第十次作业

截止时间: 2022 年 11 月 28 日 (周一)

姓名：陈　稼　霖
学号：SA21038052
成绩：__________

第 1 题 (课本习题 5.11) 得分: ________. 一个双态系统的哈密顿量矩阵能被写为

$$\mathcal{H}=\begin{pmatrix}E_1^0 & \lambda\Delta\\ \lambda\Delta & E_2^0\end{pmatrix}$$

很清楚, 无微扰问题 ($\lambda=0$) 的能量本征函数由

$$\phi_1^{(0)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \phi_z^{(0)}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

给出.

(a) 精确求解这个问题以找到能量本征函数 ψ_1 和 ψ_2, 及能量本征值 E_1 和 E_2.

(b) 假定 $\lambda|\Delta|\ll|E_1^0-E_2^0|$, 使用时间无关微扰论, 求解同样的问题到一级的能量本征函数和到二级的能量本征值. 并与 (a) 中得到的精确结果比较.

(c) 假定两个无微扰的能量是“几乎简并”的, 即

$$\left|E_1^0-E_2^0\right|\ll\lambda\left|\Delta\right|.$$

证明 (a) 中得到的精确结果非常像通过令 E_1^0 严格等于 E_2^0, 而把简并微扰论应用于这个问题时所期待的结果.

解: (a) 通过

$$|\mathcal{H}-EI|=\begin{vmatrix}E_1^0-E & \lambda\Delta\\ \lambda\Delta & E_2^0-E\end{vmatrix}=E^2-(E_1^0+E_2^0)E+E_1^0E_2^0-\lambda^2\Delta^2=0 \tag{1}$$

解得该问题的能量本征值为

$$E_{1,2}=\frac{(E_1^0+E_2^0)\pm\sqrt{(E_1^0-E_2^0)^2+4\lambda^2\Delta^2}}{2}. \tag{2}$$

将这两个能量本征值分别代入本征方程

$$\mathcal{H}\psi_{1,2}=E_{1,2}\psi_{1,2} \tag{3}$$

中可得对应的归一化能量本征函数分别为

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{(E_1-E_2^0)^2+\lambda^2\Delta^2}}\begin{bmatrix}E_1-E_2^0\\ \lambda\Delta\end{bmatrix},\quad \psi_2=\frac{1}{\sqrt{(E_2-E_1^0)^2+\lambda^2\Delta^2}}\begin{bmatrix}\lambda\Delta\\ E_2-E_1^0\end{bmatrix}. \tag{4}$$

(b) 使用时间无关微扰论, 该问题的精确到一级的能量本征函数为

$$\psi_1=\phi_1^0+\lambda\frac{\Delta}{E_1^0-E_2^0}\phi_2^0,\quad \psi_2=\phi_2^0+\lambda\frac{\Delta}{E_2^0-E_1^0}\phi_1^0. \tag{5}$$

精确到二级的能量本征值为

$$E_1=E_1^0+\frac{\lambda^2\left|\Delta\right|^2}{E_1^0-E_2^0},\quad E_2=E_2^0+\frac{\lambda^2\left|\Delta\right|^2}{E_2^0-E_1^0}. \tag{6}$$

由(a) 中的精确结果, 关于 $\lambda\Delta$ 展开并取到一阶小量的能量本征函数为

$$\psi_1=\begin{bmatrix}1\\ \frac{\lambda\Delta}{E_1^0-E_2^0}\end{bmatrix},\quad \psi_2=\begin{bmatrix}\frac{\lambda\Delta}{E_2^0-E_1^0}\\ 1\end{bmatrix}. \tag{7}$$

关于 $\lambda\Delta$ 展开并取到二阶小量的能量本征值为

$$E_1=\max\{E_1^0,E_2^0\}+\frac{\lambda\left|\Delta\right|^2}{|E_1^0-E_2^0|},\quad E_2=\min\{E_1^0,E_2^0\}-\frac{\lambda\left|\Delta\right|}{|E_1^0-E_2^0|}. \tag{8}$$

可见, 由时间无关微扰论得到的结果与精确结果一致.

(c) 先令E_1^0 严格等于E_2^0 并应用简并微扰论: 微扰矩阵为

$$V=\begin{bmatrix}0 & \lambda\Delta\\ \lambda\Delta & 0\end{bmatrix}, \tag{9}$$

通过久期方程

$$|V-EI|=\begin{vmatrix}-\Delta^{(1)} & \lambda\Delta\\ \lambda\Delta & -\Delta^{(1)}\end{vmatrix}=(\Delta^{(1)})^2-(\lambda\Delta)^2=0 \tag{10}$$

解得该微扰矩阵的本征能量 (一阶能量修正) 为

$$\Delta_{1,2}^{(1)}=\pm\lambda\Delta. \tag{11}$$

将这两个本征值代入微扰矩阵的本征方程

$$V\psi_{1,2}^{(0)}=\Delta_{1,2}^{(1)}\psi_{1,2}^{(0)} \tag{12}$$

解得对应的零阶本征矢分别为

$$\psi_{1,2}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ \pm1\end{bmatrix}. \tag{13}$$

原简并子空间内的一阶态矢修正为

$$P_0\psi_1^{(1)}=\frac{\lambda\psi_2^{(0)}}{\Delta_1^{(1)}-\Delta_2^{(1)}}\sum_{k\notin D}\cdots=0, \tag{14}$$

$$P_0\psi_2^{(1)}=\frac{\lambda\psi_1^{(0)}}{\Delta_2^{(1)}-\Delta_1^{(1)}}\sum_{k\notin D}\cdots=0, \tag{15}$$

原简并子空间外的一阶态矢修正为

$$P_1\psi_{1,2}^{(1)}=0 \tag{16}$$

故一阶态矢修正为

$$\psi_{1,2}^{(1)}=P_0\psi_{1,2}^{(1)}+P_1\psi_{1,2}^{(1)}=0. \tag{17}$$

二阶能量修正为

$$\Delta_{1,2}^{(2)}=\sum_{k\notin D}\cdots=0. \tag{18}$$

综上, 精确到一级的能量本征函数为

$$\psi_{1,2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ \pm1\end{bmatrix}, \tag{19}$$

精确到二级的能量本征值为

$$E_{1,2}=E_1^0\pm\lambda\Delta. \tag{20}$$

再精确求解: 当两个无微扰的能量几乎简并, 即 $|E_1^0-E_2^0|\ll\lambda|\Delta|$ 时, 能量本征函数为

$$\psi_{1,2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}\pm1\\ 1\end{bmatrix}, \tag{21}$$

能量本征值为

$$E_{1,2}=\frac{E_1^0+E_2^0}{2}\pm\lambda\Delta. \tag{22}$$

可见, 通过简并微扰论得到的结果与精确结果是一致的.

□

第 2 题 (课本习题 5.13) 得分: ________. 在下述情况下计算氢的 $2\,\mathrm{S}_{1/2}$ 和 $2\,\mathrm{P}_{1/2}$ 能级的斯塔克效应, 在那里场 ε 足够的弱以至 $e\varepsilon a_0$ 小于精细结构, 但要计入兰姆位移 δ ($\delta=1057\,\mathrm{MHz}$) (即在计算中忽略 $2\,\mathrm{P}_{3/2}$ 能级). 证明: 当 $e\varepsilon a_0\ll\delta$ 时, 能移对 ε 是二次的; 而当 $e\varepsilon a_0\gg\delta$ 时, 能移对 ε 是线性的. (所需径向积分是 $\langle 2s|r|2p\rangle=3\sqrt{3}a_0$.) 简要地讨论这个问题的时间反演结果 (如果有的话). 这个问题取自 Gottfried 1966, 习题 7-3.

解: 无微扰时, 考虑兰姆位移 δ, 能量本征态 $|2S_{1/2}\rangle$ 和 $|2P_{1/2}\rangle$ 的能量本征值分别为 $E_2+\delta$ 和 E_2, 故系统的无微扰哈密顿量可表为

$$H_0=\begin{bmatrix}E_2+\delta & 0\\ 0 & E_2\end{bmatrix}. \tag{23}$$

外加电场 ε 带来的微扰为

$$V=-e\varepsilon z, \tag{24}$$

其中由于 $|2S_{1/2}\rangle$ 和 $|2P_{1/2}\rangle$ 分别具有偶/奇宇称, 故 $\langle 2S_{1/2}|V|2S_{1/2}\rangle=\langle 2P_{1/2}|V|2P_{1/2}\rangle=0$, 由于径向积分 $\langle 2s|r|2p\rangle=\langle 2s|\sqrt{x^2+y^2+z^2}|2p\rangle=\langle 2s|\sqrt{3}\,|z|\,|2p\rangle=3\sqrt{3}a_0$, 故 $\langle 2s|V|2p\rangle=-3e\varepsilon a_0$, 从而微扰可表为

$$V=\begin{bmatrix}0 & -3e\varepsilon a_0\\ -3e\varepsilon a_0 & 0\end{bmatrix}. \tag{25}$$

微扰下哈密顿量为

$$H=H_0+V=\begin{bmatrix}E_2+\delta & -3e\varepsilon a_0\\ -3e\varepsilon a_0 & E_2\end{bmatrix}. \tag{26}$$

当 $e\varepsilon a_0\ll\delta$ 时, 可认为 $|2S_{1/2}\rangle$ 和 $|2P_{1/2}\rangle$ 不简并, 利用<u>非简并定态微扰论</u>, 精确到二级的能量本征值为

$$E_{2S_{1/2}}=E_2+\delta+\frac{(3e\varepsilon a_0)^2}{\delta},\quad E_{2P_{1/2}}=E_2-\frac{(3e\varepsilon a_0)^2}{\delta}, \tag{27}$$

故此时的能移对 ε 是二次的.

当 $e\varepsilon a_0\gg\delta$ 时, 可认为 $|2S_{1/2}\rangle$ 和 $|2P_{1/2}\rangle$ 近简并, 利用<u>简并定态微扰论</u>, 通过久期方程

$$\left|V-\Delta^{(1)}I\right|=\begin{vmatrix}\Delta^{(1)} & -3e\varepsilon a_0\\ -3e\varepsilon a_0 & \Delta^{(0)}\end{vmatrix}=(\Delta^{(1)})^2-(3e\varepsilon a_0)^2=0 \tag{28}$$

解得一阶能量修正为

$$\Delta^{(1)}_{2S_{1/2}}=+3e\varepsilon a_0,\quad \Delta^{(1)}_{2P_{1/2}}=-3e\varepsilon a_0, \tag{29}$$

故此时的能移对 ε 是线性的.

在时间反演变换下, $|2S_{1/2}\rangle\to|2S_{1/2}\rangle$ (不变), $|2P_{1/2}\rangle\to|2P_{1/2}\rangle$ 不变, 位置坐标 $\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}$ (不变), 电场 $\varepsilon\to\varepsilon$ (不变), 从而微扰算符 V 仅改变符号, 用与上文相同的推导方法最终得到的能移是相同的. □

第 3 题 (补充习题) 得分: ________. 对类氢原子, 求解 $\langle nlm|\frac{1}{r}\frac{\partial V_c}{\partial r}|nlm\rangle$.

解: 对类氢原子,

$$V_c=-\frac{Ze^2}{r},\tag{30}$$

故

$$\langle nlm|\frac{1}{r}\frac{\partial V_c}{\partial r}|nlm\rangle=\langle nlm|\frac{Ze^2}{r^3}|nlm\rangle.\tag{31}$$

注意到对任意算符 A, 均有

$$\langle nlm|[H_0,A]|nlm\rangle=\langle nlm|H_0A|nlm\rangle-\langle nlm|AH_0|nlm\rangle=E_{nl}^{(0)}\langle nlm|A|nlm\rangle-E_{nl}^{(0)}\langle nlm|A|nlm\rangle=0.\tag{32}$$

取径向动量算符 $A=p_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$, 则有

$$\begin{aligned}&\langle nlm|\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)+\frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2}+V_c(r),p_r\right]|nlm\rangle\\=&\langle nlm|\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V_c(r),p_r\right]|nlm\rangle=0,\end{aligned}\tag{33}$$

其中 H_0 的径向部分 $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)$ 是与径向动量算符 p_r 对易的, 而 H_0 的角向部分 $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ 和带有 $\frac{\partial}{\partial r}$ 的 V_c 与径向角动量算符 p_r 不对易:

$$\langle nlm|\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-\frac{Ze^2}{r},p_r\right]|nlm\rangle=-i\hbar\langle nlm|\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{mr^3}-\frac{Ze^2}{r^2}\right]|nlm\rangle\tag{34}$$

$$\Longrightarrow\langle nlm|\frac{Ze^2}{r^3}|nlm\rangle=\frac{m}{l(l+1)\hbar^2}\langle nlm|\frac{(Ze^2)^2}{r^2}|nlm\rangle.\tag{35}$$

由课本式 (5.3.9) 和式 (3.7.53),

$$\begin{aligned}\langle nlm|\frac{1}{r}\frac{\partial V_c}{\partial r}|nlm\rangle=&\langle nlm|\frac{Ze^2}{r^3}|nlm\rangle=\frac{m}{l(l+1)\hbar^2}\frac{4n}{l+1/2}(E_n^{(0)})^2=-\frac{2m^2c^2Z^2\alpha^2}{nl(l+1)(l+1/2)\hbar^2}E_n^{(0)}\\=&\frac{m^3c^4Z^4\alpha^4}{n^3l(l+1)(l+1/2)\hbar^2}.\end{aligned}\tag{36}$$

□

第 4 题 (课本习题 5.17) 得分: ________. (a) 一个刚性转子处于一个垂直于其转轴的磁场中, 假定它的哈密顿量具有如下形式 (Merzbacher 1970, 习题 17-1)

$$A\boldsymbol{L}^2+BL_z+CL_y$$

如果磁场的二次项被忽略的话. 假设 $B\gg C$, 将微扰论用到最低非零级以获得近似的能量本征值.

(b) 考虑一个单电子 (如, 碱金属) 原子的矩阵元

$$\langle n'l'm_l'm_s'|(3z^2-r^2)|nlm_lm_s\rangle,$$
$$\langle n'l'm_l'm_s'|xy|nlm_lm_s\rangle.$$

对 Δl, Δm_l 和 Δm_s 写出选择定则. 证明你的答案是合理的.

解: (a) 由于 $B\gg C$, 以该哈密顿量的前两项为无微扰哈密顿量

$$H_0=A\boldsymbol{L}^2+BL_z,\tag{37}$$

以末项为微扰

$$V = CL_y = C\frac{L_+ - L_-}{2i}. \tag{38}$$

无微扰时的能量本征态为 $|lm\rangle$, 对应的能量本征值为 $E_{lm}^{(0)} = A\hbar^2 l(l+1) + B\hbar m$. 利用非简并定态微扰论, 一阶能量本征值修正为

$$\Delta_{lm}^{(1)} = \langle lm|V|lm\rangle = \frac{C}{2i}\langle lm|L_+ - L_-|lm\rangle = 0, \tag{39}$$

二阶能量本征值修正为

$$\begin{aligned}\Delta_{lm}^{(2)} =& \sum_{l'm'}\frac{|\langle lm|V|l'm'\rangle|^2}{E_{lm}^{(0)} - E_{l'm'}^{(0)}}\\ =& \frac{C^2}{4}\sum_{l'm'}\frac{|\langle lm|L_+ - L_-|l'm'\rangle|^2}{E_{lm}^{(0)} - E_{l'm'}^{(0)}}\\ =& \frac{C^2\hbar^2}{4}\sum_{l'm'}\frac{\left|\sqrt{m'+1}\delta_{ll'}\delta_{m,m'+1} - \sqrt{m'}\delta_{ll'}\delta_{m,m'-1}\right|^2}{A\hbar^2 l(l+1) + B\hbar m - A\hbar^2 l'(l'+1) - B\hbar m'}\\ =& \frac{C^2\hbar m}{2B}.\end{aligned}$$

故精确到最低非零级的近似能量本征值为

$$E_{lm}^{(2)} = E_{lm}^{(0)} + \Delta_{lm}^{(1)} + \Delta_{lm}^{(2)} = A\hbar^2 l(l+1) + B\hbar m + \frac{C^2\hbar m}{2B}. \tag{40}$$

(b) 这些矩阵元与电子自旋无关, 故不会引起自旋翻转, $\Delta m_s = 0$.

由课本习题 (3.32),

$$\begin{aligned}\langle n'l'm_l'm_s'|(3z^2 - r^2)|nlm_lm_s\rangle =& \sqrt{\frac{16\pi}{5}}\langle n'l'm_l'm_s'|r^2 Y_2^0(\boldsymbol{r})|nlm_lm_s\rangle\\ =& \sqrt{\frac{16\pi}{5}}\langle l2;m_l0|l2;l'm_l'\rangle\frac{\langle n'l'\|Y^{(2)}(\boldsymbol{r})\|nl\rangle}{\sqrt{2l+1}}\delta_{m_sm_s'}.\end{aligned} \tag{41}$$

考虑到 Clebsch-Gordan 系数 $\langle l2;m_l0|l2;l'm_l'\rangle$ 仅当 $m_l = m_l'$, $|l-2| \le l' \le l+2$ 时不为零, 并且由于 $Y^{(2)}(\boldsymbol{r})$ 具有偶宇称, 故 $\langle n'l'|Y^{(2)}(\boldsymbol{r})|nl\rangle$ 仅当 $\Delta l = l - l'$ 为偶数时不为零. 综上, 矩阵元 $\langle n'l'm_l'm_s'|(3z^2 - r^2)|nlm_lm_s\rangle$ 对应的微扰引发的跃迁遵循选择定则: $\underline{\Delta l \text{ 为偶数且}|l-2| \le l' \le l+2,\ \Delta m_l = 0,\ \Delta m_l = 0,\ \Delta m_s = 0}$.

由课本习题 (3.32) 并利用 Wigner-Eckart 定理,

$$\begin{aligned}\langle n'l'm_l'm_s'|xy|n'l'm_l'm_s'\rangle =& i\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\langle n'l'm_l'm_s'|r^2[Y_2^{-2}(\boldsymbol{r}) + Y_2^{+2}(\boldsymbol{r})]|nlm_lm_s\rangle\\ =& i\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left[\langle l2;m_l,-2|l2;l'm_l'\rangle + \langle l2;m_l2|l2;l'm_l'\rangle\right]\frac{\langle n'l'|Y^{(2)}|nl\rangle}{\sqrt{2l+1}}\delta_{m_sm_s'}.\end{aligned} \tag{42}$$

考虑到 Clebsch-Gordan 系数 $\langle l2;m_l,-2|l2;l'm_l'\rangle$ 仅当 $m_l - 2m_l'$, $|l-2| \le l' \le l+2$ 时不为零, $\langle l2;m_l2|l2;l'm_l'\rangle$ 仅当 $m_l + 2 = m_l'$, $|l-2| \le l' \le l+2$ 时不为零, 并且由于 $Y^{(2)}(\boldsymbol{r})$ 具有偶宇称, 故 $\langle n'l'|Y^{(2)}(\boldsymbol{r})|nl\rangle$ 仅当 $\Delta l = l - l'$ 为偶数时不为零. 综上, 矩阵元 $\langle n'l'm_l'm_s'|xy|nlm_lm_s\rangle$ 对应的微扰引发的跃迁遵循选择定则: $\underline{\Delta l \text{ 为偶数且}|l-2| \le l' \le l+2,\ \Delta m_l = \pm 2,\ \Delta m_s = 0}$.

□

第 5 题 (课本习题 5.19) 得分: ________. (Merzbacher 1970, 448 页, 习题 11.) 对氦 (He) 的波函数, 使用

$$\psi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = (Z_{\text{有效}}^3/\pi a_0^3)\exp\left[-\frac{Z_{\text{有效}}(r_1 + r_2)}{a_0}\right]$$

其中 $Z_{有效}=2-5/16$, 它是使用变分法得到的. 抗磁磁化率的测量值是 $1.88\times10^{-6}\,\mathrm{cm}^3/\mathrm{mole}$.

如果系统处在一个由矢势 $\boldsymbol{A}=(1/2)\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$ 描写的一个均匀磁场中, 使用对于在磁场中原子电子的哈密顿量, 确定一个零角动量态的到 B^2 量级的能量变化.

用 $E=-(1/2)\chi B^2$ 定义原子的抗磁磁化率 χ, 计算基态氦原子的 χ, 并将其与测量值比较.

解: 磁场带来的 B^2 量级的微扰为

$$V=\frac{e^2}{8m_ec^2}B^2[(x_1^2+y_1^2)+(x_2^2+y_2^2)]. \tag{43}$$

该微扰带来基态的能量变化为

$$\begin{aligned}\Delta=&\int\psi^*(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)V\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}_2\\=&\frac{e^2}{8m_ec^2}B^2\frac{Z_{有效}^3}{\pi a_0^3}\left\{\frac{2}{3}4\pi\int_0^\infty r_1^2\exp\left(-\frac{2Z_{有效}r_1}{a_0}\right)r_1^2\,\mathrm{d}r_1+\frac{2}{3}4\pi\int_0^\infty r_2^2\exp\left(-\frac{2Z_{有效}r_2}{a_0}\right)r_2^2\,\mathrm{d}r_2\right\}\\=&\frac{e^2B^2a_0^2}{2Z_{有效}^2m_ec^2}.\end{aligned} \tag{44}$$

其中利用了 $\langle x^2\rangle=\langle y^2\rangle=\langle z^2\rangle=\frac{1}{3}\langle r^2\rangle$, 以及积分 $\int_0^\infty e^{-\alpha r}r^n\,\mathrm{d}r=\frac{n!}{\alpha^{n+1}}$. 基态氦原子的抗磁磁化率为

$$\chi=-\frac{2\Delta}{B^2}=-\frac{e^2a_0^2}{Z_{有效}^2m_ec^2}=-2.76\times10^{-36}\mathrm{m}^3/\mathrm{atom}=1.67\times10^{-6}\mathrm{cm}^3/\mathrm{mol}. \tag{45}$$

(注意此处的 e 为高斯单位制的元电荷. 最前面的系数 2 是因为氦原子中含有两个电子, 他们在外加磁场下均感应出磁矩从而均产生 Δ 的能量变化.) 该理论计算结果与测量值吻合. □

第 6 题 (课本习题 5.20) 得分: ________. 使用试探波函数

$$\langle\boldsymbol{x}|\tilde{0}\rangle=e^{-\beta|x|}$$

其中 β 作为变分参数, 估算一维简谐振子的基态能量. 可以使用

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r}r^n\,\mathrm{d}r=\frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

解: 一维简谐振子的哈密顿量为

$$H=-\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}. \tag{46}$$

试探波函数对应的能量为

$$\bar{H}=\frac{\langle\tilde{0}|H|\tilde{0}\rangle}{\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle}=\frac{\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\beta|x|}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)e^{-\beta|x|}\,\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2\beta|x|}\,\mathrm{d}x}, \tag{47}$$

其中

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\beta|x|}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}e^{-\beta|x|}\,\mathrm{d}x=&-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\epsilon\to0}\left[2\int_\epsilon^\infty e^{-\beta x}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}e^{-\beta x}+\int_{-\epsilon}^{\epsilon}e^{-\beta|x|}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}e^{-\beta|x|}\,\mathrm{d}x\right]\\=&-\frac{\hbar^2}{2m}\left[2\beta^2\int_\epsilon^\infty e^{-2\beta x}\,\mathrm{d}x+e^{-\beta\cdot0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}e^{-\beta|x|}}{\mathrm{d}x}\right)\right]\\=&-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\beta+\left(\frac{\mathrm{d}e^{-\beta|x|}}{\mathrm{d}x}\right)_{-\epsilon}^{\epsilon}\right]\\=&\frac{\hbar^2\beta}{2m},\end{aligned} \tag{48}$$

$$\frac{m\omega^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-2\beta|x|}\,\mathrm{d}x = m\omega^2\int_0^{+\infty}x^2e^{-2\beta x}\,\mathrm{d}x = \frac{m\omega^2}{4\beta^3}, \tag{49}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2\beta|x|} = \frac{1}{\beta}, \tag{50}$$

故

$$\bar{H} = \frac{\hbar^2\beta^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{4\beta^2}. \tag{51}$$

要使估算的基态能量最小, 则需参数 β 满足

$$\frac{\partial\bar{H}}{\partial\beta} = \frac{\hbar^2\beta}{m} - \frac{m\omega^2}{2\beta^3} = 0, \tag{52}$$

$$\Longrightarrow \beta^2 = \frac{m\omega}{\sqrt{2}\hbar}, \tag{53}$$

此时估算的基态能量为

$$\bar{H} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}. \tag{54}$$

□