}=\frac{ER}{2Ze^2}$　　或 $\cos\alpha_0=\sqrt{\frac{ER}{\alpha}}=\sqrt{\frac{ER}{2Ze^2}}$

而 $\sqrt{\frac{ER}{\alpha}(1-\frac{ER}{\alpha})}=\cos\alpha_0\sqrt{(1-\cos^2\alpha_0)}=\frac{1}{2}\sin 2\alpha_0$

因此　$T=e^{-\frac{4Ze^2}{\hbar v}(2\alpha_0-\sin 2\alpha_0)}$

9. 用W·K·B法，求粒子对下列势垒的穿透系数

$$V(x)=\begin{cases}V_0(1-\frac{x^2}{a^2}) & |x|<a\\ 0 & |x|>a\end{cases}$$



设粒子质量为m，能量为E ($E<V_0$)

[解]：转折点 $(-b,b)$，$b=a\sqrt{1-\frac{E}{V_0}}$，

$b^2=a^2(1-\frac{E}{V_0})$

穿透系数：　$T=\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\left|\int_{-b}^{b}\sqrt{2\mu(E-V(x))}\,dx\right|\right\}$

$$\int_{-b}^{b}\sqrt{E-V(x)}\,dx=\int_{-b}^{b}\sqrt{(E-V_0)+V_0x^2/a^2}\,dx$$

$$=\sqrt{\frac{V_0}{a^2}}\int_{-b}^{b}\sqrt{\frac{V_0-E}{V_0}a^2+x^2}\,dx=\frac{\sqrt{V_0}}{a}\int_{-b}^{b}\sqrt{x^2-b^2}\,dx$$

$$\left|\int_{-b}^{b}\sqrt{E-V(x)}\,dx\right|=\frac{\sqrt{V_0}}{a}\int_{-b}^{b}\sqrt{b^2-x^2}\,dx=\frac{2\sqrt{V_0}}{a}\int_0^b\sqrt{b^2-x^2}\,dx$$

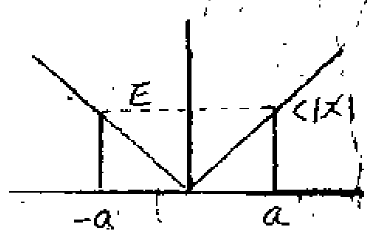
$$=\frac{2\sqrt{V_0}}{a}\cdot\frac{1}{2}b^2\sin^{-1}\left(\frac{x}{b}\right)\Big|_0^b=\frac{\sqrt{V_0}}{a}b^2\frac{\pi}{2}$$

$$=\frac{\pi b^2}{2a}\sqrt{V_0}\qquad\left(\begin{cases}\sin^{-1}0=0\\ \sin^{-1}1=\frac{\pi}{2}\end{cases}\right)$$

$$T=\exp\left\{-\frac{\pi b^2\sqrt{2\mu V_0}}{a\hbar}\right\}=\exp\left\{-\frac{\pi}{\hbar}a\left(1-\frac{E}{V_0}\right)\sqrt{2\mu V_0}\right\}$$

10、给定一个一维势阱 $V(x)=C|x|$ $(C>0)$ 求能级的表达式

〔解〕：与第二题类似，转折点 $(-a,a)$



$$a=E/C$$

量子化条件为 $2\int_{-a}^{a}\sqrt{2m(E-C|x|)}\,dx$

$$=(n+\tfrac{1}{2})h$$

$$\therefore\int_0^a\sqrt{2m(E-Cx)}\,dx=(n+\tfrac{1}{2})\pi\hbar/2$$

$$左=\sqrt{2mC}\int_0^a\sqrt{\left(\frac{E}{C}-x\right)}\,dx=\sqrt{2mC}\cdot\frac{2}{3}\left(\frac{E}{C}\right)^{3/2}=(n+\tfrac{1}{2})\frac{\pi\hbar}{2}$$

$$\therefore\left(\frac{E}{C}\right)^{3/2}=\frac{3\pi\hbar}{4}\frac{1}{\sqrt{2mC}}(n+\tfrac{1}{2})$$

$$\therefore E_n=C\left\{\frac{3\pi\hbar}{4\sqrt{2mC}}(n+\tfrac{1}{2})\right\}^{2/3}=\left(\frac{9\pi^2\hbar^2C^2}{32m}\right)^{1/3}(n+\tfrac{1}{2})^{2/3}$$

$$n=0,1,2,\cdots$$

11、应用 WKB 法于中心力场的径向方程。设 $V(r)$ 是单调上升函数 $V(\infty)=0$ 证明 $l=0$ 的束缚态的量子化条件为：

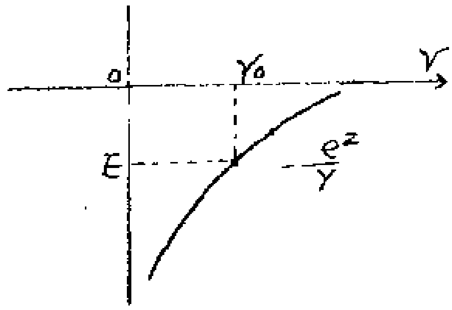
$$2\int_0^a\sqrt{2\mu(E-V)}\,dr=(n+\tfrac{3}{4})h$$

a 是转折点的径向坐标

提示：参考第一题

12、利用 WKB 法求氢原子的 $l=0$ 能级的近似表达式

〔解〕：利用11题结果



$$2\int_0^{r_0}\sqrt{2\mu(E-V(r))}\,dr=(n+\frac{3}{4})h$$

其中 $V(r)=-\frac{e^2}{r}$，$E<0$（束缚态）

r_0是转折点，

由 $r_0=e^2/|E|$ 决定，积分

$$2\int_0^{r_0}\sqrt{2\mu(E+e^2/r)}\,dr=2\sqrt{2\mu}\int_0^{r_0}\sqrt{-|E|+e^2/r}\,dr$$

$$=2e\sqrt{2\mu}\int_0^{r_0}\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{r_0}}\,dr$$

令 $\frac{1}{r}=x$，$\frac{1}{r_0}=x_0$，则：

$$I=\int_0^{r_0}\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{r_0}}\,dr=\int_{x_0}^{\infty}\frac{\sqrt{x-x_0}}{x^2}\,dx$$

令 $z=\sqrt{x-x_0}$，$z^2=x-x_0$　　$2z\,dz=dx$

则 $$I=\int_0^{\infty}\frac{2z\,z\,dz}{(z^2+x_0)^2}=2\int_0^{\infty}\frac{z^2+x_0-x_0}{(z^2+x_0)^2}\,dz$$

$$=2\int_0^{\infty}\frac{dz}{z^2+x_0}-2x_0\int_0^{\infty}\frac{dz}{(z^2+x_0)^2}$$

查积分表得 $=2\left(\frac{1}{\sqrt{x_0}}\frac{\pi}{2}-\frac{1}{\sqrt{x_0}}\frac{\pi}{4}\right)=\frac{1}{\sqrt{x_0}}\frac{\pi}{2}=\frac{\pi}{2}\sqrt{r_0}$

$$\sqrt{2\mu r_0}\,e\pi=(n+\frac{3}{4})h$$

$$2\mu r_0\pi^2e^2=(n+3/4)^2h^2=2\mu e^4\pi^2/|E|$$

所以 $$E=E_n=-\frac{2\mu e^4\pi^2}{h^2}(n+\frac{3}{4})^{-2}$$

$$=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}(n+\frac{3}{4})^{-2}\qquad n=0,1,2\cdots$$

第十四章 13 角动量理论初步

1. 两个自旋为$\hbar$的两个粒子，总自旋为$\hat{S}=\hat{S}_1+\hat{S}_2$，求$(\hat{S}^2,\hat{S}_z)$的共同本征态（表成$S_{1z}$及$S_{2z}$的本征函数的乘积的线性组合）（取$\hbar=1$）

[解]：$S^2=(S_{1x}+S_{2x})^2+(S_{1y}+S_{2y})^2+(S_{1z}+S_{2z})^2$

$$=S_1^2+S_2^2+2(S_{1x}S_{2x}+S_{1y}S_{2y}+S_{1z}S_{2z})$$

$$=S_1^2+S_2^2+(S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+})+2S_{1z}S_{2z}$$

（其中$S_{1\pm}=S_{1x}\pm iS_{1y}$，$S_{2\pm}=S_{2x}\pm iS_{2y}$）

由于我们在$(S_1^2,S_2^2,S_{1z},S_{2z})$表象中求$(S_1^2,S_2^2,S^2,S_z)$的共同本征态。$S_1^2=1(1+1)=2$，$S_2^2=2$

$$S^2=4+(S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+})+2S_{1z}S_{2z} \qquad (1)$$

$$S_z=S_{1z}+S_{2z} \qquad (2)$$

S_z的本征态所表成S_{1z}与S_{2z}本征态的乘积，而本征值M则为S_{1z}与S_{2z}本征值之和$M=m_1+m_2$。以$M=0$为例，S_z的本征态有三个。$m_1,m_2=(1,-1),(0,0),(-1,1)$。让$m_i=1,0,-1$的态表为$\alpha,\beta,\gamma$。$S_z$的三个本征态（$M=0$）表为：$\alpha(1)\gamma(2)$，$\beta(1)\beta(2)$，和$\gamma(1)\alpha(2)$。但它们并非$S^2$的本征态。但可以找它们的线性迭加。

$$\chi_0=a\alpha(1)\gamma(2)+b\gamma(1)\alpha(2)+c\beta(1)\beta(2) \qquad (3)$$

使之为S^2的本征态。

$$S^2\chi_0=\lambda\chi_0 \qquad (4)$$

利用角动量的普遍公式（$\hbar=1$）

$$j_\pm|jm\rangle=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j,m\pm1\rangle$$

可求出（$S=1$）

$$S_+\alpha=0,\quad S_+\beta=\sqrt{2}\,\alpha,\quad S_+\gamma=\sqrt{2}\,\beta \qquad (5)$$
$$S_-\alpha=\sqrt{2}\,\beta,\quad S_-\beta=\sqrt{2}\,\gamma,\quad S_-\gamma=0$$

把(3)代入(4)，利用(5)式，可求出

$$S^2\chi_0=2a(\alpha(1)\gamma(2)+\beta(1)\beta(2))+2b(\gamma(1)\alpha(2)+\beta(1)\beta(2))$$
$$+2c(2\beta(1)\beta(2)+\alpha(1)\gamma(2)+\gamma(1)\alpha(2))$$
$$-\lambda[a\alpha(1)\gamma(2)+b\gamma(1)\alpha(2)+c\beta(1)\beta(2)]$$

即 $[2(a+c)-\lambda a]\alpha(1)\gamma(2)+[2(b+c)-\lambda b]\gamma(1)\alpha(2)$
$$+[2(a+b)+4c-\lambda c]\beta(1)\beta(2)=0$$

即
$$\begin{cases}2(a+c)-\lambda a=0\\2(b+c)-\lambda b=0\\2(a+b)+4c-\lambda c=0\end{cases}\qquad (6)$$

齐次方程(6)有解的必要条件为

$$\begin{vmatrix}2-\lambda & 0 & 2\\ 0 & 2-\lambda & 2\\ 2 & 2 & 4-\lambda\end{vmatrix}=0 \qquad (7)$$

解出 $\lambda=0,2,6\quad(S=0,1,2)$ (8)

$\lambda=0\ (S=0)$ 代入(6)式，求出 a,b,c 归一化后，得

$$a=b=-c=\frac{1}{\sqrt{3}}$$

相应的 (S^2, S_z) 本征态 χ_{SM}（取适当的相角）为

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\gamma(2)+\gamma(1)\alpha(2)-\beta(1)\beta(2)]$$

类似用 $\lambda=1,2$ 代入可求出

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\gamma(2)-\gamma(1)\alpha(2)]$$
$$\chi_{20}=\frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\gamma(2)+\gamma(1)\alpha(2)+2\beta(1)\beta(2)]$$

类似还可以求$M=1$与$M=2$的本征态，按$\vec{S}^2$的本征值来解除简并，最后把($\vec{S}^2, S_z$)本征态求出，结果是：

$$S=2 \qquad \chi_{22}=\alpha(1)\alpha(2)$$

$$\chi_{21}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]$$

$$\chi_{20}=\frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\gamma(2)+\gamma(1)\alpha(2)+2\beta(1)\beta(2)]$$

$$\chi_{2-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2)+\gamma(1)\beta(2)]$$

$$\chi_{2-2}=\gamma(1)\gamma(2)。$$

$$S=1 \qquad \chi_{11}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\gamma(2)-\gamma(1)\alpha(2)]$$

$$\chi_{1-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2)-\gamma(1)\beta(2)]。$$

$$S=0 \qquad \chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\gamma(2)+\gamma(1)\alpha(2)-\beta(1)\beta(2)]。$$

2、利用14.2节所列C、G系数表，可求出($\vec{S}^2, S_z$)共同本征态。

$$\chi_{SM}=\sum_{m_1,m_2}\langle 1m_1 1m_2|SM\rangle\chi_{1m_1}(1)\chi_{1m_2}(2)$$

与上题计标结果比较：

提示：$\chi_{11}\sim\alpha$，$\chi_{10}\sim\beta$，$\chi_{1-1}\sim\gamma$。结果完全相同。

3. 证明$e^{-i\theta\sigma_z}=\begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & e^{i\theta}\end{pmatrix}$，$\sigma_z$为泡利矩阵

[证]：利用 $(\sigma_z)^{2n}=1$，$(\sigma_z)^{2n+1}=\sigma_z$，$n=0,1,2\cdots$

$$e^{-i\theta\sigma_z}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i\theta\sigma_z)^n$$

$$=\sum_{n(偶)}\frac{1}{n!}(-i\theta)^n+\sigma_z\sum_{n(奇)}(-i\theta)^n/n! \qquad 利用(-i)^{2K}=(-1)^K$$

$$=\sum_{K=0}^{\infty}\frac{1}{(2K)!}(-1)^K\theta^{2K}-i\sigma_z\sum_{K=0}^{\infty}\frac{(-1)^K}{(2K+1)!}\theta^{2K+1}$$

$$= \cos\theta - i\sigma_z \sin\theta$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta - i\sin\theta & 0 \\ 0 & \cos\theta + i\sin\theta \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$$

4、设$\hat{J}$为角动量算符，矢量算符$\hat{A}$满足（取$\hbar=1$）

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{A}_z$$

求证：1° $[\hat{J}^2, \hat{A}] = (i\hat{A}\times\hat{J} - \hat{J}\times\hat{A})$

2° $[\hat{J}^2, (\hat{J}^2\hat{A})] = 2(\hat{J}^2\hat{A} + \hat{A}\hat{J}^2) - 4\hat{J}(\hat{J}\hat{A})$

[证]：1° 以x分量为例

$$[\hat{J}^2, \hat{A}_x] = [\hat{J}_x^2, \hat{A}_x] + [\hat{J}_y^2, \hat{A}_x] + [\hat{J}_z^2, \hat{A}_x]$$

$$= 0 + \hat{J}_y[\hat{J}_y, \hat{A}_x] + [\hat{J}_y, \hat{A}_x]\hat{J}_y + \hat{J}_z[\hat{J}_z, \hat{A}_x] + [\hat{J}_z, \hat{A}_x]\hat{J}_z$$

$$= -i\hat{J}_y\hat{A}_z - i\hat{A}_z\hat{J}_y + i\hat{J}_z\hat{A}_y + i\hat{A}_y J_z$$

$$= i(\hat{A}_y\hat{J}_z - \hat{A}_z\hat{J}_y) - i(\hat{J}_y\hat{A}_z - \hat{J}_z\hat{A}_y)$$

$$= i(\hat{A}\times\hat{J} - \hat{J}\times\hat{A})_x$$

$$\therefore \quad [\hat{J}^2, \hat{A}] = i(\hat{A}\times\hat{J} - \hat{J}\times\hat{A})$$

2° （略）

5. 设$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$代表两个角动量之和，求证：

1° $\langle j'm'|\hat{J}_{1z}|jm\rangle = \langle j'm|J_{1z}|jm\rangle\delta_{m'm}$

2° $\langle j'm'|\hat{J}_{1\pm}|jm\rangle = \langle j'm\pm|\hat{J}_{1\pm}|jm\rangle\delta_{m'm\pm1}$

3° 当$|j'-j|>1$时：$\langle j'm'|\hat{J}_1|jm\rangle = 0$

[证]：1° 利用$[\hat{J}_z, \hat{J}_{1z}] = 0$，即$\hat{J}_z\hat{J}_{1z} - \hat{J}_{1z}\hat{J}_z = 0$

取矩阵元$\langle j'm'|\cdots|jm\rangle$，中间插入$\sum_{j''m''}\cdots|j''m''\rangle\langle j''m''|\cdots$

得：

$$\sum_{j''m''}[\langle j'm'|\hat{J}_z|j''m''\rangle\langle j''m''|\hat{J}_{1z}|jm\rangle-\langle j'm'|\hat{J}_{1z}|j''m''\rangle\langle j''m''|J_z|jm\rangle]=0$$

利用矩阵元 ($\hbar=1$) $m'\delta_{j''j'}\delta_{m''m'}$　　$m\delta_{j''j}\delta_{m''m}$

$$m'\langle j'm'|\hat{J}_{1z}|jm\rangle-m\langle j'm'|\hat{J}_{1z}|jm\rangle=0$$

$$\therefore\quad (m'-m)\langle j'm'|\hat{J}_{1z}|jm\rangle=0$$

若 $m'\neq m$，则必须 $\langle j'm'|\hat{J}_{1z}|jm\rangle=0$

$$\therefore\quad \langle j'm'|\hat{J}_{1z}|jm\rangle=\langle j'm|\hat{J}_{1z}|j'm\rangle\delta_{m'm}$$

2° 同1°，利用 $[\hat{J}_z,\hat{J}_{1\pm}]=\pm\hat{J}_{1\pm}$　　($\hbar=1$)

3° 利用1°，2°结果，参考 Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics, P36

6. 利用陀螺的角动量表达式

$$\hat{L}_x=-i\hbar\left[-\cos\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right]$$

$$\hat{L}_y=-i\hbar\left[-\sin\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}+\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right]$$

$$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}$$

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

[证]：例如

$$[\hat{L}_z\hat{L}_y]=(-i\hbar)^2\left[\frac{\partial}{\partial\alpha},-\sin\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}+\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right]$$

$$=(-i\hbar)^2\left\{-\cot\beta\left[\frac{\partial}{\partial\alpha},\sin\alpha\right]\frac{\partial}{\partial\alpha}+\left[\frac{\partial}{\partial\alpha},\cos\alpha\right]\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{1}{\sin\beta}\left[\frac{\partial}{\partial\alpha},\sin\alpha\right]\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}$$

$$=(-i\hbar)^2\left\{-\cot\beta\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}$$

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

7. 写出陀螺角动量在转动坐标轴（记为 1, 2, 3 轴）上的分量 $\hat{L}_1$, $\hat{L}_2$ 与 $\hat{L}_3$ 。

$$\hat{L}_1 = -i\hbar\left[\sin\gamma\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\cos\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha} + \cot\beta\cos\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\right]$$

$$\hat{L}_2 = -i\hbar\left[\cos\gamma\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{\sin\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cot\beta\sin\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\right]$$

$$\hat{L}_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\gamma}$$

证明：$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = -i\hbar\hat{L}_3$, ----

〔证〕：例如

$$[\hat{L}_3, \hat{L}_2] = (-i\hbar)^2\left[\frac{\partial}{\partial\gamma}, \cos\gamma\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{\sin\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cot\beta\sin\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\right]$$

$$= (-i\hbar)^2\left\{-\sin\gamma\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{\cos\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cot\beta\cos\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}$$

$$= i\hbar\hat{L}_1$$

8、按原子光谱理论中的 LS 耦合模型，原子中各电子自旋先耦合成 $\vec{S}$，轨道角动量先耦合为 $\vec{L}$，然后 $\vec{L}$ 和 $\vec{S}$ 耦合成 $\vec{J}$，$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ 。$\vec{S}$ 和 $\vec{L}$ 绕 $\vec{J}$ 旋转，$\vec{J}$ 为守恒量。从对称性考虑，$\bar{\vec{S}}$ 将沿 $\vec{J}$ 方向，即 $\bar{\vec{S}} = c\vec{J}$（c 一常数，待定）。设原子处于外磁场 $\vec{B}$ 中，微扰为

$$W = \mu_B\vec{B}(\vec{L} + 2\vec{S}) = \mu_B\vec{B}(\vec{J} + \vec{S}), \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

假设 $\vec{J}^2$ 仍为守恒量（近似），原子处于 $\vec{J}^2$ 本征态下。求能量一级修正。

〔解〕：取磁场方向为 z 轴方向。

$$W = \mu_B B(J_z + S_z)$$

在 $|LSJM_J\rangle$ 表象中，（利用第 5 题及本题假设）$\bar{S}_z$ 是对角化的，因而 W 是对角化的。因此按简并态微扰论，一级能量修正为

$$\Delta E = \overline{W} = \mu_B B(M_J + \overline{S}_z)$$

为了计算$\overline{S_z}$，利用 $\overline{\vec{S}} = c\vec{J}$

点乘$\vec{J}$ $\quad \overline{\vec{S}} \cdot \vec{J} = c\vec{J}^2 = cJ(J+1)$

$$\therefore \quad c = \overline{\vec{S}} \cdot \vec{J} / J(J+1) = \overline{\vec{S} \cdot \vec{J}} / J(J+1)$$

利用 $\quad \vec{S}\vec{J} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{S}^2 - \vec{L}^2)$

$$\overline{\vec{S}\vec{J}} = \frac{1}{2}[J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]$$

$$\therefore \quad c = \frac{1}{2}[J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)] / J(J+1)$$

而 $\quad \overline{S_z} = c\overline{J_z} = M_J[J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)] / 2J(J+1)$

$$\therefore \quad \Delta E = \mu_B B \cdot M_J \left\{1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}\right\}$$

$$= \mu_B g B M_J$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \qquad (\text{Lande } g\text{-因子})$$

第十五章 14. 二次量子化

1. 设 $\{a^+, a\}=1$（费米子）。令 $\hat{n}=a^+a$

证明：$\hat{n}$ 的本征值只能为 1 或 0

[证明]: $\because \hat{n}=a^+a$

$\therefore \hat{n}^2=a^+a\,a^+a=a^+(a^+a+1)a=a^+a^+aa+a^+a=a^+a=\hat{n}$

$(\because a^+a^+=0,\quad aa=0)$

$\therefore \hat{n}(\hat{n}-1)=0$

设 $\hat{n}|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle$，$\lambda$ 为本征值（任意个本征值）

则 $\hat{n}(\hat{n}-1)|\lambda\rangle=\lambda(\lambda-1)|\lambda\rangle=0$

$\therefore \lambda=0,\ 1$。

2. 设 $a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$，　　$a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle$

证明 $[a, a^+]=1$

[证明]: $\because (aa^+-a^+a)|n\rangle=aa^+|n\rangle-a^+a|n\rangle$

$=a\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle-a^+\sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$=\sqrt{n+1}\,a|n+1\rangle-\sqrt{n}\,a^+|n-1\rangle$

$=\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\,|n\rangle-\sqrt{n}\sqrt{n}\,|n\rangle$

$=[(n+1)-n]|n\rangle=|n\rangle$

$\therefore [a,a^+]|n\rangle=n\rangle$，　　n 任意

$\therefore [a,a^+]=1$

3. 设 $[a, a^+]=1$，令 $\hat{n}=a^+a$

1° 证明：$[\hat{n}, a^{+k}]=ka^{+k}$　用归纳法

2° $\hat{n}$ 是正定的厄密算符。

3° 设 $a|0\rangle=0$，即 $\hat{n}|0\rangle=0$，表示真空态

令 $|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}a^{+n}|0\rangle \qquad n=0,1,2\cdots$

证明：$\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle$，即 $|n\rangle$ 是 $\hat{n}$ 的本征态。

$\langle n|n\rangle=1$

〔证明〕：

1° $[\hat{n},a^+]=[a^+a,a^+]=a^+[a,a^+]+[a^+,a^+]a=a^+$

设 $[\hat{n},a^{+k}]=ka^{+k}$

则 $[\hat{n},a^{+k+1}]=[\hat{n},a^+a^{+k}]=a^+[\hat{n},a^{+k}]+[\hat{n},a^+]a^{+k}$

$=a^+ka^{+k}+a^{+k+1}=(k+1)a^{+k+1}$

$\therefore [\hat{n},a^{+k}]=ka^{+k}$ 是正确的，$k=0,1,2\cdots\cdots$

2° $\hat{n}=a^+a$，在任何态 $|\varphi\rangle$ 下，平均值是非负的。

$\because \langle\varphi|\hat{n}|\varphi\rangle=\langle\varphi|a^+a|\varphi\rangle$ （令 $|\psi\rangle=a|\varphi\rangle$，则

$=(\psi|\psi)\geq 0$ (正定) $\quad \langle\psi|=\langle\varphi|a^+$ ）

又 $\hat{n}^+=(a^+a)^+=a^+a=\hat{n}$ （厄密）

3° 利用 1° $[\hat{n},a^{+k}]=ka^{+k}$ 及 $a|0\rangle=0$

可以看出 $[\hat{n},a^{+k}]|0\rangle=ka^{+k}|0\rangle$

左 $=\hat{n}a^{+k}|0\rangle+a^{+k}|\hat{n}|0\rangle=\hat{n}a^{+k}|0\rangle=$ 右 $=ka^{+k}|0\rangle$

$\therefore a^{+k}|0\rangle$ 是 $\hat{n}$ 的本征态，本征值为 k。

设 $|n\rangle\sim a^{+n}|0\rangle$，则 $\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle$

以下用归纳法证明归一化因子为 $\frac{1}{\sqrt{n!}}$

设 $|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}a^{+n}|0\rangle$ 满足 $\langle n|n\rangle=1$，

于是 $|n+1\rangle=\frac{1}{\sqrt{(n+1)!}}a^{+n+1}|0\rangle=\frac{a^+}{\sqrt{n+1}}|n\rangle$

$\langle n+1|n+1\rangle=\frac{1}{n+1}\langle n|aa^+|n\rangle$

$$= \frac{1}{n+1} < n | (a^+ a + 1) | n >$$

$$= \frac{1}{n+1} < n | (n+1) | n >$$

$$= \langle n | n \rangle = 1$$

这样我们就用归纳法证明了 $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{+n} |0\rangle$ 是$\hat{N}$的归一化本征函数。

4、设两个谐振子分别用 a_1^+、a_1 与 a_2^+、a_2 描述，证明角动量的全部代数性质可以用它们来表示。即：

(1) 令 $a^+ = (a_1^+, a_2^+)$，$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$，证明 $\vec{J} = \frac{1}{2} a^+ \vec{\sigma} a$（$\vec{\sigma}$ 为泡利矩阵）具有角动量的代数性质。

(2) 证明 $J^+ \equiv J_x + iJ_y = a_1^+ a_2$，

$J^- \equiv J_x - iJ_y = a_2^+ a_1$。

(3) 证明：$J = \frac{1}{2} a^+ a$ 的本征值为 $\begin{cases} 0, 1, 2 \cdots \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \cdots \end{cases}$

从而，$\vec{J}^2$ 的本征值为 $j(j+1)$。

〔解〕：(1) $J_x = \frac{1}{2}(a_1^+, a_2^+)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1)$

$J_y = \frac{1}{2}(a_1^+, a_2^+)\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2i}(a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1)$

$J_z = \frac{1}{2}(a_1^+, a_2^+)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2)$

利用 $[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$，$[a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0$　　$i, j = 1, 2 \cdots$

可知 $[J_x, J_y] = \frac{1}{4i}[a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1, a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1]$

$$= \frac{1}{4i}\{[a_1^+ a_2, -a_2^+ a_1] + [a_2^+ a_1, a_1^+ a_2]\}$$

$$= \frac{1}{4i}\{-a_2^+ [a_1^+, a_1] a_2 - a_1^+ [a_2, a_2^+] a_1 + a_1^+ [a_2^+, a_2] a_1 + a_2^+ [a_1, a_1^+] a_2\}$$

$$= \frac{1}{4i}\{a_2^+ a_2 - a_1^+ a_1 - a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2\} = \frac{i}{2}[a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2] = iJ_z$$

类似可证明 $[J_y, J_z]=iJ_x$，$[J_z, J_x]=iJ_y$。

(2) $J^+=J_x+iJ_y=\frac{1}{2}(a_1^+a_2+a_2^+a_1)+\frac{1}{2}(a_1^+a_2-a_2^+a_1)=a_1^+a_2$

同理，$J^-=J_x-iJ_y=a_2^+a_1$。

(3) $J=\frac{1}{2}a^+a=\frac{1}{2}(a_1^+a_1+a_2^+a_2)=\frac{1}{2}(\hat{n}_1^++\hat{n}_2^+)$

其中 $\hat{n}_1^+=a_1^+a_1$，$\hat{n}_2^+=a_2^+a_2$。

分别代表两种谐振子的粒子数秝子。它们的本征值为 0, 1, 2……因此，$J=\frac{1}{2}a^+a$ 的本征值为 $\frac{1}{2}(0,1,2\cdots\cdots)$

即为 $0, 1, 2, \cdots\cdots$；$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}\cdots\cdots$。

$$\vec{J}^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2=\frac{1}{2}(J_+J_-+J_-J_+)+J_z^2$$

$$=\frac{1}{2}(a_1^+a_2a_2^+a_1+a_2^+a_1a_1^+a_2)+\frac{1}{4}(a_1^+a_1-a_2^+a_2)^2$$

$$=\frac{1}{2}[a_1^+a_1(a_2^+a_2+1)+a_2^+a_2(a_1^+a_1+1)]+\frac{1}{4}[(a_1^+a_1+a_2^+a_2)^2$$

$$-4a_1^+a_1a_2^+a_2]$$

$$=\frac{1}{2}[a_1^+a_1a_2^+a_2+a_2^+a_2a_1^+a_1+a_1^+a_1+a_2^+a_2]+J^2-a_1^+a_1a_2^+a_2$$

$$=J^2+J。$$

∴ $\vec{J}^2$ 本征值为 $j(j+1)$

5. 设费密子体系在轴对称势场中运动，单粒子能级用 ε_ν 表示（$\nu=1, 2, 3\cdots\cdots$）。能级为二重简并，ε_ν 能级上的两个简并态分别用 ν，$\bar{\nu}$ 表示。令 $S_\nu^+=a_\nu^+a_{\bar{\nu}}^+$，$S_\nu=a_{\bar{\nu}}a_\nu$，$\hat{n}_\nu=a_\nu^+a_\nu+a_{\bar{\nu}}^+a_{\bar{\nu}}$。$S_\nu^+(S_\nu)$ 代表在能级 ε_ν 上一对粒子的产生（湮灭）秝符，$\hat{n}_\nu$ 代表能级 ε_ν 上的粒子數秝符。~~求证~~ $[S_\mu, S_\nu^+]=(1-\hat{n}_\mu)\delta_{\mu\nu}$，

$$[\hat{n}_\mu, S_\nu^+]=2S_\mu^+\delta_{\mu\nu}$$

$$[\hat{n}_\mu S_\nu]=-2S_\mu\delta_{\mu\nu}$$

证明提示：

利用恒等式 $[A, BC]=A[B,C]_+-[B,C]_+A+C[A,B]_+-[A,C]_+B$，

若B与C反对易，$[A,BC]=C[A,B]_+-[A,C]_+B$

$$\therefore [S_\mu, S_\nu^+]=[a_{\bar\mu}a_\mu, a_\nu^+a_{\bar\nu}^+]$$

$$=a_{\bar\mu}[a_\mu, a_\nu^+a_{\bar\nu}^+]+[a_{\bar\mu}, a_\nu^+a_{\bar\nu}^+]a_\mu$$

$$=a_{\bar\mu}a_{\bar\nu}^+[a_\mu, a_\nu^+]_+-[a_{\bar\mu}, a_{\bar\nu}^+]_+a_\nu^+a_\mu$$

$$=a_{\bar\mu}a_{\bar\nu}^+\delta_{\mu\nu}-a_\nu^+a_\mu\delta_{\mu\nu}$$

$$=[1-(a_\mu^+a_\mu+a_{\bar\mu}^+a_{\bar\mu})]\delta_{\mu\nu}=(1-\hat{n}_\mu)\delta_{\mu\nu}$$

其余类推。

6、同上题，设粒子之间还有对力（pairing force）即

$$H=H_{sp}+H_p$$

$$=\sum_{\nu>0}\varepsilon_\nu(a_\nu^+a_\nu+a_{\bar\nu}^+a_{\bar\nu})-G\sum_{\mu,\nu>0}S_\mu^+S_\nu$$

G为对力强度参数。设体系有一对费密子，求它们的能量本征值。（取真空态能量为零）。分两种情况：

(1)、两粒子“不配对”，即处于不同的单粒子能级波函数一般形式为 $a_\mu^+a_\nu^+|0\rangle$，$(\mu\neq\nu)$。相应能量为 $E=\varepsilon_\mu+\varepsilon_\nu$。不受对力影响。

(2)、两粒子“配对”，波函数形式为 $A^+|0\rangle=\sum_\mu C_\mu S_\mu^+|0\rangle$，

$\sum_\mu|C_\mu|^2=1$（归一化条件）C_μ 待求。

〔解〕：利用上题结果，可证明

$$[H, A^+]=2\sum_\mu\varepsilon_\mu C_\mu S_\mu^+-G\sum_{\mu\nu}C_\nu S_\mu^+(1-\hat{n}_\nu)$$

取真空态 $|0\rangle$ 的能量为零，则

$$HA^+|0\rangle=[H, A^+]|0\rangle=EA^+|0\rangle$$

利用 $\hat{\chi}_\nu|0\rangle=0$，可得

$$2\sum_\mu \varepsilon_\mu c_\mu S_\mu^+|0\rangle-G\sum_{\mu\nu}c_\nu S_\mu^+|0\rangle=E\sum_\mu c_\mu^+|0\rangle$$

或改写成

$$\sum_{\mu,\nu}\left[(E-2\varepsilon_\nu)c_\nu\delta_{\mu\nu}+Gc_\nu\right]S_\mu^+|0\rangle=0$$

$$\therefore\quad \sum_\nu\left[(E-2\varepsilon_\nu)\delta_{\mu\nu}+G\right]c_\nu=0$$

这是 c_ν 满足的齐次方程，有解条件为

$$\det\left|(E-2\varepsilon_\nu)\delta_{\mu\nu}+G\right|=0$$

令 $(E-2\varepsilon_\nu)/G=\lambda_\nu$，则 $\det|\lambda_\nu\delta_{\mu\nu}+1|=0$

明显写出：

$$\begin{vmatrix}\lambda_1+1 & 1 & 1 & \cdots\cdots \\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & \cdots\cdots \\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & \cdots\cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\cdots\end{vmatrix}=0$$

可化为（见第8.16题）

$$\sum_\nu\frac{1}{\lambda_\nu}=-1\qquad 即\ \sum_\nu\frac{1}{E-2\varepsilon_\nu}=-\frac{1}{G}$$

此即确定能量本征值E的式子。详细解法参考第8.16题

7. 设核子在中心力场中运动，单粒子能级用 ε_j 表示，j 为总角动量，能级为 $2j+1$ 重简并，ε_j 能级上的单粒子态表成 $a_{jm}^+|0\rangle$，$m=j,j-1,\cdots,-j+1,-j$。

令 $$S_{m+}=(-1)^{j-m}a_{jm}^+a_{j-m}^+\qquad (m>0，下同)$$

$$S_{m-}=(S_{m+})^+=(-1)^{j-m}a_{j-m}a_{jm}$$

$$S_{m0}=\frac{1}{2}(a_{jm}^+a_{jm}+a_{j-m}^+a_{j-m}-1)$$

有：

$$[S_{m+},S_{m-}]=2S_{m0}$$

$$[S_{m0},S_{m+}]=S_{m+}$$

$$[S_{m0},S_{m-}]=-S_{m-}$$

提示：与5题类似

讨论：可以看出，上述对易关系式与角动量对易式

$$[J_+, J_-] = 2J_z \quad (\hbar = 1)$$

$$[J_z, J_+] = J_+$$

$$[J_z, J_-] = -J_-$$

相似，即 $S_{m+} \sim J_+$，$S_{m-} \sim J_-$，$S_{m0} \sim J_z$ （S_{m+}，S_{m-}，S_{m0}）称为 quasi-spin 称符，参阅：A·K·Kerman，Annels of physics, 12(1961), 300]

在轴对称变形场（第5题）情况，也可类似处理。

令：$S_{\nu+} = a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ \qquad S_{\nu-} = (S_{\nu+})^+ = a_{\bar{\nu}} a_\nu$

$$S_{\nu 0} = \frac{1}{2}[a_\nu^+ a_\nu + a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}} - 1] = \frac{1}{2}(\hat{n}_\nu - 1)$$

则：$[S_{\mu+}, S_{\nu-}] = 2S_{\mu 0}\delta_{\mu\nu}$

$$[S_{\mu 0}\ S_{\nu\pm}] = \pm S_{\mu\pm}\delta_{\mu\nu}$$

8、同上题，令 $\Omega_j = (j + \frac{1}{2})$

$$S_j^+ = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m} a_{jm}^+ a_{j-m}^+ = \sqrt{2}\sum_{m>0}\langle jm\,j{-}m|00\rangle a_{jm}^+ a_{j-m}^+,$$

$$S_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m} a_{j-m} a_{jm} = \sqrt{2}\sum_{m>0}\langle jm\,j{-}m|00\rangle a_{j-m} a_{jm},$$

$$\hat{n}_j = \sum_m a_{jm}^+ a_{jm}$$

S_j^+（S_j）代表在 ε_j 能级上产生（消灭）"一对粒子"的称符。

（两个粒子角动量耦合为零，称为"配对"）。

求证：

$$[S_i, S_j^+] = (1 - \hat{n}_i/\Omega_i)\delta_{ij}$$

$$[\hat{n}_i, S_j^+] = 2S_i^+\delta_{ij}$$

$$[\hat{n}_i, S_j] = -S_i\delta_{ij}$$

9. 同上题，设粒子间还有对力作用

$$H=\sum_{jm}\varepsilon_j a_{jm}^+ a_{jm}-\frac{G}{4}\sum_{jj'}S_j^+ S_{j'}$$

设体系只有一对粒子，处于"配对"态，即波函数表为

$$A^+|0\rangle=\sum_j C_j A_j^+|0\rangle,\quad (\sum_j|C_j|^2=1,\ 归一化条件)$$

求体系的能勇本征值。

提示：计称$[H,A^+]$，取真空态$|0\rangle$的能勇为零。与第6题相（ ）。解 $HA^+|0\rangle=[H,A^+]|0\rangle=EA^+|0\rangle$，所求出E满足下列（ ）子

$$\sum_j\left(\frac{\Omega_j}{E-2\varepsilon_j}\right)=-\frac{1}{G}。$$

参阅：J·Högaasen—Feldman. Nuclear physics, 28 (961). 258. 10。同上题，设ε_j能级上有K对粒子，$(K\leq\Omega_j)$，求证归一化的波函数可表为

$$\left[K!\prod_{\nu=0}^{K-1}\left(1-\frac{\nu}{\Omega_j}\right)\right]^{-\frac{1}{2}}(S_j^+)^K|0\rangle$$

参（ ）：曾谨（ ）《高能物理与核物理》2（1978）. 428.

15. 相对论量子力学

1. （ ）电磁（ ）中的 Dirac 粒子（电荷为$-e$）的定态方程出发，（ ）非相（ ）论近似，求出粒子的磁矩。

【解】 电磁（ ）中Dirac粒子的定态方程为

$$[(E+e\phi)-(\vec\alpha\cdot(\vec p+\frac{e}{c}\vec A)-\beta mc^2]\psi=0 \qquad (1)$$

（E为能勇）

（ ）用 $\vec\alpha=\begin{pmatrix}0&\vec\sigma\\\vec\sigma&0\end{pmatrix}\quad \beta=\begin{pmatrix}I&0\\0&-I\end{pmatrix}$

并令 $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ (2)

得 $(E+e\phi)\varphi-c(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}\chi-mc^2\varphi=0$ (3a)

$(E+e\phi)\chi-c(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}\varphi+mc^2\chi=0$ (3b)

从(3b)式 $\chi=\frac{1}{E+mc^2+e\phi}c(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}\varphi$ (4)

令 $E=E'+mc^2$ ($E'\ll mc^2$, 非相对论近似) (5)

于是 $\chi=\frac{1}{2mc^2+E'+e\phi}c(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}\varphi$

$\approx\frac{1}{2mc}(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}\varphi$ (略去高级小项) (6)

代入(3a),得:

$$(E+e\phi-mc^2)\varphi=c(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}\chi$$

$$=\frac{1}{2m}[(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}][(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\cdot\vec{\sigma}]\varphi \quad (7)$$

利用 $[\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})][\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})]=(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+i\vec{\sigma}\cdot[(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})\times(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})]$

$$=(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}\times\vec{A}+\vec{A}\times\vec{p})\frac{e}{c}$$

$$=(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+i\frac{e}{c}\vec{\sigma}\cdot(-i\hbar\nabla\times\vec{A})$$

$$=(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+\frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B},\quad(\vec{B}=\nabla\times\vec{A}) \quad (8)$$

代入(7)式得:

$$(E'+e\phi)\varphi=\frac{1}{2m}(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})^2\varphi+\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\varphi$$

$$=\frac{1}{2m}(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})^2\varphi-\vec{\mu}\cdot\vec{B}\varphi \quad (9)$$

其中 $\vec{\mu}=-\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}=-\frac{e}{mc}\vec{S}$

正是带电(−e)粒子的磁矩

2. 试从电磁场中的Dirac方程出发,求出几率守恒的微分方程,

ρ 与 $\vec{j}$ 的形式与自由粒子情况有无不同？

[解]：电磁场中的 Dirac 方程为（粒子带电 $-e$）

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[c\vec{\alpha}\cdot(\vec{p}+\frac{e}{c}\vec{A})+mc^2\beta-e\phi\right]\psi \qquad (1)$$

取厄密共轭：（$\vec{\alpha}^+=\vec{\alpha}$，$\beta^+=\beta$）

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t}=-c(\vec{p}\psi^+)\cdot\vec{\alpha}+\psi^+\left[e\vec{\alpha}\cdot\vec{A}+mc^2\beta-e\phi\right] \qquad (2)$$

上式右乘 ψ，得

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\psi=-c(\vec{p}\psi^+)\vec{\alpha}\cdot\psi+\psi^+\left[e\vec{\alpha}\cdot\vec{A}+mc^2\beta-e\phi\right]\psi \qquad (3)$$

ψ^+ 左乘(1)式，得：

$$+i\hbar\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t}=c\psi^+\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\psi+\psi^+\left[e\vec{\alpha}\cdot\vec{A}+mc^2\beta-e\phi\right]\psi \qquad (4)$$

(4)－(3)，得

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi)&=c\psi^+\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\psi+c(\vec{p}\psi^+)\vec{\alpha}\cdot\psi\\&=-i\hbar c\left[\psi^+\vec{\alpha}\cdot\nabla\psi+(\nabla\psi^+)\cdot\vec{\alpha}\psi\right]\\&=-i\hbar c\nabla\cdot(\psi^+\vec{\alpha}\psi)\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi)+\nabla\cdot(\psi^+c\vec{\alpha}\psi)=0$$

令 $\rho=\psi^+\psi$ （几率密度）

$\vec{j}=c\psi^+\vec{\alpha}\psi$ （几率流密度）

则 $\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=0$ （几率守恒的微分方程）

3. 证明，在非相对论极限情况下，Dirac 理论中的流密度将回到薛定谔理论中的流密度。

[证]：利用 1 题结果，几率流密度为

$$\vec{j}=c\psi^+\vec{\alpha}\psi \qquad (1)$$

与第 1 题相似，令 $\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ (2)

φ为大分量，于是

$$\vec{j} = c(\varphi^+\vec{\sigma}\chi + \chi^+\vec{\sigma}\varphi). \qquad (3)$$

再利用第1题结果，在非相对论极限情况下

$$\chi = \frac{1}{2mc}\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)\cdot\vec{\sigma}\varphi \qquad (4)$$

$$= \frac{1}{2mc}\left[(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\varphi + \frac{e}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{A}\varphi\right]$$

代入(3)式

$$2m\vec{j} = \varphi^+\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\varphi + [(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\varphi]^+\vec{\sigma}\varphi + \frac{e}{c}\varphi^+[\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A}) + (\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\vec{\sigma}]\varphi$$

$$= \varphi^+\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\varphi + (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\varphi^+\vec{\sigma}\varphi + \frac{e}{c}\varphi^+2\vec{A}\varphi$$

例如：$\varphi^+\sigma_x(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z)\varphi + \varphi^+(p_x\sigma_x + p_y\sigma_y + p_z\sigma_z)\sigma_x\varphi$

$$= \varphi^+p_x\varphi + \varphi^+(i\sigma_z p_y - i\sigma_y p_z)\varphi + \varphi^+\overleftarrow{p}_x\varphi + \varphi^+(i\overleftarrow{p}_y\sigma_z - i\overleftarrow{p}_z\sigma_y)\varphi$$

$$= \varphi^+p_x\varphi - \varphi^+i(\vec{\sigma}\times\vec{p})_x\varphi + \varphi^+\overleftarrow{p}_x\varphi + \varphi^+i(\overleftarrow{p}\times\vec{\sigma})_x\varphi$$

$$2m\vec{j} = [\varphi^+\vec{p}\varphi - (\vec{p}\varphi^+)\varphi] + i\varphi^+\vec{\sigma}\times\vec{p}\varphi + i\varphi^+\overleftarrow{p}\times\vec{\sigma}\varphi + \frac{2e}{c}\varphi^+\vec{A}\varphi$$

$$\vec{j} = \frac{-i\hbar}{2m}[\varphi^+\nabla\varphi - (\nabla\varphi^+)\varphi] + \frac{e}{mc}\vec{A}\varphi^+\varphi + i\frac{i\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^+\vec{\sigma}\varphi)$$

乘以电荷$-e$，得电流密度

$$\vec{j}_e = -\frac{e\hbar}{2mi}[\varphi^+\nabla\varphi - (\nabla\varphi^+)\varphi] - \frac{e^2}{mc}\vec{A}\varphi^+\varphi - \frac{e\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^+\vec{\sigma}\varphi)$$

$$= -\frac{e\hbar}{2mi}[\varphi^+\nabla\varphi - (\nabla\varphi^+)\varphi] - \frac{e^2}{mc}\vec{A}\varphi^+\varphi + c\nabla\times(\varphi^+\vec{\mu}\varphi)$$

其中 $\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}$

最后一项是由于电子有磁矩而产生的电流。前面二项正是带电粒子在电磁场中电流密度。

4、证明 Klein－Gordon（克莱因－戈登）方程可以表成 Schrodinger 方程的形式。

即 $$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=H\Psi \tag{1}$$

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3+i\tau_2)\nabla^2+mc^2\tau_3 \tag{2}$$

其中 $\tau_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$， $\tau_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$， $\tau_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$

讨论其物理意义

〔证〕： Klein—Gordon 方程含有对时间的二次微商。由(1)式对 t 求导，得

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3+i\tau_2)\nabla^2+mc^2\tau_3\right]^2\Psi \tag{3}$$

而 $$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3+i\tau_2)\nabla^2+mc^2\tau_3\right]^2$$

$$=+\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2(\tau_3+i\tau_2)^2\nabla^4-\frac{\hbar^2}{2m}[\tau_3+i\tau_2,\tau_3]mc^2\nabla^2+\tau_3^2m^2c^4$$

但 $$(\tau_3+i\tau_2)^2=\tau_3^2-\tau_2^2+i(\tau_3\tau_2+\tau_2\tau_3)=0 \tag{4}$$

$$[\tau_3+i\tau_2,\tau_3]=i\tau_2\tau_3-i\tau_3\tau_2=i2i\tau_1=-2\tau_1 \tag{5}$$

$$\therefore -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi=-\hbar c^2\nabla^2\Psi+m^2c^4\Psi \tag{6}$$

这正是 Klein—Gordon 方程

在 pauli 表象中，$\tau_3+i\tau_2=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&+1\\-1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&1\\-1&-1\end{pmatrix}$ 在含时对间的一次微分方程中，两个分量混在一起。在含时间的二次微分方程中，两个分量就分开了。但 H 并非 $\hbar=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ 的线性组合。把方程(1)写成两分量形式，令

$$\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix} \tag{8}$$

代入(1)式，得

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)+mc^2\varphi\\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)-mc^2\chi\end{aligned} \tag{9}$$

这相当于在(6)式中，令

$$\psi=\varphi+\chi,\quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=mc^2(\varphi-\chi) \tag{10}$$

因为此时，(6)式化为

$$+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\varphi-\chi)mc^2$$

$$=-\hbar^2c^2\nabla^2(\varphi+\chi)+m^2c^4(\varphi+\chi)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi+\frac{\hbar^2c^2\nabla^2}{2m}(\varphi+\chi)-mc^2\varphi$$

$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi+\frac{\hbar^2c^2\nabla^2}{2m}(\varphi+\chi)+mc^2\chi$$

可以求出方程(1)的电荷守恒方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3+i\tau_2)\nabla^2\Psi+mc^2\tau_3\Psi \tag{12}$$

取它的共轭 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^+=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2\Psi)^+(\tau_3-i\tau_2)+mc^2\tau_3\Psi$ (13)

(13) $\tau_3\Psi$ 得

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^+}{\partial t}\tau_3\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2\Psi)^+(\tau_3-i\tau_2)\tau_3\Psi+mc^2\Psi^+\Psi$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2\Psi^+)\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\Psi+mc^2\Psi^+\Psi \tag{14}$$

$\Psi\tau_3\times$(12)式得

$$i\hbar\Psi^+\tau_3\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^+\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\nabla^2\Psi+mc^2\Psi^+\Psi \tag{15}$$

(15)−(14) $\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\tau_3\Psi)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Big\{\Psi^+\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\nabla^2\Psi$

$$-(\nabla^2\Psi^+)\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\Psi\Big\}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\left\{\Psi^+\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^+)\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\Psi\right\} \tag{16}$$

令 $\quad\rho=e\Psi^+\tau_3\Psi$ (17)

$$\vec{j}=\frac{e\hbar}{2mi}\left\{\Psi^+\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^+)\tau_3(\tau_3+i\tau_2)\Psi\right\} \tag{18}$$

则

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\vec{j}=0 \tag{19}$$

利用变换(10)式代入无耒(含时间二次导数的)Klein—Gordon方程所相应的"几率守恒"方程中的ρ与$\vec{j}$的式子

$$\rho=\frac{ie\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)$$
$$\vec{j}=-\frac{ie\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right) \tag{20}$$

并利用(8)式，可得到(17)式与(18)式。

用分量形式表示出来

$$\rho=e(\varphi^*\varphi-\chi^*\chi)$$

φ描述荷电e的粒子，χ描述荷电$(-e)$的粒子。自旋为零的粒子在相对论情况下的波函数表成二个分量形式，相当于两种电荷态，这是一种新的自由度。

$\vec{j}$的表示式(18)的物理意义又可如下理解，由于粒子的"速度"算符

$$\vec{v}=\frac{d}{dt}\vec{r}=\frac{1}{i\hbar}[\vec{r},H]$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}(\tau_3+i\tau_2)[\vec{r},\vec{p}^2]+0$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}(\tau_3+i\tau_2)i\hbar\,2\vec{p}$$
$$=\frac{\vec{p}}{m}(\tau_3+i\tau_2)=\frac{\hbar}{im}(\tau_3+i\tau_2)\nabla$$

(18)式可表成 $\vec{j}=\frac{e\hbar}{2m}\{\Psi^+\tau_3\nabla\Psi-(\nabla\Psi^+)\tau_3\Psi\}$

5. 证明，对于Dirac粒子，当作用于能量本征态上，算符γ_5可以表成 $\gamma_5=-\frac{(E-mc^2\beta)(\vec{\Sigma}\cdot\vec{p})}{c\,\vec{p}^2}$

当$m=0$(中微子)，γ_5的等效算符表成什么形式？

[证明]：利用 $\alpha_j=\rho_1\Sigma_j=-\gamma_5\Sigma_j$

$$\therefore\quad -\vec{\alpha}\cdot\vec{p}=\gamma_5\vec{\Sigma}\cdot\vec{p}$$

Dirac 哈密顿量 $H=c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+mc^2\beta$

当作用于能量本征态上 $=E$ （能量本征值）

即 $$-\gamma_5 c\vec{\Sigma}\cdot\vec{p}+mc^2\beta=E$$

或 $$\gamma_5 c\vec{\Sigma}\cdot\vec{p}=(mc^2\beta-E)$$

上式两边右乘 $(\vec{\Sigma}\cdot\vec{p})$，利用 $(\vec{\Sigma}\cdot\vec{p})(\vec{\Sigma}\cdot\vec{p})=\vec{p}^2$

$$\therefore \quad \gamma_5=-\frac{(E-mc^2\beta)}{c\vec{p}^2}(\vec{\Sigma}\cdot\vec{p})$$

当 $m\to 0$ $\quad E=cp$,

而 $\quad \gamma_5=-(\vec{\Sigma}\cdot\vec{p})/p$, $\quad -\gamma_5=\rho_1=\vec{\Sigma}\cdot\vec{p}/p$

所以 $(-\gamma_5)$ 相当于中微子的 helicity operator

6、证明(1)对于无穷小 Lorentz 变换 $\Lambda=1+\frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}$,

$$\Lambda\gamma_5\Lambda^{-1}=\gamma_5$$

(2)对于空间反射 $\Lambda=i\gamma_4$，以及时间反演 $\Lambda=\gamma_1\gamma_2\gamma_3$,

$$\Lambda\gamma_5\Lambda^{-1}=\gamma_5$$

〔证〕：(1)利用 $[\gamma_5,\gamma_\mu]_+=0 \qquad \mu=1,2,3,4$

$$\therefore [\gamma_5,\gamma_\mu\gamma_\nu]=\gamma_5\gamma_\mu\gamma_\nu-\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_5=-\gamma_\mu\gamma_5\gamma_\nu-\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_5$$
$$=\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_5-\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma_5=0$$

而 $\sigma_{\mu\nu}=\frac{1}{2i}(\gamma_\mu\gamma_\nu-\gamma_\nu\gamma_\mu) \qquad \mu,\nu=1,2,3,4$

$\therefore \quad [\gamma_5,\sigma_{\mu\nu}]=0$，因而 $[\gamma_5,\Lambda]=0$，即 $\gamma_5\Lambda-\Lambda\gamma_5=0$

右乘 Λ^{-1}，得 $\quad \gamma_5-\Lambda\gamma_5\Lambda^{-1}=0$

(2)对于空间反射，$[\gamma_5\Lambda]_+=i[\gamma_5\gamma_4]_+=0$

$\therefore \gamma_5\Lambda+\Lambda\gamma_5=0 \qquad$ 即 $\gamma_5=-\Lambda\gamma_5\Lambda^{-1}$

对于时间反演

$$[\gamma_5\Lambda]_+=[\gamma_5\gamma_1\gamma_2\gamma_3]_+=\gamma_5\gamma_1\gamma_2\gamma_3+\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_5$$

$$=-\gamma_1\gamma_5\gamma_2\gamma_3+\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_5$$
$$=\gamma_1\gamma_2\gamma_5\gamma_3+\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_5$$
$$=-\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_5+\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_5=0 \quad \therefore \gamma_5=-\Lambda\gamma_5\Lambda^{-1}$$

7.按照特殊相对论，自由粒子的能量 $E=\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}$

当 $v/c \ll 1$ 时，
$$E=mc^2\left[1+\frac{p^2}{m^2c^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\approx mc^2+\frac{p^2}{2m}-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\cdots\cdots$$

把 mc^2 去掉后，考虑到相对论修正的首项，氢原子的哈密顿量可以表为
$$H=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r}+W, \quad W=-\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

把 W 看成微扰，求能级的一级修正。

8.同上题，考虑相对论修正，薛定谔方程表为：
$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(r)-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}\right)\psi=E\psi$$
$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(r) \qquad \hat{H}_0\psi^{(0)}=E^{(0)}\psi^{(0)}$$
$$W=-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} \quad \text{（微扰）}$$

并证
$$\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}\psi\approx-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}\psi^{(0)}=-\frac{T^2}{2mc^2}\psi^{(0)}=-\frac{(E-V)^2}{2mc^2}\psi^{(0)}$$
$$\approx-\frac{(E-V)^2}{2mc^2}\psi$$

于是薛定谔方程表为
$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+(V-E)-\frac{1}{2mc^2}(E-V)^2\right]\psi=0, \quad V=-\frac{e^2}{r}$$

试求解上述方程，求出氢原子的能级。

参阅：E. U Condon G. H Shortley, The Theory of Atomik Spentre (1935), P. 118.