

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

$$\phi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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

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

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

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

解得该问题的能量本征值为

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

将这两个能量本征值分别代入本征方程

$$\mathcal{H}\psi_{1,2} = E_{1,2}\psi_{1,2} \quad (3)$$

中可得对应的归一化能量本征函数分别为

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

- (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

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

精确到二级的能量本征值为

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

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

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

关于 $\lambda\Delta$ 展开并取到二阶小量的能量本征值为

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

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

$$V = \begin{bmatrix} 0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & 0 \end{bmatrix}, \quad (9)$$

通过久期方程

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

解得该微扰矩阵的本征能量 (一阶能量修正) 为

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

将这两个本征值代入微扰矩阵的本征方程

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

解得对应的零阶本征矢分别为

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

原简并子空间内的一阶态矢修正为

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

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

原简并子空间外的一阶态矢修正为

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

故一阶态矢修正为

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

二阶能量修正为

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

综上, 精确到一级的能量本征函数为

$$\psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{bmatrix}, \quad (19)$$

精确到二级的能量本征值为

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

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

$$\psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (21)$$

能量本征值为

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

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 $2S_{1/2}$ 和 $2P_{1/2}$ 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 ($\delta = 1057 \text{ MHz}$) (即在计算中忽略 $2P_{3/2}$ 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

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

外加电场 ε 带来的微扰为

$$V = -e\varepsilon z, \quad (24)$$

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

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

微扰下哈密顿量为

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

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

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

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, 利用简并定态微扰论, 通过久期方程

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

解得一阶能量修正为

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

故此时的能移对 ε 是线性的.

在时间反演变换下, $|2S_{1/2}\rangle \rightarrow |2S_{1/2}\rangle$ (不变), $|2P_{1/2}\rangle \rightarrow |2P_{1/2}\rangle$ 不变, 位置坐标 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}$ (不变), 电场 $\varepsilon \rightarrow \varepsilon$ (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,

$$V_c = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (30)$$

故

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

注意到对任意算符 A , 均有

$$\langle nlm | [H_0, A] | nlm \rangle = \langle nlm | H_0 A | nlm \rangle - \langle nlm | A H_0 | nlm \rangle = E_n^{(0)} \langle nlm | A | nlm \rangle - E_n^{(0)} \langle nlm | A | nlm \rangle = 0. \quad (32)$$

取径向动量算符 $A = p_r$, 则有

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

其中 H_0 的径向部分 $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right)$ 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:

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

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

由课本式 (5.3.9) 和式 (3.7.53),

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

□

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)

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

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

$$\begin{aligned} & \langle n'l'm'_l m'_s | (3z^2 - r^2) | nlm_l m_s \rangle, \\ & \langle n'l'm'_l m'_s | xy | nlm_l m_s \rangle. \end{aligned}$$

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

$$H_0 = A\mathbf{L}^2 + BL_z, \quad (37)$$

以末项为微扰

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

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

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

二阶能量本征值修正为

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

故精确到最低非零级的近似能量本征值为

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

(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),

$$\begin{aligned} \langle n'l'm'_l m'_s | (3z^2 - r^2) | nlm_l m_s \rangle &= \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \langle n'l'm'_l m'_s | r^2 Y_2^0(\mathbf{r}) | nlm_l m_s \rangle \\ &= \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \langle l2; m_l 0 | l2; l' m'_l \rangle \frac{\langle n'l' || Y^{(2)}(\mathbf{r}) || nl \rangle}{\sqrt{2l+1}} \delta_{m_s m'_s}. \end{aligned} \quad (41)$$

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

由课本习题 (3.32) 并利用 Wigner-Eckart 定理,

$$\begin{aligned} \langle n'l'm'_l m'_s | xy | n'l'm'_l m'_s \rangle &= i \sqrt{\frac{2\pi}{15}} \langle n'l'm'_l m'_s | r^2 [Y_2^{-2}(\mathbf{r}) + Y_2^{+2}(\mathbf{r})] | nlm_l m_s \rangle \\ &= i \sqrt{\frac{2\pi}{15}} [\langle l2; m_l, -2 | l2; l' m'_l \rangle + \langle l2; m_l 2 | l2; l' m'_l \rangle] \frac{\langle n'l' || Y^{(2)}(\mathbf{r}) || nl \rangle}{\sqrt{2l+1}} \delta_{m_s m'_s}. \end{aligned} \quad (42)$$

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

□

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

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

其中 $Z_{\text{有效}} = 2 - 5/16$, 它是使用变分法得到的. 抗磁磁化率的测量值是 $1.88 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{mole}$.

如果系统处在一个由矢势 $\mathbf{A} = (1/2)\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ 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 , 计算基态氢原子的 χ , 并将其与测量值比较.

解: 磁场带来的 B^2 量级的微扰为

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

该微扰带来基态的能量变化为

$$\begin{aligned} \Delta &= \int \psi^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) V \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2 \\ &= \frac{e^2}{8m_e c^2} B^2 \frac{Z_{\text{有效}}^3}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{2}{3} 4\pi \int_0^\infty r_1^2 \exp\left(-\frac{2Z_{\text{有效}} r_1}{a_0}\right) r_1^2 dr_1 + \frac{2}{3} 4\pi \int_0^\infty r_2^2 \exp\left(-\frac{2Z_{\text{有效}} r_2}{a_0}\right) r_2^2 dr_2 \right\} \\ &= \frac{e^2 B^2 a_0^2}{2Z_{\text{有效}}^2 m_e c^2}. \end{aligned} \quad (44)$$

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 $\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^n dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$. 基态氢原子的抗磁磁化率为

$$\chi = -\frac{e^2 Z a_0^2}{Z_{\text{有效}}^2 m_e c^2} = -2.76 \times 10^{-36} \text{ m}^3/\text{atom} = 1.67 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{mol}. \quad (45)$$

(注意此处的 e 为高斯单位制的元电荷.) 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

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

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

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

解: 一维简谐振子的哈密顿量为

$$H = -\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (46)$$

试探波函数对应的能量为

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

其中

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta|x|} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\beta|x|} dx &= -\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[2 \int_{\epsilon}^{\infty} e^{-\beta x} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\beta x} + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} e^{-\beta|x|} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\beta|x|} dx \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[2\beta^2 \int_{\epsilon}^{\infty} e^{-2\beta x} dx + e^{-\beta \cdot 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} d \left(\frac{de^{-\beta|x|}}{dx} \right) \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\beta + \left(\frac{de^{-\beta|x|}}{dx} \right)_{-\epsilon}^{\epsilon} \right] \\ &= \frac{\hbar^2 \beta}{2m}, \end{aligned} \quad (48)$$

$$\frac{m\omega^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\beta|x|} dx = m\omega^2 \int_0^{+\infty} x^2 e^{-2\beta x} dx = \frac{m\omega^2}{4\beta^3}, \quad (49)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta|x|} dx = \frac{1}{\beta}, \quad (50)$$

故

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

要使估算的基态能量最小, 则需参数 β 满足

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

$$\implies \beta^2 = \frac{m\omega}{\sqrt{2}\hbar}, \quad (53)$$

此时估算的基态能量为

$$\bar{H} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}. \quad (54)$$

□