求出氢原子基态波函数在动量表象中的表示式。利用所得结果，计算 $\bar{p}_x^2$。用 x 表象中的氢原子波函数计算 $\bar{x}^2$,并验证测不准关系式。

（解）本题是三维问题，氢原子基态波函数用坐标表象时写作：

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}e^{-\frac{r}{a}} \qquad (1)$$

但 $a\equiv\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是玻尔半径，将（1）代入三维的坐标---动量波函数变换式，此式是：

$$\varphi(\hat{\vec{p}})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_\tau \psi(\vec{r})e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/h}d^3x$$

为使计算简单，可选择 z 轴与动量 $\vec{p}$ 的方向重合，这样

$$\vec{p}\cdot\vec{r}=pr\cos\theta$$

将（2）中的 $\psi(r)$ 用（1）式代入，进行积分，积分的次序是 φ，θ，r：

$$\phi(p)=\frac{1}{\pi^2(2\hbar a)^{3/2}}\iiint_{\phi\theta r} e^{-\frac{r}{a}-i\frac{pr\cos\theta}{\hbar}}r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$$

$$=\frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\iint_{\theta r}(e^{-\frac{r}{a}-ipr\cos\theta/\hbar}\sin\theta d\theta)r^2dr$$

$$=\frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\iint_{\theta r}-(e^{-\frac{r}{a}-ipr\cos\theta/\hbar}d\cos\theta)r^2dr$$

$$=\frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\iint_{\theta r}-\frac{\hbar}{ip}(e^{-\frac{r}{a}-ipr\cos\theta/\hbar}d\frac{ip\cos\theta}{\hbar})r^2dr$$

$$=\frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\int\frac{\hbar}{ipr}\left(e^{-\frac{r}{a}+\frac{ipr}{\hbar}}-e^{-\frac{r}{a}-\frac{ipr}{\hbar}}\right)\ r^2dr$$

$$=\frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\int\frac{\hbar}{ip}e^{-\frac{r}{a}}(2i\sin\frac{pr}{\hbar})\ rdr$$

$$=\frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\int 2\frac{\hbar}{p}e^{-\frac{r}{a}}\sin\frac{pr}{\hbar}rdr$$

$$\int_0^{\infty} xe^{-ax}\sin(bx)dx=\frac{2ab}{(a^2+b^2)^2};\text{(常用积分第13个)}$$

$$=\frac{(2a\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a^2p^2+\hbar^2)^2} \qquad (3)$$

其次为了验证氢原子的测不准关系，需要计算坐标动量的平均值，计算与坐标有关的平均值时，用$\psi(\bar{r})$为波函数，反之计算动量平均值时，可用动量波函数$\varphi(\bar{p})$：测不准关系的验证，是通过一个指定方向（如 x 轴）的分量间关系：

$$\bar{x}=\iiint_{\tau}|\psi(\bar{r})|^2xd^2r=\frac{1}{\pi a^2}\iiint_{r\theta\phi}e^{-\frac{2r}{a}}(r\sin\theta\cos\phi)\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\phi=0$$

$$\bar{x}^2=\iiint_{\tau}|\psi(\bar{r})|^2x^2d^2r=\frac{1}{\pi a^2}\iiint_{r\theta\varphi}$$

$$e^{-\frac{2r}{a}}r^2\sin^2\theta\cos^2\varphi\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi$$

$$=\frac{1}{\pi a^2}\int_{r=0}e^{-\frac{2r}{a}}r^4\ dr\int_{\theta=0}^{\pi}\sin^3\theta\ d\theta\int_{\phi=0}^{2\pi}\cos^2\phi\ d\phi$$

$$=\frac{1}{\pi a^3}\int_{r=0}e^{-\frac{2r}{a}}r^4dr\cdot\int_{\theta=0}^{\pi}(\frac{\sin 3\theta}{4}+\frac{3}{4}\sin\theta)d\theta$$

$$\times\int_{\varphi=0}^{2\pi}(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cos 2\varphi)d\varphi$$

$$=\frac{1}{\pi a^3}\cdot\frac{4!}{(\frac{2}{a})^5}\cdot\frac{8}{6}\cdot\pi=a^2 \qquad (4)$$

利用量子力学常用积分公式（8）

在计算动量有关平均值时，可采用动量相空间的球坐标系，设动量相空间直角坐标为 p_x， p_y， p_z 则球坐标用 r^l,θ^l,φ^l 表示， $r^l=p$

$$p_x=p\sin\theta^l\cos\phi^l$$

$$p_y=p\sin\theta^l\sin\phi^l$$

$$p_z=p\cos\theta^l$$

$$\bar{p}_x=\iiint|\phi(p)|^2 p_x d^3p=\frac{(2a^3)\hbar^5}{\pi^2}$$

$$\times\iiint_{r^l\theta^l\varphi^l}\frac{p}{(a^2p^2+\hbar^2)\psi}\sin\theta^l\cos\varphi^l\cdot p^2\sin\theta^l dpd\theta^l d\varphi^l$$

$$=\frac{(2a^3)\hbar^5}{\pi^2}\int_0^\infty\frac{p^3dp}{(a^2p^2+\hbar^2)^2}$$

$$\times\int_0^\pi\sin^2\theta^l d\theta^l\int_0^{2\pi}\cos\phi^l d\phi^l$$

$$\bar{p}_x^2=\iiint|\varphi(p)|^2 p_x^2 d^3r^l$$

$$=\frac{(2a^3)\hbar^5}{\pi^2}\int_0^\infty\frac{p^4dp}{(a^2p^2+\hbar^2)^2}$$

$$\times\int_{\theta=0}^{\pi}\sin^3\theta' d\theta'\int_{\varphi=0}^{2\pi}\cos^2\varphi' d\varphi' \qquad (6)$$

与 p 有关的积分可用替代 $ap=\hbar\tan\xi$ 入(6)式的第一道积分，得：

$$\int_0^{\infty}\frac{p^4dp}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}=\frac{1}{a^5\hbar^3}\int_{\xi=0}^{\frac{\pi}{2}}\sin^4\xi\cos^2\xi d\xi$$

$$=\frac{1}{16a^5\hbar^3}\int_{\xi=0}^{\pi^2}(1-\frac{\cos2\xi}{2}-\cos4\xi+\frac{\cos6\xi}{2})d\xi$$

$$=\frac{\pi}{64}\frac{1}{a^5\hbar^3}$$ 代入（6）得：

$$\overline{p}_x^2=\frac{\pi}{64}\frac{1}{a^5\hbar^3}\cdot\frac{8^3\hbar^5}{\pi^2}\cdot\frac{1}{4}\int_{\theta=0}^{\pi}(3\sin\theta'-\sin3\theta')d\theta'$$

$$\times\frac{1}{2}\int_{\varphi'=0}^{2\pi}(1-\cos2\varphi')d\varphi'$$

$$=\frac{\hbar^2}{32a^2\pi}\cdot\left|-3\cos\theta'+\frac{1}{3}\cos3\theta'\right|_0^{\pi}\cdot\pi=\frac{\hbar^2}{3a^2}$$

代入测不准关系式：

$$\delta x\cdot\delta p_x=\sqrt{\overline{x}^2-(\overline{x})^2}\cdot\sqrt{\overline{p}_x^2-(\overline{p}_x)^2}$$

$$=a\cdot\frac{\hbar}{\sqrt{3}a}=\frac{\hbar}{\sqrt{3}}>\frac{\hbar}{2}$$

****

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）在经典力学中，当总能量一定时，轨道半径 r 受到限制，设玻耳半径 a，则总能量

$$E=-\frac{e^2}{2a}$$

粒子的势能则随着到核的距离 r 而变，表示作 $-\frac{e^2}{r}$，动能是两者的差：（从理论上讲，距离 r 可以扩展到无限远处。）

$$T(r)=-\frac{e^2}{2a}+\frac{e^2}{r} \qquad (1)$$

使 T(r)>0, r<2a, 在量子力学中，电子可以在离核任何距离 r 处出现，它在经典力学中不允许范围中出现的几率是：

$$\text{概率}=\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r=2a}^{\infty}|\psi|^2 d\tau$$

$$=\frac{1}{\pi a^3}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r=2a}^{\infty}(e^{-\frac{2r}{a}}r^2 dr)\sin\theta d\theta d\phi$$

$$=\frac{4\pi}{\pi a^3}\int_{r=2a}^{\infty}e^{-\frac{2r}{a}}r^2dr$$

$$=\frac{4}{a^3}\int_{r=2a}^{\infty}e^{-\frac{2r}{a}}r^2dr=\frac{4}{a^3}\left(-\frac{a}{2}\right)\int_{r=2a}^{\infty}r^2d\left(e^{-\frac{2r}{a}}\right)$$

$$=-\frac{2}{a^2}r^2e^{-\frac{2r}{a}}\bigg|_{8a}^{\infty}+\frac{2}{a^2}\int_{2a}^{\infty}2re^{-\frac{2r}{a}}dr$$

$$=8e^{-4}+\frac{4}{a^2}(-\frac{a}{2})re^{-\frac{2r}{a}}\int_{2a}^{\infty}\quad+\frac{2}{a}\int_{2a}^{\infty}e^{-\frac{2r}{a}}dr$$

$$=(8+2+1)e^{-4}=13e^{-4}$$

****

证明在规范变换下

$$\rho=\psi^*\psi \qquad (1)$$

$$\vec{j}=\frac{1}{2\mu}\left[\psi^*\hat{\vec{p}}\psi-\psi\hat{\vec{p}}\psi^*\right]-\frac{q}{\mu c}\vec{A}\psi^*\psi \qquad (2)$$

$$\mu\bar{\vec{v}}=\left(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)$$（机械动量的平均值）都不变　　　　(3)

（证明）如课本证明，要规范变换下，若将体系的波函数作以下变换（P243。17 式）

$$\psi\to e^{\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}f}\psi \qquad (4)$$

则薛定谔方程形式不变，将（4）代入（1）式等号右方，设变换后几率密度：

$$\rho'=\left(e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi\right)^*\left(e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi\right)=e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^*\cdot e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi=\psi^*\psi$$

$$\rho'=\rho$$

又设变换概率流密度是 j'，将（4）代入（2）式右方，同时又代入

$$\vec{A}\to\vec{A}+\nabla f\left(\vec{r},t\right)$$ （规范变换）

$$\vec{j}' = \frac{1}{2\mu}\left[e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* \vec{p} e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi - e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi \vec{p} e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* \right]$$

$$-\frac{q}{\mu c}\left[\vec{A} + \nabla f\left(\vec{r}, t\right)\right] e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi \tag{5}$$

注意到算符的对易关系

推广到三维：$\left[\hat{\vec{p}}, g(\vec{r})\right] = \frac{\hbar}{i}\nabla \cdot g(\vec{r})$ （6）

令 $g(\vec{r}) = e^{\frac{iqf}{\hbar c}}$ 则有：

$$\vec{p} e^{\frac{iqf}{\hbar c}} - e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla e^{\frac{iqf}{\hbar c}} = \frac{q}{c}(\nabla f) e^{\frac{iqf}{\hbar c}}$$

$$\vec{p} e^{\frac{iqf}{\hbar c}} = e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p} + \frac{q}{c}\nabla f\right)$$

$$\vec{p} e^{-\frac{iqf}{\hbar c}} = e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\nabla f\right)$$

将（7）(8)代入（5）式等号右方第一项第二项，（5）式成为：

$$\vec{j} = \frac{1}{2\mu}\left[e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p} + \frac{q}{c}\nabla f\right)\psi - e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\nabla f\right)\right]$$

$$-\frac{q}{\mu c}\left(\vec{A} + \nabla f\right)\psi\psi^*$$

$$= \frac{1}{2\mu}\left(\psi^* \vec{p}\psi - \psi \vec{p}\psi^*\right) - \frac{q}{\mu c}\vec{A}\psi\psi^* = \vec{j}$$

在证明第 3 式时，设变换后的 ν 是 ν' 。写出右方平均值的显式，用（4）的波数变换，和 $(4)'$

的矢势的变换式：

$$\mu\bar{v}' = \iiint \psi^{*\prime}\left(p' - \frac{q}{c}\hat{A}'\right)\psi' d\tau$$

$$= \iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^{*}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\left(\hat{\vec{A}} + \nabla f\right)\right)e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi d\tau$$

$$= \iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^{*}\hat{\vec{p}}e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi d\tau - \frac{q}{c}\iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^{*}\left(\hat{\vec{A}} + \nabla f\right)e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi d\tau$$

前式第一个积分可重复用（7）式，得：

$$\mu\bar{v}' = \iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^{*}e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\hat{\vec{p}} + \frac{q}{c}\nabla f\right)\psi d\tau - \frac{q}{c}\iiint \psi^{*}\left(\hat{\vec{A}} + \nabla f\right)\psi d\tau$$

$$= \iiint \psi^{*}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\psi d\tau = \mu\bar{v}'$$

命题得证

****

设带电粒子相互的均匀电场 $\vec{E}$ 和均匀磁场 $\vec{B}$ 中运动，求其能谱及波函数（取磁场方向为 z 轴，电场方向为 x 轴方向）

[解] 为使能量本征方程能够求得，可以这样选择矢势，使

$$A_x = 0 \qquad A_y = Bx \qquad A_z = 0$$

设电场 $\vec{E}$ 的大小是 ε ,选择标势 $V(\vec{r})$，使场沿着 x 轴

$$-\frac{dV}{dx} = \varepsilon q \,, \qquad V = -\varepsilon q x$$

哈密顿算符是：

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\{\hat{p}_x^{\ 2} + (\hat{p}_y - \frac{q}{c}Bx)^2 + p_z^{\ 2}\} - \varepsilon q x$$

$$= \frac{1}{2\mu}\{\hat{p}_x^{\ 2} + \hat{p}_y^{\ 2} - \frac{2qB}{c}p_y x + \left(\frac{q}{c}B\right)^2 x^2 + p_z^{\ 2}\} - \varepsilon q x \qquad (1)$$

$\hat{H}$ 中不出现 y 和 z，因此

$$[\hat{H},\hat{p}_y]=0 \qquad [\hat{H},\hat{p}_z]=0$$

可以依照本章中§7。2 均匀磁场中带电粒子的运动的解法，先求能量本征函数，由于 $\hat{p}_y$，$\hat{p}_z$ 守恒，波函数包括这两个算符的本征函数作为其构成因子：

$$\psi(x,y,z)=e^{i(p_y y+p_z z)/\hbar}X(x) \qquad (2)$$

代入能量本征方程式：

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{2qBi}{c\hbar}\frac{\partial}{\partial y}x\psi+[\frac{2pq\varepsilon}{\hbar^2}x-(\frac{qB}{c\hbar})^2]x^2\psi=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi$$

整理，并约去同因式 $e^{i(p_y y+p_z z)/\hbar}$ 后，得到 X（x）的本征方程

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2\mu}[\frac{q^2B^2}{c^2}x^2-2(\frac{qBp_y}{e}+\mu\varepsilon q)x+p_y{}^2+p_z{}^2]\}X(x)=EX(x)$$

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\mu}{2}(\frac{qB}{c\mu})^2(x-\frac{cp_y}{qB}-\frac{\mu\varepsilon c^2}{qB^2})+[\frac{p_y{}^2+p_z{}^2}{2\mu}+\frac{1}{2\mu}(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B})^2]\}X(x)=EX(x)$$

（3）

或者简写作

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\mu}{2}\omega^2(x-x_0)^2+E_0\}X(x)=EX(x)$$

式中 $\omega\equiv\frac{qB}{c\mu}, x_{0=}\frac{cp_y}{Bq}+\frac{\mu q\varepsilon}{qB^2}$ ，$E_0=\frac{p_y{}^2+p_z{}^2}{2\mu}-\frac{1}{2\mu}(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B})^2$

方程式（3）明显的是一个沿 x 方向振动的谐振子的薛定谔方程式，它的固有频率是ω，振动中心在$x=x_0$一点上，同时具有能量本征值： $E-E_0$

其中E_0是有关于 y、z 方向的分能量，按一维谐振子理论，它的能级是

$$E-E_0=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega=(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar qB}{\mu c} \qquad (4)$$

它的本征函数写作

$$X(x)=C_n e^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}(x-x_0)^2}H_n[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}(x-x_0)] \qquad （5）$$

这外个运动点电荷的总能量 E 是：

$$E=E_0+(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar qB}{\mu c}=\frac{p_y{}^2+p_z{}^2}{2\mu}-\frac{1}{2\mu}(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B})^2+(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar qB}{\mu c}$$

****

求自由粒子的坐标 x，动量 $\hat{p}_x$ 和 Hamilton 量 $\hat{H}$ 在 x 表象中的矩阵元。

解：自由粒子的坐标 x 的本征函数 $\delta(x-x_n),\quad n=1,2,3\ldots$ 是 x 表象中的基矢。因此，矩阵元

$$\left(X\right)_{x_m x_n}=(\psi_{x_m}(x),x\psi_{x_n})=(\delta(x-x_m),x\delta(x-x_n))$$
$$=\int\delta(x-x_m)x\delta(x-x_n)dx=x_n\delta(x_m-x_n),$$

$$\left(P_x\right)_{x_m x_n}=(\psi_{x_m}(x),\hat{p}_x\psi_{x_n})=-i\hbar(\psi_{x_m}(x),\frac{\partial}{\partial x}\psi_{x_n}(x))$$
$$=-i\hbar\int\delta(x-x_m)\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x_n)dx=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_m}\delta(x_m-x_n),$$

$$\left(H\right)_{x_m x_n}=(\psi_{x_m}(x),\hat{H}\psi_{x_n}(x))=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_{x_m}(x),\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{x_n}(x))$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_m)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\delta(x-x_n)dx$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_m{}^2}\delta(x_m-x_n)$$ 。

****

在动量表象中，求 x， $\hat{p}_x$ 和 $\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+V(x)$ 的矩阵元。

解：在动量表象中，动量本征函数是 $\delta(p-p')$，它构成动量表象中的基矢。因此，矩阵元

$$(x)_{p'p''}=(\varphi_{p'}(p),x\varphi_{p''}(p))=(\varphi_{p'}(p),i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\varphi_{p''}(p))$$

$$=i\hbar\int\varphi_{p'}^*(p)\frac{\partial}{\partial p}\varphi_{p''}(p)dp=i\hbar\int\delta(p-p')\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p'')dp$$

$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p'-p''),$$

$$(p)_{p'p''}=(\varphi_{p'}(p),p\varphi_{p''}(p))=\int\delta(p-p')p\delta(p-p'')dp$$

$$=p'\delta(p'-p'')$$,

$$(H)_{p'p''}=(\varphi_{p'}(p),\hat{H}\varphi_{p''}(p))=\int\delta(p-p')[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})]\delta(p-p'')dp$$

$$=[\frac{p'^2}{2m}+V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'})]\delta(p'-p'').$$

****

设在 $t=0$ 时刻，氢原子处于状态：

$$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{10}}[2|100>+|210>+\sqrt{2}|211>+\sqrt{3}|21-1>],$$

求，① 在$|\psi(0)\rangle$态下能量的平均值。

②在$t>0$时，体系处于$|lm>=|11>$态的几率。

解：①能量平均值 $\bar{E}=<\psi|\hat{H}|\psi>$ $\hat{H}$为Hamilto。对于$|\psi_0\rangle$态，由于：

$$\hat{H}|\psi_0\rangle$$

$$=\hat{H}[\frac{1}{\sqrt{10}}(2|100>+|210>+\sqrt{2}|211>+\sqrt{3}|21-1>)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{10}}\{2E_1|100>+E_2|210>+\sqrt{2}E_2|211>+\sqrt{3}E_2|21-1>\},$$

因此，

$$\bar{E}=<\psi_0|\hat{H}|\psi_0>=\frac{1}{10}(4E_1+E_2+2E_2+3E_2)$$

$$=\frac{1}{10}(4E_1+6E_2)=\frac{11}{20}E_1=-\frac{11\mu e^4}{40\hbar^2}.$$

状态$|11>$出现的几率为：

$$P=|<n11|\psi(t)>|^2=|<n11|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)>|^2$$

$$=\frac{1}{10}|<n11|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}(2|100>+|210>+\sqrt{2}|211>+\sqrt{3}|21-1>)|^2$$

$$=\frac{1}{5}|<n11|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|211>|^2$$

$$=\frac{1}{5}|<2\,1\,1|e^{\frac{i}{\hbar}Ht}|n\,1\,1><n\,1\,1|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|2\,1\,1>|$$

$$=\frac{1}{5}e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}<2\,1\,1|n\,1\,1><n\,1\,1|2\,1\,1>e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$=\frac{1}{5}|<n11|211>|^2=\frac{1}{5}\delta_{n2}$$ 。

****

6.11 对于类氢原子（核电荷 Ze），计算处于束缚态 ψ_{nlm} 下的电子的 $\langle r^{\lambda}\rangle$， $\lambda=-1,-2,-3$。

解　对于该类氢原子，令 $a_z=a_0/Z$，a_0 为 Bohr 半径。按 Virial 定理

$$2\langle T\rangle=\langle \mathbf{r}\cdot\nabla V\rangle=\left\langle \mathbf{r}\cdot\nabla\frac{Ze}{r}\right\rangle=-\left\langle \mathbf{r}\cdot\nabla\frac{Zer}{r^3}\right\rangle=-\left\langle\frac{Ze}{r}\right\rangle=-\langle V\rangle$$

这样 $\langle V\rangle+\langle T\rangle=\frac{1}{2}\langle V\rangle$，束缚态 ψ_{nlm} 下 $\langle V\rangle=2E_n$，此式即

$$\langle r^{-1}\rangle=\frac{1}{n^2a_z}=\frac{Z}{n^2a_0} \qquad (6.99)$$

对于类氢原子，

$$H_l=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{Ze}{r}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$ ，

能量本征值为 $E_{nlm}=E_n=-Ze^2/2n^2a_z$，$n=n_r+l+1$。

用 Hellmann-Feynman 定理 $\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\langle\psi_{nlm}|\frac{\partial H}{\partial\lambda}|\psi_{nlm}\rangle$，取 $\lambda=l$，

$\frac{\partial E_n}{\partial l}=\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{Ze^2}{n^3a_z}$，$\frac{\partial H}{\partial l}=\frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$，这样给出

$$\langle r^{-2}\rangle=\frac{1}{(l+1/2)n^3a_z^2}=\frac{Z^2}{(l+1/2)n^3a_0^2} \qquad (6.100)$$

(到此为止)

最后，计算 $\langle r^{-3}\rangle$。对于 s 态 $(l=0)$，$r\to 0$ 处，$\psi\to C$ (常数量)，所以

$$\langle r^{-3}\rangle_{n00}\to\infty \qquad (6.101)$$

当 $l\neq 0$，利用题 6.4 的式(6.45)，即得

$$\left\langle-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{l(l+1)}{r^3}+\frac{\partial}{\partial r}V\right\rangle=0$$

因此

$$\langle r^{-3}\rangle=\frac{\mu}{\hbar^2 l(l+1)}\left\langle\frac{\partial}{\partial r}V\right\rangle=\frac{\mu}{\hbar^2 l(l+1)}\left\langle\frac{Ze^2}{r^2}\right\rangle$$

$$=\frac{1}{l(l+1)(2l+1)}\frac{2}{n^3a_z^3}=\frac{1}{l(l+1)(2l+1)}\frac{2Z^3}{n^3a_0^3}$$

当 $l\to 0$，上式右端 $\to\infty$，所以上式实际上适用于所有 l 值(包括

$l=0$)。

讨论 由于总能量算符及径向方程均与磁量子数 m 无关，所以诸 $\langle r^{\lambda}\rangle$ 都与 m 无关。而 $\langle r^{-1}\rangle$ 和能级一样，与角量子数 l 也无关，仅取决于主量子数 n。$\langle r^{-2}\rangle$ 与 $\langle r^{-3}\rangle$ 则与 n,l 均有关，亦即对于能级相同但“轨道形状”不同（l 不同）的各状态，$\langle r^{-2}\rangle$ 与 $\langle r^{-3}\rangle$ 具有不同的数值。

利用式(6.100)，易得 ψ_{nlm} 态下离心势能的平均值为

$$\left\langle \frac{l^2}{2\mu r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{l(l+1)Z^2e^2}{(2l+1)n^3a_0}=-\frac{l(l+1)}{(l+1/2)n}E_n \tag{6.103}$$

由于 $(-E_n)$ 为动能平均值，所以在动能中离心势能所占比例为 $l(l+1)/[(l+1/2)n]$，当 n 确定后，l 越大，这个比例越大。当 l 取最大值 $(l=n-1)$，这个比例为 $l(l+1)/(n-1/2)$，这时径向动能仅占动能的 $1/(2n-1)$。所以，如 $n>>1$，$(n,n-1,m)$ 态中径向动能就很小，这种状态相当于 Bohr 量子论中的圆形轨道。

****

6.25 粒子在 Hulthen 势场

$$V(r)=-\frac{V_0}{\exp(r/a)-1},\qquad V_0,a>0$$

中运动，证明其束缚态能级 E_n 满足不等式

$$E_n>-\frac{\mu V_0^2a^2}{2n^2\hbar^2},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

提示 与下面 Coulomb 势场中能级比较

$$V_c(r)=-V_0a/r$$

证明　将题给 Hulthen 势场分母里指数函数按幂级数展开

$$V(r)=\frac{-V_0}{\left[\frac{r}{a}+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]}=\frac{V_c(r)}{\left[1+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)+\frac{1}{3!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]} \qquad (6.221)$$

上式分母恒大于 1，因此

$$|V(r)|<|V_c(r)|,\qquad V(r)>V_c(r) \qquad (6.222)$$

和类氢离子能级公式比较，可以看出所证不等式

$$E_n>-\frac{\mu V_0^2a^2}{2n^2\hbar^2},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

的右边正好是 Coulomb 势场中 $V_c(r)=-V_0a/r$ 的束缚态能级，其中

$$n=n_r+l+1 \qquad (6.223)$$

其中 $n_r=0,1,2,\cdots$ 为径向波函数的节点个数，而 $l=0,1,2,\cdots$ 为角量子数。

由于 $V(r)>V_c(r)$，根据 H-F 定理可以证明，(n_r,l) 相同的束缚态中，Hulthen 势场的能级高于 Coulomb 势场的能级。因此所证不等式成立。

说明　Coulomb 势场存在偶然简并，$n_r+l+1=n$ 的所有束缚态能量相等。本题的结论是对于所有满足 $n_r+l+1=n$ 的 (n_r,l) 对应的束缚态能量均高于 $-\frac{\mu V_0^2a^2}{2n^2\hbar^2}$。

****

6.26 荷电 q 的一维谐振子处于均匀电场 ε 中，Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\varepsilon x$$

利用 HF 定理，求其束缚能级 E_n。

提示　利用 Heisenberg 方程，计算 $\langle x\rangle_n$，然后取 ε 为参数，利用 HF 定理。

解　关于 p 的 Heisenberg 方程

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[p,H]=-m\omega^2x+q\varepsilon \tag{6.224}$$

一维定态问题的能级非简并。上式两边对束缚态能级 E_n 对应的本征态(必可归一)求平均得

$$-m\omega^2\langle x\rangle_n+q\varepsilon=0,\qquad \langle x\rangle_n=\frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \tag{6.225}$$

再利用 HF 定理得

$$\frac{\partial E_n}{\partial\varepsilon}=-q\langle x\rangle_n=-\frac{q^2\varepsilon}{m\omega^2} \tag{6.226}$$

上式对 ε 积分，利用已知的谐振子能级，即得

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

****

7.1　证明在磁场 B 中，质量为 μ 的带电粒子的速度算符的各分量，满足下述的对易关系：

$$[v_x,v_y]=\frac{i\hbar q}{\mu^2c}B_z,\quad [v_y,v_z]=\frac{i\hbar q}{\mu^2c}B_x,\quad [v_z,v_x]=\frac{i\hbar q}{\mu^2c}B_y$$

(7.1)

即 $v\times v=\dfrac{i\hbar q}{\mu^2c}\mathbf{B}$ **。再证明**

$$[v,v^2]=\frac{i\hbar q}{\mu^2c}(v\times\mathbf{B}-\mathbf{B}\times v)$$

(7.2)

在只有静磁场的情况下，可把 Hamilton 量写成 $H=\dfrac{\mu}{2}v^2$ **，由此证明**

$$\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v=\frac{q}{2c}(v\times\mathbf{B}-\mathbf{B}\times v)$$

(7.3)

解释其物理意义。

证明 带电粒子在磁场 $\mathbf{B}$ 中运动的 Hamilton 量为 $H=\frac{1}{2\mu}\left(\mathbf{p}-\frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2$，其中 $\mathbf{p}(p_x,p_y,p_z)$ 是正则动量，而 $\mathbf{A}$ 为相应于磁感应强度 $\mathbf{B}$ 的磁矢势。根据正则方程 $v_x=\dot{x}=\frac{\partial H}{\partial p_x}$ 得粒子 x 方向速度算符如下给出：

$$v_x=\frac{1}{\mu}\left(p_x-\frac{q}{c}A_x\right)$$

同理可以得到

$$v_y=\frac{1}{\mu}\left(p_y-\frac{q}{c}A_y\right),\quad v_z=\frac{1}{\mu}\left(p_z-\frac{q}{c}A_z\right)$$

这样计算 v_x 与 v_y 的对易式

$$\left[v_x,v_y\right]=\frac{1}{\mu^2}\left[p_x-\frac{q}{c}A_x,p_y-\frac{q}{c}A_y\right]$$
$$=\frac{1}{\mu^2}\left[p_x,\ p_y\right]-\frac{q}{\mu^2c}\left[p_x,\ A_y\right]-\frac{q}{\mu^2c}\left[A_x,\ p_y\right]+\frac{q^2}{\mu^2c}\left[A_x,\ A_y\right]$$

正则动量分量 p_x 与 p_y 相互对易，又 $\mathbf{A}$ 仅是坐标的函数，而坐标相互对易，故 $\left[A_x,A_y\right]=0$，这样

$$\left[v_x,v_y\right]=-\frac{q}{\mu^2c}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},A_y\right]-\frac{q}{\mu^2c}\left[A_x,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right]=\frac{q}{\mu^2c}\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=\frac{iq\hbar}{\mu^2c}B_z$$

上面利用了 $\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}$。这样我们证明了 $\left[v_x,v_y\right]=\frac{iq\hbar}{\mu^2c}B_z$，此即式(7.1)的第一式，通过 x,y,z 轮换写出另外 2 式，这样我们证明了式(7.1)。该式可以统一写为

$$\left[v_i,v_j\right]=\frac{iq\hbar}{\mu^2c}\varepsilon_{ijk}B_k \qquad (7.4)$$

上述对易关系式也可以写为

$$v \times v = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\mathbf{B} \tag{7.4'}$$

由式(7.4)得

$$\left[v_i, v^2\right] = \left[v_i, v_j v_j\right] = v_j\left[v_i, v_j\right] + \left[v_i, v_j\right]v_j = v_j \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\varepsilon_{ijk}B_k + \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\varepsilon_{ijk}B_k v_j$$

$$= \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\left(\varepsilon_{ijk}v_j B_k + \varepsilon_{ijk}B_k v_j\right) = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\left(v \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times v\right)_i$$

即有 $\left[v_i, v^2\right] = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\left(v \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times v\right)$，此即式(7.2)。

在只有磁场的情况下，可把 Hamilton 量写成 $H = \frac{\mu}{2}v^2$，由式(7.2)得

$$\mu\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{\mu}{i\hbar}\left[v, H\right] = \frac{\mu^2}{2i\hbar}\left[v, v^2\right] = \frac{q}{2c}\left(v \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times v\right)$$

此即式(7.3)，这是带电粒子在磁场中运动受磁场力作用的量子力学方程。

（自学）7.2 荷电 q 质量为 μ 的粒子在均匀恒定外磁场 $\mathbf{B}$ 中运动，Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \frac{\mu}{2}\hat{v}^2, \quad \hat{v} = \frac{1}{\mu}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)$$

速度算符 $\hat{v}$ 的三个分量满足的对易式，见上题。

假设 $\mathbf{B}$ 沿 z 轴方向，只考虑粒子在 xy 平面中的运动，则有

$$\left[v_x, v_y\right] = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}B_z$$

设 $q > 0$，令

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\mu^2 c}{\hbar q B}}\hat{v}_x, \qquad \hat{P} = \sqrt{\frac{\mu^2 c}{\hbar q B}}\hat{v}_y$$

则

$$\left[\hat{Q}, \hat{P}\right] = \mathrm{i}$$

而

$$H=\frac{\mu}{2}\left(\hat{v}_x^2+\hat{v}_y^2\right)=\frac{1}{2}\hbar\omega_c\left(\hat{Q}^2+\hat{P}^2\right)$$

式中 $\omega_c=|q|B/\mu c$ 为回旋角频率。上式与谐振子的 Hamilton 量相似，由此求出其能量本征值 Landau 能级

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega_c$$

解 设磁场沿 z 轴方向，$B_x=0,B_y=0,B_z=B$。矢势 **A** 可取为 $A_x=-By/2$，$A_y=-Bx/2$，$A_z=0$。这样粒子 Hamilton 量是

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left\{\left(p_x+\frac{qB}{2c}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2c}x\right)^2+p_z^2\right\} \tag{7.5}$$

$$=\frac{\mu}{2}\left\{v_x^2+v_y^2+v_z^2\right\} \tag{7.6}$$

由于磁场沿 z 轴方向，$B_x=0,B_y=0,B_z=B$，根据题 7.1 的式(7.1)，速度算符间的对易式是

$$[v_x,v_y]=\frac{i\hbar q}{\mu^2c}B,\quad [v_y,v_z]=0,\quad [v_z,v_x]=0 \tag{7.7}$$

不妨设 $q>0$，令

$$Q=\left(\frac{\mu^2c}{\hbar|q|B}\right)^{\frac{1}{2}}\hat{v}_x,\quad P=\left(\frac{\mu^2c}{\hbar|q|B}\right)^{\frac{1}{2}}\hat{v}_y \tag{7.8}$$

如果 $q<0$，则 Q,P 的定义互换。

根据式(7.7)即有

$$\left[\hat{Q},\hat{P}\right]=\mathrm{i} \tag{7.9}$$

而 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{\hbar|q|B}{2\mu c}\left(Q^2+P^2\right)+\frac{1}{2\mu}p_z^2=\frac{1}{2}\hbar\omega\left(Q^2+P^2\right)+\frac{1}{2\mu}p_z^2$$

其中 $\omega=|q|B/(\mu c)$，称为粒子回旋(cyclotron)频率(2 倍 Larmor 频率)。根据式(7.7,7.8)，z 方向动量 $p_z(\mu v_z)$ 分别和 Q、P 对易。Hamilton 量第一项(与第二项对易)以及对易式与一维谐振子完全类似，这样写出其本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,,\qquad n=0,1,2,3,\cdots \tag{7.10}$$

称为 Landau 能级。而 p_z 得本征值可取 $-\infty,+\infty$ 间的任何值，因此总的能量本征值为

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2\mu}p_z^2 \tag{7.11}$$

其中 $\omega=|q|B/(\mu c)$，$n=0,1,2,3,\cdots$，$-\infty<P_z<+\infty$。

磁场使得粒子获得能量为 $(2n+1)B|q|\hbar/2\mu$，这意味着该粒子具有磁矩 $-(2n+1)B|q|\hbar/2\mu$；无论电荷是正还是负，这磁矩方向与外磁场方向相反，具有抗磁性。

讨论 1 (能量本征函数，磁矢势取对称规范)。定态 Schrodinger 方程为

$$\hat{H}\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \tag{7.12}$$

由式(7.6)得，Hamilton 量可写为

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{\mu}{2}\left\{v_x^2+v_y^2+v_z^2\right\}=\frac{1}{2\mu}\left\{\left(p_x+\frac{qB}{2c}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2c}x\right)^2+p_z^2\right\}\\&=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2\right)+\omega\left(\hat{p}_x\hat{y}-\hat{p}_y\hat{x}\right)+\frac{\mu}{2}\omega^2\left(x^2+y^2\right)+\frac{1}{2\mu}\hat{p}_z^2\\&=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2\right)+\omega L_z+\frac{\mu}{2}\omega^2\left(x^2+y^2\right)+\frac{1}{2\mu}\hat{p}_z^2\end{aligned} \tag{7.13}$$

可取对易的力学量完全集(CSCO)为 $\hat{H}$、p_z 与 L_z。而 $\psi(x,y,z)$ 取为 $\hat{H}$、p_z 与 L_z 的共同本征态，取下列分离变量的形式

$$\psi(x,y,z)=e^{im\varphi}e^{ip_z z}R(\rho) \tag{7.14}$$

其中 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots,-\infty<p_z<+\infty$。将上式带入式(7.12)得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2R}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial R}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}R\right]+\frac{\mu}{2}\omega^2\rho^2=\left(E-m\hbar\omega-\frac{1}{2\mu}p_z^2\right)R \tag{7.15}$$

整理后写成

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}+\left[\eta^2-\alpha^4\rho^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right]R=0 \tag{7.16}$$

其中 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$，$\eta=\sqrt{2\mu E/\hbar^2-2m\mu\omega_L/\hbar}$。

式(7.16)与题 6.18 的式(6.141)相同，根据那里的分析 $R(\rho)$ 在 $\rho\to0$、∞ 的渐进行为分别是

$R \propto \rho^{|m|}$ 与 $R(\rho) \propto \exp\left(-\alpha^2\rho^2/2\right)$，这样可设

$$R(\rho) = \rho^{|m|} e^{-\alpha^2\rho^2/2} u(\rho) \tag{7.17}$$

式(7.17)代入式(7.16)得

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} + \left(2|m| + 1 - 2\alpha^2\rho^2\right)\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} + \left[\eta^2 - \left(2|m| + 2\right)\alpha^2\right]u = 0 \tag{7.18}$$

令 $\xi = \alpha^2\rho^2$，得

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(|m| + 1 - \xi\right)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi} + \left[\frac{\eta^2}{\alpha^2} - \left(2|m| + 2\right)\right]u = 0 \tag{7.19}$$

此式为合流超几何方程，其形式为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(\gamma - \xi\right)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi} - \beta u = 0 \tag{7.19’}$$

其中 $\gamma = |m| + 1$，$\beta = -\left[\eta^2/\alpha^2 - \left(2|m| + 2\right)\right]/4$。在 $\xi = 0$ 的邻域中式(7.19’)的解析解表示为合流超几何函数 $F(\beta,\gamma,\xi)$，要得到满足束缚态条件的解，$F(\beta,\gamma,\xi)$ 须中断为一个多项式。这要求 β 是一个小于或者等于 0 的整数，即

$$\beta = -n_\rho, \qquad n_\rho = 0,1,2,\cdots$$

因此有

$$\beta = -\frac{1}{4}\left[\frac{\eta^2}{\alpha^2} - \left(2|m| + 2\right)\right] = -n_\rho$$

其中 α 、η 见式(7.16)的定义。这样可得能量 E 的本征值为

$$E_{n_\rho,m,p_z} = \left(2n_\rho + |m| + m\right)\hbar\omega + \frac{1}{2\mu}p_z^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{1}{2\mu}p_z^2 \tag{7.20}$$

这里 $m = 0,\pm1,\pm2,\cdots$ 为磁量子数，$n_\rho = 0,1,\cdots$ 为径向量子数，而 $n = n_\rho + \left(|m| + m\right)/2$。相应的径向部分能量本证函数用合流超几何函数 F 表示为

$$R_{n_\rho m} = A\rho^{|m|}F(-n_\rho, |m| + 1, \alpha^2\rho^2)e^{-\alpha^2\rho^2/2} \tag{7.21}$$

其中 $\alpha = \sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}} = \sqrt{\dfrac{eB}{2\hbar c}}$，$A$ 为归一化常数。而本征函数为

$$\psi_{n_\rho,m,p_z}(x,y,z) = A\rho^{|m|}F(-n_\rho, |m| + 1, \alpha^2\rho^2)e^{-\alpha^2\rho^2/2}e^{im\varphi}e^{ip_z z}$$

其中 $n_\rho = 0,1,2,\cdots$，$m = 0,\pm1,\pm2,\cdots$，$-\infty < p_z < +\infty$。从能级公式(7.20)可看出，对于多有 $m \le$ 的态对应的能量都相等，因而能级简并度为 ∞。

讨论 2　(能量本征函数，磁矢势取 Landau 规范)。取磁矢势

$$\mathbf{A} = -yBe_x, \qquad A_x = -yB, A_y = A_z = 0 \tag{7.22}$$

Hamilton 量

$$H = \frac{1}{2\mu}\left[(p_x + qyB)^2 + p_y^2 + p_z^2\right] \tag{7.23}$$

因 $[H, p_x] = [H, p_z] = [H, p_z] = 0$，可选 CSCO 为 (H, p_x, p_z)，其共同本征态为

$$\psi_{n,p_x,p_z}(x,y,z) = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i(k_x x + k_z z)} \eta_n(y) \tag{7.24}$$

代入定态 Schrodinger 方程可得

$$\frac{1}{2\mu} p_y^2 + \frac{1}{2\mu}\left[(p_x + qyB)^2\right]\eta_n(y) = \varepsilon_n \eta_n(y) \tag{7.25}$$

其中 $\varepsilon_n = E_n - \dfrac{p_z^2}{2\mu}$，令 $s = y + \dfrac{1}{qB} p_x$，$\omega_c = \dfrac{|q|B}{\mu}$ 称为回转频率，为 Lamor 频率 2 倍。这样上式化为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 s^2\right)\eta_n(s) = \varepsilon_n \eta_n(s) \tag{7.26}$$

此为一维谐振子定态方程，直接写出如下解：

$$\eta_n(s) = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 s^2} H_n(\alpha s) \tag{7.27}$$

其中 $\alpha = (\mu\omega/\hbar)^{1/2}$。相应的能量 $\varepsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega$。于是粒子的能级和相应的本征函数为

$$E_{np_xp_z} = \frac{p_z^2}{2\mu} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\frac{|q|B}{\mu} \tag{7.28}$$

$$\psi_{n,p_x,p_z} = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar} \eta_n\left(y - \frac{p_x}{qB}\right) \tag{7.29}$$

其中 $n = 0,\pm1,\pm2,\cdots$，$-\infty < p_x, p_z < +\infty$。从能量本征值公式(7.28)可看出，粒子能量本征值不依赖于 p_x，而 p_x 得取值为 $-\infty < p_x < +\infty$，因而能级简并度为 ∞。

从粒子能量本征函数(7.29)可看出，由于 p_x 可取值 $p_x \to \pm\infty$，粒子可以出现在 $y \to \pm\infty$ 的无穷远处，因而此时 ψ_{n,p_x,p_z} 为非束缚态，而其能级却是分立的。束缚定态的能级一定是分立的，从本例却看到，分立能级对应的本征态未必是束缚态。

****

8.2 设矩阵 A 和 B 满足 $A^2=0$，$AA^+ + A^+A = 1$，$B = AA^+$.

(1)证明 $B^2 = B$.

(2)在 B 的表象中求出 A、B 的矩阵表示形式.

解 (1)[证明] 由 $B = AA^+$ 和 $A^2 = 0$， $AA^+ + A^+A = 1$ 得

$$B^2 = AA^+AA^+ = A(A^+A)A^+ = A(A^+A + AA^+)A^+ = AA^+ = B$$

即得 $B^2 = B$；

(2) 由于 $B^2 = B$，即 $B(B-1) = 0$，由矩阵的 Hamilton 原理，知 B 的本征值只有 0 和 1，这样在 B 的表象中 B 的矩阵表示为

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

设 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$，则 $A^+ = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}$， $AA^+ = B$ 给出

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ac^* + bd^* \\ ca^* + db^* & |c|^2 + |d|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

由 $|c|^2 + |d|^2 = 0$ 知 $c = d = 0$，这样 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$，A 满足 $A^2 = 0$，$AA^+ + A^+A = 1$ 给出

$$\begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a^* & 0 \\ b^* & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a^* & 0 \\ b^* & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2|a|^2 + |b|^2 & a^*b \\ ab^* & |b|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

由上式得 $|a|^2 + |b|^2 = |b|^2 = 1$，可见 $|a|^2 = 0$，故 $a = 0$， $|b|^2 = 1$，可取 $b = e^{i\alpha}$， α 为实数。最后结果为

$$B=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}0 & e^{i\alpha}\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

****

8.3　厄米运算符 A、B，满足 $A^2=B^2=1$, $AB+BA=0$。求：(1)在 A 表象中 A 与 B 的矩阵表示式，并求 B 的本征函数表示式。(2)在 B 表象中 A 与 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 S.

解　(1)题给出 $AB+BA=0$，所以 A、B 都不可能是单位矩阵。设 A 与 B 均无简并。$A^2=1$，即 $(A-1)(A+1)=0$，所以 A 的本征值只有 1 和-1，A 表象只有 2 个基矢，而 A 的矩阵表示为

$$A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{8.1}$$

现设 $B=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$，则 $AB+BA=0$ 给出

$$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2a & 0\\ 0 & 2d\end{pmatrix}=0$$

上式给出 $a=d=0$。再 $B^2=1$ 给出

$$\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}bc & 0\\ 0 & bc\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

上式给出 $bc=1$，再 B 为厄米算符，$B^{+}=B$，因而 $c=b^*$，这样 $b=e^{i\delta}$，$c=b^*=e^{-i\delta}$，故

$$B=\begin{pmatrix}0 & e^{-i\delta}\\ e^{-i\delta} & 0\end{pmatrix}$$

其中 δ 为任意实数。由于 $B^2=1$，B 的本征值也为 ±1。相应于矩阵形式(8.1)，A 的本征态记为

$$|1\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad |-1\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{8.3}$$

通过矩阵形式(8.2)求解 $B|\lambda\rangle_b = \lambda|\lambda\rangle_b$ 得 B 的归一化本征态

$$|1\rangle_b = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\e^{-i\delta}\end{pmatrix}, \quad |-1\rangle_b = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-e^{-i\delta}\end{pmatrix} \tag{8.4}$$

相应的本征值分别为 1，-1。

(2) 同第(1)小题，只需将 A 与 B 的地位相互交换一下即可。

(3)第(1)小题求得了 A 与 B 的归一化本征态，从而 A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵元为

$a\langle\lambda'|\lambda\rangle_b$，从而写出这一幺正变换矩阵如下：

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ e^{-i\delta} & -e^{-i\delta}\end{pmatrix} \tag{8.5}$$