高等院校物理学习辅导丛书

量　子　力　学

——考研辅导教材

史守华　编著

Quantum Mechanics——Companion to Post Graduate Examinations

清华大学出版社
北　京

内 容 提 要

本书是量子力学考研辅导用书。全书分为 13 个单元,每单元由"内容提要"和"典型习题解答"两部分组成。编著《量子力学——考研辅导教材》的目的是为了加深学生对量子力学基本概念、基本规律的理解、掌握与运用,对于物理类及相关专业的学生学好量子力学课程,进而顺利通过攻读硕士研究生量子力学课程的入学考试,是有帮助的。本书也可供量子力学课程教学人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学——考研辅导教材/ 史守华编著 .—北京:清华大学出版社,2003
(高等院校物理学习辅导丛书)
ISBN 7-302-06992-1

Ⅰ.量… Ⅱ.史… Ⅲ.量子力学-研究生-入学考试-自学参考资料 Ⅳ.O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 070826 号

出 版 者: 清华大学出版社　　地　址: 北京清华大学学研大厦
http:// www.tup.com.cn　　邮　编: 100084
社总机: 010-62770175　　客户服务: 010-62776969
责任编辑: 朱红莲
封面设计: 何凤霞
版式设计: 刘　淼
印 刷 者:
发 行 者: 新华书店总店北京发行所
开　本: 185×230　印张:10.25　字数: 210 千字
版　次: 2003 年 10 月第 1 版　2003 年 10 月第 1 次印刷
书　号: ISBN 7-302-06992-1/ O · 314
印　数: 1～　000
定　价: 　元

FOREWORD 前言

量子力学是物理系本科生各专业、包括与物理相关专业的重要基础理论课。全国各高等院校、科研院所物理类专业硕士研究生入学考试，几乎都把量子力学列为必考科目。为了辅导学生考研，作者在安徽大学物理系任教期间，参阅了大量资料，尤其是追踪近年来各高等院校、科研院所硕士研究生入学考试中量子力学试题的有关信息，对习题进行了认真的筛选。在筛选过程中，既注意习题的覆盖面，同时也充分考虑了习题的难易程度，编写成《量子力学》——考研辅导讲义。试用了几年，效果很好。本书就是在该讲义的基础上经进一步整理而成的。

全书分成 13 个单元，每单元分为“内容提要”和“典型习题解答”两部分，难度较大的少数习题前加上了“ * ”号。内容提要便于读者从整体内容上把握应掌握的基本概念、规律及方法，典型习题解答有助于学生掌握计算方法。

本书适用于物理类及相关专业的本科生考研复习之用，也可供讲授和学习量子力学的师生参考。

南京大学柯善哲教授和肖福康教授仔细审阅了该书的初稿，并提出了宝贵的修改意见，作者在此向他们表示深深的谢意。

由于作者水平有限，错误和不足之处在所难免，敬请原谅，并欢迎批评指正。

编者

2003 年 3 月于安徽大学

目录

CONTENTS

CHAPTER 1

1 状态和波函数

【内容提要】

1. 量子力学中用波函数描写微观体系的状态。

2. $\psi^* \psi d\tau = |\psi|^2 d\tau$是状态用$\psi$描写的粒子在体积元 $d\tau$内的几率(设ψ是归一化的)。

3. 态叠加原理:设ψ,ψ,…ψ_n…是体系的可能状态,那么,这些态的线性叠加

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

也是体系的一个可能状态。

4. 波函数随时间的变化规律由薛定谔方程给出:

$$i \frac{\psi}{t} = -\frac{^2}{2\mu}\Delta^2\psi + V(\boldsymbol{r}, t)\psi$$

当势场 $V(\boldsymbol{r})$不显含 t时,其解是定态解 $\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}) e^{-iEt/}$,$\psi(\boldsymbol{r})$满足定态薛定谔方程

$$H\psi = \left[-\frac{^2}{2\mu}\Delta^2\psi + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\psi = E\psi$$

定态薛定谔方程即能量算符的本征方程。

5. 波函数的归一化条件:$\int_{(全)} |\psi|^2 d\tau = 1$。相对几率分布:$\psi(\boldsymbol{r}) \sim c\psi(\boldsymbol{r})$,波函数常数因子不定性;相位因子不定性。

6. 波函数一般应满足三个基本条件:连续性,有限性,单值性。

7. 几率流密度 $\boldsymbol{j} = \frac{i}{2\mu}(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi)$与几率密度 $\rho = \psi^*\psi$满足连续性方程

$$\frac{\rho}{t} + \Delta \cdot \boldsymbol{j} = 0$$

【典型习题解答】

根据方程解题

量子力学(QM)描述方式的最大特点,是微观系统的运动状态用波函数完全描写。而波函数是几率振幅,因此寻求波函数便是 QM 里最为重要的任务。解波函数满足的 Schr dinger .eq (简记为 S .eq,下同)是获得波函数的一条最基本的途径。但这时要充分认识边界条件(包括连接条件)的重要性。

1.1 证明具有不同能量的两个束缚态,其波函数的重叠积分为零。

解: 设 ψ_1,ψ_2 分别为对应于能量 E_1 和 E_2 的束缚态波函数, $E_1\neq E_2$,要证明等式

$$\int d\tau\,\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r})=0$$

凡这种与具体位势无关的结论,第一个选择是从 S .eq(薛定谔方程)出发。ψ_1,ψ_2 满足的两个定态 S .eq 为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1(\boldsymbol{r})+V\psi_1(\boldsymbol{r})=E_1\psi_1(\boldsymbol{r}) \qquad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2(\boldsymbol{r})+V\psi_2(\boldsymbol{r})=E_2\psi_2(\boldsymbol{r}) \qquad (2)$$

$\psi_2^*\times(1)-\psi_1^*\times(2)$,再对空间积分:$\int d\tau$, 得

$$(E_1-E_2)\int d\tau\,\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\int d\tau(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int d\tau\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}\oint(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)\cdot d\boldsymbol{S}$$

$=0$ (束缚态边条件: $r\to\infty$处,$\psi_1\to0,\psi_2\to0$)

如果 $E_1\neq E_2$,则有

$$\int d\tau\,\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r})=0$$

亦即 ψ_1,ψ_2 正交或有零的重迭积分。

1.2 已知描述单粒子一维束缚状态的两个本征函数分别为

$$\psi_1=Ae^{-\frac{1}{2}ax^2}$$

$$\psi_2=B(x^2+bx+c)e^{-\frac{1}{2}ax^2}$$

试求这两个状态的能级间隔。

解: ψ_1,ψ_2 都满足定态 S .eq:

$$\psi_1'' + \frac{2m}{{}^2}(E_1 - V)\psi_1 = 0 \tag{1}$$

$$\psi_2'' + \frac{2m}{{}^2}(E_2 - V)\psi_2 = 0 \tag{2}$$

$\psi_2 \times (1) - \psi_1 \times (2)$,得

$$(E_2 - E_1)\psi_1\psi_2 = \frac{{}^2}{2m}(\psi_2\psi_1'' - \psi_1\psi_2'') \tag{3}$$

式(3)对任意 x 都成立,找一个波函数的非零点,例如 $x = 0$,在方程(3)两边取值,可求得

$$E_2 - E_1 = \frac{1}{ABc}\frac{{}^2}{2m}(-2AB) = -\frac{{}^2}{mc}$$

1 .3 质量为 m 的粒子处于能量为 E 的本征态,波函数为 $\psi(x) = Axe^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$,问粒子在什么样的位势中运动?

解: 这也是直接应用 S .eq 解题的例子,S .eq 联系了 m, ,V, E 和 $\psi(x)$,知道了其中一部分,就可以求出其他部分。本题中要求解位势。从 S .eq

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

看,只要把题给的能量本征函数 $\psi(x)$ 代入运算,即可得解:

$$V(x) = E + \frac{{}^2}{2m}\cdot\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = E + \frac{{}^2}{2m}(\alpha^4 x^2 - 3\alpha^2)$$

利用连接条件定能级

定态问题中常见的一类问题是确定系统的允许能量,最一般的办法是解 S .eq,然后利用边界条件和连接条件来确定能量本征值。常用的边界条件有下面几种:

(1) 束缚态中,粒子局限在有限范围内运动,因此在无限远处找到粒子的几率为零,也即波函数在无限远处消失。

(2) 在位势无限高处,有限能量的粒子去不了,故那里的波函数为零。

(3) 在位势作有限跳跃的地方,波函数及其导数也都分别连续。

(4) 对于 δ 型位势,波函数导数有跃变,而波函数本身仍连续 :

$$V(x) = \pm\gamma\delta(x),\text{则 } \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \pm\frac{2m\gamma}{{}^2}\psi(0)$$

1.4 粒子在位势

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x\le 0\\ -V_0, & 0<x<a,\quad V_0>0\\ 0, & x\ge a\end{cases}$$

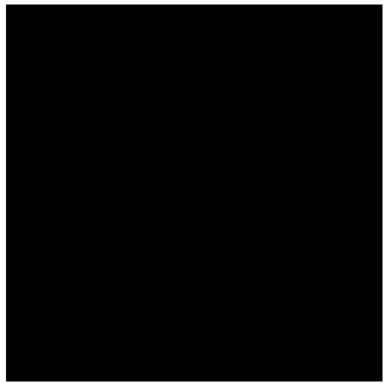

图 1.1

中运动(如图 1.1),求至少存在一个束缚态的条件。

解:显然,在 $x<0$ 处,$\psi=0$;在 $0<x<a$ 区域,束缚态波函数为

$$\psi(x)=A\sin(kx+\phi)$$

$$k=\quad 2m(E+V_0)/\quad,\qquad E<0 \qquad (1)$$

利用边条件 $\psi(0)=0$,知 $\phi=0$。

在 $x>a$ 区域,一般解为

$$\psi(x)=Be^{-k'x}+B'e^{k'x}$$

$$k'=\quad -2mE/ \qquad (2)$$

由于讨论束缚态,故当 $x\to\infty$ 时,$\psi\to 0$。由此定出 $B'=0$。于是

$$\psi(x)=A\sin kx,\quad 0<x<a$$

$$\psi(x)=Be^{-k'x},\quad a\le x \qquad (3)$$

在 $x=a$ 处,位势只有有限跃变,故波函数及其导数分别连续,或波函数对数导数连续:

$$(\ln\psi(x))'\Big|_{x=a}=(\ln\psi(x))'\Big|_{x=a} \qquad (4)$$

式(3)代入式(4),得

$$ka\cot ka=-k'a \qquad (5)$$

但 k, k'不独立。由式(1),(2)可得

$$(ka)^2+(k'a)^2=\frac{2ma^2V_0}{^2} \qquad (6)$$

令 $\xi=ka$,$\eta=k'a$,则式(5),(6)化为

$$\eta=-\xi\cot\xi$$

$$\eta^2+\xi^2=2ma^2V_0/\ ^2 \qquad (7)$$

此方程至少有一个解的条件为:

$$\frac{2ma^2V_0}{^2}\ge\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \qquad (8a)$$

或

$$8ma^2V_0/\pi^2\ ^2\ge 1 \qquad (8b)$$

这是对粒子质量 m,位阱深 V_0 和宽 a 的一个限制。

节点法

用节点法解题的依据是节点定理:对于一维束缚态而言,在基本区域内(不算边界点)基态无节点(即波函数的零点),第 n 个激发态有 n 个节点。对于高维情形,经常存在对称性,因而可以化为等效的一维问题。所以这个定理的适用范围还是很广的。利用节点定理,我们可以确定波函数零点,判定量子数,排列能级顺序,判定能量本征值等。

1.5 今有两个波函数

$$\psi_1 = A\mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$\psi_2 = B(x^2 + bx + c)\mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$$

都对应于能量本征态,则它们对应的能级哪个高?是否相邻能级?

解:我们可以直接从 S.eq 出发求出这两个态的能量之差,但无法判定题目中提出的两个问题。利用节点定理很容易解决这个问题。

ψ_1 无零点,也即没有节点,它对应的态是基态,因而能量最低。ψ_2 中可能有两个节点,因为解 $x^2 + bx + c = 0$,得在一定条件下 ψ_2 有两个节点:

$$x = \frac{1}{2}\left(-b \pm \sqrt{b^2 - 4c}\right)$$

由于题目给定 ψ_2 为能量本征态,故必有两节点,于是可以判定 ψ_2 描写的是第二激发态,能量高于 ψ_1 描述的基态。并且我们知道,这里的数 c 必定要小于 $b^2/4$,而 ψ_1,ψ_2 描写的态不是相邻能级的态,它们之间还有一个能量本征态,具有一个节点。

如果题目中没有给定 ψ_2 为能量本征态,则也可判定它所对应的能量高,因为它可能是基态、第一激发态和第二激发态的组合(依赖于 b 和 c 的大小)。因此在此态中的能量平均值也要高于 ψ_1 描写的状态的能量平均值。

1.6 测得氢原子的一个能量本征态中,轨道角动量为零(s 态),而有两个同心球面是波函数的零点。求此氢原子的能量。

解:三维有心力场中的系统的本征函数可以写为

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

其中 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 为球谐函数,而 $u(r)$ 满足方程

$$u''(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = 0$$

这是相当于在$(0,\infty)$范围内的一维运动,其行为可用径向量子数 n_r 描述。从 ψ 函数的形式看,角度方向的零点由球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 提供,而径向的零点由 $u(r)$ 提供。于是

根据节点定理,对于固定的 l,径向基态($n_r=0$)无节点,第 k 个径向激发态($n_r=k$)有 k 个节点(同心球面)。

现在再来考虑氢原子(由于它具有高简并度,所以讨论问题时要仔细些)。由于是 s 态,$l=0$;然后由径向有两个节点知径向量子数 $n_r=2$。故而我们得到氢原子的主量子数为

$$n=n_r+l+1=2+0+1=3$$

于是全部量子数为$(n,l,m)=(3,0,0)$,其相应的能量值为

$$E_3=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{3^2}=-\frac{\mu e^4}{18\hbar^2}=-1.5(\mathrm{eV})$$

根据几率守恒定律解题

几率守恒定律是 S.eq 的一个基本结果,它的正确性依赖于 Hamilton 算符的厄米性。利用这个守恒律可以得到体系的一般性质。在应用这个定律时,须注意这个定律的多种形式、几率和几率流的一些性质。

1.7 证明:如果量子系统的态是可归一化的,则一旦归一化,它在任何时候也都是归一化的。

解:设描述此态的波函数为 $\psi(\boldsymbol{r},t)$,它可归一化,意味着积分$\int \mathrm{d}\tau\psi^*\psi$是有界的。于是分析在 $r=|\boldsymbol{r}|$很大处的行为可知当 $r\to\infty$,必有 $\psi\to 0$。

由几率守恒定律

$$\partial_t\rho+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

对空间积分,得

$$\partial_t\int\mathrm{d}\tau\psi^*\psi+\int\mathrm{d}\tau\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

或

$$\partial_t\int\mathrm{d}\tau\psi^*\psi=-\int\mathrm{d}\tau\nabla\cdot\boldsymbol{j}=-\oint_s\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

其中 $\boldsymbol{S}$ 为无限远处的封闭曲面,$\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 为面元。由于 $\boldsymbol{j}$ 中总有 ψ 或 ψ^* 这一因子,在无限远处它变为零,故$\oint_s\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=0$,从而

$$\partial_t\int\mathrm{d}\tau\psi^*\psi=0$$

亦即$\int\mathrm{d}\tau\psi^*\psi$不显含时间。故当某一时刻归一化了,以后在任何时刻它也不变。这也说

明了总几率的守恒性质。

1.8　证明:若位势不依赖于时间,系统处于定态中,则其几率流密度不随时间变化。

解:几率流密度的一般表达式为

$$\boldsymbol{j} = -\frac{\mathrm{i}}{2m}[\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*] - \frac{q}{mc}\psi^* \boldsymbol{A}\psi \qquad (1)$$

对于定态 ψ而言,它随时间的变化关系为

$$\mathrm{i}\quad {}_t\psi = E\psi$$

E 为能量,是实数。于是

$$-\mathrm{i}\quad {}_t\psi^* = E\psi^*$$

$${}_t\boldsymbol{j} = -\frac{\mathrm{i}}{2m}[({}_t\psi^*)\Delta\psi + \psi^*\Delta({}_t\psi) - ({}_t\psi)\Delta\psi^* - \psi\Delta({}_t\psi^*)]$$

$$-\frac{q}{mc}[({}_t\psi^*)\boldsymbol{A}\psi + \psi^*({}_t\boldsymbol{A})\psi + \psi^*\boldsymbol{A}({}_t\psi)]$$

$$= \frac{1}{2m}[E\psi^*\Delta\psi - \psi^*\Delta(E\psi) + E\psi\Delta\psi^* - \psi\Delta(E\psi^*)]$$

$$-\frac{q}{mc}\ \frac{1}{-\mathrm{i}}E\psi^*\boldsymbol{A}\psi + \frac{1}{\mathrm{i}}\psi^*\boldsymbol{A}E\psi \quad = 0$$

这里已用了 ${}_t\boldsymbol{A} = 0$。

从几率流密度的表达式(1)可看出,如果不存在矢量势,则对实函数而言,几率流一定为零。例如一维束缚态,三维的 S 态束缚态等。

等效一维法

在量子体系的运动中,常常有这样一类运动,它们是在高维空间进行的。但由于受到一定的约束,其实际的运动自由度只有一个。这时常用的一种处理方法是把约束化掉,转变为等效的一维运动求解。这里的关键是如何写下等效的哈密顿算符,从而把运动完全描述出来。

*1.9　粒子的质量为 μ,被限制在半径为 R,螺距为 d 的螺旋线轨道上运动,求允许的能量值。

解:粒子在三维空间运动,但由于只能沿螺旋线走,实际上只要有一个合适的坐标,就可能把运动完全确定下来,因而是个一维运动。

选用柱坐标(ρ, φ, z), ρ= R 为定值,一般柱坐标 φ取值范围是 0～2π。在这里如果 φ

从 $-\infty\to+\infty$，则坐标 z 可与角度 φ 之间建立一个对应关系：

$$z = d\,\frac{\varphi}{2\pi},\qquad -\infty<\varphi<+\infty$$

螺旋线上的线元平方

$$(\mathrm{d}l)^2 = (R\mathrm{d}\varphi)^2 + (\mathrm{d}z)^2 = \left[R^2 + \left(\frac{d}{2\pi}\right)^2\right](\mathrm{d}\varphi)^2$$

这样，在螺旋线上的梯度算符为

$$\Delta = \frac{1}{R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\boldsymbol{l}_0$$

其中 $\boldsymbol{l}_0$ 为螺旋线切向单位矢量。于是可得粒子在螺旋线上“自由”运动的哈密顿算符为

$$H = \frac{p^2}{2\mu} = -\frac{{}^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2} = \frac{L_\varphi^2}{2I}$$

$$L_\varphi = -\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi},\qquad I = \mu\left(R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}\right)$$

可见，形式上如同一个转动惯量为 I 的转动刚体。当然，因为角坐标 φ 不只在 $[0,2\pi]$ 内，而是在 $-\infty\to+\infty$ 范围。解定态 S .eq 得波函数

$$(\varphi) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}$$

其中

$$k^2 = 2\mu\left(R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}\right)E/{}^2$$

从而解出能量

$$E = \frac{{}^2k^2}{2\mu\left(R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}\right)}$$

它有连续谱，确实相当于自由运动，不过等效质量变了。

在解 S .eq 的过程中，除了以上的一些方法外，通常解微分方程的常规方法，例如分离变量法、幂级数法、格林函数法等也是常用的。与数学不同的是，我们时时要考虑所求解的物理意义，要从一般解里挑出适合于所给物理条件的解来。例如在用级数法求解时，为了得到收敛的、满足边界条件的解，经常要令级数截断，这样就会导致一些力学量(如能量)的量子化。

*1.10　粒子在一半径为 R 的圆周上“自由”运动(没有其他位势)，求它的能量允许值和相应的波函数。

解：运动本身是个二维平面运动，哈密顿算符的一般形式为

$$H = \frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2) + V(x, y)$$

这里
$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & x^2 + y^2 = R^2 \\ \infty, & x^2 + y^2 \neq R^2 \end{cases}$$

但实际上,粒子的运动自由度只有一个,因为它离中心的距离保持常数,只有角度方向可以变化。显然,此时采用极坐标系便于解题。

$$x = r\cos\phi, \quad y = r\sin\phi$$

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & r = R \\ \infty, & r \neq R \end{cases}$$

与角度 ϕ 无关。动能算符为

$$\frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2) = -\frac{^2}{2\mu}\left(\frac{^2}{x^2} + \frac{^2}{y^2}\right) = -\frac{^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{}{r}r\frac{}{r} + \frac{1}{r^2}\frac{^2}{\phi^2}\right)$$

定态 S .eq 为

$$\left[-\frac{^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{}{r}r\frac{}{r} + \frac{1}{r^2}\frac{^2}{\phi^2}\right) + V(r)\right]\psi(r,\phi) = E\psi(r,\phi)$$

由于位势只依赖于向径 r,故可分离变量。令

$$\psi(r,\phi) = u(r)\ (\phi)$$

则 $u(r)$ 与 (ϕ) 各自满足方程

$$r^2 u'' + ru' - \frac{2\mu r^2}{^2}V(r)u + \left(\frac{2\mu E r^2}{^2} - \sigma\right)u = 0 \qquad (1)$$

$$''(\phi) + \sigma\ (\phi) = 0 \qquad (2)$$

由方程(1)可知,$V(r)$ 只在 $r = R$ 时有限,故 $u(r) = 0$, $r \neq R$。而在此圆周上,位能和径向动能皆为零,故可得

$$\sigma = \frac{2\mu E R^2}{^2}, \quad u = \begin{cases} c, & r = R \\ 0, & r \neq R \end{cases}$$

代入方程(2),它可改写为

$$-\frac{^2}{2\mu R^2}\frac{d^2}{d\phi^2}\ (\phi) = E\ (\phi)$$

其一般解为(只需讨论 $E > 0$,否则无周期解)

$$= Ae^{im\phi} + Be^{-im\phi} \qquad (3)$$

$$m = 2IE/\ , \quad I = \mu R^2 \qquad (4)$$

为确定 m 范围(既定能谱),可利用周期性。由于圆周封闭,为了使几率确定,必须令(波函数单值)

$$(\phi) = (\phi + 2\pi)$$

代入式(3),得

$$Ae^{\mathrm{i}m\phi}(e^{\mathrm{i}m\cdot 2\pi}-1)=Be^{-\mathrm{i}m\phi}(1-e^{-\mathrm{i}m\cdot 2\pi})$$

或

$$e^{\mathrm{i}m\phi}(A-Be^{-\mathrm{i}2m(\phi+\pi)})(e^{\mathrm{i}m2\pi}-1)=0$$

此式有非零 A, B **解的条件是**

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

因此,波函数 为(已归一化)

$$(\phi)=\frac{1}{2\pi}e^{\mathrm{i}m\phi},\ m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

而相应的能量

$$E_m=\frac{^2}{2I}m^2=\frac{^2}{2\mu R^2}m^2$$

基态无简并,而激发态是二重简并的。

从 (ϕ) **满足的方程(2)可以看出,它实际上是** $\hat{H}$ **为**

$$H(\phi)=\frac{-\ ^2}{2\mu R^2}\frac{d^2}{d\phi^2}=\frac{L^2}{2I},\quad L=-\mathrm{i}\ \frac{d}{d\phi}$$

的系统的定态 S.eq。**因此** $H(\phi)$ **也就是本题中的等效一维** $\hat{H}$(**我们也可从二维** $H(r,\phi)$——**极坐标下的** $\hat{H}$,**根据位势** $V(r)$**的意义把它读出来**)。

CHAPTER 2

一维运动 2

【内容提要】

1. 一维无限深方势阱 $V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<a\\ \infty, & x\leq 0\ \text{或}\ x\geq a\end{cases}$

本征值 $$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

本征函数 $$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, & 0<x<a\\ 0, & x\leq 0\ \text{或}\ x\geq a\end{cases}$$

若 $$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<a\\ \infty, & |x|\geq a\end{cases}$$

则本征值 $$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}$$

本征函数 $$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}, & n\ \text{为偶数}, \quad |x|<a\\ 0, & |x|\geq a\end{cases}$$

$$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\frac{1}{a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}, & n\ \text{为奇数}, \quad |x|<a\\ 0, & |x|\geq a\end{cases}$$

2. 三维无限深方势阱 $V=\begin{cases}0, & 0<x<a, 0<y<b, 0<z<c\\ \infty, & \text{其余}\end{cases}$

本征值 $$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right),\quad n_1,n_2,n_3=1,2,3,\cdots$$

本征函数 $\psi_{n_1 n_2 n_3}(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{8}{abc}}\sin\dfrac{n_1\pi x}{a}\sin\dfrac{n_2\pi x}{b}\sin\dfrac{n_3\pi x}{c}, & \text{阱内} \\ 0, & \text{阱外} \end{cases}$

3. 一维谐振子 $V = \dfrac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$

本征值 $E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$

本征函数 $\psi_n = N_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x)$

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

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

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

宇称 $\psi_n(-x) = (-1)^n\psi_n(x)$

4. 势垒贯穿

方形势垒 $V = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a \\ 0, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$

当 $\dfrac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0 - E)} \gg 1$ 时,透射系数为

$$T = T_0 e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}$$

任意形状的势垒 $V(x)$,透射系数为

$$T = T_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2\mu(V(x) - E)}\,dx}$$

5. δ势 $V(x) = \pm\gamma\delta(x) \quad (\gamma > 0)$

跃变条件 $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \pm\dfrac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$

6. 束缚态、非束缚态及其能级特点

7. 简并、简并度

【典型习题解答】

2.1 粒子在深度为 V_0,宽度为 a 的直角势阱(图 2.1)中运动,求:

① 阱口刚好出现一个束缚态能级(即 $E \approx V_0$)的条件;

② 束缚态能级总数,并和无限深势阱作比较。

解: ① $E < V_0$ 时为束缚态, $E > V_0$ 时为游离态。

定态 S .eq 为

$$\psi'' + \frac{2m}{{}^2}[E - V(x)]\psi = 0 \qquad (1)$$

令　$k = \quad 2mV_0/ \quad , \quad \beta = \quad 2m(V_0 - E)/ \qquad (2)$

则式(1)可写成

$$\psi'' + \frac{2mE}{{}^2}\psi = 0, \quad |x| \leq a/2(\text{阱内}) \qquad (3)$$

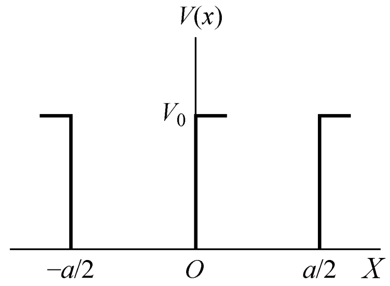

图　2.1

$$\psi'' - \beta^2\psi = 0, \quad |x| \geq a/2(\text{阱外}) \qquad (4)$$

由于束缚态边条件($|x| \to \infty$处, $\psi \to 0$), 式(4)的解应取为

$$\psi(x) = Ce^{-\beta|x|}, \quad |x| \geq a/2 \qquad (5)$$

当阱口刚好出现束缚态能级时, $E \approx V_0$, $\beta \approx 0$。因此, 由(5)式得

$$\psi'(x) = \pm\beta Ce^{-\beta|x|} \approx 0, \quad |x| \geq a/2 \qquad (6)$$

阱内波函数由式(3)解出, 当 $E \approx V_0$ 时, 解为:

$$\begin{aligned} &\text{偶宇称} \quad \psi(x) = \cos kx \\ &\text{奇宇称} \quad \psi(x) = \sin kx \end{aligned} \quad |x| \leq a/2 \qquad (7)$$

阱内、外 ψ 和 ψ' 应分别连续, 而由式(6)可知, $x = a/2$ 处 $\psi' = 0$, 将这一条件应用于式(7), 得

偶宇称　$$\sin\frac{ka}{2} = 0, \quad ka = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \cdots \qquad (8a)$$

奇宇称　$$\cos\frac{ka}{2} = 0, \quad ka = \pi, 3\pi, 5\pi, \cdots \qquad (8b)$$

亦即阱口刚好出现束缚态能级的条件为

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (9)$$

即　$$2mV_0a^2/ \ ^2 = n^2\pi^2 \qquad (10)$$

② 一维势阱至少有一个束缚能级。因此, 如果 $2mV_0a^2/ \ ^2 < \pi^2$, 只存在一个束缚态, 偶宇称(基态); 如果 $2mV_0a^2/ \ ^2 = \pi^2$, 除基态外, 阱口将再出现一个奇宇称态能级, 共两个能级; 如果 $2mV_0a^2/ \ ^2 = (2\pi)^2$, 阱口出现的将是第三个能级(偶宇称)……依此类推。由此可知, 对于给定的 V_0a^2, 束缚态能级总数为

$$N = 1 + \frac{a}{\pi} \quad 2mV_0 \qquad (11)$$

符号[A]表示不超过 A 的最大整数。

当粒子在宽度为 a 的无限深势阱中运动时, 能级为

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

则 $E\leq V_0$ 的能级数为

$$n=\frac{a}{\pi}\quad 2mV_0\quad =N-1 \tag{12}$$

即：如果只计算 $E\leq V_0$ 的能级数，则有限深(V_0)势阱的能级数比无限深势阱的能级数多一个。

注意，后者的每一个能级均一一对应地高于前者的相应能级(参看 5.9 题)。

2.2 **能量为 1eV 的电子入射到矩形势垒上，势垒高为 2eV，为使穿透几率约为 10^{-3}，势垒大约多宽？**

解：穿透系数

$$T\approx\frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}e^{-2a\quad 2m(V_0-E)/}\ =4e^{-2a\quad 2m(V_0-E)/}\ \approx 10^{-3}$$

$$\frac{2a}{}\quad 2m(V_0-E)=\ln 4000$$

$$a=\frac{\ln 4000}{2\quad 2m(V_0-E)}=\frac{1.05\times 10^{-34}\times\ln 4000}{2\quad 2\times 9.1\times 10^{-31}\times 1.6\times 10^{-19}}=8.1\times 10^{-10}(\mathrm{m})=8.1(\quad)$$

2.3 **一个谐振子处于基态：$\psi(x,t)=\quad\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}e^{-\alpha^2x^2/2-i\omega t/2}$，求势能 $V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 的平均值及动能 $T=p^2/2m$ 的平均值。**

解：

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)x^2\psi(x,t)\mathrm{d}x=\frac{\alpha}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\alpha}{\pi}\cdot\frac{\pi}{2\alpha^3}=\frac{1}{2\alpha^2}=\frac{}{2m\omega}$$

$$\overline{V}=\frac{1}{2}m\omega^2\ \overline{x^2}=\frac{1}{4}\quad\omega$$

$$\overline{T}=\frac{\overline{p^2}}{2m}=\frac{\alpha}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2/2}\cdot\quad -\frac{^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\quad e^{-\alpha^2x^2/2}\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{\alpha\quad ^2}{2m\quad\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}(\alpha^4x^2-\alpha^2)e^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{\alpha\quad ^2}{2m\quad\pi}\quad\frac{\alpha\quad\pi}{2}-\alpha\quad\pi\quad=\frac{\alpha^2\quad ^2}{4m}=\frac{1}{4}\quad\omega$$

2.4　一粒子处于如图 2.2 所示的一维势阱中,求确定能量本征值的方程。

解: ① 先设 $E > V_0$,则有

$$\psi'' + k^2\psi = 0,\quad 0 < x < L_1$$
$$\psi'' + k'^2\psi = 0,\quad L_1 < x < L_2$$

其中　$k^2 = 2mE/\hbar^2,\quad k'^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$

解出　$\psi(x) = \begin{cases} A\sin(kx + \eta), & 0 < x < L_1 \\ B\sin(k'x + \delta), & L_1 < x < L_2 \end{cases}$

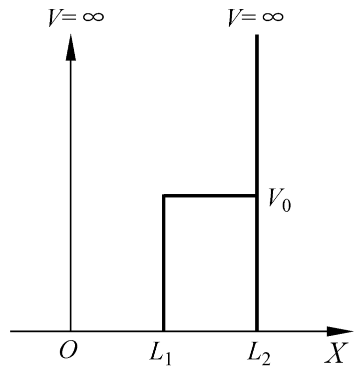

图　2.2

边界条件: $\psi(0) = 0 \qquad \eta = 0$

$\psi(L_2) = 0 \qquad \sin(k'L_2 + \delta) = 0,\quad \delta_n = n\pi - k'L_2$

$x = L_1$ 处,$(\ln\psi)'$ 连续　$k\cot kL_1 = k'\cot(k'L_1 + \delta_n)$

将 δ_n 代入,得

$$k\cot kL_1 = k'\cot k'(L_1 - L_2) \tag{1}$$

② 若 $E < 0 < V_0$,则 $k' \to \mathrm{i}k'$,代入式(1),可得

$$k\cot kL_1 = k'\coth k'(L_1 - L_2) \tag{2}$$

式(1),(2)即为确定能量本征值的方程。

2.5　质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$ 中作一维运动,试建立动量表象中的能量本征方程。

解: 采用狄拉克符号,能量本征方程可写成

$$H|\psi\rangle = (T + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{1}$$

在动量表象中,有

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle,\quad \hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle \tag{2}$$

已知

$$\begin{aligned} \varphi(p) &= \langle p|\psi\rangle \\ \langle p|p'\rangle &= \delta(p - p') \\ \int |p'\rangle\langle p'|\,\mathrm{d}p' &= 1 \end{aligned} \tag{3}$$

所以

$$|\psi\rangle = \int |p'\rangle\langle p'|\psi\rangle\,\mathrm{d}p' = \int |p'\rangle\varphi(p')\,\mathrm{d}p' \tag{4}$$

式(4)代入式(1),得

$$(T + V)\int |p'\rangle\varphi(p')\,\mathrm{d}p' = E\int |p'\rangle\varphi(p')\,\mathrm{d}p'$$

以 $\langle p|$ 左乘,

$$\int \langle p | (T+V) | p' \rangle \phi(p') \mathrm{d}p' = E\int \langle p | p' \rangle \phi(p') \mathrm{d}p' \tag{5}$$

其中
$$\langle p | T | p' \rangle = \frac{p^2}{2m}\delta(p-p') \tag{6}$$

定义
$$V_{pp'} = \langle p | V | p' \rangle,$$

代入式(5),得

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + \int V_{pp'}\phi(p')\mathrm{d}p' = E\phi(p) \tag{7}$$

此即所求的 p 表象中的能量本征方程。

$$\begin{aligned} V_{pp'} &= \int \langle p | x' \rangle \langle x | V(x) | x' \rangle \langle x' | p' \rangle \mathrm{d}x'\mathrm{d}x \\ &= \int \psi_p^*(x) V(x')\delta(x-x')\psi_{p'}(x')\mathrm{d}x'\mathrm{d}x \\ &= \int \psi_p^*(x) V(x)\psi_{p'}(x)\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int V(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{8}$$

若 $V(x) = \sum_n C_n x^n$,由于

$$x\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}$$

则式(8)变为

$$\begin{aligned} V_{pp'} &= \sum_n C_n\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x = \sum_n C_n\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\delta(p-p') \\ &= V(\hat{x})\delta(p-p') \end{aligned} \tag{9}$$

其中
$$\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p} \tag{10}$$

式(9)代入式(7),得

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\phi(p) = E\phi(p) \tag{11}$$

例如,谐振子,

$$V(\hat{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = -\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}$$

能量本征方程为

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\phi(p) = E\phi(p)$$

【动量表象中的能量本征方程,最普遍的形式是式(7);仅当 $V(x)$取 $V(x) = \sum_n C_n x^n$

的形式时，其形式才为式(11)。】

2.6　**质量为 m 的粒子处于长为 l 的一维盒子中，**

$$V = \begin{cases} \infty, & x < 0,\ x > l \\ 0, & 0 < x < l \end{cases}$$

在 $t = 0$ 时，粒子波函数为

$$\psi = \begin{cases} \frac{30}{l^5} x(l - x), & 0 < x < l \\ 0, & x < 0,\ x > l \end{cases}$$

求 $\psi(t)$ 的级数表达式和级数系数表示式。

解：

$$\psi(x, t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/}\psi(x, 0) \tag{1}$$

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n \psi_n(x) \tag{2}$$

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/} \tag{3}$$

一维无限深势阱的解为

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \frac{2}{l} \sin \frac{n\pi}{l} x \\ E_n &= \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \end{aligned} \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{4}$$

式(2)中，

$$\begin{aligned} a_n &= \int \psi_n^*(x)\psi(x, 0)\,\mathrm{d}x = \int \frac{2}{l}\sin\frac{n\pi x}{l} \frac{30}{l^5} x(l - x)\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{2\ \ 15}{l^3}\left[\int_0^l lx \sin\frac{n\pi x}{l}\,\mathrm{d}x - \int_0^l x^2 \sin\frac{n\pi x}{l}\,\mathrm{d}x\right] \\ &= \frac{2\ \ 15}{l^3}\left[l\left(\frac{l}{n\pi}\right)^2(\sin y - y\cos y)\Big|_0^{n\pi} - \left(\frac{l}{n\pi}\right)^3[2y\sin y - (y^2 - 2)\cos y]\Big|_0^{n\pi}\right] \\ &= \frac{4\ \ 15}{(n\pi)^3}(1 - \cos n\pi) = \frac{4\ \ 15}{(n\pi)^3}[1 - (-1)^n] \\ &= \frac{8\ \ 15}{(2k+1)^3\pi^3} \qquad k = 0, 1, 2, \cdots \end{aligned} \tag{5}$$

式(4)、式(5)代入式(3)，得

$$\psi(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} 8 \frac{30}{l} \cdot \frac{1}{(2k+1)^3\pi^3} \sin\frac{(2k+1)\pi}{l} x \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(2k+1)^2\pi^2 t/2ml^2}$$

2.7　考虑如下一维波函数

$$\psi(x) = A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-x/x_0} \tag{1}$$

其中 A, n, x_0 为已知常数。

① 利用 S.eq 求位势 $V(x)$和能量 E。对于它们,该波函数为一本征函数(已知当 $x\to\infty, V(x)\to 0$);

② 该势与轨道角动量为 l的氢原子态的径向势有何异同?

解:① 定态 S.eq 为

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

对题给 $\psi(x)$求导:

$$\psi' = A\frac{n}{x_0}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1} e^{-x/x_0} + A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n\left(-\frac{1}{x_0}\right)e^{-x/x_0} = \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{x_0}\right)\psi \tag{3}$$

$$\psi'' = -\frac{n}{x^2}\psi + \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{x_0}\right)\psi' = \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2}\right]\psi \tag{4}$$

从式(2)和式(4)中消去 $\psi(x)$,得

$$E - V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2}\right] \tag{5}$$

当 $x\to\infty, V(x)\to 0$,所以

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \tag{6}$$

代回式(5),解得

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x}\right] \tag{7a}$$

② 氢原子有效径向势为

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} \tag{8}$$

将式(7)改写为

$$V(x) = -\frac{n\hbar^2/mx_0}{x} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n(n-1)}{x^2} \tag{7b}$$

2.8　一个质量为 m的粒子在势 $V(x)$作用下作一维运动。假定它处在 $E = \frac{\hbar^2\gamma^2}{2m}$的能量本征态 $\psi(x) = \left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\gamma^2 x^2/2}$。

① 求粒子的平均位置;② 求粒子的平均动量;

③ 求 $V(x)$；④ 求粒子的动量在 $p\to p+\mathrm{d}p$ 间的几率。

解：

① $$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\,x\,\psi(x)\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}x\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2}\,\mathrm{d}x=0$$

② $$\langle p\rangle=\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2/2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2/2}\,\mathrm{d}x=0$$

③ 由 S.eq：
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)\tag{1}$$

而
$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2/2}=(-\gamma^2+\gamma^4x^2)\,\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2/2}\tag{2}$$

注意到
$$E=\hbar^2\gamma^2/2m\tag{3}$$

将式(2)、式(3)代入式(1)，可解得
$$V(x)=\hbar^2\gamma^4x^2/2m\tag{4}$$

④ $$|\psi(x)\rangle=\int|p\rangle\langle p|\psi(x)\rangle\,\mathrm{d}p=\int\varphi(p)\,|p\rangle\,\mathrm{d}p$$

波函数的动量表象 (5)

$$\varphi(p)=\langle p|\psi(x)\rangle=\int\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\cdot\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2/2}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\gamma^2}{2}\left(x^2+2\mathrm{i}px/\hbar\gamma^2\right)}\,\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\gamma^2}{2}\left(x+\mathrm{i}p/\hbar\gamma^2\right)^2}\cdot\mathrm{e}^{-p^2/2\hbar^2\gamma^2}\,\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}\cdot\frac{\sqrt{2}}{\gamma}\cdot\mathrm{e}^{-p^2/2\hbar^2\gamma^2}\cdot\sqrt{\pi}=\left(\frac{1}{\hbar^2\gamma^2\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-p^2/2\hbar^2\gamma^2}$$

粒子的动量在 $p\to p+\mathrm{d}p$ 间的几率为
$$P(p)\,\mathrm{d}p=|\varphi(p)|^2\,\mathrm{d}p=\left(\frac{1}{\hbar^2\gamma^2\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-p^2/\hbar^2\gamma^2}\,\mathrm{d}p\tag{6}$$

2.9 $t=0$ 时，处在谐振子势 $V=\frac{1}{2}kx^2$ 中的一粒子波函数为
$$\psi(x,0)=A\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\left[\cos\beta H_0(\alpha x)+\frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}H_2(\alpha x)\right]$$

其中 β, A 为常数，$\alpha^2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{mk}$，且厄米多项式是归一的，即

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2}[H_n(\alpha x)]^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\cdot 2^n n! \qquad N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\cdot\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$$

① 写出 $\psi(x,t)$ 表示式;

② 在该态下粒子能量的测值及相对几率;

③ $\langle x\rangle$ 怎样随 t 变化? $t=0$ 时, $\langle x\rangle$ 的值为多少?

解: ① 任意时刻,有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

形式解为

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(x,0)$$

$$\psi(x,0) = \sum_n a_n\psi_n(x)$$

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n\psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$a_n = \int\psi_n^*(x)\psi(x,0)\,dx$$

$$= \int dx\, N_n e^{-\alpha^2x^2/2}H_n(\alpha x)\cdot Ae^{-\alpha^2x^2/2}\cdot\left(\cos\beta\cdot H_0 + \frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}H_2\right)$$

$$= A\left(\frac{1}{N_0}\cos\beta\,\delta_{n0} + \frac{1}{N_2}\frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}\delta_{n2}\right)$$

$$N_0 = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}, \quad N_2 = \left(\frac{\alpha}{4\cdot 2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$$

所以

$$\psi(x,t) = A\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\right)^{1/2}\left[\cos\beta\psi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar} + \sin\beta\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}\right]$$

② 可测得的能量为

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

二者测得的相对几率为

$$P_0/P_2 = \frac{\cos^2\beta}{\sin^2\beta} = \cot^2\beta$$

③ 因为 $\psi(x,0)$ 仅为 ψ_0 与 ψ_2 的叠加态,而 ψ_0 和 ψ_2 皆为偶宇称,故叠加后仍为偶宇称态,即

$$\psi(-x,0) = \psi(x,0)$$

$t=0$ 时,

$$\langle x\rangle = (\psi(x,0),\ x\psi(x,0)) = 0$$

由 $(\psi(x,t), x\psi(x,t))$ 立即可以看出,平均值 $\langle x\rangle$ 不随时间 t 变化,即任意时刻 t,均有

$\langle x\rangle = 0$。

2.10　在 $t=0$ 时，处于势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中的粒子，由波函数

$$\psi(x,0) = A\sum_n\left(\frac{1}{2}\right)^n\psi_n(x)$$

描述，ψ_n 是能量本征态，$(\psi_n,\psi_{n'})=\delta_{nn'}$，求

① 归一化常数 A；

② 给出 $t>0$ 时，$\psi(x,t)$的表达式；

③ 证明$|\psi(x,t)|^2$ 是一个周期函数，求出其最长的周期；

④ 求出 $t=0$ 时，体系能量的平均值。

解：① $(\psi(x,0),\psi(x,0)) = |A|^2\sum_{n,m}\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{n+m}{2}}(\psi_m,\psi_n)$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{2}\right)^n\cdot|A|^2 = 2|A|^2 = 1$$

所以

$$A=\frac{1}{2}$$

②

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\psi(x,0) = \sum_n\left(\frac{1}{2}\right)^{n+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}\psi_n(x)$$

③

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\sum_{n,m}\left(\frac{1}{2}\right)^{n+m}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(n-m)t}\psi_n(x)\psi_m^*(x)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{2}\right)^n|\psi_n(x)|^2 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{n,m=0\\ m\neq n}}^{\infty}\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{n+m}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n-m)\omega t}\psi_n(x)\psi_m^*(x)$$

显然，上式是时间 t 的周期函数，最长周期 $\tau=2\pi/\omega$。

④ $t=0$ 时，

$$\overline{E} = (\psi(x,0),H\psi(x,0)) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^{n+1}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{n}{2^{n+1}}+\frac{1}{2^{n+2}}\right)\omega \qquad (1)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n}{2^{n+1}} = \frac{1}{4}+\frac{2}{8}+\frac{3}{16}+\cdots = \frac{1}{4}+\frac{1}{8}+\frac{1}{16}+\cdots+\frac{1}{8}+\frac{1}{16}+\cdots+\frac{1}{16}+\frac{1}{32}+\cdots$$

$$= \frac{1/4}{1-1/2}+\frac{1/8}{1-1/2}+\frac{1/16}{1-1/2}+\cdots = \frac{1}{2}+\frac{1}{4}+\frac{1}{8}+\cdots = \frac{1/2}{1-1/2} = 1 \qquad (2)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^{n+2}} = \frac{1}{4}+\frac{1}{8}+\frac{1}{16}+\cdots = \frac{1/4}{1-1/2} = \frac{1}{2} \qquad (3)$$

式(2)、式(3)代入式(1)，得

$$\overline{E} = \frac{3}{2}\ \omega$$

2.11　一质量为 m，动量为 p 的粒子从左射向图 2.3 所示阶跃状势垒，计算下列两种情况下粒子向后散射的几率。

① $p^2/2m < V_0$；　　② $p^2/2m > V_0$

解：将纵坐标平移至 x_0 处，不影响反射系数的计算结果。

S.eq 为：

$$\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{{}^2}\,\psi(x) = 0, \qquad x < x_0$$

$$\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{{}^2}\,\psi(x) = 0, \qquad x > x_0 \tag{1}$$

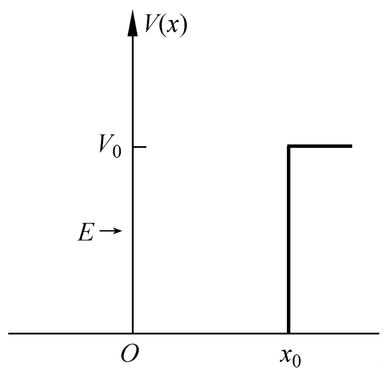

图 2.3

① $E = \dfrac{p^2}{2m} < V_0$，解为

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik(x-x_0)} + re^{-ik(x-x_0)}, & x < x_0 \\ te^{-k'(x-x_0)}, & x > x_0 \end{cases} \tag{2}$$

其中　$k^2 = 2mE/{}^2$，　$k'^2 = 2m(V_0 - E)/{}^2$　(3)

$x = x_0$ 处 ψ 及 ψ' 分别连续，得

$$1 + r = t$$

$$ik(1 - r) = -k't$$

所以

$$r = \frac{k' + ik}{-k' + ik} \tag{4}$$

反射系数　$R = |j_{反}/j_{入}| = |r|^2 = 1$　(因为是无限宽势垒)　(5)

② $E = \dfrac{p^2}{2m} > V_0$，方程(1)的解为

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik(x-x_0)} + re^{-ik(x-x_0)}, & x < x_0 \\ te^{ik''(x-x_0)}, & x > x_0 \end{cases} \tag{6}$$

其中　$k^2 = 2mE/{}^2$，　$k''^2 = 2m(E - V_0)/{}^2$　(7)

$x = x_0$ 处，ψ 及 ψ' 分别连续，得

$$1 + r = t$$

$$ik(1 - r) = ik''t$$

所以

$$r = \frac{k - k'}{k + k'} \tag{8}$$

$$R = |r|^2 = \left|\frac{k - k'}{k + k'}\right|^2 = \frac{(k - k')^2 (k + k')^2}{(k + k')^4} = \frac{(k^2 - k'^2)^2}{(k + k')^4}$$

$$= V_0^2 / (\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4 \tag{9}$$

透射系数 $T = 1 - R = 1 - \dfrac{V_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4}$ (10)

2.12　**若粒子从右边入射，求如图 2.4 所示一维阶梯势的反射和透射系数。**

图　2.4

解：右边入射，显然 $E > V_0$。

$x > 0$ 区域：既有入射波，也有反射波。S.eq 为

$$\psi'' + k_1^2 \psi = 0, \quad k_1^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$$

解为

$$\psi = e^{-ik_1 x} + r e^{ik_1 x}$$

在 $x < 0$ 区域：只有透射波。S.eq 为

$$\psi'' + k_2^2 \psi = 0, \quad (x < 0)$$

$$k_2^2 = 2mE/\hbar^2$$

解为

$$\psi = t e^{-ik_2 x}$$

$x = 0$ 处，ψ，ψ'分别连续，给出

$$1 + r = t$$

$$k_1 (1 - r) = k_2 t$$

所以

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

反射系数

$$R = |r|^2 = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2 (k_1 + k_2)^2}{(k_1 + k_2)^4} = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2}{(k_1 + k_2)^4}$$

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

透射系数

$$T = 1 - R = 1 - \frac{V_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4}$$

2 .13　**一质量为** m **的粒子沿** x **正方向以能量** E **向** $x=0$ **处的势阶运动,如图** 2.5。**当** $x\leq 0$ **时,该势为** 0;**当** $x>0$ **时,该势为** $\frac{3}{4}E$。**问在** $x=0$ **处粒子被反射的几率多大**?

解: S .eq **为**

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad x\leq 0$$
$$\psi'' + k'^2\psi = 0, \quad x>0$$

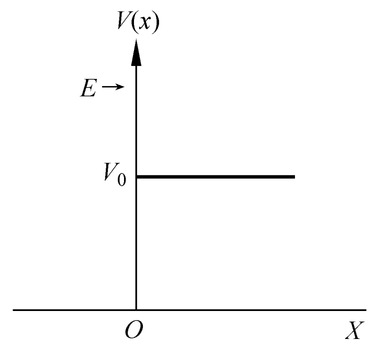

图　2.5

其中 $k^2 = 2mE/\ ^2,\ k'^2 = 2m(E-V_0)/\ ^2 = k^2/4 \quad V_0 = \frac{3}{4}E$

方程的解为:

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x\leq 0 \\ te^{ikx/2}, & x\geq 0 \end{cases}$$

$x=0$ **处**,ψ **及** ψ' **分别连续,给出**

$$1 + r = t$$
$$k(1-r) = \frac{k}{2}t$$

解得
$$r = \frac{1}{3}$$

反射系数
$$R = |r|^2 = \frac{1}{9}$$

(**本题可直接代入题** 2 .11 **中的式**(9) **求出** R)

2 .14　**证明**: **对于任意的一维势垒贯穿问题,粒子的反射系数** R **与透射系数** T **总有关系**

$$R + T = 1$$

解: **对于散射问题,粒子在无限远处不受力的作用,即力总是作用在一个有限的范围,因此在无限远处位势总趋于常数**:

$$V(x) \begin{cases} \to V_L, & x\to -\infty \\ \to V_R, & x\to +\infty \end{cases}$$

于是对于一定能量 E **的粒子,在无限远处的波函数行为如**:

$$e^{\pm ikx}, \quad x\to -\infty, \quad k = \ 2m(E-V_L)/$$
$$e^{\pm ik'x}, \quad x\to +\infty, \quad k' = \ 2m(E-V_R)/$$

考虑散射边界条件,假定粒子从左边($x=-\infty$**处**)**入射,于是在右边**($x=+\infty$**处**)**只**

有出射粒子,而向 $x = -\infty$处运动的则有被势垒反射的粒子。因此定态波函数的渐近行为是

$$\psi(x)\begin{cases}\to\psi_1 = e^{ikx} + re^{-ikx}, & x\to-\infty\\ \to\psi_2 = te^{ik'x}, & x\to+\infty\end{cases}$$

由于是定态,故几率密度 $\rho=\psi^*\psi$与时间无关。于是由几率守恒定律: ${}_t\rho + \Delta\cdot\boldsymbol{j} = 0$,可知

$$_x\boldsymbol{j} = 0$$

$\boldsymbol{j}$为一维几率流密度。对此式进行空间积分,可得

$$j(-\infty) = j(\infty)$$

或
$$j_1 = j_2 \tag{1}$$

$$j_1 = -\frac{i}{2m}\psi_1^*\frac{d}{dx}\psi_1 - c.c = \frac{k}{m}(1-|r|^2) \tag{2}$$

$$= j_入 + j_反 \tag{3}$$

其中
$$j_入 = \frac{k}{m},\quad j_反 = -\frac{k}{m}|r|^2 \tag{4}$$

而
$$j_2 = -\frac{i}{2m}\psi_2^*\frac{d}{dx}\psi_2 - c.c = \frac{k'}{m}|t|^2 \tag{5}$$

反射系数
$$R = |j_反/j_入| = |r|^2$$

透射系数
$$T = |j_2/j_入| = \frac{k'}{k}|t|^2$$

由此,
$$R + T = |r|^2 + \frac{k'}{k}|t|^2 \tag{6}$$

式(2)、式(5)代入式(1),得

$$k(1-|r|^2) = k'|t|^2$$

即
$$|r|^2 + \frac{k'}{k}|t|^2 = 1 \tag{7}$$

比较式(6)、式(7),得

$$R + T = 1 \tag{8}$$

2.15　δ势阱一侧有无限高势垒,即

$$V(x) = \begin{cases}\infty, & x<0\\ -\gamma\delta(x-a), & x>0,\quad(\gamma, a>0)\end{cases} \tag{1}$$

如图 2.6,讨论其束缚态能级。

解: S.eq:

$$-\frac{{}^{2}}{2m}\psi'' - \gamma\delta(x-a)\psi = E\psi \tag{2}$$

对于束缚态，$E<0$，令

$$\beta^2 = -2mE/{}^{2} \tag{3}$$

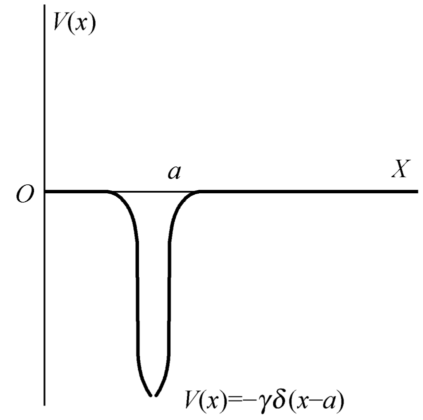

图 2.6

则

$$\psi'' - \beta^2\psi + \frac{2m\gamma}{{}^{2}}\delta(x-a)\psi = 0 \tag{4}$$

积分，$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \mathrm{d}x$，$\varepsilon \to 0^+$，得 ψ' 跃变的条件

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = -\frac{2m\gamma}{{}^{2}}\psi(a) \tag{5}$$

在 $x \neq a$ 处，式(4)化为

$$\psi'' - \beta^2\psi = 0 \tag{6}$$

边条件 $\psi(0)=0$，$\psi(\infty)=0$(束缚态)，因此

$$\psi(x) = \begin{cases} \sinh\beta x, & 0 \le x < a \\ A\mathrm{e}^{-\beta x}, & x > a \end{cases} \tag{7}$$

$x=a$ 点 $\psi(x)$ 连续及 $\psi'(x)$ 的跃变条件分别给出

$$\sinh\beta a = A\mathrm{e}^{-\beta a} = \psi(a) \tag{8}$$

$$-\beta A\mathrm{e}^{-\beta a} - \beta\cosh\beta a = -\frac{2m\gamma}{{}^{2}}\psi(a) \tag{9}$$

式(9)× $-\dfrac{a}{\psi(a)}$，利用式(8)，得

$$\beta a + \beta a\coth\beta a = \frac{2m\gamma a}{{}^{2}} \tag{10}$$

此式即为确定能级的公式。

下面分析至少存在一条束缚态能级的条件。

当势阱出现第一条能级时 $E \sim 0^-$。所以 $\beta a \sim 0^+$。利用

$$\lim_{\beta a\to 0}\beta a\coth\beta a = \lim_{\beta a\to 0}\frac{\beta a}{\tanh\beta a} = 1$$

式(10)化为

$$\frac{2m\gamma a}{{}^{2}} = \beta a + \beta a\coth\beta a = 1 + 0^+$$

因此至少存在一条束缚态能级的条件为

$$\frac{2m\gamma a}{{}^{2}} \ge 1 \tag{11}$$

我们已经知道，纯 δ 势阱肯定存在惟一的束缚态能级。当一侧存在无限高势垒时，由于排斥作用(表现为 $\psi(x)\equiv 0$，对 $x\le 0$)，束缚态存在与否是要受到影响的。纯 δ 势阱的特征长度为 $L = {}^{2}/m\gamma$，条件(11)可改写成

$$a \geq L/2 \tag{12}$$

即要求无限高势垒离开 δ势阱较远($a \geq L/2$) ,才能保证 δ势阱中束缚态能存在下去。显然,当 $a \to \infty$(即 $a \gg L/2$) ,$\beta a \to \infty$时,左侧无限高势垒的影响可完全忽略。此时 $\coth \beta a \to 1$,式(10)给出

$$\beta = m\gamma/\hbar^2$$

即
$$E = -\hbar^2\beta^2/2m = -m\gamma^2/2\hbar^2 \tag{13}$$

和孤立的 δ势阱中束缚态能级完全相同。

令 $\beta a = \eta$,式(10)化为

$$\eta(1 + \coth\eta) = 2m\gamma a/\hbar^2 \tag{14}$$

由于 $\eta(1 + \coth\eta) \geq 1$,所以只当 $\frac{2m\gamma a}{\hbar^2} \geq 1$ 时,式(10)或式(14)才有解,解出根 η之后,利用

$$\eta = \beta a = a\sqrt{-2mE}/\hbar$$

即可求出能级
$$E = -\hbar^2\eta^2/2ma^2 \tag{15}$$

*2.16　对于直角势阱(深 V_0,宽 a)的第 n 个束缚态 ψ_n, E_n,在 $V_0 \gg E_n$ 条件下,计算:

① 粒子在阱外出现的几率;

② $V(x)$和 $V^2(x)$平均值,并和 E_n 比较。

解: ① 以偶宇称态为例,定态 S.eq[见 2.1 题式(3)、(4)]可写成

$$\begin{aligned} &\psi'' + k^2\psi = 0, \quad |x| \leq a/2(\text{阱内}) \\ &\psi'' - \beta^2\psi = 0, \quad |x| \geq a/2(\text{阱外}) \end{aligned} \tag{1}$$

其中
$$\begin{aligned} k &= \sqrt{2mE}/\hbar \\ \beta &= \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \end{aligned} \tag{2}$$

注意: 在 $V_0 \gg E$ 条件下,$\beta \gg k$。

式(1)的偶宇称解为

$$\begin{aligned} \psi &= \cos kx, \quad |x| \leq a/2 \\ \psi &= Ce^{-\beta|x|}, \quad |x| \geq a/2 \end{aligned} \tag{3}$$

$x = a/2$ 处 ψ应连续,由此得出

$$C = e^{\beta a/2}\cos\frac{ka}{2} \tag{4}$$

$x = a/2$ 处 ψ′应连续,得出

$$C = \frac{k}{\beta}e^{\beta a/2}\sin\frac{ka}{2} \tag{5}$$

由式(4)、式(5)得能级公式

$$\tan\frac{ka}{2}=\frac{\beta}{k} \tag{6}$$

在 $\beta \gg k$ 条件下,式(6)的解为

$$ka=n\pi,\quad n=1,3,5,\cdots \tag{7}$$

代入式(2),得能级

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{8}$$

这正是无限深势阱的能级公式。

现在计算粒子在阱内、外出现的几率。由式(3)、(4),得

$$I_1=\int_{阱外}|\psi|^2\,dx=2C^2\int_{a/2}^{\infty}e^{-2\beta x}\,dx=\frac{C^2}{\beta}e^{-\beta a}=\frac{1}{\beta}\cos^2\frac{ka}{2} \tag{9}$$

$$I_2=\int_{阱内}|\psi|^2\,dx=2\int_0^{a/2}\cos^2 kx\,dx=\frac{a}{2}\left(1+\frac{\sin ka}{ka}\right) \tag{10}$$

由于式(7),使得 $\sin ka$ 和 $\cos\frac{ka}{2}$ 均→0。可知粒子在阱外出现的几率 $P_{外}$ 远小于阱内几率 $P_{内}$,且有

$$I=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,dx\approx\int_{阱内}|\psi|^2\,dx=\frac{a}{2} \tag{11}$$

阱外几率

$$P_{外}=\frac{\int_{阱外}|\psi|^2\,dx}{\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,dx}\approx\frac{2}{\beta a}\cos^2\frac{ka}{2} \tag{12}$$

利用式(6),得

$$1+\tan^2\frac{ka}{2}=\frac{k^2+\beta^2}{k^2}=\frac{V_0}{E}$$

所以

$$\cos^2\frac{ka}{2}=\frac{E}{V_0} \tag{13}$$

代入式(12),得阱外几率

$$P_{外}=\frac{2E}{a\beta V_0}\approx\frac{2\hbar}{a\sqrt{2mV_0}}\frac{E}{V_0} \tag{14}$$

考虑到 $V_0 \gg E$ 和式(8),有

$$\sqrt{2mV_0}\gg\sqrt{2mE_n}\approx n\pi\hbar/a \tag{15}$$

所以阱外几率

$$P_{外}\ll 2E/n\pi V_0 \tag{16}$$

② $$\langle V(x)\rangle=(\text{阱外几率})\cdot V_0=\frac{2E}{a\sqrt{2mV_0}}\hbar\,\frac{2}{n\pi}\cdot E_n \tag{17}$$

$$\langle V^2(x)\rangle=(\text{阱外几率})\cdot V_0^2\approx\frac{E}{ma}\sqrt{2mV_0}\,\hbar\left(\frac{n\pi}{ma^2}\right)^2 E\approx\frac{2}{n\pi}E_n^2 \tag{18}$$

*2.17　**粒子在无限深方势阱(宽为 a)中运动,处于第 n 个束缚态 ψ_n,求粒子对于每一侧阱壁的平均作用力。**

解:先考虑为有限深(V_0),再过渡到 $V_0\to\infty$的情况。

即
$$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<a/2\\ V_0, & |x|\geq a/2\,(V_0\to\infty)\end{cases} \tag{1}$$

粒子所受作用力为 $-\mathrm{d}V/\mathrm{d}x$,其对阱壁的作用力为

$$F(x)=\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}=V_0\delta(\underset{(\text{右侧})}{x-a/2})-V_0\delta(\underset{(\text{左侧})}{x+a/2}) \tag{2}$$

$$\langle F_{\text{右}}\rangle=\frac{\int|\psi|^2V_0\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\mathrm{d}x}{\int|\psi|^2\mathrm{d}x}=\frac{V_0\left|\psi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2}{\int|\psi|^2\mathrm{d}x}=\frac{V_0\cos^2(ka/2)}{a/2}=\frac{2E_n}{a} \tag{3}$$

(V_0/E)越大,则式(3)越正确。由于对称性,显然有

$$\langle F_{\text{左}}\rangle=-\langle F_{\text{右}}\rangle \tag{4}$$

式(3)可作如下解释:设固定阱壁左侧,而令右侧徐缓外移 Δa,则粒子对外作功 $\langle F_{\text{右}}\rangle\Delta a$,导致能级降低。据能量守恒律,有

$$\langle F_{\text{右}}\rangle=-\frac{\partial E_n}{\partial a}=-\frac{\partial}{\partial a}\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\frac{2}{a}E_n \tag{5}$$

这正是式(3)。

CHAPTER 3

3 力学量和算符

【内容提要】

1. 在量子力学中,力学量用算符表示。力学量用算符表示后,可以直接计算平均值。在坐标表象中,平均值公式是

$$\overline{f(\boldsymbol{p})}=\int\psi^{*}(\boldsymbol{r},t)f(-\mathrm{i}\ \Delta)\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r},\quad\int|\psi|^{2}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=1$$

在动量表象中,平均值公式是

$$\overline{f(\boldsymbol{r})}=\int C^{*}(\boldsymbol{p},t)f(\mathrm{i}\ \Delta_{p})C(\boldsymbol{p},t)\mathrm{d}\boldsymbol{p},\quad\int|C_{p}|^{2}\mathrm{d}\boldsymbol{p}=1$$

2. 量子力学中的力学量,用线性厄米算符表示。厄米算符 A 满足 $A^{+}=A$,即

$$(\psi,A\psi)=(A\psi,\psi)\quad 或\quad\int\psi^{*}A\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int(A\psi)^{*}\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

厄米算符的平均值是实数,本征值是实数。厄米算符的本征函数系满足正交、归一、完备、封闭等条件。可以用它作为希尔伯特空间的一组基矢,构成一个表象。

3. 在力学量 F 的本征态中测量 F,有确定值,即它的本征值;在非 F 的本征态中测量 F,有可能值和平均值,可能值是 F 的本征值。将 (x) 用算符 F 的正交归一的本征函数展开:

$$(x)=\sum_{n}c_{n}\psi_{n}(x)+\int c_{\lambda}\psi_{\lambda}(x)\mathrm{d}x$$

则在 (x) 态中测量力学量 F 得到结果为 λ_n 的几率为 $|c_n|^2$,得到结果在 $\lambda\sim\lambda+\mathrm{d}\lambda$ 范围内的几率为 $|c_\lambda|^2\mathrm{d}\lambda$。

$$c_{n}=\int\psi_{n}^{*}(x)\ (x)\mathrm{d}x,\quad c_{\lambda}=\int\psi_{\lambda}^{*}(x)\ (x)\mathrm{d}x$$

$$\overline{F}=\int{}^{*}(x)F\ (x)\mathrm{d}x\quad 或\quad\overline{F}=\sum_{n}\lambda_{n}|c_{n}|^{2}+\int\lambda|c_{\lambda}|^{2}\mathrm{d}\lambda$$

4. 连续谱的本征函数可以归一化为 δ 函数，或采用箱归一化。

5. 动量算符 $\boldsymbol{p}$ 的本征函数(即自由粒子波函数)

$$\psi_{\boldsymbol{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}$$

正交归一性　$$\int \psi_{\boldsymbol{p}'}^{*}(\boldsymbol{r})\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\,d\tau = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$$

其箱归一化波函数　$$\psi_{\boldsymbol{p}} = L^{-3/2} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}$$

动量本征值　$$p_x = \frac{2\pi\hbar n_x}{L},\quad p_y = \frac{2\pi\hbar n_y}{L},\quad p_z = \frac{2\pi\hbar n_z}{L}$$

一维自由粒子的哈密顿量　$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}$$

三维自由粒子的哈密顿量　$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$$

能量本征值　$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu L^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

$$n_x、n_y、n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

6. 角动量 z 分量　$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

本征函数　$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},\quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

L_z 的本征值　$$L_z' = m\hbar$$

7. 平面转子(设绕 z 轴旋转)

哈密顿量　$$H = \frac{L_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

能量本征态　$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},\quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

能量本征值　$$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2I}$$

8. (L^2, L_z) 有共同的本征函数—球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$：

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m N_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!\,(2l+1)}{(l+|m|)!\,4\pi}},\quad (l = 0, 1, 2, \cdots;\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l)$$

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right],\quad L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

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

$$L_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

9. 力学量 F 的平均值随时间的变化满足

$$\frac{\mathrm{d}\overline{F}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}}\overline{[F, H]} + \overline{\frac{F}{t}}$$

若 $\frac{\mathrm{d}\overline{F}}{\mathrm{d}t} = 0$(即力学量 F 的平均值不随时间变化),则称 F 为守恒量。因而力学量 F 为守恒量的条件为:

$$\frac{F}{t} = 0, \quad 且 \quad [F, H] = 0$$

量子系统的运动状态是用波函数完全描写的。但物理学了解状态靠的是系统在该状态下的性质。怎样从状态得到物理性质呢?这涉及到量子理论里如何描写物理性质或物理量。QM 假定:力学量(也称观测量)用线性厄米算符代表。这样在 QM 里就引入了算符运算。利用算符可以较好地反映整体特征,利用它我们可以从状态(波函数)里提取力学性质,从而把理论计算与实验结合起来。数学上,状态可看作是无限维复线性空间(希尔伯特空间)里的一个矢量。那么力学量(算符)反映的是此空间中的变换。在具体计算上,算符运算都可以通过矩阵来实现。

【典型习题解答】

根据定义解题

人们在解题时,总想找到最简便的方法,但这并非总能做到。所以一个基本的方法是直接从定义来思考。

3.1 设质量为 μ 的粒子在半谐振子位势

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

中运动,处于基态,求粒子的平均位置和均方差。

解:半谐振子的波函数可以从谐振子波函数得出,只需取其中以原点为节点的那些就可以了。但由于粒子在半无限空间运动,要注意归一化。

半谐振子基态波函数与谐振子的第一激发态波函数相似,归一化后的波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \frac{2\ \alpha}{\pi^{1/4}}\alpha x \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}, & x > 0 \end{cases}$$

$$\alpha = \mu\omega$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, x\psi^2(x) = \frac{2}{\alpha\sqrt{\pi}} = 2\sqrt{\frac{\hbar}{\pi\mu\omega}}$$

均方差

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, x^2\psi^2(x) - 4\hbar/\pi\mu\omega = \left(\frac{3}{2} - \frac{4}{\pi}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}$$

3.2　氢原子的波函数($t = 0$ 时刻)为

$$\psi(\boldsymbol{r}, 0) = \frac{1}{2}\psi_{100}(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{3}\psi_{210}(\boldsymbol{r}) + \frac{\sqrt{3}}{3}\psi_{211}(\boldsymbol{r})$$

求 t 时刻的平均能量,其中 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 为定态空间波函数。

解: t 时刻波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{2}\psi_{100}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/\hbar} + \frac{1}{3}\psi_{210}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar} + \frac{\sqrt{3}}{3}\psi_{211}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar}$$

其中 $E_n = -e^2/2an^2$ ($a = \hbar^2/\mu e^2$,为波尔半径, $n = 1, 2$),为 ψ_{nlm} 态对应的能量。于是我们计算 t 时刻的能量平均值

$$E = \frac{\langle\psi(\boldsymbol{r}, t)\,|\,H\,|\,\psi(\boldsymbol{r}, t)\rangle}{\langle\psi(\boldsymbol{r}, t)\,|\,\psi(\boldsymbol{r}, t)\rangle} = \frac{\left(\frac{1}{2}\right)^2 E_1 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 E_2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 E_2}{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2} = \frac{13E_1}{25} = -7.07(\mathrm{eV})$$

3.3　氢原子波函数同上例,求 t 时刻氢原子具有能量 E_2 的几率,以及氢原子相应角动量在 z 方向投影为零的几率。

解: 在 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 中,有三个能量本征态,其中 ψ_{210} 和 ψ_{211} 对应于能量 E_2 ,故由几率定义, t 时刻氢原子处于能量为 E_2 状态中的几率为

$$P(E_2) = \frac{\left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2}{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2} = \frac{16}{25} = 64\%$$

从轨边角动量的 z 方向投影 L_z 看, $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 也是由它的三个本征态组合而成的,其中 ψ_{100} 和 ψ_{210} 对应于 L_z 本征值为零的态,因此 t 时刻角动量 z 方向投影为零的几率为

$$P(L_z = 0) = \frac{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2}{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2} = 52\%$$

利用波函数的性质解题

量子状态由波函数完全描写。给定一具体波函数,可仔细观察其特性,例如实数性,对称性,零点等,这些特性有助于我们迅速解决问题。

3.4 一个三维运动的粒子处于束缚态,其定态波函数的空间部分是实函数,求此态中的动量平均值。

解:定态波函数的一般形式为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$$

E 为能量。由题可知 $\psi^*(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})$。由于是束缚态,必定有 $\psi(\boldsymbol{r})\to 0$(当 $|\boldsymbol{r}|\to\infty$)。于是可计算动量平均值,如

$$\overline{p_x}=\int \mathrm{d}\tau\psi^*(\boldsymbol{r},t)\hat{p}_x\psi(\boldsymbol{r},t)=\int \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\psi^*(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{r})$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}y\mathrm{d}z\int \mathrm{d}x\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\psi^2(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar\int \mathrm{d}y\mathrm{d}z\,\psi^2(\boldsymbol{r})\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty}=0$$

对 $\overline{p_y}$、$\overline{p_z}$ 也有同样结果。

① 这一结果也可从下面的观点看出:力学量的平均值必定是个实数,而对实波函数而言,由于算符 $\hat{p}_x$ 中含有一个纯虚数单位 i,故 $\overline{p_x}$ 形式上是个纯虚数。为统一起见,此数只有为零。

② 在一维束缚态中,定态的空间波函数总可选为实函数,因此一维束缚定态中动量平均值总为零。

3.5 三维空间中运动的粒子,其波函数的方位角(φ)部分 $\Phi(\varphi)=\cos^3\varphi$,求 $\hat{L}_z$ 的平均值。

解:由于在球坐标中 $\hat{L}_z$ 取下列形式:$\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$,该式除微分算符外,包含有纯虚数单位 i,而此处 $\Phi(\varphi)$是个实函数,同上例一样,有 $\overline{L_z}=0$。

3.6 粒子作一维运动,其空间波函数为

$$\psi(x)=A(\alpha^4x^4-\alpha^2x^2+1)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2},\quad -\infty<x<\infty$$

求其平均位置。

解:$\psi(x)$为 x 的偶函数,即 $\psi(-x)=\psi(x)$。于是我们计算 x 的平均值,有

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\psi^*(x)\,x\,\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(-x)\,\psi^*(-x)(-x)\psi(-x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\,\psi^*(y)\,y\,\psi(y) = \bar{y} = -\bar{x} = 0$$

这是因为 x 是奇函数,故积分消失。

显然,如果 $\psi(x)$是奇函数,也有同样的结果。

▲ 归纳起来,凡是具有确定空间宇称的态,其平均位置一定为零。

这一结论也可用来验证前面题 3.4 的结果,因为如果空间波函数是实的,即 $\psi^*(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r})$,则它在动量空间的形式

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3 r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\,\psi(\boldsymbol{r})$$

必定是复共轭对称的:

$$\varphi(-\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3 r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\,\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3 r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\,\psi^*(\boldsymbol{r})$$

$$= \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3 r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\,\psi(\boldsymbol{r})\right]^* = \varphi^*(\boldsymbol{p})$$

于是动量平均值为

$$\bar{\boldsymbol{p}} = \int \mathrm{d}^3 p\,\varphi^*(\boldsymbol{p})\,\hat{\boldsymbol{p}}\,\varphi(\boldsymbol{p}) = \int \mathrm{d}^3 p\,\boldsymbol{p}\,\varphi(-\boldsymbol{p})\,\varphi(\boldsymbol{p}) = 0$$

积分为零是因为 $\varphi(-\boldsymbol{p})\varphi(\boldsymbol{p})$是偶函数而 $\boldsymbol{p}$ 为奇函数:

$$\varphi(-\boldsymbol{p})\varphi(\boldsymbol{p}) = \varphi[-(-\boldsymbol{p})]\varphi(-\boldsymbol{p}) = \varphi(\boldsymbol{p})\varphi(-\boldsymbol{p})$$

3.7　粒子在 t 时刻有波函数

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} + \psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar}$$

其中 $\varphi(\boldsymbol{r})$和 $\psi(\boldsymbol{r})$为定态波函数的空间部分,且已归一化,E 不为零。求此态中的能量平均值。

解:无论波函数取何种形式,它满足一般的 S.eq

$$\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi = H\Psi$$

于是我们计算此态中的能量平均值

$$\bar{E} = \bar{H} = \langle\Psi|H|\Psi\rangle / \langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}\tau\left(\varphi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar} + \psi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\right)\left(E\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} - E\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar}\right) / \langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$= E\int \mathrm{d}\tau\,\varphi^*\varphi - \int \mathrm{d}\tau\,\psi^*\psi - \mathrm{e}^{2\mathrm{i}Et/\hbar}\int \mathrm{d}\tau\,\varphi^*\psi + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Et/\hbar}\int \mathrm{d}\tau\,\psi^*\varphi \,/\, \langle\Psi|\Psi\rangle = 0$$

这里用了归一化条件$\int d\tau \psi^* \psi = \int d\tau \psi^* \psi = 1$，且还用了$\int d\tau \psi^* \psi = \int d\tau \psi^* \psi = 0$即二态正交。这是因为当 $E \neq 0$ 时，E 和 $-E$ 是 $\hat{H}$ 的两个不同的本征值，其对应态必定正交。当然，若 $E = 0$，上面等式也是成立的。

* 此例说明，虽然 Ψ 对于时间 t 形式上不像个实函数，但由于前面的空间几率振幅提供的两部分几率相同，而求能量平均值时要对空间自由度积分(只需要几率)，故实质上 Ψ 中的时间正负频部分系数是一样的。这样，Ψ 相当于时间的实函数，而能量算符在此态中等同于 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$，故得零期望值，或者说，此波函数存在着实际的时间宇称，故计算作为时间演化算符代表的哈密顿量的平均值，只会给出零结果。

以上各例利用波函数的实数性、对称性、零点等性质，得到了许多有用的结论。而波函数的这些性质，又不必经过繁复的计算即可看出，因此学会这种方法是很有用处的。

对易关系法

3.8 系统运动的哈密顿算符 $H = \boldsymbol{p}^2/2\mu + V(\boldsymbol{r})$，已知它处于束缚定态中，证明其动量平均值为零。

解：设定态波函数的空间部分为$|\psi\rangle$，则当 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 时(E 为相应能量)，为求 $\boldsymbol{p}$ 的平均值，我们注意到坐标算符 x_i 与 $\hat{H}$ 的对易关系

$$[x_i, H] = \left[x_i, \sum_j p_j p_j/2\mu + V(\boldsymbol{r})\right] = \frac{1}{\mu} i\hbar p_i$$

这里已用了最基本的对易关系$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$。由此可见，计算动量平均值可转化为计算一个对易子的平均值：

$$\overline{p_i} = \frac{\mu}{i\hbar}\langle\psi|[x_i, H]|\psi\rangle = \frac{\mu}{i\hbar}(\langle\psi|x_i H|\psi\rangle - \langle\psi|H x_i|\psi\rangle)$$

$$= \frac{\mu}{i\hbar}(\langle\psi|x_i E|\psi\rangle - \langle\psi|E x_i|\psi\rangle) = 0$$

这里用到了 $\hat{H}$的厄米性。

这一结果可以作一般性推广：如果厄米算符$\hat{C}$可以表示为两个厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的对易子 $\hat{C} = i[\hat{A}, \hat{B}]$，则在 $\hat{A}$ 或 $\hat{B}$ 的本征态中，$\hat{C}$ 的平均值必为零。

这一定理可以用来解决许多问题。

比如：在角动量 $\boldsymbol{J}$ 的任何一个直角坐标分量(比如 J_z)的本征态下，$\boldsymbol{J}$ 的另外两个分量(J_x, J_y)的平均值均为零。

3.9　$|m\rangle$ 和 $|n\rangle$ 两态为 L_z 的本征态，本征值分别为 $m\hbar$ 和 $n\hbar$，求由力学量 L_x 引起的跃迁矩阵元，与由 L_y 引起的跃迁矩阵元之间的关系。

解：由题意，$L_z|m\rangle = m\hbar|m\rangle$，$L_z|n\rangle = n\hbar|n\rangle$，要求 $\langle m|L_x|n\rangle$ 与 $\langle m|L_y|n\rangle$ 之关系，由于 L_x、L_y、L_z 三者构成封闭的对易关系，故容易计算。

$$\langle m|L_y|n\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle m|[L_z, L_x]|n\rangle = -i(m-n)\langle m|L_x|n\rangle \text{——二者关系}$$

如果再利用一次 $L_x = \frac{1}{i\hbar}[L_y, L_z]$，则可得

$$\langle m|L_y|n\rangle = -i(m-n)\cdot\frac{1}{i\hbar}\langle m|[L_y, L_z]|n\rangle = -(m-n)(n-m)\langle m|L_y|n\rangle$$
$$= (m-n)^2\langle m|L_y|n\rangle$$

从而有
$$\langle m|L_y|n\rangle[(m-n)^2-1]=0$$

这表明，除非 $m=n\pm1$，否则矩阵元 $\langle m|L_y|n\rangle = 0$

作为特例，当 $m=n$ 时，

$$\langle m|L_x|n\rangle = \langle m|L_y|n\rangle = 0$$

即
$$\langle n|L_x|n\rangle = \langle n|L_y|n\rangle = 0$$

亦即验证了，在 L_z 的任一本征态 $|n\rangle$ 下，$\overline{L_x} = \overline{L_y} = 0$。

3.10　粒子在位势 $V(r)$ 的有心力场中作定态运动，证明在任何一具有一定轨道角动量的定态里，粒子的平均位置在原点。

解：有心力场中，由于总哈密顿算符 $H = \boldsymbol{p}^2/2\mu + V(r)$ 具有空间反射不变性，因此宇称是好量子数。对于具有一定轨道角动量的状态 $|\psi\rangle$，具有确定的宇称 $I|\psi\rangle = a|\psi\rangle$，$a=\pm1$。这里 I 为空间反演算符，$If(\boldsymbol{r}) = f(-\boldsymbol{r})$。算符 I 与坐标算符 $\boldsymbol{r}$ 是反对易的：

$$I\boldsymbol{r} = -\boldsymbol{r}I$$

即
$$\{I, \boldsymbol{r}\} \equiv I\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}I = 0$$

或
$$I\boldsymbol{r}I = -\boldsymbol{r}$$

这样我们计算 $\boldsymbol{r}$ 的平均值，有（设 $|\psi\rangle$ 已归一：$\langle\psi|\psi\rangle = 1$）

$$0 = \langle\psi|\{I, \boldsymbol{r}\}|\psi\rangle = 2a\langle\psi|\boldsymbol{r}|\psi\rangle = 2a\langle\boldsymbol{r}\rangle$$

$a\neq0$，故 $\langle\boldsymbol{r}\rangle = 0$。命题得证。

同样，由于空间反演算符 I 与动量算符 $\boldsymbol{p}$ 也是反对易的：$\{I, \boldsymbol{p}\} = 0$。故在具有确定

空间宇称的束缚态 $|\psi\rangle$ 中, $\langle \boldsymbol{p}\rangle = 0$。

可以把上面的结果归纳成一般的定理:

▲ 如果两个厄米算符 $\hat{A}, \hat{B}$ 互相反对易: $\{A, B\} \equiv AB + BA = 0$,则在一个算符的本征态中,另一个算符的平均值必为零。

3.11 设 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 为厄米算符,证明在能量表象中下式成立:

$$\sum_n (E_n - E_k) | F_{nk} |^2 = \frac{1}{2}\langle k | [F, [H, F]] | k\rangle \tag{1}$$

证: 式(1)左端为

$$\sum_n (E_n - E_k) | F_{nk} |^2 = \sum_n (E_n - E_k)\langle k | F | n\rangle\langle n | F | k\rangle \tag{*}$$

$$= \sum_n \langle k | F | n\rangle\langle n | (HF - FH) | k\rangle = \langle k | F[H, F] | k\rangle \tag{2}$$

计算中利用了公式

$$\sum_n | n\rangle\langle n | = 1 \tag{3}$$

由于 H, F 是厄米算符,有下列算符关系:

$$[H, F]^+ = [F, H] = -[H, F] \tag{4}$$

式(2)取共轭,得到:

$$\sum_n (E_n - E_k) | F_{nk} |^2 = -\langle k | [H, F]F | k\rangle \tag{5}$$

式(2) + 式(5),即得式(1)。

▲ 也可按如下方法求解:接式(3)之后,由式(*),将 $(E_n - E_k)$ 插到式(*)的前面矩阵元 $\langle k| F| n\rangle$ 之中,同样可得式(5)

$$\sum_n (E_n - E_k) | F_{nk} |^2 = \sum_n (E_n - E_k)\langle k | F | n\rangle\langle n | F | k\rangle$$

$$= \sum_n \langle k | (FH - HF) | n\rangle\langle n | F | k\rangle = \langle k | [F, H]F | k\rangle$$

$$= -\langle k| [H, F]F| k\rangle$$

3.12 对于任意算符 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 及其共轭 F^+,有下列矩阵元关系:

$$(F_{kn})^* = \langle k| F| n\rangle^* = \langle n| F^+ | k\rangle = F^+_{nk}$$

试证明在能量表象中有下列求和规则:

$$\sum_n (E_n - E_k)(| F_{nk} |^2 + | F_{kn} |^2) = \langle k | [F^+, [H, F]] | k\rangle \tag{1}$$

证:

$$[F^+, [H, F]] = F^+ HF + FHF^+ - HFF^+ - F^+ FH \tag{2}$$

在能量本征态$|k\rangle$下逐项计算平均值,并利用公式$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$,即得

$$\langle k|F^+HF|k\rangle = \sum_n \langle k|F^+H|n\rangle\langle n|F|k\rangle = \sum_n E_n F^+_{kn}F_{nk} = \sum_n E_n |F_{nk}|^2 \tag{3}$$

$$\langle k|FHF^+|k\rangle = \sum_n \langle k|FH|n\rangle\langle n|F^+|k\rangle = \sum_n E_n F_{kn}F^+_{nk} = \sum_n E_n |F_{kn}|^2 \tag{4}$$

$$\langle k|HFF^+|k\rangle = E_k\sum_n \langle k|F|n\rangle\langle n|F^+|k\rangle = E_k\sum_n F_{kn}F^+_{nk} = E_k\sum_n |F_{kn}|^2 \tag{5}$$

$$\langle k|F^+FH|k\rangle = E_k\sum_n \langle k|F^+|n\rangle\langle n|F|k\rangle = E_k\sum_n F^+_{kn}F_{nk} = E_k\sum_n |F_{nk}|^2 \tag{6}$$

式(3) + 式(4) - 式(5) - 式(6),即得式(1)。

注意,如果$F\neq F^+$,则F_{nk}和F_{kn}并无简单关系。

如果F为厄米,即$F = F^+$,则$F_{nk} = F^*_{kn}$,这时$|F_{nk}| = |F_{kn}|$,式(1)就变成3.11题的式(1)。

3.13 系统哈密顿算符为$H = p^2/2\mu + V(x)$,求和式

$$\sum_n (E_n - E_i)|x_{in}|^2$$

的值,其中$x_{in}\equiv\langle i|x|n\rangle$为矩阵元,$|n\rangle$是能量为$E_n$的本征态,已归一,求和对一切态进行。

解:
$$\begin{aligned}\sum_n (E_n - E_i)|x_{in}|^2 &= \sum_n (E_n - E_i)\langle i|x|n\rangle\langle n|x|i\rangle \\ &= \sum_n (\langle i|xE_n|n\rangle - \langle i|E_i x|n\rangle)\langle n|x|i\rangle \\ &= \sum_n (\langle i|xH|n\rangle - \langle i|Hx|n\rangle)\langle n|x|i\rangle \\ &= \sum_n (\langle i|[x,H]|n\rangle)\langle n|x|i\rangle = \langle i|[x,H]x|i\rangle\end{aligned} \tag{1}$$

这里已用了态$|n\rangle$的完备性条件:$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$。

同样,把$E_n - E_i$放到后面的矩阵元之中,得

$$\sum_n (E_n - E_i) | x_{in} |^2 = \langle i | x[H, x] | i\rangle = - \langle i | x[x, H] | i\rangle \qquad (2)$$

式(1) + 式(2),得

$$\sum_n (E_n - E_i) | x_{in} |^2 = \frac{1}{2}\{ \langle i | [x, H]x | i\rangle - \langle i | x[x, H] | i\rangle \}$$

$$= \frac{1}{2} \langle i | [[x, H], x] | i\rangle$$

具体把对易关系计算出来

$$[[x, H], x] = [i \; p/ \mu, x] = {}^2/ \mu \qquad (3)$$

于是最终得

$$\sum_n (E_n - E_i) | x_{in} |^2 = {}^2/ 2\mu \qquad (4)$$

3.14 系统的角动量为 1( ),处于角动量在 z 方向的投影 L_z 的某本征态。已知测量角动量在 y 方向的投影 L_y 得值 0 的几率为 1/ 2,求测量 L_y 得值 1 的几率。

解: 由于 L_y 可以表示为 L_z 和 L_x 的对易子:

$$L_y = \frac{1}{\mathrm{i}}[L_z, L_x]$$

故知 L_y 在 L_z 的本征态中平均值为 0: $\overline{L_y} = 0$。但总角动量为 1,即 L_y 在此态中的可能取值为 ±1, 0。由平均值定义:

$$\overline{L_y} = a_1 \cdot 1 + a_0 \cdot 0 + a_{-1} \cdot (-1) = a_1 - a_{-1} = 0$$

故

$$a_1 = a_{-1} \qquad (1)$$

这里 a_1, a_0, a_{-1} 分别为测量 L_y 得值 1,0, -1 的几率。但另一方面,几率归一:

$$a_1 + a_0 + a_{-1} = 1 \qquad (2)$$

又题设

$$a_0 = \frac{1}{2} \qquad (3)$$

由式(1)、式(2)、式(3),解得

$$a_1 = \frac{1}{4}$$

即在 L_z 的该本征态下,测 L_y 得值 1 的几率是$\frac{1}{4}$。

***3.15 限于一维运动,设**

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(x) = - \frac{{}^2}{2\mu} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) \qquad (1)$$

设 $F = F(x)$ 为 x 的任意函数,证明求和规则

$$\sum_n (E_n - E_k) \mid F_{nk} \mid^2 = \frac{{}^2}{2\mu} \langle k \| F' \mid^2 \mid k \rangle \tag{2}$$

其中 $$F' = \mathrm{d}F / \mathrm{d}x$$

证: 利用基本对易式

$$[p, F(x)] = -\mathrm{i} \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x} = -\mathrm{i} F' \tag{3}$$

易得 $$[H, F] = \frac{1}{2\mu}[p^2, F] = -\frac{\mathrm{i}}{2\mu}(pF' + F'p) \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
[F^+, [H, F]] &= -\frac{\mathrm{i}}{2\mu}([F^+, p]F' + F'[F^+, p]) \\
&= -\frac{\mathrm{i}}{2\mu} \mathrm{i} \frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x} F' + \mathrm{i} F' \frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x} \\
&= \frac{{}^2}{2\mu} \frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x} F' + F' \frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x} = \frac{{}^2}{\mu} \mid F' \mid^2
\end{aligned} \tag{5}$$

利用 3.12 题式(1),即得

$$\sum_n (E_n - E_k)(\mid F_{nk} \mid^2 + \mid F_{kn} \mid^2) = \frac{{}^2}{\mu} \langle k \mid\mid F' \mid^2 \mid k \rangle \tag{6}$$

由于一维束缚定态波函数是实函数,所以

$$F_{kn} = \int \psi_k(x) F(x) \psi_n(x) \mathrm{d}x = \int \psi_n(x) F(x) \psi_k(x) \mathrm{d}x = F_{nk} \tag{7}$$

代入式(6),即得式(2)。

① 如取 $F(x) = x$,则 $F' = 1$,式(2)成为

$$\sum_n (E_n - E_k) \mid x_{nk} \mid^2 = \frac{{}^2}{2\mu} \tag{8}$$

正是 3.13 题证明的结果。

② 若要证明 $$\sum_n (E_n - E_k) \mid \langle n \mid e^{\mathrm{i}qx} \mid k \rangle \mid^2 = \frac{{}^2 q^2}{2\mu} \tag{9}$$

则相当于 $$F(x) = e^{\mathrm{i}qx}, \quad F' = \mathrm{i}q e^{\mathrm{i}qx}, \quad \mid F' \mid^2 = q^2 \tag{10}$$

将式(10)代入式(2),即得式(9)。

* 3.16　证明在一维束缚态问题中,基态中的位置均方差满足不等式

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_0 \leq \frac{1}{E_1 - E_0} \cdot \frac{{}^2}{2\mu}$$

其中 E_1 和 E_0 分别为第一激发态和基态的能量。

解: 对于哈密顿算符为 $H = \frac{p^2}{2\mu} + V(x)$ 的系统,算符 $\Delta x = x - \langle x \rangle_0$ 与它有下列对易

关系:

$$[\Delta x,[\Delta x, H]] = -{}^{2}/\mu \tag{1}$$

也即与 x 算符一样。这是显然的,因为 $\langle x\rangle_0$ 只是一个数。于是和前面的例子相同,有关系

$$\sum_n (E_n - E_i)\,|\langle n|\Delta x|i\rangle|^2 = \frac{{}^{2}}{2\mu} \tag{2}$$

取 $E_i = E_0$ 为基态能量,上式给出

$$\sum_n (E_n - E_0)\,|\langle n|\Delta x|0\rangle|^2 = \frac{{}^{2}}{2\mu} \tag{3}$$

对一维束缚态而言,能级无简并,当 $m > n$ 时, $E_m > E_n$。

$$\sum_n (E_n - E_0)\,|\langle n|\Delta x|0\rangle|^2 \geq \sum_n (E_1 - E_0)\,|\langle n|\Delta x|0\rangle|^2$$

$$= (E_1 - E_0)\sum_n |\langle n|\Delta x|0\rangle|^2 = (E_1 - E_0)\sum_n \langle 0|\Delta x|n\rangle\langle n|\Delta x|0\rangle$$

$$= (E_1 - E_0)\langle 0|(\Delta x)^2|0\rangle = (E_1 - E_0)\langle(\Delta x)^2\rangle_0 \tag{4}$$

于是由式(3),式(4)可得

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_0 \leq \frac{1}{E_1 - E_0}\,\frac{{}^{2}}{2\mu}$$

CHAPTER 4

4 对易关系 厄米矩阵

【内容提要】

1. **对易式定义**: $[A, B] \equiv AB - BA$

2. **对易式满足的基本恒等式**:

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$$

$$[A, BC] = B[A, B] + [A, B]C$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \qquad (\text{Jacobi 恒等式})$$

3. **一些重要的对易关系**:

$$[x_\alpha, x_\beta] = 0, \quad [p_\alpha, p_\beta] = 0, \quad [x_\alpha, p_\beta] = \mathrm{i} \quad \delta_{\alpha\beta}$$

$$\left[L_\alpha, \begin{matrix} x_\beta \\ p_\beta \\ L_\beta \end{matrix}\right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i} \begin{matrix} x_\gamma \\ p_\gamma \\ L_\gamma \end{matrix}$$

$$[L^2, L_\alpha] = 0, \quad [s^2, s_\alpha] = 0, \quad [J^2, J_\alpha] = 0$$

4. **若**$[F, G] = 0$**,则算符** F **和** G **有共同的本征函数系,反之亦然。在** F **和** G **的共同本征函数系中测量** F **和** G**,都有确定值。**

若$[F, G] \neq 0$**,则有测不准关系**

$$\Delta F \Delta G \geq \frac{1}{2}\overline{|[F, G]|}$$

特例: $\Delta x \Delta p_x \geq \ / 2, \qquad \Delta E \Delta t \geq \ / 2$

5. **选定表象后,算符和量子态都用矩阵表示。在矩阵力学中,**Q **表象是以** Q **的本征函数系**$\{u_n(x)\}$**为基矢构成的表象,在这个表象中,有**

$$Qu_n(x) = Q_n u_n(x)$$

$$\Psi = \sum a_n(t)u_n(x)$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots \\ a_n(t) \end{pmatrix}, \quad \Psi^+ = (a_1^*(t), a_2^*(t), \cdots, a_n^*(t))$$

算符 F 对应一个矩阵(方阵),矩阵元是 $F_{nm} = \int u_n^* F u_m \mathrm{d}x$,平均值公式是 $\overline{F} = \Psi^+ F\Psi$,归一化条件是 $\Psi^+\Psi = I$,本征值方程是 $F\Psi = \lambda\Psi$。

6. 在量子力学中,两个表象之间的变换是幺正变换,满足 $S^+ = S^{-1}$;态的变换是 $b = S^{-1}a$;算符的变换是 $F' = S^{-1}FS$。幺正变换不改变算符的本征值。

在量子力学中,状态随时间的变化可写成 $\Psi(t) = U(t)\Psi(0)$, $U(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/}$ 是个幺正算符。

7. 量子态可用狄拉克符号刃 $|A\rangle$ 或刁 $\langle A|$ 表示。狄拉克符号的最大好处是它可以不依赖于表象。

基矢的完备性: $\sum\limits_n |n\rangle\langle n| = I$, $\int \mathrm{d}p\,|p\rangle\langle p| = I$, $\int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x| = I$

坐标表象	狄拉克符号
(1) $F\Psi(x,t) = \ (x,t)$	$F\|\Psi\rangle = \|\ \rangle$
(2) $\mathrm{i}\,\frac{}{t}\Psi(x,t) = H\Psi(x,t)$	$\mathrm{i}\,\frac{}{t}\|\Psi\rangle = H\|\Psi\rangle$
(3) $Hu_n(x) = E_n u_n(x)$	$H\|n\rangle = E_n\|n\rangle$
(4) $\int u_m^*(x)u_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{mn}$	$\langle m\|n\rangle = \delta_{mn}$
(5) $\Psi(x) = \sum\limits_n c_n u_n(x)$	$\|\Psi\rangle = \sum\limits_n c_n\|n\rangle$
(6) $c_n = \int u_n^*(x)\Psi(x)\mathrm{d}x$	$c_n = \langle n\|\Psi\rangle$
(7) $\overline{F} = \int \Psi^*(x)F\Psi(x)\mathrm{d}x$	$\overline{F} = \langle\Psi\|F\|\Psi\rangle$
(8) $\int \Psi^*(x)\Psi(x)\mathrm{d}x = 1$	$\langle\Psi\|\Psi\rangle = 1$

8. 薛定谔图景相当于一种“固定坐标系”,基矢 $u_n(x)$ 不随时间变化,波函数 $\Psi(x,t)$ 随时间变化,算符 O_S 不显含 t。

海森堡图景相当于一种“随动坐标系”,基矢随体系一起运动,是时间的函数;波函数 $|\Psi_H\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/}|\Psi_S(t)\rangle$ 与时间 t 无关;算符 $O_H = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/}O_S\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/}$ 是 t 的函数,满足运动方程

$$\mathrm{i}\ \frac{O_H}{t} = [O_H(t), H]$$

【典型习题解答】

4.1　**设** A, B **不对易**：$[A, B] = C$；**但** C **与** A, B **皆对易**：$[C, A] = 0, [C, B] = 0$，**试计算** $[A, B^n]$，$[A, \mathrm{e}^B]$，$[A, \mathrm{e}^{\lambda B}]$，$[A, f(B)]$。

解：①
$$[A, B^n] = [A, B \cdot B^{n-1}] = [A, B]B^{n-1} + B[A, B^{n-1}]$$
$$= CB^{n-1} + B[A, B^{n-1}] \qquad (1)$$

将 n **换成** $(n-1)$，**就有**

$$[A, B^{n-1}] = CB^{n-2} + B[A, B^{n-2}] \qquad (2)$$

式(2)**代入式**(1)，**得**

$$[A, B^n] = CB^{n-1} + CB^{n-1} + B^2[A, B^{n-2}] = 2CB^{n-1} + B^2[A, B^{n-2}]$$

重复这种递推过程$(n-1)$**次**，**即得**

$$[A, B^n] = (n-1)CB^{n-1} + B^{n-1}[A, B^{n-(n-1)}] = (n-1)CB^{n-1} + CB^{n-1} = nCB^{n-1} \qquad (3)$$

②
$$\mathrm{e}^B = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B^n}{n!}$$

所以
$$[A, \mathrm{e}^B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}[A, B^n] = C\sum_{n=1}^{\infty} \frac{B^{n-1}}{(n-1)!} = C\sum_{m=0}^{\infty} \frac{B^m}{m!} = C\mathrm{e}^B \qquad (4)$$

③ **如令** $B \to \lambda B$，**则** $[A, B] = C \to [A, \lambda B] = \lambda[A, B] = \lambda C$，**式**(4)**作此置换**，**即得**

$$[A, \mathrm{e}^{\lambda B}] = \lambda C \mathrm{e}^{\lambda B} \qquad (5)$$

④ **设**
$$f(B) = \sum_n f_n B^n \qquad (6)$$

则
$$f'(B) = \frac{\mathrm{d}f(B)}{\mathrm{d}B} = \sum_n n f_n B^{n-1} \qquad (7)$$

$$[A, f(B)] = [A, \sum_n f_n B^n] = \sum_n f_n [A, B^n] = \sum_n f_n nCB^{n-1} = Cf'(B) \qquad (8)$$

①、②、③皆为④的特例。

由①的结果式(3)，**若令** $A = x$, $B = p_x$，**则**

$$[x, p_x^n] = n\mathrm{i}\ p_x^{n-1}$$

特别地，
$$[x, p_x^2] = 2\mathrm{i}\ p_x = 2\ ^2\ \frac{}{x} \qquad (9)$$

4.2　**设算符** A, B **不可对易**：$[A, B] = C$；**但** $[A, C] = 0$，$[B, C] = 0$。**试证明** Glauber **公式**：

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^A \mathrm{e}^B \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C} = \mathrm{e}^B \mathrm{e}^A \mathrm{e}^{\frac{1}{2}C}$$

证：引入参数 λ，作

$$f(\lambda)=e^{\lambda A}e^{\lambda B}\tag{1}$$

注意 $f(0)=1$，$f(1)=e^{A}e^{B}$，上式对 λ 求导，得

$$\frac{d}{d\lambda}f(\lambda)=e^{\lambda A}(A+B)e^{\lambda B}\tag{2}$$

但据题 4.1 式(5)，

$$[A,e^{\lambda B}]=Ae^{\lambda B}-e^{\lambda B}A=\lambda Ce^{\lambda B}$$

所以

$$Ae^{\lambda B}=e^{\lambda B}(A+\lambda C)\tag{3}$$

代入式(2)，得

$$\frac{d}{d\lambda}f(\lambda)=e^{\lambda A}e^{\lambda B}(A+B+\lambda C)=f(\lambda)(A+B+\lambda C)\tag{4a}$$

两边乘以 $1/f(\lambda)$，得

$$\frac{d f(\lambda)}{f(\lambda)\,d\lambda}=A+B+C\lambda\tag{4b}$$

积分，得

$$\ln f(\lambda)=\ln f(0)+(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2$$

因此，

$$f(\lambda)=f(0)e^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2}=e^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2}\tag{5}$$

两边乘以 $e^{-\frac{1}{2}C\lambda^2}$，得

$$e^{\lambda(A+B)}=e^{\lambda A}e^{\lambda B}e^{-\frac{1}{2}C\lambda^2}\tag{6a}$$

如令 $A\leftrightarrow B$，则 $[A,B]=C\rightarrow[B,A]=-C$，上式变成

$$e^{\lambda(A+B)}=e^{\lambda B}e^{\lambda A}e^{\frac{1}{2}C\lambda^2}\tag{6b}$$

式(6a)和(6b)中，取 $\lambda=1$，即得

$$e^{A+B}=e^{A}e^{B}e^{-\frac{1}{2}C}=e^{B}e^{A}e^{\frac{1}{2}C}\tag{7}$$

4.3 如果 $\boldsymbol{A}$ 是厄米矩阵，试证 $\det e^{\boldsymbol{A}}=e^{\mathrm{tr}\boldsymbol{A}}$；已知

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&-i&0\\ i&0&-i\\ 0&i&0\end{pmatrix}$$

求 $\det e^{\boldsymbol{A}}$。

解：① 设 $\boldsymbol{A}$ 是 m 阶方阵，其本征值为 $a_1,a_2,\cdots,a_m$。因为 $\boldsymbol{A}$ 为厄米矩阵，故 $\boldsymbol{A}$ 可以用一个幺正矩阵 $\boldsymbol{U}$ 对角化，即

$$\boldsymbol{U}^{+}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_m \end{pmatrix}$$

因为 $\det \mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\det(\boldsymbol{U}^{+}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{U})=\det\left[\boldsymbol{U}^{+}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\boldsymbol{A}^n}{n\,!}\boldsymbol{U}\right]$

$$=\det\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n\,!}(\boldsymbol{U}^{+}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{+}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}\cdots\boldsymbol{U}^{+}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U})=\det\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\boldsymbol{U}^{+}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U})^n}{n\,!}$$

$$=\det\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n\,!}\begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_m \end{pmatrix}^n=\det\begin{pmatrix} \sum\frac{a_1^n}{n\,!} & & \\ & \sum\frac{a_2^n}{n\,!} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$=\det\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{a_1} & & \\ & \mathrm{e}^{a_2} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}=\mathrm{e}^{a_1}\mathrm{e}^{a_2}\cdots\mathrm{e}^{a_m}=\mathrm{e}^{\mathrm{tr}(U^{+}AU)}=\mathrm{e}^{\mathrm{tr}A}$$

② 对于

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

有
$$\det \mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\mathrm{e}^{\mathrm{tr}\boldsymbol{A}}=\mathrm{e}^{0}=1$$

4.4 已知 $\ln \boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 2 & 7 & \mathrm{i}3 \\ 7 & 0 & -5 \\ -\mathrm{i}3 & -5 & -1 \end{pmatrix}$

求 $\det \boldsymbol{A}$。

解法 1: 令 $\boldsymbol{B}=\ln \boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{A}=\mathrm{e}^{\boldsymbol{B}}$。利用 4.3 题结果,

$$\det \boldsymbol{A}=\det \mathrm{e}^{\boldsymbol{B}}=\mathrm{e}^{\mathrm{tr}\boldsymbol{B}} \tag{1}$$

而
$$\mathrm{tr}\boldsymbol{B}=\mathrm{tr}(\ln \boldsymbol{A})=2-1=1$$

代入上式即得
$$\det \boldsymbol{A}=\mathrm{e} \tag{2}$$

* **解法 2**: 令 $\boldsymbol{A}=\mathrm{e}^{\boldsymbol{B}}$。矩阵(算符) $\boldsymbol{A}$ 既然为 $\boldsymbol{B}$ 的函数, 则 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ 可以同时对角化, 即变到 $\boldsymbol{B}$ 表象中去, 这时对角元 $\boldsymbol{B}_{nn}=\boldsymbol{B}_n$ 为 $\boldsymbol{B}$ 的本征值。有

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{B}=\sum_n \boldsymbol{B}_{nn}=\sum_n \boldsymbol{B}_n \tag{3}$$

$\boldsymbol{A}$ 的本征值为 $e^{\boldsymbol{B}_n}$,即

$$\boldsymbol{A}_n=\boldsymbol{A}_{nn}=e^{\boldsymbol{B}_n} \tag{4}$$

所以
$$\det \boldsymbol{A}=\prod_n \boldsymbol{A}_{nn}=\prod_n e^{\boldsymbol{B}_n}=e^{\sum_n \boldsymbol{B}_n}=e^{\mathrm{tr}\boldsymbol{B}}$$

此即为式(1)。

矩阵的行列式和迹均与表象的选择无关,故式(1)适用于任何表象。

4.5 给定算符 A, B,令

$C_0=B$

$C_1=[A, C_0]=[A, B]=AB-BA$

$C_2=[A, C_1]=[A,[A, B]]$

……

证明:
$$e^A B e^{-A}=C_0+C_1+\frac{1}{2!}C_2+\frac{1}{3!}C_3+\cdots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{C_n}{n!}$$

证:引入参变数 λ,作

$$f(\lambda)=e^{\lambda A}Be^{-\lambda A} \tag{1}$$

则
$$f(0)=B=C_0,\quad f(1)=e^A Be^{-A} \tag{2}$$

对 λ 求导即得

$$\frac{d}{d\lambda}f(\lambda)=e^{\lambda A}(AB-BA)e^{-\lambda A}=e^{\lambda A}C_1e^{-\lambda A}$$

$$\left(\frac{d}{d\lambda}\right)^2 f(\lambda)=e^{\lambda A}(AC_1-C_1A)e^{-\lambda A}=e^{\lambda A}C_2e^{-\lambda A}$$

$$\left(\frac{d}{d\lambda}\right)^n f(\lambda)=e^{\lambda A}C_ne^{-\lambda A} \tag{3}$$

根据泰勒公式

$$f(1)=f(0)+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{d^n}{d\lambda^n}f(\lambda)\bigg|_{\lambda=0} \tag{4}$$

而由式(3),令 λ→0,即得

$$\frac{d^n}{d\lambda^n}f(\lambda)\bigg|_{\lambda=0}=C_n \tag{5}$$

代入式(4),并注意到式(2),得

$$e^A Be^{-A}=C_0+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}C_n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}C_n \tag{6}$$

亦即

$$e^{A}Be^{-A}=B+[A,B]+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]+\frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]]+\cdots \tag{7}$$

4.6　① 证明:任一算符 F,总可写作 $F=A+\mathrm{i}B$,其中 A, B 是厄米算符;
② 若算符 G 是一个非厄米算符,问在什么条件下,G^2 是厄米算符。

解: ①
$$F=\frac{1}{2}(F+F^{+})+\frac{1}{2}(F-F^{+})=A+\mathrm{i}B \tag{1}$$

$$A=\frac{1}{2}(F+F^{+})=A^{+} \tag{2}$$

$$B=\frac{\mathrm{i}}{2}(F^{+}-F)=B^{+} \tag{3}$$

② 若 $G=A+\mathrm{i}B$,是非厄米算符,则

$$G^2=(A+\mathrm{i}B)^2=A^2-B^2+\mathrm{i}(AB+BA) \tag{4}$$

$$\begin{aligned}(G^2)^{+}&=[(A+\mathrm{i}B)^2]^{+}=A^2-B^2-\mathrm{i}(B^{+}A^{+}+A^{+}B^{+})\\&=A^2-B^2-\mathrm{i}(AB+BA)\end{aligned} \tag{5}$$

令 $(G^2)^{+}=G^2$,由式(4)和式(5)可知,需

$$AB+BA=0 \tag{6}$$

即 $\{A,B\}\equiv AB+BA=0$, A, B 反对易。

4.7　设 U 为幺正算符,证明 U 必可分解成 $U=A+\mathrm{i}B$, A, B 为厄米算符,并满足 $A^2+B^2=1$, $[A,B]=0$,试找出 A, B,进而证明 U 可表成 $U=e^{\mathrm{i}H}$, H 为厄米算符。

证: ① 如存在厄米算符 A, B,使

$$U=A+\mathrm{i}B \tag{1}$$

则
$$U^{+}=A-\mathrm{i}B \tag{2}$$

易解出
$$A=\frac{1}{2}(U+U^{+}),\quad B=\frac{\mathrm{i}}{2}(U^{+}-U) \tag{3}$$

显然,这样确定的 A, B 都是厄米算符。

U 作为幺正算符,满足

$$UU^{+}=U^{+}U=1 \tag{4}$$

式(1)和式(2)代入式(4),得

$$UU^{+}=(A+\mathrm{i}B)(A-\mathrm{i}B)=A^2+B^2-\mathrm{i}[A,B]=1$$

$$U^{+}U=(A-\mathrm{i}B)(A+\mathrm{i}B)=A^2+B^2+\mathrm{i}[A,B]=1$$

因此必有

$$A^2+B^2=1,\quad [A,B]=0 \tag{5}$$

容易验证由式(3)确定的 A, B 确实满足式(5)。

* ② 由于 A, B 是对易的厄米算符,故存在共同本征态 $|n\rangle$,满足本征方程

$$A|n\rangle = A_n|n\rangle, \qquad B|n\rangle = B_n|n\rangle \tag{6}$$

由于 $A^2 + B^2 = 1$,易见

$$A_n^2 + B_n^2 = 1 \quad (\text{圆方程}) \tag{7}$$

因此,对每组本征值(A_n, B_n),在$(0, 2\pi)$间必然存在实数 H_n,使

$$A_n = \cos H_n, \quad B_n = \sin H_n \tag{8}$$

从而

$$U|n\rangle = (A + \mathrm{i}B)|n\rangle = (A_n + \mathrm{i}B_n)|n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_n}|n\rangle \tag{9}$$

若在全体$|n\rangle$所张态矢量空间中定义厄米算符 H,使

$$H|n\rangle = H_n|n\rangle$$

则有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}H}|n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_n}|n\rangle \tag{10}$$

且

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}H}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}H})^+ = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H} = 1$$

即 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}H}$ 为幺正算符。由此可见

$$U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H} \tag{11}$$

4.8 证明投影算符是厄米算符,其平方等于该算符本身。

证:据定义,投影算符

$$P = |n\rangle\langle n|$$

因为

$$P^+ = (|n\rangle\langle n|)^+ = |n\rangle\langle n| = P$$

所以 P 是厄米算符。

又

$$P^2 = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = |n\rangle\langle n| = P$$

证毕。

顺便指出,若一线性算符 P 满足 $P^+ = P$ 和 $P^2 = P$,则此线性算符 P 一定是投影算符。

4.9 证明:投影算符 $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 是一个可观察量,$|\psi\rangle$ 是任一归一化态矢量。

证:

$$P_\psi^+ = (|\psi\rangle\langle\psi|)^+ = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi \tag{1}$$

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi \tag{2}$$

设$|\lambda\rangle$为 P_ψ 的本征态,即

$$P_\psi|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \tag{3}$$

则

$$P_\psi^2|\lambda\rangle = \lambda^2|\lambda\rangle = P_\psi|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$(\lambda^2 - \lambda)|\lambda\rangle = 0$$

所以 $$\lambda = 0, 1$$

此即证明了投影算符 $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 是一可观察量，其本征值只有两个：0 或 1。

4.10　设 $K = |\varphi\rangle\langle\psi|$，$|\varphi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 是两个任意矢量，均已归一化，试问：

① 在什么条件下，K 是厄米算符？

② 在什么条件下，K 是投影算符？

解：① 先证明 K 的厄米共轭为 $K^+ = |\psi\rangle\langle\varphi|$。设 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 为两任意态矢量，

$$\langle 1|K^+|2\rangle = \langle 2|K|1\rangle^* = (\langle 2|\varphi\rangle\langle\psi|1\rangle)^* = \langle\varphi|2\rangle\langle 1|\psi\rangle = \langle 1|\psi\rangle\langle\varphi|2\rangle$$

因 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 为任意矢量，所以

$$K^+ = |\psi\rangle\langle\varphi| \tag{1}$$

再讨论 K 是厄米算符的条件。若 K 是厄米算符，须满足 $K = K^+$，即

$$|\varphi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\varphi| \tag{2}$$

两边作用到 $|\psi\rangle$ 上，有

$$|\varphi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle$$

即 $$|\varphi\rangle = C|\psi\rangle, \quad C = \langle\varphi|\psi\rangle, \quad \langle\varphi| = C^*\langle\psi| \tag{3}$$

代入式(2)，得 $$C|\psi\rangle\langle\psi| = C^*|\psi\rangle\langle\psi|$$

即 $$C = C^* \tag{4}$$

所以 C 为实数。因此，只有在 $|\varphi\rangle = C|\psi\rangle$，且 $C = \langle\varphi|\psi\rangle$ 为实数时，$K = |\varphi\rangle\langle\psi|$ 才是厄米算符。

② 投影算符的充要条件是 $K^+ = K$，$K^2 = K$。由①中讨论的结论，知 $K = C|\psi\rangle\langle\psi|$（$C$ 为实数）已是厄米算符，故只要将它代入 $K^2 = K$，定出实常数 C 就能求出 K 是投影算符的条件，即

$$K^2 = C^2|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = C|\psi\rangle\langle\psi| = K$$

亦即 $$C^2|\psi\rangle\langle\psi| = C|\psi\rangle\langle\psi|$$

显然 $$C^2 = C$$

从而 $$C = 1 \qquad (\text{这里不取 } C = 0)$$

所以当 $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ 时，$K = |\varphi\rangle\langle\psi|$ 才是投影算符。

4.11　若 I 为宇称算子，计算 $\frac{1}{2}(1 \pm I)$ 是否满足投影算子关系式。用 $\frac{1}{2}(1 \pm I)$ 作用于任意波函数，其影响如何？

解：① 对宇称算子，$I^2 = 1$，本征值为 ± 1。

$$\left[\frac{1}{2}(1\pm I)\right]^2=\frac{1}{4}(1\pm 2I+I^2)=\frac{1}{2}(1\pm I)$$

满足投影算子条件。

② 设$|\rangle$为任意态,考虑

$$I\cdot\frac{1}{2}(1\pm I)|\rangle=\frac{1}{2}(I\pm I^2)|\rangle=\pm1\cdot\frac{1}{2}(1\pm I)|\rangle$$

即$\frac{1}{2}(1\pm I)$作用于任意态$|\rangle$,将把该态变成I的本征态(亦即变成具有确定宇称的态)$\frac{1}{2}(1\pm I)|\rangle$,本征值为±1。

4.12 设幺正算符 U 可以写成 $U=1\pm i\varepsilon F$ 的形式,ε是一个无限小量,证明 F 是厄米算子。

证:
$$U=1\pm i\varepsilon F,\qquad U^+=1\mp i\varepsilon F^+$$

因为
$$UU^+=U^+U=1$$

所以
$$UU^+=(1\pm i\varepsilon F)(1\mp i\varepsilon F^+)=1\pm i\varepsilon(F-F^+)+\varepsilon^2FF^+=1$$

略去二阶小量,即得

$$F^+=F$$

即 F 是厄米算子。

4.13 已知二阶矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$满足下列关系:$\boldsymbol{A}^2=0,\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^++\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}=1,\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}$。试证明 $\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{B}$,并在 $\boldsymbol{B}$表象中求出矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$。

解:据题意,$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}$,有

$$\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}(1-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^+)=\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{A}^+=\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$$

由此求出 $\boldsymbol{B}$的本征值为0,1。

在 $\boldsymbol{B}$表象中,$\boldsymbol{B}$为对角矩阵:

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

设
$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}\tag{2}$$

应有
$$\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a^*&c^*\\b^*&d^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a^*a+c^*c&a^*b+c^*d\\b^*a+d^*c&b^*b+d^*d\end{pmatrix}=\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}\tag{3}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^+=\begin{pmatrix}a^*a+b^*b&c^*a+d^*b\\a^*c+b^*d&c^*c+d^*d\end{pmatrix}=1-\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\tag{4}$$

$$\boldsymbol{A}^2 = \begin{pmatrix} a^2 + bc & ab + bd \\ ac + dc & d^2 + bc \end{pmatrix} = 0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

由式(3)得

$$a = 0, \quad c = 0, \quad b^* b + d^* d = 1 \tag{6}$$

由式(4)得

$$c = 0, \quad d = 0, \quad a^* a + b^* b = 1 \tag{7}$$

由式(6)、式(7)求出

$$a = c = d = 0, \quad b^* b = 1 \tag{8}$$

现在式(5)已得到满足,因此可取

$$b = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \quad (\alpha\text{为实数}) \tag{9}$$

代入式(2),即得 B 表象中的 A 矩阵表示:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

由式(1)和式(10)表示的 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$,已满足所有题设条件,故 α 可取任意实数,最简单的一种选择是

$$\alpha = 0, \quad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

4.14　满足条件 $\boldsymbol{U}^+ \boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^+ = 1$, $\det \boldsymbol{U} = 1$ 的 n 维矩阵 $\boldsymbol{U}$,称为 SU_n 矩阵。试求 SU_2 的一般表示式。

解:设

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{U}^+ = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \tag{1}$$

由 $\boldsymbol{U}^+ \boldsymbol{U} = 1$,得

$$a^* a + c^* c = b^* b + d^* d = 1 \tag{2a}$$

$$a^* b + c^* d = ab^* + cd^* = 0 \tag{2b}$$

由 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^+ = 1$,得

$$a^* a + b^* b = c^* c + d^* d = 1 \tag{3a}$$

$$ac^* + bd^* = a^* c + b^* d = 0 \tag{3b}$$

由 $\det \boldsymbol{U} = 1$,得

$$ad - bc = 1 \tag{4}$$

由式(2a)及(3a),易得

$$b^* b = c^* c, \quad a^* a = d^* d \tag{5}$$

$$a^* a + b^* b = 1 \tag{6}$$

据此可令

$$a=\cos\omega\cdot e^{i\alpha},\quad b=\sin\omega\cdot e^{i\beta} \qquad (7)$$
$$d=\cos\omega\cdot e^{i\gamma},\quad c=\sin\omega\cdot e^{i\delta}$$

$\omega,\alpha,\beta,\gamma,\delta$为实数。将式(7)代入式(4),得到

$$\cos^2\omega\cdot e^{i(\alpha+\gamma)}-\sin^2\omega\cdot e^{i(\beta+\delta)}=1$$

为此,需

$$e^{i(\alpha+\gamma)}=1,\quad e^{i(\beta+\delta)}=-1 \qquad (8a)$$

式(8a)给出

$$\gamma=-\alpha,\quad e^{i\delta}=-e^{-i\beta} \qquad (8b)$$

至此,矩阵 $\boldsymbol{U}$ 已经具体化为

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}\cos\omega\cdot e^{i\alpha} & \sin\omega\cdot e^{i\beta}\\ -\sin\omega\cdot e^{-i\beta} & \cos\omega\cdot e^{-i\alpha}\end{pmatrix} \qquad (9)$$

容易验证,这个矩阵已经满足所有题设条件,所以它就是 SU_2 矩阵的普遍表示式。可以看出,它含有 3 个独立的参量。

*4.15 证明任何一个厄米矩阵能用一个幺正矩阵对角化。由此证明,两个厄米矩阵能被同一个幺正矩阵对角化的充要条件是它们相互对易。

证: ① 设厄米矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为任意的 n 阶方阵,对应本征值 λ_i $(i=1,2,\cdots,n)$的正交归一本征矢可表为

$$\begin{pmatrix}a_{1i}\\ a_{2i}\\ \cdots\\ a_{ni}\end{pmatrix}$$

本征方程:

$$\boldsymbol{A}\begin{pmatrix}a_{1i}\\ a_{2i}\\ \cdots\\ a_{ni}\end{pmatrix}=\lambda_i\begin{pmatrix}a_{1i}\\ a_{2i}\\ \cdots\\ a_{ni}\end{pmatrix} \qquad (1)$$

首先,构造幺正矩阵 $\boldsymbol{U}$,以本征矢作为列,排成 $\boldsymbol{U}$,取 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 个本征矢作为 $\boldsymbol{U}$ 的第 i 列元素,即

$$\boldsymbol{U}_{ji}=a_{ji},\quad i,j=1,2,\cdots,n \qquad (2)$$

所以
$$(\boldsymbol{U}^{+}\boldsymbol{U})_{\alpha\beta}=\sum_i \boldsymbol{U}^{+}_{\alpha i}\boldsymbol{U}_{i\beta}=\sum_i a^{+}_{\alpha i}a_{i\beta}=\delta_{\alpha\beta}$$

同理有

$$(UU^+)_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \tag{3}$$

所以 U 为幺正矩阵。由式(2),式(3)得

$$(U^+AU)_{\alpha\beta} = \sum_{i,j} U^+_{\alpha i}A_{ij}U_{j\beta} = \sum_{i,j} a^+_{\alpha i}A_{ij}a_{j\beta} = \sum_i a^+_{\alpha i}\lambda_\beta a_{i\beta} = \lambda_\beta\delta_{\alpha\beta} \tag{4}$$

② 先证充分条件。设 A, B 可对易,且 A 能被幺正矩阵 U 对角化,即

$$AB = BA, \quad (U^+AU)_{\alpha\beta} = \lambda_\beta\delta_{\alpha\beta} \tag{5}$$

则由 $U^+ABU = U^+BAU$,可改写为

$$(U^+AU)(U^+BU) = (U^+BU)(U^+AU)$$

$$\sum_{\alpha'}(U^+AU)_{\alpha\alpha'}(U^+BU)_{\alpha'\beta} = \sum_{\beta'}(U^+BU)_{\alpha\beta'}(U^+AU)_{\beta'\beta}$$

将式(5)代入上式,得

$$\sum_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}\delta_{\alpha\alpha'}(U^+BU)_{\alpha'\beta} = \sum_{\beta'}(U^+BU)_{\alpha\beta'}\lambda_\beta\delta_{\beta'\beta}$$

即
$$(\lambda_\alpha - \lambda_\beta)(U^+BU)_{\alpha\beta} = 0$$

要想 $(U^+BU)_{\alpha\beta} \neq 0$,必有 $\lambda_\alpha = \lambda_\beta$,即 $\alpha = \beta$,亦即矩阵 (U^+BU) 只有对角元素可不为 0,非对角元素必须全为 0。这就证明了,矩阵 B 也被使 A 对角化的同一个幺正矩阵 U 对角化了,可表为 $(U^+BU)_{\alpha\beta} = k_\beta\delta_{\alpha\beta}$。

再证必要条件。设 A, B 能被同一 U 对角化,即

$$(U^+AU)_{\alpha\beta} = \lambda_\beta\delta_{\alpha\beta}, \quad (U^+BU)_{\alpha\beta} = k_\beta\delta_{\alpha\beta} \tag{6}$$

反证,令 $AB - BA = C$,则有

$$\sum_{\beta'}(U^+AU)_{\alpha\beta'}(U^+BU)_{\beta'\beta} - \sum_{\beta'}(U^+BU)_{\alpha\beta'}(U^+AU)_{\beta'\beta} = (U^+CU)_{\alpha\beta}$$

即
$$\sum_{\beta''}\lambda_{\beta''}\delta_{\alpha\beta''}k_\beta\delta_{\beta''\beta} - \sum_{\beta'}k_{\beta'}\delta_{\alpha\beta'}\lambda_\beta\delta_{\beta'\beta} = (U^+CU)_{\alpha\beta}$$

亦即
$$\lambda_\beta k_\beta\delta_{\alpha\beta} - k_\beta\lambda_\beta\delta_{\alpha\beta} = (U^+CU)_{\alpha\beta}$$

得
$$(U^+CU)_{\alpha\beta} = 0$$

α, β 任意,故得 $C = 0$,即 A, B 对易:$[A, B] = 0$,证毕。

*4.16 从谐振子升、降算符的基本对易关系

$$[a, a^+] = 1 \tag{1}$$

出发,证明

$$e^{\lambda a^+a}ae^{-\lambda a^+a} = e^{-\lambda}a \tag{2}$$

(λ 为参数)。而对于 $\lambda > 0$,计算

$$T(\lambda) \equiv \mathrm{tr}\, e^{-\lambda a^+a}$$

进而讨论算符 a^+a 的本征值谱。

解:① 将式(2)左端记为 $f(\lambda)$,显然,

$$f(0) = a \tag{3}$$

视 λ 为参变量,将 $f(\lambda)$ 对 λ 求导,得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda a^+ a}(a^+ a^2 - aa^+ a)\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a} = \mathrm{e}^{\lambda a^+ a}[-(aa^+ - a^+ a)a]\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a}$$

$$= -\mathrm{e}^{\lambda a^+ a}a\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a} = -f(\lambda) \tag{4}$$

其解为

$$f(\lambda) = f(0)\mathrm{e}^{-\lambda} = a\mathrm{e}^{-\lambda} = \mathrm{e}^{-\lambda}a$$

此即式(2)。

② 算符 $a^+ a$ 在任意态 $|\psi\rangle$ 下的平均值为

$$\langle\psi| a^+ a|\psi\rangle = |a|\psi\rangle|^2 \geq 0$$

因此 $a^+ a$ 的本征值为非负实数(注意:$a^+ a$ 为厄米算符!),记为 $k_0, k_1, k_2, \cdots, k_n, \cdots$,则

$$T(\lambda) = \mathrm{tr}\,\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a} = \sum_n \mathrm{e}^{-\lambda k_n} \tag{5}$$

另一方面,视 λ 为参变量,有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) = \mathrm{tr}(-a^+ a\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a}) = -\mathrm{tr}(a^+ \mathrm{e}^{-\lambda a^+ a}a)\mathrm{e}^{-\lambda}$$

$$= -\mathrm{e}^{-\lambda}\mathrm{tr}(aa^+ \mathrm{e}^{-\lambda a^+ a}) = -\mathrm{e}^{-\lambda}\mathrm{tr}[(1 + a^+ a)\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a}]$$

$$= \mathrm{e}^{-\lambda}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) - T(\lambda)\right]$$

即

$$(1 - \mathrm{e}^{-\lambda})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) = -\mathrm{e}^{-\lambda}T(\lambda)$$

亦即

$$\frac{\mathrm{d}T(\lambda)}{T(\lambda)} = -\frac{\mathrm{e}^{-\lambda}}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}}\mathrm{d}\lambda = -\frac{\mathrm{d}(1 - \mathrm{e}^{-\lambda})}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}} \tag{6}$$

积分得

$$\ln T(\lambda) = -\ln(1 - \mathrm{e}^{-\lambda}) + \ln C$$

$$T(\lambda) = \frac{C}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}} \tag{7}$$

③ 式(7)中,令 $\lambda\to\infty$,得 $T(\infty) = C$。和式(5)比较,可知 $a^+ a$ 的最小本征值 $k_0 = 0$[否则式(5)给出 $T(\infty)\equiv 0$]。令 $T(\infty) = 1$,则

$$C = 1 \tag{8}$$

代入式(7),得

$$T(\lambda) = \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}} = 1 + \mathrm{e}^{-\lambda} + \mathrm{e}^{-2\lambda} + \mathrm{e}^{-3\lambda} + \cdots \tag{9}$$

当 $\lambda\to\infty$, $\mathrm{e}^{-\lambda}\to 0^+$。将式(5)和式(9)从 $\mathrm{e}^{-\lambda}$ 的最低次幂开始逐项比较,可知

$$k_n = n \tag{10}$$

亦即 $a^+ a$ 的本征值谱为

$$0, 1, 2, 3, \cdots, n, \cdots \tag{11}$$

CHAPTER 5

5

Feynman-Hellmann定理 Virial定理

【内容提要】

参数空间法:除时空坐标外,一个量子体系的 $\hat{H}$ 总还要包含一些参数,如质量、电荷、耦合常数、光速 C、普朗克常数 $\hbar$ 等。因此系统的特征如波函数、量子能级、期望值、几率等也都依赖于这些参数。考虑当这些参数变化时,系统的特征如何变化,有助于我们获得这些特征本身的性质。

这方面最常用的一个工具是 Feynman Hellmann 定理(F H 定理)。

【典型习题解答】

5.1　设量子体系的束缚态能级和归一化能量本征态分别为 E_n 和 ψ_n(n 为量子数或编号),设 λ 为 $\hat{H}$ 含有的任何一个参数,证明:

$$\frac{E_n}{\lambda} = \left\langle \psi_n \middle| \frac{H}{\lambda} \middle| \psi_n \right\rangle \quad (\text{F H 定理}) \tag{1}$$

证: $|\psi_n\rangle$ 满足能量本征方程为

$$(H - E_n)|\psi_n\rangle = 0 \tag{2a}$$

其共轭方程为

$$\langle\psi_n|(H - E_n) = 0 \tag{2b}$$

视 λ 为参数,式(2a)对 λ 求导,得到

$$\left(\frac{H}{\lambda} - \frac{E_n}{\lambda}\right)|\psi_n\rangle + (H - E_n)\frac{}{\lambda}|\psi_n\rangle = 0 \tag{3}$$

以 $\langle\psi_n|$ 左乘式(3),利用式(2b)和归一化条件 $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$, 即得式(1)。

5.2　维里(Virial)定理:设哈密顿算符为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

设 ψ_n 为归一化的束缚态波函数,证明

$$\left\langle\psi_n\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right|\psi_n\right\rangle=\frac{1}{2}\langle\psi_n|\boldsymbol{r}\cdot\Delta V(\boldsymbol{r})|\psi_n\rangle \tag{2}$$

即

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

这称为维里定理。讨论 $V(\boldsymbol{r})$是(x,y,z)的 ν 次齐次函数的情形。

证 1: 在 $\boldsymbol{r}$ 表象,

$$H=-\frac{{}^2}{2\mu}\Delta^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{1a}$$

视　为参变量,则

$$\frac{H}{}=-\frac{}{\mu}\Delta^2=\frac{2}{}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}$$

据 F H 定理,有

$$\frac{E_n}{}=\left\langle\psi_n\left|\frac{H}{}\right|\psi_n\right\rangle=\frac{2}{}\left\langle\psi_n\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right|\psi_n\right\rangle \tag{3a}$$

在 $\boldsymbol{p}$ 表象中,

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V\left(\mathrm{i}\frac{}{\boldsymbol{p}}\right) \tag{1b}$$

其中

$$\mathrm{i}\frac{}{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{r} \tag{4}$$

这时可得

$$\frac{H}{}=\frac{V}{}=\frac{\boldsymbol{r}}{}\cdot\frac{V}{\boldsymbol{r}}=\frac{1}{}\mathrm{i}\frac{}{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{V}{\boldsymbol{r}}=\frac{\boldsymbol{r}}{}\cdot\Delta V(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

利用 F H 定理,即得

$$\frac{E_n}{}=\frac{1}{}\langle\psi_n|\boldsymbol{r}\cdot\Delta V(\boldsymbol{r})|\psi_n\rangle \tag{3b}$$

比较式(3a)与(3b),即得式(2)。

证 2: 利用海森堡运动方程:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})=\frac{1}{\mathrm{i}}[F,H] \tag{6}$$

在束缚态 ψ_n 下求平均值,显然有

$$\left\langle\psi_n\left|\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right|\psi_n\right\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}}\langle\psi_n|(FH-HF)|\psi_n\rangle=0 \tag{7}$$

取 $F = \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$,则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{r}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} \tag{8a}$$

其中

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}}[\boldsymbol{r}, H] = \frac{1}{\mathrm{i}}\ \frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}^2] = \frac{\boldsymbol{p}}{\mu} \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}}[\boldsymbol{p}, H] = \frac{1}{\mathrm{i}}[\boldsymbol{p}, V(\boldsymbol{r})] = -\Delta V(\boldsymbol{r}) \tag{10}$$

代入(8a)即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{\mu} - \boldsymbol{r}\cdot\Delta V(\boldsymbol{r}) \tag{8b}$$

对 ψ_n 态求平均值,并利用式(7),即得式(2)。

如 $V(\boldsymbol{r})$是(x, y, z)的 ν 次齐次函数,则

$$\boldsymbol{r}\cdot\Delta V(\boldsymbol{r}) = \nu V(\boldsymbol{r}) \tag{11}$$

代入式(2),即得

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} \right\rangle = \frac{\nu}{2}\langle V\rangle_n \tag{12a}$$

即

$$\langle T\rangle_n = \frac{\nu}{2}\langle V\rangle_n \tag{12b}$$

其中 $\langle\ \rangle_n$ 表示 ψ_n 态下的平均值。式(12a)规定了束缚态下动能平均值和势能平均值的比例关系,如 E_n 已知,就有

$$\begin{aligned} \langle T\rangle_n &= \frac{\nu}{\nu+2}E_n \\ \langle V\rangle_n &= \frac{2}{\nu+2}E_n \end{aligned} \tag{13}$$

5.3　质量为 μ 的粒子在三维幂律势 $V(\boldsymbol{r}) = \alpha r^n$ 中运动,试求能量本征态中动能平均值与势能平均值的关系,并讨论存在束缚态的条件。

解: 系统的哈密顿算符为

$$H = \boldsymbol{p}^2/2\mu + \alpha r^n$$

假定存在束缚态,波函数可归一,于是由维里定理,

$$2\langle T\rangle = \langle \boldsymbol{r}\cdot\Delta V\rangle = n\langle V\rangle$$

即

$$\langle T\rangle = \frac{n}{2}\langle V\rangle$$

这是动能与位能平均值之间的关系。另一方面,能量 E 为

$$E = \langle T\rangle + \langle V\rangle = \frac{n+2}{2}\langle V\rangle = \frac{n+2}{n}\langle T\rangle$$

反过来，
$$\langle V\rangle=\frac{2}{n+2}E,\quad \langle T\rangle=\frac{n}{n+2}E \tag{1}$$
此式帮助我们从总能量中分离出动能和势能值。

① 如果 $\alpha>0$，则 $V\geq 0$，$\langle V\rangle>0$；而 $\langle T\rangle$ 总是正的，E 当然也是正的。于是从 $\langle V\rangle$，$\langle T\rangle$ 与 E 的关系得出
$$\frac{2}{n+2}>0,\quad \frac{n}{n+2}>0$$
此式表明，$n>0$ 才可能。

② 如 $\alpha<0$，则 $V\leq 0$，$\langle V\rangle<0$，$\langle T\rangle$ 仍大于零。对于束缚态而言，总能量 E 必须小于势能最大值，于是 $E<0$。由此结合式(1)得出
$$\frac{n}{n+2}<0,\quad \frac{2}{n+2}>0$$
亦即有
$$-2<n<0$$
归结起来，在有心幂律势 $V(\boldsymbol{r})=\alpha r^n$ 中存在束缚态的条件为
$$\alpha<0,\quad -2<n<0$$
或
$$\alpha>0,\quad n>0$$
作为两个最典型的例子，对谐振子势：
$$V(\boldsymbol{r})=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$$
$n=2$，有
$$\langle T\rangle=\langle V\rangle=\frac{1}{2}E$$
对库仑势
$$V(\boldsymbol{r})=-\frac{e^2}{r}$$
$n=-1$，有
$$\langle T\rangle=-E,\quad \langle V\rangle=2E$$
例如对于氢原子，
$$E_n=-\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}\ (a_0\ \text{为玻尔半径})$$
则有平均值
$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle=-\frac{1}{e^2}\langle V\rangle=\frac{1}{a_0}\frac{1}{n^2}$$

5.4 求氢原子能量本征态 ψ_{nlm} 中 $\frac{1}{r^2}$ 的平均值。

解：在把角向部分分离后，氢原子径向波函数 $R=u/r$ 中的 u 满足的方程为
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u(r)=Eu(r)$$

这相当于一个半无限空间中的运动,等效 $\hat{H}$ 为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

根据 F-H 定理,取 l 为参数,则有

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \left\langle u_l(r)\left|\frac{\partial \hat{H}}{\partial l}\right|u_l(r)\right\rangle = \left\langle \frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right\rangle$$

于是得

$$\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle = \frac{2\mu}{(2l+1)\hbar^2}\cdot\frac{\partial E_n}{\partial l}$$

代入

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0}\cdot\frac{1}{(n_r+l+1)^2}$$

得

$$\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle = \frac{1}{a_0^2}\cdot\frac{2}{2l+1}\cdot\frac{1}{n^3}$$

5.5 粒子在三维有心势 $V(r)$ 中作束缚运动,求证基态一定是 s 态(轨道角动量为 0)。

解:由前一例,我们已求得关系

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

由于 $\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle$ 总大于零,故知 $\frac{\partial E}{\partial l} > 0$,也即当其它量子数固定后(这里是径向量子数 n_r),则当轨道角动量增加时,能级抬高。基态能量最低,故应相应于 l 的最小值 0,即为 s 态。

5.6 质量为 μ 的粒子在一与质量无关的位势中运动,则粒子的质量越大,同一量子数描述的能级越低,也即束缚得越紧。试加以证明。

证:此系统的哈密顿算符可写为

$$\hat{H} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(\boldsymbol{r}), \qquad \partial V/\partial\mu = 0$$

于是,对于固定一种形式的能量本征函数 ψ,当 μ 变化时能量变化为

$$\frac{\partial E}{\partial \mu} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mu}\right\rangle = -\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu^2}\right\rangle = -\frac{1}{\mu}\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle < 0$$

故知质量增大时,能级下降。

在通常讨论原子问题时,原子核常被当作质量无限大的粒子,故系统的约化质量即等于电子的质量。如果考虑原子核的有限质量影响,则约化质量将要减小,由本例结论可知,此时能级将抬高。

5.7　**质量为 μ的粒子在球对称对数势中运动:**

$$V(r) = \alpha\ln(r/r_0), \quad \alpha > 0, r_0 > 0$$

α, r_0 与 μ无关,求证:

① 各能量本征态中有相同的动能期望值;

② 能级间隔不依赖于质量 μ。

证:① 哈密顿算符为

$$H = \boldsymbol{p}^2/2\mu + V(r) = \boldsymbol{p}^2/2\mu + \alpha\ln(r/r_0)$$

由维里定理[由于 $V\to\infty$(当 $r\to\infty$),故所有本征态皆为束缚态]

$$2\langle T\rangle_n = \langle \boldsymbol{r}\cdot\Delta V\rangle_n = \alpha$$

或所有态中 $$\langle T\rangle_n = \frac{\alpha}{2} = \text{常数}$$

② 由 F H 定理

$$-\mu\frac{E_n}{\mu} = \left\langle -\mu\frac{H}{\mu}\right\rangle_n = \left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle = \langle T\rangle_n = \frac{\alpha}{2}$$

α与 μ 无关,故上式可积分出来

$$E_n = -\frac{\alpha}{2}\ln\mu + \varepsilon_n$$

其中 ε_n 与 μ 无关。因此能级间隔 $\Delta E_n = \Delta\varepsilon_n$ 也与质量 μ 无关。

5.8　**一个粒子在位势 $V_1(x)$中运动,具有能级 E_{11}, E_{12},…同一粒子在位势 $V_2(x)$中运动时,能级为 E_{21}, E_{22},…能级都以下降的次序排列。现已知处处有 $V_1(x)\le V_2(x)$,则一定有 $E_{1n}\le E_{2n}$,对一切 n 成立。**

解:这是比较不同位势中的谱,为此,我们考虑一个综合的带参数的位势

$$V(x,\lambda) = \lambda V_2(x) + (1-\lambda)V_1(x)$$

显然 $$V(x,0) = V_1(x), \quad V(x,1) = V_2(x)$$

我们假定 λ 在[0,1]之间连续变化,于是

$$H(\lambda) = \boldsymbol{p}^2/2\mu + V(x,\lambda)$$

的能级将依赖于 λ:

$$E_n(\lambda) = \langle\psi_\lambda|H(\lambda)|\psi_\lambda\rangle_n$$

由 F H 定理,它随 λ的变化率是

$$\frac{E_n}{\lambda} = \left\langle\psi_\lambda\left|\frac{H}{\lambda}\right|\psi_\lambda\right\rangle_n = \left\langle\psi_\lambda\left|\frac{V(x,\lambda)}{\lambda}\right|\psi_\lambda\right\rangle_n = \langle\psi_\lambda|(V_2 - V_1)|\psi_\lambda\rangle_n \ge 0$$

即 $E_n(\lambda)$为 λ 的不减函数,故知 $E_n(1)$不小于 $E_n(0)$,也即 $E_{2n} \geq E_{1n}$。

或设 $$V(x,\lambda) = (2-\lambda)V_1(x) + (\lambda-1)V_2(x)$$

则 $$V(x,1) = V_1(x), \quad V(x,2) = V_2(x)$$

也可得出同样的结论。

5.9 粒子在势场

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2, & |x| < b \\ \frac{1}{2}kb^2, & |x| > b \end{cases} \tag{1}$$

中运动,如图 5.1,试粗略估计束缚态能级总数 N 的上、下限(设 Nm 1)。

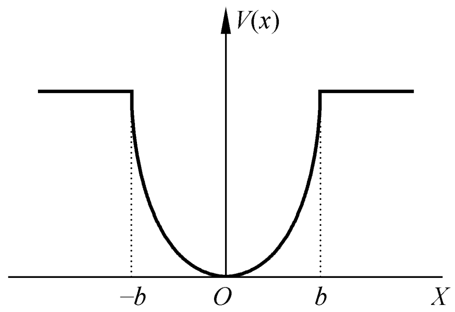

图 5.1

解:束缚态能量显然不能大于 $V(\pm\infty)$,即

$$E \leq \frac{1}{2}kb^2 \tag{2}$$

本题势能介于直角势阱

$$V_1(x) = \begin{cases} 0, & |x| < b \\ \frac{1}{2}kb^2, & |x| > b \end{cases} \tag{3}$$

和谐振子势阱

$$V_2(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \tag{4}$$

之间,即

$$V_1(x) \leq V(x) \leq V_2(x) \tag{5}$$

因此,三种势场造成的能级应取和这相同的高低次序。因此,在式(2)限制下,三者能级总数应取与此相反的大小次序,即

$$N_2 \leq N \leq N_1 \tag{6}$$

谐振子势阱 V_2 的能级为

$$E_n(2) = \quad n + \frac{1}{2} \quad \omega, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{7}$$

能级总数 N_2 由下式决定:

$$N_2 - 1 + \frac{1}{2} \quad \omega \leq \frac{1}{2}kb^2$$

作为粗略估计,可取

$$N_2 \approx kb^2/2 \quad \omega = \frac{b^2}{2} \quad k\mu \tag{8}$$

而根据题 2 .1 式(11) $N = 1 + \frac{a}{\pi} \quad 2\mu V_0$, $a = 2b$, $V_0 = \frac{1}{2}kb^2$ 的计算,直角势阱 V_1 的能级总数

$$N_1 = \frac{2b^2}{\pi} \quad k\mu + 1 \approx \frac{2b^2}{\pi} \quad k\mu \tag{9}$$

本题能级总数 N 介于 N_2、N_1 之间,因此,

$$\frac{b^2}{2} \quad k\mu \leq N \leq \frac{2b^2}{\pi} \quad k\mu \tag{10}$$

右端(N_1)为上限,左端(N_2)为下限。

5 .10 一维束缚运动系统的 $\hat{H}_0$ 为

$$H_0 = p^2 / 2\mu + V(x)$$

能级为 E_{0n},现加上一阻尼作用, $\hat{H}$ 变为

$$H = p^2 / 2\mu + V(x) + \alpha p \quad (\alpha 为参数)$$

求能级发生的变化。

解: 设新的能级为 E_n,由 F H 定理

$$\frac{E_n}{\alpha} = \left\langle \frac{H}{\alpha} \right\rangle = \langle p \rangle \tag{1}$$

但另一方面,在 H 的本征态里,有

$$0 = \langle [x, H] \rangle = \langle [x, p^2 / 2\mu + \alpha p + V(x)] \rangle$$

$$= \langle \mathrm{i} \quad p / \mu + \mathrm{i} \quad \alpha \rangle = \frac{\mathrm{i}}{\mu}(\langle p \rangle + \mu\alpha)$$

或

$$\langle p \rangle = -\mu\alpha \tag{2}$$

式(2)代入式(1),得

$$\frac{E_n}{\alpha} = -\mu\alpha$$

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu\alpha^2 + \varepsilon_n \tag{3}$$

其中

$$\varepsilon_n = E_n \big|_{\alpha = 0}$$

由于 $H\big|_{\alpha=0} = H_0$,故知 ε_n 即为 H_0 的能级

$$\varepsilon_n = E_{0n} \tag{4}$$

于是将式(4)代入式(3),最后得

$$E_n = E_{0n} - \frac{1}{2}\mu\alpha^2 \tag{5}$$

可见,加上阻尼 αp 后,能级较原来的相应能级降低了。

5.11 设一维谐振子带有电荷 q,并置于沿 x 方向的电场中,电场强度为 ε,求系统能谱。

解: 本题和上题相似,只不过所加作用是纯坐标的。此带电谐振子的

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

$$\lambda \equiv q\varepsilon$$

把 λ 视作参数,由 F H 定理,

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle_n = -\langle x \rangle_n \tag{1}$$

但由于 $$[p, H] = -\mathrm{i}\hbar\mu\omega^2 x + \mathrm{i}\hbar\lambda$$

故 $$0 = \langle [p, H] \rangle_n = -\mathrm{i}\hbar\mu\omega^2 \langle x \rangle_n + \mathrm{i}\hbar\lambda$$

$$\langle x \rangle_n = \frac{\lambda}{\mu\omega^2} \tag{2}$$

式(2)代入式(1),得

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = -\frac{\lambda}{\mu\omega^2}$$

积分,得 $$E_n = -\frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} + \varepsilon_n$$

其中 ε_n 与 λ 无关,故

$$\varepsilon_n = E_n \big|_{\lambda=0}$$

但当 $\lambda = 0$ 时,H 即退为纯谐振子的 H_0,我们知其能谱为 $\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$,于是

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \lambda^2/2\mu\omega^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - q^2\varepsilon^2/2\mu\omega^2 \tag{3}$$

▲ 本题也可用如下方法求解:

$$\begin{aligned} H &= p^2/2\mu + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 - q\varepsilon x \\ &= p^2/2\mu + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left(x - \frac{q\varepsilon}{\mu\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2\mu\omega^2} \\ &= p^2/2\mu + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x'^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2\mu\omega^2} \end{aligned}$$

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

CHAPTER 6

中心力场 6

【内容提要】

1．中心力场中，势场 $V(\boldsymbol{r})=V(r)$，$[\boldsymbol{L},H]=0$，角动量 $\boldsymbol{L}$ 为守恒量。

2．中心力场中，

$$\boldsymbol{p}^2=-\hbar^2\nabla^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right]+\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$$

$$=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$$

3．薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\psi=E\psi$$

选 (H, L^2, L_z) 为体系的守恒量完全集，其共同的本征函数为

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

$$l=0,1,2,\cdots,\quad m=l,l-1,\cdots,-l$$

4．无限深球方势阱

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<a\\ \infty, & r>a\end{cases}$$

$$E=E_{n_r0}=\frac{\pi^2\hbar^2(n_r+1)^2}{2\mu a^2},\quad n_r=0,1,2,\cdots$$

s 态 $(l=0)$：

$$R(r)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{(n_r+1)\pi r}{a}\cdot\frac{1}{r}, & 0\le r\le a\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

$l \neq 0$ 的态:

$$E_{n_r l} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} x_{n_r l}^2, \quad n_r = 0, 1, 2, \cdots$$

$$R_{n_r l}(r) = C_{n_r l}\, j_l(k_{n_r l} r) \propto j_l(k_{n_r l} r)$$

5 . 氢原子

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

$$a = \hbar^2 / \mu e^2 \text{ (玻尔半径)}$$

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\xi/2} \xi^l F(-n + l + 1, 2l + 2, \xi), \quad \xi = \frac{2r}{na}$$

$$N_{nl} = \frac{2}{a^{3/2} n^2 (2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

能级简并度 $$f_n = n^2$$

轨道磁矩 $$M_z = -\frac{e\hbar m}{2\mu c} = -\mu_B m, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c} \text{ ——玻尔磁子}$$

旋磁比 $$\frac{M_z}{L_z} = \frac{M_z}{m\hbar} = -\frac{e}{2\mu c}$$

类氢离子 $$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2}$$

6 . 三维各向同性谐振子

势能 $$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

在球坐标系中求解:

波函数 $$R_{n_r l}(r) \sim r^l e^{-\alpha^2 r^2/2} F(-n_r, l + 3/2, \alpha^2 r^2)$$

能级 $$E = E_N = (N + 3/2)\hbar\omega, \quad N = 0, 1, 2, \cdots$$

能级简并度 $$f_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

在直角坐标系中求解: 能级为

$$E_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

【典型习题解答】

6.1 **对于中心力场 $V(r)$ 的任何一个束缚态，证明**

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} |\psi(0)|^2 \tag{1}$$

证：中心力场中，

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \tag{2}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}, H\right] = \frac{\partial H}{\partial r} = \frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \tag{3}$$

在任何一个束缚态下计算上式的平均值，左端贡献为 0，所以

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \psi^* \frac{1}{r^2}\frac{\partial \psi}{\partial r} r^2 \,\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$$

$$= -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \mathrm{d}\Omega \int_0^\infty \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r}\mathrm{d}r \tag{4}$$

上式左端的平均值为实数，则右端亦为实数，因此

$$\int_0^\infty \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r}\mathrm{d}r = \int_0^\infty \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r}\mathrm{d}r = \frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r}(\psi^*\psi)\,\mathrm{d}r$$

$$= \frac{1}{2}\psi^*\psi\Big|_{r=0}^{r\to\infty} = -\frac{1}{2}|\psi(0)|^2 \tag{5}$$

代入式(4)，并计及 $\int \mathrm{d}\Omega = 4\pi$，**即得式(1)。**

* **中心力场，多数取** $H, \boldsymbol{L}^2, L_z$ **表象，波函数**

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{6}$$

这时，式(1)中 $\boldsymbol{L}^2$ **用** $l(l+1)\hbar^2$ **代替，由于只有** s **态**($l=0$)$\psi(0)$**才不等于零，因此式(1)等价于**

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi(0)|^2, \quad l = 0 \tag{7a}$$

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle = l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad l \neq 0 \tag{7b}$$

讨论：① $l=0$，$|\psi(0)|^2 = \dfrac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left\langle \dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle$，$\left\langle \dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle$**是向心力，此力越大，粒子运动越靠近中**

心,在中心处找到粒子的几率 $|\psi(0)|^2$ 越大。

② 若粒子处在线性势 $V = kr$ 下的 s 态,粒子在原点出现的几率可求得如下:

对 s 态, $\left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle = 0$, $\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = k$, $|\psi(0)|^2 = \frac{k\mu}{2\pi\hbar^2}$

中心力场中:

$$H = \frac{1}{2\mu}p_r^2 + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2}$$

$$p_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

$$\boldsymbol{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$$

$$= -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$$

6.2 类氢离子(核电荷 Ze)中电子处于束缚态 ψ_{nlm},计算 $\langle r^\lambda \rangle$,$\lambda = -1, -2, -3$。

解:类氢离子能级

$$E_{nlm} = E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2 e^2}{2an^2}$$

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad n = n_r + l + 1 \tag{1}$$

据维里定理,

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} \right\rangle_{nlm} = \left\langle \frac{r}{2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle_{nlm} = \frac{Ze^2}{2}\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = -\frac{1}{2}\langle V \rangle_{nlm} \tag{2}$$

所以

$$E_n = \frac{1}{2}\langle V \rangle_{nlm} = -\frac{Ze^2}{2}\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm}$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = -\frac{2E_n}{Ze^2} = \frac{Z}{n^2 a}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3}$$

其次,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{4}$$

满足本征方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}\right]\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm} \tag{5}$$

总能量算符等价于

$$H \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \tag{6}$$

视 l 为参变量,式(6)对 l 求导,利用 F-H 定理,得

$$\frac{\partial E_n}{\partial l}=\left\langle \frac{\partial H}{\partial l}\right\rangle_{nlm}=\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm} \tag{7}$$

由于 $n=n_r+l+1$,所以

$$\frac{\partial E_n}{\partial l}=\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{Z^2e^2}{n^3a} \tag{8}$$

代入式(7),并利用 $a=\hbar^2/\mu e^2$,得

$$\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3}\cdot\frac{Z^2}{a^2} \tag{9}$$

* 最后,计算 $\langle r^{-3}\rangle$。

对于 s 态($l=0$),$r\to 0$ 处 $\psi\to C$(常数),所以

$$\langle r^{-3}\rangle_{n00}\to\infty \tag{10}$$

当 $l\neq 0$ 时,利用前题(7b)式,即得

$$\left\langle \frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{Z}{l(l+1)a}\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm} \tag{11}$$

将式(9)代入,得

$$\left\langle \frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\left(\frac{Z}{a}\right)^3 \tag{12}$$

当 $l\to 0$,上式右端→∞,所以上式实际上适用于一切 l 值。

6.3 对于氢原子基态,求电子处于经典禁区($r>2a$)(即 $E-V<0$)的几率。

解:氢原子基态波函数为

$$\psi_{100}=\left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2}e^{-r/a},\quad a=\hbar^2/\mu e^2,\text{为玻尔半径。}$$

相应的能量 $$E_1=-\mu e^4/2\hbar^2=-e^2/2a$$

动能 $$T(r)=E_1-V=-\frac{e^2}{2a}+\frac{e^2}{r}$$

$T=E-V<0$ 是经典禁区。由上式解出 $r>2a$。因此,电子处于经典禁区的几率为

$$P=\frac{1}{\pi a^3}\int_{2a}^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\mathrm{e}^{-2r/a}r^2\,\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\ (\text{令 }\xi=2r/a)$$

$$=\frac{4}{a^3}\cdot\left(\frac{a}{2}\right)^3\int_4^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi}\xi^2\,\mathrm{d}\xi=13\mathrm{e}^{-4}=0.2381$$

6.4 **电荷为 Ze 的原子核发生 β^- 衰变,核电荷变成 $(Z+1)e$。对于衰变前原子 Z 中的一个 K 电子(1s 层电子),衰变后仍保持为新原子的 K 电子的几率等于多少?**

解:由于原子核的 β^- 衰变是突然发生的,可以认为核外的电子状态还来不及变化,对于原来的 K 电子,其波函数仍为

$$\psi_{00}(Z, r) = \left(\frac{Z^3}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-Zr/a} \tag{1}$$

而新原子中 K 电子的波函数应是

$$\psi_{00}(Z+1, r) = \left(\frac{(Z+1)^3}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-(Z+1)r/a} \tag{2}$$

将 $\psi_{00}(Z, r)$ 按新原子的能量本征态作线性展开:

$$\psi_{00}(Z, r) = \sum_{nlm} C_{nlm} \psi_{nlm}(Z+1, r) \tag{3}$$

则衰变前的 1s 电子在衰变后处于新原子的 $\psi_{nlm}(Z+1, r)$ 态的几率为

$$P_{nlm} = |C_{nlm}|^2 = |\langle \psi_{nlm}(Z+1) | \psi_{00}(Z) \rangle|^2 \tag{4}$$

因此,本题所求几率为

$$\begin{aligned} P_{100} &= |\langle \psi_{100}(Z+1) | \psi_{00}(Z) \rangle|^2 \\ &= \frac{Z^3 (Z+1)^3}{\pi^2 a^6} (4\pi)^2 \left| \int_0^\infty e^{-(2Z+1)r/a} r^2 \, dr \right|^2 \\ &= \frac{Z^3 (Z+1)^3}{\left(Z + \frac{1}{2}\right)^6} = \left(1 + \frac{1}{Z}\right)^3 \left(1 + \frac{1}{2Z}\right)^{-6} \end{aligned} \tag{5}$$

当 $Z \gg 1$,

$$P_{100} \approx 1 - \frac{3}{4Z^2}$$

例如

$$Z = 10, \quad P_{100} \approx 0.9932$$

$$Z = 30, \quad P_{100} \approx 0.9992$$

6.5 **在半径为 a 的硬钢球内,有一质量为 m 的粒子处于基态。现突然将这硬钢球扩展到原来半径的两倍,求扩展后系统中粒子处在基态的几率是多少?**

解:粒子束缚在半径为 a 的硬钢球内,容易解出基态波函数

$$\psi_{00} = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \dfrac{\sin \dfrac{\pi r}{a}}{r} Y_{00}, & r < a \\ 0, & r \geq a \end{cases}$$

当钢球半径突然扩展到原来的 2 倍,粒子所处势场突然改变为

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<2a\\ \infty, & r\geq 2a\end{cases}$$

在此新势场中的基态波函数为

$$\varphi_{00}=\begin{cases}\dfrac{1}{a}\dfrac{\sin\dfrac{\pi r}{2a}}{r}Y_{00}, & r<2a\\ 0, & r\geq 2a\end{cases}$$

由于势场改变极其迅速,粒子原来所处状态还来不及发生变化,因此这时粒子处于基态 φ_{00} 的几率为

$$P=|\langle\varphi_{00}|\psi_{00}\rangle|^2=\left|\int_0^a r^2\,\mathrm{d}r\iint\mathrm{d}\Omega\cdot\varphi_{00}^{*}\psi_{00}\right|^2$$

$$=\left|\int_0^a\frac{2}{a}\frac{1}{r^2}\sin\frac{\pi r}{a}\sin\frac{\pi r}{2a}r^2\,\mathrm{d}r\right|^2=\frac{32}{9\pi^2}$$

公式 $\sin\alpha\sin\beta=\frac{1}{2}[\cos(\alpha-\beta)-\cos(a+\beta)]$

6.6 **有一种关于基本粒子的非常简单的“袋”模型,将介子描述成限制在弹性口袋中的夸克(quark)——反夸克模型。袋为球形,半径 R(可变),表面张力系数 $\sigma=50\mathrm{MeV}/(\mathrm{fm})^2$。夸克和反夸克均作非相对论粒子处理,静质量取为 $200\mathrm{MeV}/c^2$。不考虑相互作用。**

① 当 R 固定,估算夸克——反夸克体系基态能量(不包括静止质量);

② 允许 R 变化,计算基态的“袋”半径,并和公认的 π 介子大小作比较。

解:① 当 R 固定时,夸克和反夸克(质量均为 m)可以认为是在无限深球形势阱中运动,基态($l=0$)能级为

$$E_1=\pi^2\hbar^2/2mR^2 \tag{1}$$

因此体系的基态能量为

$$E_0=2E_1=\pi^2\hbar^2/mR^2 \tag{2}$$

② 当 R 可变,还应该考虑弹性袋的表面能

$$E_\sigma(R)=\sigma\cdot 4\pi R^2 \tag{3}$$

R 的取值应使 $E_0(R)+E_\sigma(R)$ 为极小。由极值条件

$$\frac{\partial}{\partial R}(E_0+E_\sigma)=0 \tag{4}$$

求得

$$R = \left(\frac{\pi^2\hbar^2}{4m\sigma}\right)^{1/4} = \left(\frac{\pi^2\hbar^2c^2}{4mc^2\sigma}\right)^{1/4}$$

$$= \left(\frac{\pi}{4}\times\frac{(197\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm})^2}{200\mathrm{MeV}\times 50\mathrm{MeV}/(\mathrm{fm})^2}\right)^{1/4}\approx 1.3(\mathrm{fm})$$

公认的基本粒子的线度正是这个数量级。

*6.7　质量为 μ 的粒子在球壳 δ 势阱

$$V(r) = -V_0\delta(r-a)\qquad V_0, a>0 \tag{1}$$

中运动,求存在束缚态所需的最小 V_0 值。

解:基态为 s 态($l=0$),波函数可以写成

$$\psi(r) = u(r)/r \tag{2}$$

$u(r)$满足径向方程

$$u'' + \frac{2\mu E}{\hbar^2}u + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u = 0 \tag{3a}$$

由于 $r\to\infty$处 $V(r)\to 0$,所以束缚态 $E<0$。令

$$\beta = \sqrt{-2\mu E}/\hbar \tag{4}$$

式(3a)可以改写成

$$u'' - \beta^2 u + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u = 0 \tag{3b}$$

边界条件为 $r\to 0$、∞处 $u\to 0$。

在 $r\sim a$附近对式(3b)积分,可得 u'的跃变条件

$$u'(a+0) - u'(a-0) = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}u(a) \tag{5a}$$

即

$$\left.\frac{u'}{u}\right|_{r=a-0}^{r=a+0} = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{5b}$$

在 $r\neq a$处,式(3b)即

$$u'' - \beta^2 u = 0 \tag{3c}$$

在 $r>a$区域,满足无限远处边界条件的解为

$$u = c\mathrm{e}^{-\beta r},\qquad r>a \tag{6}$$

因此

$$\left.\frac{u'}{u}\right|_{r=a+0} = -\beta \tag{7a}$$

如 V_0 之值刚够形成第一个束缚态,能级必为 $E=0^-$,这时 $\beta=0$,式(3c)成为

$$u''=0\qquad (E\to 0^-) \tag{8}$$

式(7a)成为

$$\left.\frac{u'}{u}\right|_{r=a+0}=0 \quad (E\to 0^-) \tag{7b}$$

$E\to 0^-$ 时,式(8)(满足边界条件 $u(0)=0$ 的)在 $r<a$ 区域的解为

$$u=Ar, \quad r<a, \quad (E\to 0^-) \tag{9}$$

因此

$$\left.\frac{u'}{u}\right|_{r=a-0}=\frac{1}{a}, \quad (E\to 0^-) \tag{10}$$

将(7b)、(10)代入(5b),得

$$V_0=\frac{{}^2}{2\mu a} \tag{11}$$

此即存在束缚态所需最小 V_0 值,相应能级 $E=0^-$ 。

*6.8 三维各向同性谐振子,各 $\langle r^\lambda\rangle$ 之间有递推关系

$$(\lambda+2)\alpha^4\langle r^{\lambda+2}\rangle-(\lambda+1)(2N+3)\alpha^2\langle r^\lambda\rangle+\frac{\lambda}{4}[(2l+1)^2-\lambda^2]\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \tag{1}$$

其中 $\alpha^2=\mu\omega$ 。上式适用条件为

$$\lambda>-(2l+1) \tag{2}$$

试计算 $\langle r^2\rangle$, $\langle r^4\rangle$ 。

解: 取 $\lambda=0$,得(注意 $\langle r^0\rangle=1$)

$$\langle r^2\rangle_{n_r lm}=N+\frac{3}{2}\ \alpha^{-2}=N+\frac{3}{2}\ \frac{}{\mu\omega} \tag{3}$$

此结果易由维里定理得出: $\langle T\rangle=\langle V\rangle=\frac{1}{2}E$

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2\langle r^2\rangle=\frac{1}{2}\ N+\frac{3}{2}\ \ \omega$$

所以

$$\langle r^2\rangle=N+\frac{3}{2}\ \frac{}{\mu\omega}$$

取 $\lambda=2$,利用式(3),得

$$\langle r^4\rangle_{n_r lm}=\frac{1}{8}[3(2N+3)^2-(2l-1)(2l+3)]\alpha^{-4} \tag{4}$$

例如 $N=0$(基态,$l=n_r=0$)

$$\langle r^2\rangle=\frac{3}{2}\alpha^{-2}, \quad \langle r^4\rangle=\frac{15}{4}\alpha^{-4} \tag{5}$$

$N=1$(第一激发能级,$l=1$, $n_r=0$)

$$\langle r^2\rangle = \frac{5}{2}\alpha^{-2},\quad \langle r^4\rangle = \frac{35}{4}\alpha^{-4} \tag{6}$$

对于给定的能级 E_N, l 可取 $N, N-2, \cdots, 1$(或 0)。式(3)表明, $\langle r^2\rangle$ 只与 N 直接有关,与 l 无关。式(4)则表明 $\langle r^4\rangle$ 与 N、l 都有关, N 给定后, l 越大, $\langle r^4\rangle$ 越小。

***6.9　一个电子被约束在半径为 a 的球内,作用在球面上的压强是多少?**

① 若电子处于最低的 s 态;

② 若电子处在最低的 p 态。

分析: 通过求解定态 S. eq(无限深球方势阱),求出 E,假设球体均匀膨胀一小量,所做的功是

$$\mathrm{d}W = P\mathrm{d}V = 4\pi a^2 P\mathrm{d}a = -\mathrm{d}E(a)$$

$$P = -\frac{1}{4\pi a^2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}a} \tag{1}$$

$$E = E_{n_r l} = \frac{{}^2 k^2}{2m} = \frac{{}^2}{2ma^2}\chi^2_{n_r l} \tag{2}$$

解: ① 由最低 s 态能量 $E_s = \frac{\pi^2\ {}^2}{2ma^2}$,代入上式,求得

$$P = \frac{\pi^2\ {}^2}{4ma^5} \tag{3}$$

② 最低的 p 态径向波函数为

$$R(r) = A\left(\frac{\cos kr}{kr} - \frac{\sin kr}{(kr)^2}\right)\qquad k^2 = \frac{2mE}{{}^2} > 0 \tag{4}$$

由边界条件 $R(a) = 0$,可得确定最低 p 态能量 E_p 的超越方程:

$$\tan ka = ka \tag{5}$$

令 $y = ka$,有 $y = \tan y$,参考图 6.1,设 $y_0 = 3\pi/2$,代入式(5)求出 y_1,反复迭代逐步逼近精确值,求得最小非零正值 $ka \approx 4.5$,所以最低 p 态电子对球面的压强

$$P = \frac{(4.5)^2\ {}^2}{4\pi ma^5} \tag{6}$$

若可查表,则 $\chi_{n_r l}$: $\chi_{00} = \pi$, $\chi_{01} = 4.5$,直接代入式(2)、式(1),即可求得式(3)、式(6)。

图　6.1

*6.10 **单价原子中价电子(最外层电子)所受原子实(原子核及内层电子)的作用势可近似表为**

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a}{r^2},\quad 0<\lambda \ll 1 \tag{1}$$

a 为玻尔半径。求价电子的能级,并和氢原子能级比较。

解: 取守恒量完全集为$(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$,

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

$u(r)$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a}{r^2}\right]u = Eu \tag{3a}$$

令
$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) \tag{4}$$

注意到 $a = \hbar^2/\mu e^2$,式(3a)可化为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right]u = Eu \tag{3b}$$

相当于氢原子径向方程中 l 换成 l',由此可得与(3b)对应的能级

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2an'^2},\quad n' = n_r + l' + 1 \tag{5}$$

通常令
$$l' = l + \Delta l \tag{6}$$

$$n' = n_r + l + \Delta l + 1 = n + \Delta l \tag{7}$$

Δl 称为量子数 l 和 n 的“修正数”。由于 $\lambda \ll 1$,可对式(4)作如下近似处理:

$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) = (l+\Delta l)(l+\Delta l+1) = l(l+1) + (2l+1)\Delta l + (\Delta l)^2$$

略去$(\Delta l)^2$,即得

$$\Delta l \approx -\frac{\lambda}{l+\frac{1}{2}} \tag{8}$$

$\lambda \ll 1$,所以$|\Delta l| \ll 1$,因此,本题所得能级 E_{nl} 和氢原子能级仅有较小的差别,但能级的“l 简并”已经消除。

式(5)和碱金属光谱的实际资料大体一致,尤其是,修正数$|\Delta l|$随 l 升高而减小,这一点和实际符合得极好。

式(4)的精确解为

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1-\frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2} \tag{9}$$

如对上式作二项式展开,保留 λ 项,略去 λ^2 以上各项,即可得式(8)。

* 6.11　设有一中心位势

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ 0, & r \geq a \end{cases} \tag{1}$$

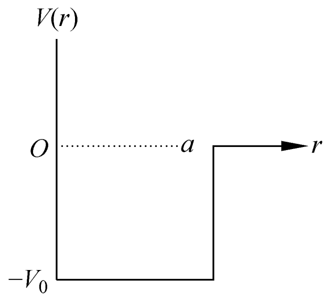

图　6.2

求粒子在该位势中的最低能态的本征能量。

解:最低能态, $l = 0$。考虑 $-V_0 < E < 0$(束缚态)情况,令

$$k = \sqrt{2\mu(E+V_0)}/\hbar, \quad k' = \sqrt{-2\mu E}/\hbar \tag{2}$$

则径向方程为

$$\begin{cases} R'' + \dfrac{2}{r}R' + \left[k^2 - \dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 & (r < a) \\ R'' + \dfrac{2}{r}R' + \left[(\mathrm{i}k')^2 - \dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 & (r > a) \end{cases} \tag{3}$$

即球 Bessel 方程。

在 $r < a$ 区域中,物理上允许的解只能取

$$R(r) = A_{kl}\, j_l(kr) \tag{4}$$

在 $r > a$ 区域,满足束缚态边条件的解只能取虚宗量 Hankel 函数:

$$R(r) = B_{k'l}\, h_l(\mathrm{i}k'r) \tag{5}$$

根据在 $r = a$ 处 R 及 R' 连续条件以及归一化条件,可求出 E(即 k 与 k',见式(2))及 A_{kl}、$B_{k'l}$。如只对能谱感兴趣,则可用 $(\ln R)'$ 在 $r = a$ 点连续的条件来确定 E。$l = 0$,利用 $j_0(\rho) = \frac{1}{\rho}\sin\rho$, $h_0(\rho) = -\frac{\mathrm{i}}{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho}$,按照 $(\ln(rR))'$ 在 $r = a$ 点连续的条件可求出

$$k\cot ka = -k'$$

令 $\xi = ka$, $\eta = k'a$,有

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}V_0 a^2$$

$$\xi\cot\xi = -\eta$$

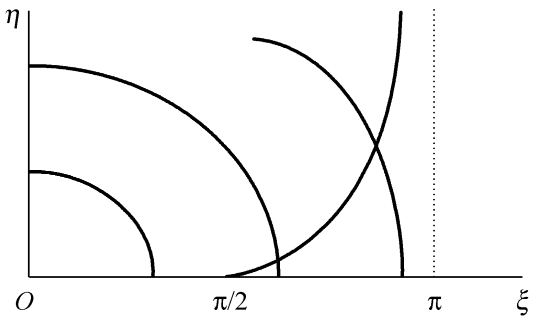

图　6.3

束缚态个数 n 由下式决定:

$$\left(n-\frac{1}{2}\right)^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu} < V_0 a^2 < \left(n+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}$$

求氘核阱深：当 $n=1$，即一个束缚态，

$$V_0 \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2} = \frac{10\times10^{-54}}{8\times4\times10^{-50}} = 3.2\times10^{-5}\ \text{尔格} \approx 20\text{MeV}$$

*6.12　对类氢离子(核电荷 Ze)的 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 的共同本征态 ψ_{nlm}，按递推关系

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^{\lambda}\rangle - (2\lambda+1)\frac{a}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle + \frac{\lambda}{4}[(2l+1)^2 - \lambda^2]\frac{a^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle = 0 \tag{1}$$

计算各 $\langle r^{\lambda}\rangle$。

解：在式(1)中，如取 $\lambda=0$ 并注意到 $\langle r^0\rangle=1$，立即得到

$$\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{n^2 a} \tag{2}$$

依次取 $\lambda=1,2$，可得

$$\langle r\rangle_{nlm} = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]\frac{a}{Z} \tag{3}$$

$$\langle r^2\rangle_{nlm} = \frac{n^2}{2}[5n^2 + 3l(l+1) + 1]\left(\frac{a}{Z}\right)^2 \tag{4}$$

例如　$1s$ 态(基态)，　$\langle r\rangle_{100} = \frac{3}{2}$，　$\langle r^2\rangle_{100} = 3$

$2s$ 态，　$\langle r\rangle_{200} = 6$，　$\langle r^2\rangle_{200} = 42$　(5)

$2p$ 态，　$\langle r\rangle_{21m} = 5$，　$\langle r^2\rangle_{21m} = 30$

式(5)中，$\langle r\rangle$ 以(a/Z)为单位，$\langle r^2\rangle$ 以(a^2/Z^2)为单位。

注意，利用式(1)不能计算 $\langle r^{-2}\rangle$，但如利用上题关于 $\langle r^{-2}\rangle$ 的计算结果，则只要在式(1)中取 $\lambda=-1$，即可算出 $\langle r^{-3}\rangle$，结果和上题相同。如再取 $\lambda=-2(l\geq1)$，就可算出

$$\langle r^{-4}\rangle = \left(\frac{Z}{a}\right)^4 \cdot \frac{3n^2 - l(l+1)}{2n^5\left(l-\frac{1}{2}\right)l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\left(l+\frac{3}{2}\right)} \tag{6}$$

计算其他 $\langle r^{\lambda}\rangle$ 可依此类推。

CHAPTER 7

带电粒子在电磁场中的运动

7

【内容提要】

1．一个带电为 q 的粒子在电磁场中的哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\phi$$

2．正常 Zeeman 效应：如果把原子置于强磁场中，原子发出的每条光谱线都分裂为三条，此即正常 Zeeman 效应。光谱线的分裂反映原子的简并能级发生分裂，即能级简并被解除或部分解除。

外磁场

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r},\quad \boldsymbol{B}(0,0,B)$$

略去 B^2 项，

$$H\approx\frac{1}{2\mu}P^2+V(r)+\frac{eB}{2\mu c}L_z$$

(H,L^2,L_z)的共同本征函数

$$\psi_{n_r lm}(r,\theta,\phi)=R_{n_r l}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$n_r,l=0,1,2,\cdots\quad m=l,l-1,\cdots,-l$$

能级 $$E_{n_r lm}=E_{n_r l}+\frac{eB}{2\mu c}m\hbar=E_{n_r l}+m\hbar\omega_L$$

能级简并全部解除(分裂为 $2l+1$ 条)，但光谱线一分为三。

3．Landau 能级和波函数。荷电 q 的自由粒子(无势场 V)在外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动，

$$H=H_0-\frac{qB}{2\mu c}L_z+\frac{1}{2\mu}P_z^2$$

$$H_0=\frac{1}{2\mu}(P_x^2+P_y^2)+\frac{1}{2}\mu\omega_L^2(x^2+y^2),\quad \omega_L=\frac{qB}{2\mu c}$$

取(H_0, L_z, P_z)为守恒量完全集,其共同的本征函数为

$$\psi(\rho,\varphi,z)=\rho^{|m|}F(-n_\rho,|m|+1,\alpha^2\rho^2)e^{-\alpha^2\rho^2/2}e^{im\varphi}e^{ikz}$$

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots \qquad -\infty<k(\text{实})<+\infty$$

$$L_z\sim m\hbar,\quad P_z\sim \hbar k$$

$$E_{n_\rho m k}=(2n_\rho+1+|m|+m)\hbar\omega_L+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}=(N+1)\hbar\omega_L+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}$$

在 xy 平面内为束缚态,能级分立;沿磁场方向(z 轴方向)为自由运动,能量连续变化。

【典型习题解答】

7.1 质量为 m,电荷为 q 的非相对论性粒子在电磁场中运动,哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\varphi$$

其中

$$\boldsymbol{P}=-i\hbar\nabla$$

定义速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{r},H]$$

求 $\boldsymbol{v}$ 的具体表达式及对易式。

解:以一个分量为例:

$$v_x=\frac{1}{i\hbar}[x,H]=\frac{1}{2i\hbar m}\left[x,\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right]$$

$$=\frac{1}{2i\hbar m}\left\{\left[x,P_x-\frac{q}{c}A_x\right]\left(P_x-\frac{q}{c}A_x\right)+\left(P_x-\frac{q}{c}A_x\right)\left[x,P_x-\frac{q}{c}A_x\right]\right\}$$

$$=\frac{1}{m}\left(P_x-\frac{q}{c}A_x\right)$$

所以

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)$$

$$[v_x,v_y]=\left[\frac{1}{m}\left(P_x-\frac{q}{c}A_x\right),\frac{1}{m}\left(P_y-\frac{q}{c}A_y\right)\right]$$

$$=-\frac{q}{m^2c}\{[P_x,A_y]+[A_x,P_y]\}$$

$$= \frac{\mathrm{i}\ q}{m^2\ c}\left(\frac{}{x}A_y - \frac{}{y}A_x\right) = \frac{\mathrm{i}\ q}{m^2\ c}(\Delta \times \boldsymbol{A})_z = \frac{\mathrm{i}\ q}{m^2\ c}B_z$$

同理,有

$$[v_y, v_z] = \frac{\mathrm{i}\ q}{m^2\ c}B_x$$

$$[v_z, v_x] = \frac{\mathrm{i}\ q}{m^2\ c}B_y$$

写成矢量式,为

$$\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{v} = \mathrm{i}\ \frac{q}{m^2\ c}\boldsymbol{B}$$

7.2　**带电粒子(m, q)在与磁场 $\boldsymbol{B}$ 垂直的平面内运动,取矢势$(0, Bx, 0)$。**

① **写出此二维问题的 H;**

② **求出能量本征值和本征函数。**

解: 由于 $\boldsymbol{B} = \Delta \times \boldsymbol{A}$　$\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{k}$,所以 $\boldsymbol{P} = P_x \mathrm{i} + P_y \mathrm{j}$, $P_z = 0$

①
$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{1}{2m}\left[P_x^2 + \left(P_y - \frac{q}{c}Bx\right)^2\right] \tag{1}$$

② 改写 H,即有

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{m}{2}\frac{q^2 B^2}{m^2 c^2}\left(x - \frac{cP_y}{qB}\right)^2 \tag{2}$$

令

$$\omega = qB/mc, \quad x_0 = cP_y/qB, \quad x - x_0 = \pi \tag{3}$$

则

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x - x_0)^2 = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\pi^2 \tag{4}$$

$$[\pi, P_x] = [x, P_x] = \mathrm{i} \tag{5}$$

$$[\pi, P_y] = 0 \tag{6}$$

$$[P_y, H] = 0 \tag{7}$$

其中 P_y 是守恒量。因此,式(4)表示的仍是一个一维谐振子的哈密顿量,其能量本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{qB}{mc} \tag{8}$$

本征函数

$$\psi(x, y) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\pi^2} H_n(\alpha\pi) \tag{9}$$

其中
$$\pi = x - \frac{cP_y}{qB}$$
$$\alpha = \frac{m\omega}{\ } = \frac{qB}{c} \qquad (10)$$

7.3 **电子$(s=1/2)$在均匀常磁场$\boldsymbol{A}(-By,0,0)$中运动,试问力学量的完全集合是什么?并求能级和波函数。**

解:
$$\boldsymbol{B}=\Delta\times\boldsymbol{A}=B\boldsymbol{k}$$
$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\mu\cdot\boldsymbol{B}$$
$$\boldsymbol{A}=-By\boldsymbol{i},\quad \mu=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}$$

所以
$$H=\frac{1}{2m}\left[\left(P_x-\frac{eB}{c}y\right)^2+P_y^2+P_z^2\right]+\frac{eB}{mc}s_z$$
$$=\frac{1}{2m}P_y^2+\frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2\left(y-\frac{cP_x}{eB}\right)^2+\frac{P_z^2}{2m}+\frac{eB}{mc}s_z$$
$$=H_1+H_2+\frac{eB}{mc}s_z$$
$$H_1=\frac{P_y^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(y-y_0)^2,\quad \omega=\frac{eB}{mc},\quad y_0=\frac{cP_x}{eB}$$
$$H_2=P_z^2/2m$$

(H_1, P_z, s_z)组成完全集。
$$E_1=E_{1n}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{eB}{mc}$$
$$\psi_{1n}=\psi_n(y-y_0)=A_nH_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$
$$\xi=\alpha(y-y_0),\quad \alpha=\frac{m\omega}{\ }=\frac{eB}{c}$$
$$E_2=\frac{P_z^2}{2m}$$
$$E_3=\frac{eB}{mc}m_s,\quad m_s=\pm\frac{1}{2}$$

总能量
$$E=E_{nP_zm_s}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{eB}{mc}+\frac{P_z^2}{2m}+\frac{eB}{mc}m_s$$

波函数
$$\psi_{nP_zm_s}=A_n\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_n(\xi)\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}P_zz/}\chi_{m_s}(s_z)$$

其中
$$A_n = \frac{\alpha}{\pi 2^n n\,!}$$

*7.4　**质量为 m、荷电 e 的粒子在恒定磁场中运动，粒子的速度分量算符之间有对易关系：$[v_i, v_j] = \frac{ie}{m^2 c}\varepsilon_{ijk}B_k$。若粒子在均匀磁场 $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{k}$ 中运动，求体系能量。**

解：磁场沿 z 轴，$B_z = B$，　$B_x = B_y = 0$。所以

$$[v_x, v_y] = \frac{ie}{m^2 c}B_z, \quad (B_z = B)$$
$$[v_y, v_z] = [v_x, v_z] = 0 \tag{1}$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{m}{2}\boldsymbol{v}^2 = \frac{m}{2}(v_x^2 + v_y^2) + \frac{m}{2}v_z^2 = H_1 + H_2$$

由 $[H_1, H_2] = 0$，可分别求出 H_1，H_2。注意到式(1)，令

$$v_x = \frac{eB}{m^2 c}\hat{Q}$$

$$v_y = \frac{eB}{m^2 c}\hat{P}$$

$$[Q, P] = i$$

则
$$H_1 = \frac{eB}{mc}\frac{1}{2}(Q^2 + P^2) \tag{2}$$

若令
$$eB/mc = \omega, \quad Q = m\omega x = \alpha x, \quad P = \frac{1}{m\omega}P_x$$

则
$$H_1 = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

与 H_1 对应的能级

$$E_1 = \frac{e\ B}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

$$H_2 = \frac{m}{2}v_z^2, \quad \boldsymbol{v} = \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)$$

$$mv_z = P_z - \frac{e}{c}A_z, \quad \boldsymbol{B} = B\boldsymbol{k}$$

取
$$\boldsymbol{A} = (-By, 0, 0)$$

则
$$mv_z = P_z, \quad H_2 = P_z^2/2m$$

与 H_2 对应的能级

$$E_2 = \frac{P_z^2}{2m}$$

总能级

$$E = E_{nP_z} = \frac{eB}{2mc}(2n+1) + P_z^2/2m$$

*7.5 质量 m、荷电 q 的粒子在恒定磁场 $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{k}$ 中运动,用柱坐标系求解体系能量(即朗道能级)。

解:
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{1}$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2m} + \frac{q^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2 - \frac{q}{2mc}(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}) \tag{2}$$

取
$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r} = \left(-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0\right) \tag{3}$$

由于
$$[\boldsymbol{P}, \boldsymbol{A}] = \boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P} = -\mathrm{i}\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0 \text{(因为} \nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0\text{)}$$

所以
$$\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P} = 2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P} = B(xP_y - yP_x) = BL_z \tag{4}$$

$$\boldsymbol{A}^2 = \frac{B^2}{4}(x^2 + y^2) \tag{5}$$

式(2)改写为

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{q^2B^2}{8mc^2}(x^2 + y^2) - \frac{qB}{2mc}L_z + \frac{P_z^2}{2m} \\ &= H_0 - \omega_L L_z + P_z^2/2m \end{aligned} \tag{6}$$

其中
$$\omega_L = \frac{qB}{2mc}, \quad L_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad P_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{7}$$

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{q^2B^2}{8mc^2}(x^2 + y^2) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega_L^2\rho^2 \end{aligned} \tag{8}$$

(H_0, L_z, P_z)组成完全集($[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{r}^2] = 0$, $[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{P}^2] = 0$),具有共同本征态,表为 ψ_{nmk},

$$\psi_{nmk} = R(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \rho^{|m|}F(-n_\rho, |m|+1, \alpha^2\rho^2)\mathrm{e}^{-\alpha^2\rho^2/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{9}$$

由径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega_L^2\rho^2\right]R(\rho) = E'R(\rho) \tag{10}$$

可解出
$$E' = E_{n_\rho mk} \pm m\hbar\omega_L - \hbar^2k^2/2m \tag{11}$$

$$\omega_L = |q|B/2mc$$

与 ψ(即式(9))对应的 $E_{n_\rho mk}$ 为

$$E_{n_\rho mk} = (2n_\rho + 1 + |m| \mp m)\hbar\omega_L + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (12)$$

此为朗道能级,式(9)为朗道波函数。e^{ikz} 为自由态,沿 z 轴;平面运动是束缚态($n_\rho = 0, 1, 2, \cdots$)。

式(12)中第一项 > 0(因为 $|m| \mp m \geq 0$),可看作是具有磁矩

$$\mu = -(2n_\rho + 1 + |m| \mp m)\frac{|q|\hbar}{2mc}$$

的粒子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的相互作用能($\sim H' = -\mu \cdot \boldsymbol{B}$),与上题 $E = (2n+1)\frac{|q|\hbar B}{2mc}$ 相比较,

$(2n_\rho + |m| \mp m) \sim 2n$, $\omega_L = |q|B/2mc = \omega/2$, $\omega = \frac{|q|B}{mc}$。

*7.6 质量 m,电荷 q,频率为 ω_0 的各向同性谐振子置于均匀外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,求能级公式(与前两题比较,多了一项谐振子势)。

解:本题需添加一谐振子势,即(参前题式(6))

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{q^2B^2}{8mc^2}(x^2 + y^2) - \frac{qB}{2mc}L_z$$

$$= H_1 + H_2 - \omega_L L_z \qquad (1)$$

其中

$$H_1 = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2$$

$$H_2 = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}(\omega_0^2 + \omega_L^2)(x^2 + y^2) \qquad (2)$$

$$\omega_L = \frac{qB}{2mc}$$

(H_1, H_2, L_z) 组成完全集,$[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{r}^2] = 0$,$[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{P}^2] = 0$。

$$E_{n_1} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad n_1 = 0, 1, 2, \cdots \qquad (3)$$

$$E_{n_2} = (2n_2 + 1 + |m|)\hbar\omega, \quad n_2 = 0, 1, 2, \cdots \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \qquad (4)$$

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_L^2} \qquad (5)$$

L_z 的本征值为 $m\hbar$。总能级公式为

$$E_{n_1 n_2 m} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 + (2n_2 + 1 + |m|)\hbar\omega - m\hbar\omega_L \qquad (6)$$

*7.7 **质量 μ、电荷 q 的粒子在方向互相垂直的均匀电场 ε 和均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动，求能量本征值和本征函数。**

解：设电场和磁场分别为

$$\boldsymbol{\varepsilon}=(\varepsilon,0,0)\qquad \boldsymbol{B}=(0,0,B)\tag{1}$$

取电磁场的标、矢势为

$$\varphi=-\varepsilon x,\quad \boldsymbol{A}=(0,Bx,0)\tag{2}$$

满足关系 $\boldsymbol{\varepsilon}=-\nabla\varphi,\quad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$

$$H=\frac{1}{2\mu}\left[P_x^2+\left(P_y-\frac{qB}{c}x\right)^2+P_z^2\right]-q\varepsilon x\tag{3}$$

取守恒量完全集为 (H,P_y,P_z)，它们的共同本征函数可以写成

$$\psi(x,y,z)=\psi(x)e^{i(P_y y+P_z z)/\hbar}\tag{4}$$

其中 P_y 和 P_z 为本征值，可取任意实数。$\psi(x,y,z)$ 满足能量本征方程

$$H\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

因此 $\psi(x)$ 满足方程

$$\frac{1}{2\mu}\left[\hat{P}_x^2+\left(P_y-\frac{qB}{c}x\right)^2+P_z^2\right]\psi-q\varepsilon x\psi=E\psi\tag{5}$$

（注意：此式中的 $\hat{P}_x$ 是算符，而 P_y，P_z 已是本征值了！）亦即，对于 $\psi(x)$ 来说，H 和下式等价：

$$\begin{aligned}H&=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x^2-\left(q\varepsilon+\frac{qB}{\mu c}P_y\right)x+\frac{1}{2\mu}(P_y^2+P_z^2)\\&=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}(x-x_0)^2-\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x_0^2+\frac{1}{2\mu}(P_y^2+P_z^2)\end{aligned}\tag{6}$$

其中

$$x_0=\frac{\mu c^2}{q^2B^2}\left(q\varepsilon+\frac{qB}{\mu c}P_y\right)=\frac{\mu c}{qB}\left(\frac{c\varepsilon}{B}+\frac{P_y}{\mu}\right)\tag{7}$$

式(6)相当于一维谐振子能量算符

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x-x_0)^2,\quad \omega=|q|B/\mu c$$

再加上两项常数，因此，本题能级为

$$\begin{aligned}E&=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x_0^2+\frac{1}{2\mu}(P_y^2+P_z^2)\\&=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar|q|B}{\mu c}-\frac{c^2\varepsilon^2\mu}{2B^2}-\frac{c\varepsilon}{B}P_y+\frac{1}{2\mu}P_z^2\end{aligned}\tag{8}$$

其中 P_y，P_z 为任意实数，$n=0,1,2,\cdots$。

式(4)中 $\psi(x)$ 为以 $(x-x_0)$ 为变量的一维谐振子的能量本征函数，即

$$\psi(x)=\psi_n(x-x_0)=H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}\tag{9}$$

$H_n(\xi)$ 为厄米多项式，$\xi=\left(\frac{|q|B}{\hbar c}\right)^{1/2}(x-x_0)$

CHAPTER 8

8 自旋与角动量

【内容提要】

1 . **电子自旋假设的两个要点**:

(1) $s_z = \pm \frac{}{2}$; (2) $\mu_s = -\frac{e}{\mu c}\boldsymbol{s}$ 或 $\left|\frac{\mu_s}{s}\right| = \frac{e}{\mu c}$

内禀磁矩的值即玻尔磁子的值: $|\mu_s| = \mu_B = e\ \ /2\mu c$

g **因子(回转磁比值)**: $|g_s| = 2$, $|g_L| = 1$

2 . **旋量波函数** $\psi(\boldsymbol{r}, s_z) = \begin{pmatrix} \psi(\boldsymbol{r}, \ /2) \\ \psi(\boldsymbol{r}, -\ /2) \end{pmatrix} = \ (\boldsymbol{r})\chi(s_z)$ **的意义及其归一化。**

$s_z = \pm\ /2$ **的本征态**: $\alpha = \chi_{1/2}(s_z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\beta = \chi_{-1/2}(s_z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

一般自旋态: $\chi(s_z) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\alpha + b\beta$

3 . **自旋算符与** Pauli **矩阵** $\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{s} = \mathrm{i}\ \ \boldsymbol{s}$, $\boldsymbol{s} = \frac{}{2}\sigma$

$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$ (**单位算符**)

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = \mathrm{i}\sigma_z \qquad \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2\mathrm{i}\sigma_z \qquad \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$$
$$\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_x \qquad \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2\mathrm{i}\sigma_x \qquad \sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y = 0$$
$$\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = \mathrm{i}\sigma_y \qquad \sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z = 2\mathrm{i}\sigma_y \qquad \sigma_z\sigma_x + \sigma_x\sigma_z = 0$$

在 σ_z **表象中**,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

4 . **总角动量**

在中心力场 $V(r)$(**例如** Coulomb **场**)**中运动的电子的相对论波动方程**(Dirac **方程**),**在非相对论极限下**, Hamilton **量中将出现一项自旋轨道耦合作用**

$$\xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}$$

$$\xi(r)=\frac{1}{2\mu^2c^2}\ \frac{1}{r}\ \frac{dV}{dr}$$

电子的能量本征态可选为(H, L^2, J^2, J_z)的共同本征态,而空间角度部分与自旋部分的波函数则可取为(L^2, J^2, J_z)的共同本征态:

$$_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z)\quad \begin{array}{l} j=l+1/2 \\ j=l-1/2 \quad (l\neq 0)\end{array}$$

本征值分别为 $l(l+1)\ ^2, j(j+1)\ ^2, m_j\ \ (m_j=j,j-1,\cdots,-j)$

5．碱金属原子光谱的双线结构

由于 $\xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}$项的存在,使得 $E_{nlj=l+1/2}>E_{nlj=l-1/2}$。例如

$$\text{Na}:\quad \begin{array}{ll} 3p_{1/2}\to 3s_{1/2} & (5896\quad) \\ 3p_{3/2}\to 3s_{1/2} & (5890\quad)\end{array}$$

6．考虑自旋后对正常 Zeeman 效应的再认识

由于磁场较强,这时须考虑内禀磁矩与磁场 $\boldsymbol{B}$的相互作用,但仍可略去 $\xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}$ 项,

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(r)+\frac{eB}{2\mu c}(L_z+2s_z)$$

$$(H, L^2, J^2, J_z)\sim\psi_{nlmm_s}(r,\theta,\varphi,s_z)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\chi_{m_s}(s_z)$$

$$E_{nlmm_s}=E_{nl}+\frac{eB}{2\mu c}(m+2m_s)$$

$$=E_{nl}+\frac{eB}{2\mu c}(m\pm 1)$$

与不考虑电子自旋时的能级 E_{nlm} 相比,E 虽有所改变,但对原子光谱的正常 Zeeman 分裂无影响($\Delta m_s=0$)。

7．反常 Zeeman 效应

这时磁场 $\boldsymbol{B}$很弱,应将 $\xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}$项和内禀磁矩与外磁场 $\boldsymbol{B}$的作用项一并同时考虑。

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(r)+\frac{eB}{2\mu c}J_z+\xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{eB}{2\mu c}s_z$$

先忽略最后一项,取守恒量完全集(H, L^2, J^2, J_z),本征态和能量本征值分别为

$$\psi_{nljm_j}(r,\theta,\varphi,s_z)=R_{nlj}(r)\ _{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z)$$

$$E_{nljm_j}=E_{nlj}+m_j\ \omega_L,\qquad \omega_L=eB/2\mu c$$

考虑最后一项,在一级微扰近似下,局限在 E_{nlj} 的诸简并态张开的$(2j+1)$维子空间中把微扰 $\omega_L s_z$ 对角化:

$$E_{nljm_j}=E_{nlj}+m_j\ \omega_L\quad \begin{array}{ll} 1+\dfrac{1}{2j} & j=l+1/2 \\ 1-\dfrac{1}{2j+2} & j=l-1/2\ (l\neq 0)\end{array}$$

8 .两个电子的自旋单态与三重态

(s^2, s_z)的共同本征函数 χ_{SM_S}	S	M_S
$\alpha(1)\alpha(2)$ $\frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]$ $\beta(1)\beta(2)$	1 1 1	1 0 (三重态) - 1
$\frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$	0	0 (单态)

9 .角动量理论

角动量理论是比较严格的理论,可自成体系,只需从基本定义式 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\ \boldsymbol{J}$ 出发,就可推演出角动量的几乎全部内容。

(1) $$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\ \boldsymbol{J}$$

分量形式: $[J_x, J_y]=\mathrm{i}\ J_z,\quad [J_y, J_z]=\mathrm{i}\ J_x,\quad [J_z, J_x]=\mathrm{i}\ J_y$

或统一写作: $[J_i, J_j]=\mathrm{i}\ \varepsilon_{ijk}J_k,\ (i,j,k=1,2,3)$

$$(J^2, J_z)\sim|jm\rangle$$

$$J^2|jm\rangle = j(j+1)\ ^2|jm\rangle$$

$$J_z|jm\rangle = m\ |jm\rangle$$

j 为 0、正整数或半奇数; $m=-j, -j+1, \cdots, j$

引入上升和下降算符: $$J_\pm = J_x \pm iJ_y$$

则 $$J_\pm|jm\rangle = (j\hat{e}\ m)(j\pm m+1)\ |jm\pm1\rangle$$

(2) 若 $\boldsymbol{J}_1$, $\boldsymbol{J}_2$ 是两个独立的角动量,则 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ 也是角动量。

$$(J_1^2, J_2^2, J^2, J_z)\sim|j_1 j_2 jm\rangle$$,(耦合表象基矢,简记为 $|jm\rangle$)

$$(J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z})\sim|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$ (无耦合表象基矢)

$$\Big|jm\rangle = \sum_{m_2}\Big|j_1\ m-m_2\ j_2\ m_2\rangle \underbrace{\langle j_1\ m-m_2\ j_2\ m_2\ |\ jm\rangle}_{C\text{-}G\text{系数}}$$

(3) 若体系沿轴 $\boldsymbol{n}$ 转过角度 θ,则转动算符为

$$R=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}$$

$\boldsymbol{J}$ 为系统的角动量。若系统的波函数 ψ 和任一算符 A 转动后变为 ψ' 和 A',则有关系式:

$$\psi'=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}\psi,\qquad A'=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}$$

【典型习题解答】

8.1 **对于(L^2, L_z)的共同本征函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$,计算L_x^2和L_y^2的平均值,以及ΔL_x,ΔL_y,并验证测不准关系。**

解:本征态态矢Y_{lm}记为$|lm\rangle$,满足本征方程

$$L^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle \tag{1}$$

$$L_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle,\quad \langle lm|L_z = m\hbar\langle lm| \tag{2}$$

利用基本对易式

$$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L} \tag{3}$$

可得算符关系

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar L_x^2 &= (L_yL_z - L_zL_y)L_x = L_y(L_zL_x) - L_zL_yL_x\\ &= L_y(L_xL_z + \mathrm{i}\hbar L_y) - L_zL_yL_x\\ &= \mathrm{i}\hbar L_y^2 + L_yL_xL_z - L_zL_yL_x\end{aligned} \tag{4}$$

在$|lm\rangle$态下对上式求平均,易得(利用式(2))

$$\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle \tag{5}$$

由于

$$\langle L_x^2 + L_y^2\rangle = \langle L_x^2\rangle + \langle L_y^2\rangle = \langle L^2 - L_z^2\rangle = [l(l+1) - m^2]\hbar^2$$

所以
$$\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2 \tag{6}$$

又在(L^2, L_z)的共同本征态$|lm\rangle$下,有

$$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$$

所以
$$\Delta L_x = \Delta L_y = \langle L_x^2\rangle^{1/2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{l(l+1) - m^2} \tag{7}$$

$$\Delta L_x\cdot\Delta L_y = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2 \tag{8}$$

而测不准关系给出

$$\Delta L_x\cdot\Delta L_y \geqslant \frac{1}{2}\left|\overline{[L_x, L_y]}\right| = \frac{1}{2}|m|\hbar^2 \tag{9}$$

由于$l\geqslant|m|$,式(8)和式(9)是一致的。当$|m| = l$时,式(9)中的等号成立。

8.2 **在$l = 1(\boldsymbol{L}^2 = 2\hbar^2)$的情形下,证明$L_z = 0$的本征态,$L_x = 0$的本征态以及$L_y = 0$的本征态互相正交。**

证:$l = 1$时,$L_z = 0$的状态记为$|lm\rangle = |10\rangle$

由题8.1知

$$\langle 10 | L_x^2 | 10\rangle = \frac{1}{2}[\, l(l+1) - m^2 \,]\ {}^2 = {}^2$$

由于 $l = 1$ 时，L_z 的本征值只能是　，0，-　，故知态 $|10\rangle$ 中只包含 $L_x = \pm$　这两种本征态，而没有 $L_x = 0$ 的本征态成分(注：如有 $L_x = 0$ 的成分，则 $\langle L_x^2\rangle$ 不可能等于 ^{2})。所以

$$\langle l = 1,\ L_z = 0 |\ l = 1,\ L_x = 0\rangle = 0$$

同理可证

$$\langle l = 1,\ L_z = 0 |\ l = 1,\ L_y = 0\rangle = 0$$

$$\langle l = 1,\ L_x = 0 |\ l = 1,\ L_y = 0\rangle = 0$$

8.3　轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 的三个分量 L_x, L_y, L_z 是互相不对易的，它们有没有共同本征态？

解：如果存在 $\boldsymbol{L}$ 三个分量的共同本征态，设为 ψ，则由于它是 L_z 的本征态，在此态下，$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$；但它又同时是 L_x 和 L_y 的本征态，在本征态下的平均值就等于本征值，因此 L_x 和 L_y 的本征值必须为 0。同样，L_z 的本征值也应为 0。故而

$$\boldsymbol{L}\psi = 0, \qquad L^2\psi = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L}\psi = 0 \tag{1}$$

满足这条件的波函数只有

$$\psi = Y_{00} = \frac{1}{4\pi} \tag{2}$$

如果还考虑径向变量 r，则

$$\psi = f(r) \tag{3}$$

f 为 r 的任意函数。

8.4　限于 $l = 1$ ($L^2 = 2\ {}^2$)，求 ($\boldsymbol{L}^2$, L_x) 的共同本征函数，表示成球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的线性迭加。

解：$l = 1$ 时，L_z 的本征值为 0 及 ±　。由 x、y、z 的轮换对称性可知，L_x (及 L_y) 的本征值也是 0 及 ±　，相应的 ($\boldsymbol{L}^2$, L_x) 的共同本征函数记为 ${}_{11}$，${}_{10}$，${}_{1-1}$，它们可以利用 ($\boldsymbol{L}^2$, L_z) 的共同本征函数 Y_{11}，Y_{10}，Y_{1-1} 的具体函数形式，用 x、y、z 轮换的方式求出。

当 $x \to y$，$y \to z$，$z \to x$ 时，

有 $L_x \to L_y$，$L_y \to L_z$，$L_z \to L_x$，$\boldsymbol{L}^2$ 不变。

已知

$$Y_{11} = -\ \frac{3}{8\pi}\sin\theta e^{i\varphi} = -\ \frac{3}{8\pi}\ \frac{x + iy}{r} \tag{1a}$$

$$Y_{10} = \frac{3}{4\pi}\cos\theta = \frac{3}{4\pi}\ \frac{z}{r} \tag{1b}$$

$$Y_{1-1} = \frac{3}{8\pi}\sin\theta e^{-i\varphi} = \frac{3}{8\pi}\ \frac{x - iy}{r} \tag{1c}$$

经过 x, y, z 轮换,成为

$$Y_{11} \to - \frac{3}{8\pi}\frac{y + \mathrm{i}z}{r} = -\mathrm{i}\ \frac{1}{2}Y_{11} + \frac{1}{2}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1-1} \tag{2a}$$

$$Y_{10} \to \frac{3}{4\pi}\frac{x}{r} = \frac{1}{2}(-Y_{11} + Y_{1-1}) \tag{2b}$$

$$Y_{1-1} \to \frac{3}{8\pi}\frac{y - \mathrm{i}z}{r} = \mathrm{i}\ \frac{1}{2}Y_{11} - \frac{1}{2}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1-1} \tag{2c}$$

选择适当的因子后,可取

$${}_{11} = \frac{1}{2}Y_{11} + \frac{1}{2}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1-1}, \quad (l_x = \quad) \tag{3a}$$

$${}_{10} = \frac{1}{2}(Y_{11} - Y_{1-1}), \quad (l_x = 0) \tag{3b}$$

$${}_{1-1} = \frac{1}{2}Y_{11} - \frac{1}{2}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1-1}, \quad (l_x = - \quad) \tag{3c}$$

它们都已经归一化。注意 ${}_{10}$ 中没有 Y_{10} 的成分(即 $l = 1, L_x = 0$ 的态 ${}_{10}$ 中不包含 $l = 1$, $L_z = 0$的态 Y_{10})。

8.5 考虑 $|lm\rangle$ 态矢量空间中 $l = 1$ 的子空间:

① 写出($\boldsymbol{L}^2, L_x$)表象中 L_x 的矩阵表示;

② 利用前题求得的($\boldsymbol{L}^2, L_x$)共同本征函数,写出联系($\boldsymbol{L}^2, L_x$)表象和($\boldsymbol{L}^2$, L_z)表象的幺正变换矩阵 S;

③ 利用幺正变换矩阵 S,求出($\boldsymbol{L}^2, L_z$)表象中 L_x 的表示式;

④ 求出($\boldsymbol{L}^2, L_z$)表象中 L_y 的表示式;

⑤ 求出($\boldsymbol{L}^2, L_y$)共同本征函数,表成 Y_{lm} 的线性迭加。

解: ① $l = 1$($L^2 = 2\ ^2$)时, $\boldsymbol{L}$ 的任一分量的本征值都是 ,0, - 。在($\boldsymbol{L}^2, L_x$)表象中 $\boldsymbol{L}_x$ 自身的矩阵应为对角矩阵:

$$L'_x = \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{matrix} \tag{1}$$

② 据题 8.4, $l = 1$ 时,($\boldsymbol{L}^2, L_x$)的本征函数为

$${}_{11} = \frac{1}{2}Y_{11} + \frac{1}{2}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1-1}, \quad (l_x = \quad)$$

$$_{10} = \frac{1}{2}(Y_{11} - Y_{1-1}), \quad (l_x = 0) \tag{2}$$

$$_{1-1} = \frac{1}{2}Y_{11} - \frac{1}{2}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1-1}, \quad (l_x = - \quad)$$

写成($\boldsymbol{L}^2$, L_z)表象中的态矢量,即

$$_{11} = \begin{pmatrix} 1/\ 2 \\ 1/\ 2 \\ 1/\ 2 \end{pmatrix}, \quad _{10} = \begin{pmatrix} 1/\ 2 \\ 0 \\ -1/\ 2 \end{pmatrix}, \quad _{1-1} = \begin{pmatrix} 1/\ 2 \\ -1/\ 2 \\ 1/\ 2 \end{pmatrix} \tag{3}$$

它们就是变换矩阵 S 的第 1,2,3 列:

$$S = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

显然, $S^+ = S$。易验证, $S^+ S = 1$。

③ ($\boldsymbol{L}^2$, L_z)表象中 L_x 的矩阵表示为

$$L_x = S L'_x S^+ = \frac{}{4}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} = \frac{}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

④ ($\boldsymbol{L}^2$, L_z)表象中 L_z 自身的矩阵表示显然是

$$L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

由于算符的对易式不随表象而变,利用对易式

$$L_z L_x - L_x L_z = \mathrm{i}\ L_y \tag{7}$$

及式(5)、(6),即得

$$L_y = \frac{1}{\mathrm{i}}(L_z L_x - L_x L_z) = \frac{}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

此即($\boldsymbol{L}^2$, L_z)表象中 L_y 的矩阵表示。

⑤ 设 $l = 1$ 时 L_y 的本征函数为

$$\psi = c_1 Y_{11} + c_0 Y_{10} + c_{-1} Y_{1-1} \tag{9a}$$

写成($\boldsymbol{L}^2$, L_z)表象中的态矢量,就是

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \\ c_{-1} \end{pmatrix} \tag{9b}$$

以 λ 表示 L_y 的本征值,则 L_y 的本征方程的矩阵形式为

$$L_y\psi = \frac{}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \\ c_{-1} \end{pmatrix} = \lambda\psi = \lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \\ c_{-1} \end{pmatrix} \tag{10}$$

本征值 λ 由下式决定:

$$\det|(L_y)_{mn} - \lambda\delta_{mn}| = 0 \tag{11a}$$

即

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -\frac{\mathrm{i}}{2} & 0 \\ \frac{\mathrm{i}}{2} & -\lambda & -\frac{\mathrm{i}}{2} \\ 0 & \frac{\mathrm{i}}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{11b}$$

解得 $\lambda = 1, 0, -1$(意料之中)。将本征值逐个代入本征方程(10),并利用归一化条件

$$\psi^{+}\psi = c_1^{*}c_1 + c_0^{*}c_0 + c_{-1}^{*}c_{-1} = 1 \tag{12}$$

即可得到各个本征矢量,结果为

$$\lambda = 1, \psi_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \mathrm{i}/2 \\ -1/2 \end{pmatrix};\quad \lambda = 0, \psi_0 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix};\quad \lambda = -1, \psi_{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -\mathrm{i}/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} \tag{13}$$

在(θ,φ)表象中写出来,就是

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{2}Y_{11} + \frac{\mathrm{i}}{2}Y_{10} - \frac{1}{2}Y_{1-1} \qquad (l_y = \quad) \\ \psi_0 &= \frac{1}{2}(Y_{11} + Y_{1-1}) \qquad (l_y = 0) \\ \psi_{-1} &= \frac{1}{2}Y_{11} - \frac{\mathrm{i}}{2}Y_{10} - \frac{1}{2}Y_{1-1} \qquad (l_y = -\quad) \end{aligned} \tag{14}$$

8.6 在$|lm\rangle$态矢量空间的 $l = 1$ 的子空间中,取 $= 1$,

① 证明 $L_x^3 = L_x$;

② 证明 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha L_x} = 1 + \mathrm{i}(\sin\alpha)L_x - (1 - \cos\alpha)L_x^2$($\alpha$为实数)。

证:① 在 $l = 1$ 子空间中,$\boldsymbol{L}^2 = 2$,$L_x = 1, 0, -1$。如以$|{}_{1m}\rangle$ $(m = 1, 0, -1)$表示

$(\boldsymbol{L}^2, L_x)$的共同本征态,有

$$\boldsymbol{L}^2|\psi_{1m}\rangle = 2|\psi_{1m}\rangle;\quad L_x|\psi_{1m}\rangle = m|\psi_{1m}\rangle,\quad m=1,0,-1$$

显然,对任何一个态矢量

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_{11}\rangle + c_0|\psi_{10}\rangle + c_{-1}|\psi_{1-1}\rangle$$

均有

$$(L_x-1)(L_x-0)(L_x+1)|\psi\rangle = 0 \tag{1a}$$

亦即

$$(L_x^3 - L_x)|\psi\rangle = 0 \tag{1b}$$

因$|\psi\rangle$是任意的,故有

$$L_x^3 - L_x = 0$$

即

$$L_x^3 = L_x \tag{2}$$

② 将 $e^{i\alpha L_x}$展开成 L_x 的幂级数

$$e^{i\alpha L_x} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\alpha)^n}{n!}L_x^n = 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(i\alpha)^n}{n!}L_x^n$$

$$= 1 + L_x\left(i\alpha + \frac{(i\alpha)^3}{3!}+\frac{(i\alpha)^5}{5!}+\cdots\right)\qquad \{L_x = L_x^3 = L_x^5=\cdots\}$$

$$+ L_x^2\left(\frac{(i\alpha)^2}{2!}+\frac{(i\alpha)^4}{4!}+\frac{(i\alpha)^6}{6!}+\cdots\right)\qquad\{L_x^2=L_x^4=L_x^6=\cdots\}$$

$$= 1 + iL_x\left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!}+\frac{\alpha^5}{5!}-\cdots\right) + L_x^2\left(-\frac{\alpha^2}{2!}+\frac{\alpha^4}{4!}-\frac{\alpha^6}{6!}+\cdots\right)$$

$$= 1 + i(\sin\alpha)L_x - (1-\cos\alpha)L_x^2 \tag{3}$$

由证明过程可知,上式中 L_x 可以换成 $\boldsymbol{L}$在任何方向 $\boldsymbol{n}$ 的投影 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{n}$,公式仍然成立。

8.7 ① 证明泡利矩阵 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 及 I(2×2 单位矩阵)构成 2×2 矩阵的完全集;

② 将任意 2×2 矩阵表示成 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 及 I 的线性迭加。

解:① 线性独立的 2×2 矩阵最多只有四个,因此只需证明 σ_x、σ_y、σ_z 及 I 是线性独立的。

设存在数 c_0, c_1, c_2, c_3,使

$$c_0 I + c_1\sigma_x + c_2\sigma_y + c_3\sigma_z = 0 \tag{1}$$

取式(1)之迹,因为

$$\mathrm{tr}\,\sigma = 0,\quad \mathrm{tr}\,I = 2 \tag{2}$$

故得

$$\mathrm{tr}(c_0 I) = 2c_0 = 0, \quad \text{即} \quad c_0 = 0$$

再以 σ_x 左乘式(1),**得到**

$$c_0\sigma_x + c_1 I + c_2 \mathrm{i}\sigma_z - c_3 \mathrm{i}\sigma_y = 0$$

再取其迹,即得

$$\mathrm{tr}(c_1 I) = 2c_1 = 0, \quad \text{即} \quad c_1 = 0$$

同样可证:

$$c_2 = 0, \quad c_3 = 0$$

因此使式(1)**成立的** c_0, c_1, c_2, c_3 **必须全为** 0,**亦即** $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ **及** I **互相线性独立,它们构成** 2×2**矩阵的完全集。**

② **任意给定** 2×2 **矩阵** M,**必定可以表成**(M**是矩阵,但** $m_0 — m_3$ **是常数**)

$$M = m_0 I + m_1\sigma_x + m_2\sigma_y + m_3\sigma_z \tag{3}$$

今求系数 $m_0 — m_3$。**取式**(3)**之迹,有**

$$\mathrm{tr}M = \mathrm{tr}(m_0 I) = 2m_0$$

所以

$$m_0 = \frac{1}{2}\mathrm{tr}M \tag{4}$$

以 σ_x 右乘式(3),**得**

$$M\sigma_x = m_0\sigma_x + m_1 I - \mathrm{i}m_2\sigma_z + \mathrm{i}m_3\sigma_y$$

再取其迹,即可求出

$$m_1 = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(M\sigma_x) \tag{5}$$

同理可得

$$m_2 = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(M\sigma_y)$$
$$m_3 = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(M\sigma_z) \tag{6}$$

因此式(3)**具体化为**

$$M = \frac{1}{2}\{(\mathrm{tr}M)I + [\mathrm{tr}(M\boldsymbol{\sigma})]\cdot\boldsymbol{\sigma}\} \tag{7a}$$

$$= \frac{1}{2}\{(\mathrm{tr}M)I + [\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma}M)]\cdot\boldsymbol{\sigma}\} \tag{7b}$$

8.8 讨论下列算符是否存在。如存在,将其表成 $I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的线性迭加:

① $(1+\sigma_x)^{1/2}$;　② $(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}$;　③ $(1+\sigma_x)^{-1}$。

解:① $(1+\sigma_x)^{1/2}$。σ_x **的本征值为**±1。**对每一个本征值**,$(1+\sigma_x)^{1/2}$ **都给出明确的值**(**规定取正根**)。**因此可判断**,$(1+\sigma_x)^{1/2}$ **存在,且是 σ_x 的函数。可令**

$$(1+\sigma_x)^{1/2} = c_0 + c_1\sigma_x \tag{1}$$

两边平方,得

$$1+\sigma_x = c_0^2 + c_1^2 + 2c_0c_1\sigma_x$$

比较系数,得

$$c_0^2 + c_1^2 = 1,\quad 2c_0c_1 = 1$$

两边相加、相减,得

$$(c_0+c_1)^2 = 2,\quad (c_0-c_1)^2 = 0$$

解出(如规定(c_0+c_1)取正值)

$$c_0 = c_1 = 1/\sqrt{2}$$

代入式(1),即得

$$(1+\sigma_x)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\sigma_x) \tag{2}$$

容易验证,对于σ_x的任何一个本征值(±1),上式确实成立。

② 试令

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2} = c_0 I + c_1\sigma_x + c_2\sigma_y + c_3\sigma_z \tag{3}$$

两边取平方,得到(用到$[\sigma_i,\sigma_j]_+ = 0$)

$$1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y = c_0^2 + c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + 2c_0(c_1\sigma_x + c_2\sigma_y + c_3\sigma_z)$$

因此

$$\begin{aligned} &c_3 = 0 \\ &c_0^2 + c_1^2 + c_2^2 = 1 \\ &2c_0c_1 = 1 \\ &2c_0c_2 = \mathrm{i} \end{aligned} \tag{4}$$

从后两式中解出$c_1 = 1/2c_0$,$c_2 = \mathrm{i}/2c_0$。代入式(4)可解得$c_0^2 = 1$。如规定c_0取正值,即得

$$c_0 = 1,\quad c_1 = \frac{1}{2},\quad c_2 = \frac{\mathrm{i}}{2},\quad c_3 = 0$$

代入式(3)即得

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y) \tag{5}$$

③ $(1+\sigma_x)^{-1}$不存在,因为当σ_x取本征值-1时,$(1+\sigma_x)^{-1}\to\infty$。为证实这个判断,不妨先试令

$$(1+\sigma_x)^{-1} = c_0 + c_1\sigma_x + c_2\sigma_y + c_3\sigma_z$$

以$(1+\sigma_x)$左乘和右乘上式,再相加,可得

$$1 = c_0 + c_1 + (c_0+c_1)\sigma_x + c_2\sigma_y + c_3\sigma_z$$

因此

$$c_2 = 0,\quad c_3 = 0,\quad c_0 + c_1 = 1,\quad c_0 + c_1 = 0$$

后面两式矛盾,无解,表明$(1+\sigma_x)^{-1}$确实不存在。

8.9 设 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ 是与 σ 对易的任何矢量算符, 证明:

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{1}$$

证: $(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})=(\sigma_x A_x+\sigma_y A_y+\sigma_z A_z)(\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z)$

$$=(\sigma_x^2 A_x B_x+\sigma_y^2 A_y B_y+\sigma_z^2 A_z B_z)+(\sigma_x\sigma_y A_x B_y+\sigma_y\sigma_x A_y B_x)$$

$$+(y,z\text{ 分量项})+(z,x\text{ 分量项})$$

利用

$$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1$$

$$\sigma_x\sigma_y=\mathrm{i}\sigma_z=-\sigma_y\sigma_x\text{, 等等}$$

即得

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\sigma_z(A_x B_y-A_y B_x)+\cdots$$

$$=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\sigma_z(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_z+\cdots$$

$$=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

证毕。由证明过程可知, 只要 $\boldsymbol{A}$ 和 σ 对易, $\boldsymbol{B}$ 和 σ 对易, 式(1)就可以成立, $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ 之间, 即使互不对易也无妨。

几个重要特例

如 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$, 且 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=0$, 则式(1)简化成

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{A})^2=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^2 \tag{2}$$

例如, $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{n}$(单位矢量, $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}=0$), 即得

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{n})^2=\sigma_n^2=\boldsymbol{n}^2=1 \tag{3}$$

又如, 取 $\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{r}$ 或 $\boldsymbol{p}$, 即得

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{r})^2=\boldsymbol{r}^2 \tag{4}$$

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{p})^2=\boldsymbol{p}^2 \tag{5}$$

式(1)中, 如取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$, 利用 $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}=\mathrm{i}\boldsymbol{L}$(取 $\hbar=1$), 即得

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{L})^2=\boldsymbol{L}^2-\sigma\cdot\boldsymbol{L} \tag{6}$$

8.10 设 $\boldsymbol{A}$ 与 σ 对易, 证明

$$\sigma(\sigma\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\sigma\cdot\boldsymbol{A})\sigma=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\sigma$$

证: 引入任意常数矢量 $\boldsymbol{B}$, 并利用公式

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{1a}$$

即得

$$[\boldsymbol{A}-(\sigma\cdot\boldsymbol{A})\sigma]\cdot\boldsymbol{B}=-\mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})=-\mathrm{i}(\sigma\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{B}$$

因为 $\boldsymbol{B}$ 任意, 故有

$$\boldsymbol{A}-(\sigma\cdot\boldsymbol{A})\sigma=-\mathrm{i}\sigma\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\sigma \tag{2}$$

同理,

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{B})(\sigma\cdot\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A} + \mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A}) \tag{1b}$$

可得

$$[\sigma(\sigma\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B} = \mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A}) = -\mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) = -\mathrm{i}(\sigma\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{B}$$

因为 $\boldsymbol{B}$ 任意,故得

$$\sigma(\sigma\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A} = -\mathrm{i}\sigma\times\boldsymbol{A} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\sigma \tag{3}$$

式(3) - 式(2),得

$$\sigma(\sigma\cdot\boldsymbol{A}) + (\sigma\cdot\boldsymbol{A})\sigma = 2\boldsymbol{A} \tag{4}$$

式(3) + 式(2),得

$$[\sigma, \sigma\cdot\boldsymbol{A}] = \sigma(\sigma\cdot\boldsymbol{A}) - (\sigma\cdot\boldsymbol{A})\sigma = 2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\sigma \tag{5}$$

8.11 计算 $\mathrm{tr}(\sigma\cdot\boldsymbol{A})$, $\mathrm{tr}[(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})]$ 以及 $\mathrm{tr}[(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})(\sigma\cdot\boldsymbol{C})]$,其中 σ 为泡利矩阵,$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}$ 为与 σ 对易的算符或常数。

解:

$$\sigma\cdot\boldsymbol{A} = \sigma_x A_x + \sigma_y A_y + \sigma_z A_z$$

由于

$$\mathrm{tr}\sigma_x = \mathrm{tr}\sigma_y = \mathrm{tr}\sigma_z = 0,\quad \mathrm{tr}\, I = 2 \tag{1}$$

显然有

$$\mathrm{tr}(\sigma\cdot\boldsymbol{A}) = 0 \tag{2}$$

因为

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{3}$$

利用式(2),即得

$$\mathrm{tr}[(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})] = 2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} \quad [\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})I,\quad \mathrm{tr}\, I = 2] \tag{4}$$

利用式(3),得

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})(\sigma\cdot\boldsymbol{C}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})(\sigma\cdot\boldsymbol{C}) + \mathrm{i}[\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})](\sigma\cdot\boldsymbol{C})$$

上式求迹,右边第一项是 σ 的线性项,迹为 0,因此

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}[(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})(\sigma\cdot\boldsymbol{C})] &= \mathrm{i}\,\mathrm{tr}\{[\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})](\sigma\cdot\boldsymbol{C})\}\\ &= 2\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot \mathrm{C} = 2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})\end{aligned} \tag{5}$$

在以上求迹过程中,由于已经假定 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}$ 与 σ 对易,所以 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}$ 的任何组合均可当作常数矩阵处理,但其次序不能随意调换。

所谓常数矩阵,如常数矩阵 k:

$$k\boldsymbol{I} = \begin{matrix} k & 0 & 0 & 0\\ 0 & k & 0 & 0\\ 0 & 0 & \mathrm{W} & 0\\ 0 & 0 & 0 & k\end{matrix}$$

▲矩阵的迹:矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的对角元素之和称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的迹,以 $\mathrm{tr}\boldsymbol{A}$ 表示:

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{A} = \sum_n A_{nn}$$

有

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{AB}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{BA})$$

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{AB}\cdots\boldsymbol{CDE}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{EAB}\cdots\boldsymbol{CD}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{DEAB}\cdots\boldsymbol{C}) = \cdots$$

即:在 tr 符号下的几个矩阵的乘积中,矩阵顺序可轮换。

8.12 设 λ为常数,证明

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda \tag{1}$$

证 1:将 $e^{i\lambda\sigma_z}$ 展开:

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(i\lambda\sigma_z)^n = \left(\sum_{n偶} + \sum_{n奇}\right)\frac{1}{n!}(i\lambda)^n\sigma_z^n \tag{2}$$

由于 $\sigma_z^2 = 1$,所以

$$n 为偶,\ \sigma_z^n = 1; \quad n 为奇,\ \sigma_z^n = \sigma_z$$

代入式(2),即得

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \sum_{n偶}\frac{(i\lambda)^n}{n!} + \sigma_z\sum_{n奇}\frac{(i\lambda)^n}{n!}$$

其中

$$\sum_{n偶}\frac{(i\lambda)^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(i\lambda)^{2k}}{(2k)!} = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k}}{(2k)!} = \cos\lambda$$

$$\sum_{n奇}\frac{(i\lambda)^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(i\lambda)^{2k+1}}{(2k+1)!} = i\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k+1}}{(2k+1)!} = i\sin\lambda$$

故得

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda$$

证 2:由于 $\sigma_z^2 = 1$,σ_z 的任何正幂级数必定可以简化成$(a + b\sigma_z)$的形式。因此可令

$$e^{i\lambda\sigma_z} = a + b\sigma_z \tag{3}$$

a, b为待定常数。将上式作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{\pm 1/2}$,得到

$$对于\ \chi_{1/2},\quad \sigma_z = 1,\quad e^{i\lambda} = a + b$$

$$对于\ \chi_{-1/2},\quad \sigma_z = -1,\quad e^{-i\lambda} = a - b$$

易解出

$$a = \cos\lambda,\quad b = i\sin\lambda \tag{4}$$

代入式(3),即得式(1)。

证 3:$e^{i\lambda\sigma_z}$是 σ_z 的函数,σ_z 的本征值为± 1,故 $e^{i\lambda\sigma_z}$ 的本征值为 $e^{\pm i\lambda}$。因此在 σ_z 表象中 $e^{i\lambda\sigma_z}$的矩阵表示为

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{i\lambda} & 0 \\ 0 & e^{-i\lambda}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\lambda + i\sin\lambda & 0 \\ 0 & \cos\lambda - i\sin\lambda\end{pmatrix} \tag{5}$$

$$= \cos\lambda\cdot \boldsymbol{I} + i\sin\lambda\cdot\sigma_z = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda$$

算符间的关系式与表象的选择无关,故上式可以脱离 σ_z 表象而普遍成立。

讨论:在以上证明过程中,主要利用了 σ_z 的本征值以及 $\sigma_z^2=1$。如将 σ_z 换成 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_n$,由于 σ_n 的本征值也为 ±1,$\sigma_n^2=1$,因此显然可证明

$$e^{i\lambda\sigma_n}=\cos\lambda+i\sigma_n\sin\lambda \tag{6}$$

8.13 化简 $e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha e^{-i\lambda\sigma_z}$,$\alpha=x,y;\lambda$为常数。

解法 1:已证明

$$e^{i\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda \tag{1}$$

可得

$$\begin{aligned}e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}&=(\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda)\sigma_x(\cos\lambda-i\sigma_z\sin\lambda)\\&=\cos^2\lambda\cdot\sigma_x+i\sin\lambda\cos\lambda(\sigma_z\sigma_x-\sigma_x\sigma_z)+\sin^2\lambda\cdot(\sigma_z\sigma_x\sigma_z)\\&=\cos^2\lambda\cdot\sigma_x+i\sin\lambda\cos\lambda\cdot(2i\sigma_y)+\sin^2\lambda\cdot(-\sigma_x\sigma_z^2)\\&=\sigma_x(\cos^2\lambda-\sin^2\lambda)-2\sigma_y\sin\lambda\cos\lambda\\&=\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda\end{aligned} \tag{2}$$

类似可得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\sin2\lambda+\sigma_y\cos2\lambda \tag{3}$$

解法 2:令

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=a_0I+a_1\sigma_x+a_2\sigma_y+a_3\sigma_z \tag{4}$$

作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{\pm1/2}$,利用

$$\sigma_z\chi_{\pm1/2}=\pm\chi_{\pm1/2},\quad \sigma_x\chi_{\pm1/2}=\chi_{\mp1/2},\quad \sigma_y\chi_{\pm1/2}=\pm i\chi_{\mp1/2} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}\text{式(4)左端}\cdot\chi_{1/2}&=e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda}\cdot\chi_{1/2}=e^{i\lambda\sigma_z}\chi_{-1/2}e^{-i\lambda}\\&=e^{-i\lambda}\chi_{-1/2}e^{-i\lambda}=e^{-2i\lambda}\chi_{-1/2}\end{aligned} \tag{6}$$

$$\text{式(4)右端}\cdot\chi_{1/2}=(a_0+a_3)\chi_{1/2}+(a_1+ia_2)\chi_{-1/2} \tag{7}$$

比较式(6)、式(7),得

$$a_0+a_3=0,\quad a_1+ia_2=e^{-2i\lambda} \tag{8}$$

将式(4)作用于 $\chi_{-1/2}$,类似可得

$$e^{2i\lambda}\chi_{1/2}=(a_1-ia_2)\chi_{1/2}+(a_0-a_3)\chi_{-1/2}$$

比较两边系数,可得

$$a_0-a_3=0,\quad a_1-ia_2=e^{2i\lambda} \tag{9}$$

由式(8)、式(9)可解出:

$$a_0=a_3=0,\quad a_1=\cos2\lambda,\quad a_2=-\sin2\lambda$$

代入式(4),即得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda$$

类似可证明式(3)。

例:验证 $e^{i\frac{\pi}{\hbar}s_z}s_x e^{-i\frac{\pi}{\hbar}s_z}=-s_x$

8 .14 **有一个定域电子,受到沿 x 方向均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 的作用**, Hamilton **量(不考虑轨道运动)表为**

$$H = \frac{e\ B}{2\mu c}\sigma_x = \ \omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{eB}{\mu c}s_x,\quad \omega = \frac{eB}{2\mu c} \tag{1a}$$

设 $t = 0$ **时,电子自旋"向上"**($s_z = \ / 2$),**求** $t > 0$ **时** $\boldsymbol{s}$ **的平均值。**

解法 1: **先由** S .eq **解出自旋波函数** $\chi(t)$, **再计算** $\boldsymbol{s}$ **的平均值。在** s_z **表象中**,

$$H = \frac{e\ \ B}{2\mu c}\sigma_x = \ \omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \omega = \frac{eB}{2\mu c} \tag{1b}$$

令

$$\chi(t) = a(t)\chi_{1/2} + b(t)\chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{2}$$

满足

$$\mathrm{i}\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t) = H\chi(t) \tag{3}$$

初始条件

$$\chi(0) = \chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

即

$$a(0) = 1,\quad b(0) = 0 \tag{4}$$

将式(1b)**及式**(2)**代入式**(3),**得**

$$\mathrm{i}\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \ \omega \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} \tag{5a}$$

相当于方程组

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} &= -\mathrm{i}\omega b \\ \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} &= -\mathrm{i}\omega a \end{aligned} \tag{5b}$$

两式相加、减,分别得

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(a + b) &= -\mathrm{i}\omega(a + b) \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(a - b) &= \mathrm{i}\omega(a - b) \end{aligned} \tag{6}$$

解为

$$\begin{aligned} a(t) + b(t) &= [a(0) + b(0)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ a(t) - b(t) &= [a(0) - b(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \end{aligned} \tag{7}$$

由式(7)**易得**

$$a(t) = \cos\omega t,\quad b(t) = -\mathrm{i}\sin\omega t \tag{8}$$

代入式(2),**得**

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ -\mathrm{i}\sin\omega t \end{pmatrix} \tag{9a}$$

$$\chi^{+}(t) = (\cos\omega t \quad i\sin\omega t) \tag{9b}$$

$$\begin{aligned} \langle s_x \rangle &= \frac{\ }{2}\chi^{+}\sigma_x\chi = \cdots = 0 \\ \langle s_y \rangle &= \frac{\ }{2}\chi^{+}\sigma_y\chi = \cdots = -\frac{\ }{2}\sin 2\omega t \\ \langle s_z \rangle &= \frac{\ }{2}\chi^{+}\sigma_z\chi = \cdots = \frac{\ }{2}\cos 2\omega t \end{aligned} \tag{10}$$

解法 2: **直接求解海森伯运动方程**

$$\frac{d\boldsymbol{s}}{dt} = \frac{1}{i}[\boldsymbol{s}, H] \tag{11}$$

容易得到

$$\begin{aligned} \frac{ds_x}{dt} &= \frac{1}{i}[s_x, H] = 0 \\ \frac{ds_y}{dt} &= \frac{1}{i}[s_y, H] = \frac{1}{i}\left[s_y, \frac{eB}{\mu c}s_x\right] = -2\omega s_z \\ \frac{ds_z}{dt} &= \frac{1}{i}[s_z, H] = \frac{1}{i}\left[s_z, \frac{eB}{\mu c}s_x\right] = 2\omega s_y \end{aligned} \tag{12}$$

求平均值,**得**

$$\frac{d}{dt}\langle s_x \rangle = 0 \tag{13a}$$

$$\frac{d}{dt}\langle s_y \rangle = -2\omega\langle s_z \rangle \tag{13b}$$

$$\frac{d}{dt}\langle s_z \rangle = 2\omega\langle s_y \rangle \tag{13c}$$

初始条件为

$$\langle s_x \rangle_{t=0} = \langle s_y \rangle_{t=0} = 0, \quad \langle s_z \rangle_{t=0} = \frac{\ }{2} \tag{14}$$

解式(13a)**给出**

$$\langle s_x \rangle_t = \langle s_x \rangle_{t=0} = 0 \tag{15}$$

注意, s_x **为守恒量**,**由于** $t=0$ **时其平均值为** 0, **所以** $\langle s_x \rangle_t = 0$。

式(13c) + i(13b) ,**得**

$$\frac{d}{dt}\langle s_z + is_y \rangle = -2i\omega\langle s_z + is_y \rangle$$

其解为

$$\langle s_z + is_y \rangle_t = \langle s_z + is_y \rangle_{t=0} e^{-2i\omega t} = \frac{\ }{2}e^{-2i\omega t} \tag{16}$$

$\langle \boldsymbol{s} \rangle$ **应为实数。上式分别取实部、虚部**,**即得**

$$
\begin{aligned}
\langle s_x \rangle_t &= \frac{}{2}\cos 2\omega t \\
\langle s_y \rangle_t &= -\frac{}{2}\sin 2\omega t
\end{aligned}
\tag{17}
$$

两种解法所得结果一样。

8.15 **设粒子自旋为 1,荷电 $-e$,处在沿 z 轴,大小为 B 的均匀磁场中,即 $\boldsymbol{B}=(0,0,B)$。体系的哈密顿算符为**

$$H=-\mu\cdot\boldsymbol{B}=\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}$$

式中 $\boldsymbol{s}$ 的矩阵为

$$s_x=\frac{}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad s_y=\frac{}{2}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad s_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

设在 $t=0$ 时刻,自旋沿 x 轴投影为 (即处在初态 $s_x=$ 的本征态)。

① **求任意时刻($t>0$)系统的自旋波函数;**

② **求 $\langle \boldsymbol{s}\rangle$ 随时间的变化。**

解: ① 设在 s_z 表象,初态

$$\psi(0)=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$$

由题设

$$s_x\psi(0)=\psi(0)$$

即

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

可求出 $a=c=b/\ 2$。再由归一化条件可求得 $b=1/\ 2$。故

$$\psi(0)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\2\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\xi_1(0)\\\xi_2(0)\\\xi_3(0)\end{pmatrix}$$

$$H=\frac{eB}{mc}s_z=\omega\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad \omega=\frac{eB}{mc}$$

代入 S.eq:

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}\xi_1\\\xi_2\\\xi_3\end{pmatrix}=\omega\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_1\\\xi_2\\\xi_3\end{pmatrix}$$

代入初条件后,可得出

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-i\omega t} \\ 1/\sqrt{2} \\ \frac{1}{2}e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

② 由上述结果可求得

$$\langle s_x \rangle = \psi^{+}(t)\, s_x \psi(t) = \frac{\quad}{4\sqrt{2}}\left(e^{i\omega t} \quad \sqrt{2} \quad e^{-i\omega t}\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ \sqrt{2} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} = \cos\omega t$$

同理可求:

$$\langle s_y \rangle = \sin\omega t, \quad \langle s_z \rangle = 0$$

8.16　**以 $\boldsymbol{s}, \boldsymbol{L}, \boldsymbol{J}$ 表示电子的自旋、轨道角动量及总角动量,取 $=1$, $\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{J}^2$ 可以表示成**

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{s} + \boldsymbol{L} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{L} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{s}^2 + \boldsymbol{L}^2 + 2\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L} = \frac{3}{4} + \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} \tag{2}$$

① 计算 $[\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$, $[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$, $[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$, $[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{L}^2]$;

② 求 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})$ 和 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值。

解:① $\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$,它和 $\boldsymbol{L}$ 属于不同自由度,因此可对易。根据题 8.10 式(5)的结果:

$$[\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}] = 2i\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{\sigma} = -2i\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{L} \tag{3}$$

利用

$$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} = i\boldsymbol{L} \quad (\text{取} \; = 1) \tag{4}$$

可求出

$$[L_x, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}] = \sigma_y[L_x, L_y] + \sigma_z[L_x, L_z] = i(\sigma_y L_z - \sigma_z L_y) = i(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{L})_x$$

因此

$$[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}] = i(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{L}) \tag{5}$$

由式(3)及式(5)立即得到

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}] = [\boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}] + \frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}] = 0 \tag{6}$$

另外,

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{L}^2] = [\boldsymbol{L}, \boldsymbol{L}^2] + [\boldsymbol{s}, \boldsymbol{L}^2] = 0 \tag{7}$$

$$[\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}] = \boldsymbol{\sigma}\cdot[\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{L}] + [\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{\sigma}]\cdot\boldsymbol{L} = 0 \tag{8}$$

因此,$\boldsymbol{J}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}, \boldsymbol{L}^2$ 互相对易。由式(2)可知,$\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}, \boldsymbol{L}^2$ 互相对易。通常选取$(\boldsymbol{J}^2, J_z, \boldsymbol{L}^2)$作为力学量完全集。

② 利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{9}$$

并取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{L}$,即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})=\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}\quad(\;=1) \tag{10}$$

对于 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{L}^2$ 的共同本征态,有

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}^2=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-l(l+1)=0$$

即

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-l)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+l+1)=0 \tag{11}$$

因此,$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 的本征值为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=\begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases} \tag{12}$$

将 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 及 $\boldsymbol{L}^2$ 的本征值代入式(2),即得 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值

$$\boldsymbol{J}^2=j(j+1),\quad j=l\pm\frac{1}{2}$$

$$\text{当}\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=l, & j=l+\dfrac{1}{2} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=-(l+1), & j=l-\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

注意,$l=0$ 时,$\boldsymbol{L}^2=0$,因此 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=0$,$j=1/2$;而 $j=l-1/2$ 的情形只能出现于 $l\neq0$ 的情况。

8.17 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系,以 $\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 分别表示粒子 1 和 2 的自旋角动量及泡利算符,

$$\boldsymbol{s}_1=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1,\quad \boldsymbol{s}_2=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2\quad(\text{取}\;=1)$$

试求 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 满足的最简代数方程,并用以确定 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的本征值,进而再确定总自旋 $\boldsymbol{s}^2$ 的本征值。

解:利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{1}$$

令

$$\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}_1,\quad \boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\sigma}_2$$

代入式(1),得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{2}$$

由于

$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=3,\quad \boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{3}$$

式(3)代入(2),即得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2+2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)-3=(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2-1)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+3)=0 \tag{4}$$

式(4)即所求的最简代数方程。因此 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的本征值为

$$\sigma_1 \cdot \sigma_2 = \begin{matrix} 1 \\ -3 \end{matrix} \tag{5}$$

总自旋为

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \tag{6}$$

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{1}{4}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 2\sigma_1 \cdot \sigma_2) = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\sigma_1 \cdot \sigma_2 \tag{7}$$

$\boldsymbol{s}^2$ 的本征值为

$$\begin{aligned} &\sigma_1 \cdot \sigma_2 = 1 \qquad \boldsymbol{S}^2 = 2 = S(S+1), \quad S = 1, \quad \text{三重态} \\ &\sigma_1 \cdot \sigma_2 = -3, \quad \boldsymbol{S}^2 = 0 = S(S+1), \quad S = 0, \text{单　态} \end{aligned} \tag{8}$$

如将 $\sigma_1 \cdot \sigma_2$ 作用于($\boldsymbol{S}^2$, s_z)的共同本征态 χ_{SM_S},显然有下列结果(根据式(7)):

$$\begin{aligned} &S = 1(\text{三重态}), \sigma_1 \cdot \sigma_2 \chi_{1M_S} = \chi_{1M_S}, \ M_S = 1, 0, -1 \\ &S = 0(\text{单　态}), \sigma_1 \cdot \sigma_2 \chi_{00} = -3\chi_{00} \end{aligned} \tag{9}$$

8.18　**设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符**, $J_\pm = J_x \pm \mathrm{i} J_y$, **取　= 1,证明**

①
$$J_z^n J_\pm = J_\pm (J_z \pm 1)^n, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{1}$$

②
$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z} &= J_x \cos\lambda - J_y \sin\lambda \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_y \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z} &= J_x \sin\lambda + J_y \cos\lambda \end{aligned} \tag{2}$$

证:① 由
$$\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{J}$$

知
$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \tag{3a}$$

即
$$J_z J_\pm = J_\pm (J_z \pm 1) \tag{3b}$$

$$J_z^2 J_\pm = J_z J_\pm (J_z \pm 1) = J_\pm (J_z \pm 1)^2$$

反复利用式(3b),得

$$J_z^n J_\pm = J_\pm (J_z \pm 1)^n, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{4}$$

因此,对于任何可以表示成 J_z 正幂级数的函数(算符) $f(J_z)$,有

$$f(J_z) J_\pm = J_\pm f(J_z \pm 1) \tag{5}$$

例如:
$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_\pm = J_\pm \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\lambda} \quad (\lambda \text{为常数}) \tag{6}$$

② 以 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}$ 右乘式(6),得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_+ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z} = J_+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} \tag{7a}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z} = J_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \tag{7b}$$

二式相加、减,利用

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-), \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \tag{8}$$

即得

$$\begin{aligned}
e^{i\lambda J_z} J_x e^{-i\lambda J_z} &= \frac{1}{2}(J_+ e^{i\lambda} + J_- e^{-i\lambda}) \\
&= \frac{1}{2}[J_+(\cos\lambda + i\sin\lambda) + J_-(\cos\lambda - i\sin\lambda)] \\
&= J_x\cos\lambda - J_y\sin\lambda \\
e^{i\lambda J_z} J_y e^{-i\lambda J_z} &= \frac{1}{2i}(J_+ e^{i\lambda} - J_- e^{-i\lambda}) \\
&= \frac{1}{2i}[J_+(\cos\lambda + i\sin\lambda) - J_-(\cos\lambda - i\sin\lambda)] \\
&= J_x\sin\lambda + J_y\cos\lambda
\end{aligned}$$

此即式(2)。

证明式(7)也可用参数微分法,即设

$$f(\lambda) = e^{i\lambda J_z} J_+ e^{-i\lambda J_z}$$

注意到 $f(0) = J_+$,上式对 λ 求导,得

$$\frac{d}{d\lambda} f(\lambda) = i e^{i\lambda J_z}[J_z, J_+] e^{-i\lambda J_z} = i e^{i\lambda J_z} J_+ e^{-i\lambda J_z} = i f(\lambda)$$

其解为

$$f(\lambda) = f(0) e^{i\lambda} = J_+ e^{i\lambda}$$

此即式(7a)。仿此,令

$$f(\lambda) = e^{i\lambda J_z} J_- e^{-i\lambda J_z},\text{可证式(7b)}$$

式(2)中 x、y、z 轮换,还可得以下各式:

$$\begin{aligned}
e^{i\lambda J_x} J_y e^{-i\lambda J_x} &= J_y\cos\lambda - J_z\sin\lambda \\
e^{i\lambda J_x} J_z e^{-i\lambda J_x} &= J_y\sin\lambda + J_z\cos\lambda
\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
e^{i\lambda J_y} J_z e^{-i\lambda J_y} &= J_z\cos\lambda - J_x\sin\lambda \\
e^{i\lambda J_y} J_x e^{-i\lambda J_y} &= J_z\sin\lambda + J_x\cos\lambda
\end{aligned} \tag{10}$$

式(2)、式(9)、式(10)在有关转动变换问题中经常用到。

*8.19 自旋 1/2 粒子,处于($\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_z)的共同本征态 $|ljm_j\rangle$,证明

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \langle\boldsymbol{J}\rangle \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{j(j+1)} \quad (\text{取 } \hbar = 1)$$

证:利用题 8.10 的式(4),令 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}$,得

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{L} \tag{1}$$

上式在 $|ljm_j\rangle$ 态下求平均值,由于 $|ljm_j\rangle$ 也是 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})$ 的本征态,故有

$$\langle ljm_j|\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})|ljm_j\rangle=\langle ljm_j|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{\sigma}|ljm_j\rangle=\langle ljm_j|\boldsymbol{\sigma}|ljm_j\rangle(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})_{\text{本征值}}\tag{2}$$

结合式(1),可得

$$\langle\boldsymbol{L}\rangle=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}\rangle_{\text{本征值}}\tag{3}$$

$$\langle\boldsymbol{J}\rangle=\left\langle\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right\rangle=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\right)_{\text{本征值}}\tag{4}$$

利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})-\boldsymbol{L}^2=0\tag{5}$$

可得

$$\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3}{4}\tag{6a}$$

$$=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+2(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})+\frac{3}{4}=\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3}{2}\right)\tag{6b}$$

因此,式(4)两端各乘 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+3/2)_{\text{本征值}}$,即得

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle(\boldsymbol{J}^2)_{\text{本征值}}=\langle\boldsymbol{J}\rangle\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3}{2}\right)_{\text{本征值}}=\langle\boldsymbol{J}\rangle\left(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2+\frac{3}{4}\right)_{\text{本征值}}$$

亦即

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\langle\boldsymbol{J}\rangle\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{j(j+1)}\tag{7}$$

在 $|ljm_j\rangle$ 态下,$\langle J_x\rangle=\langle J_y\rangle=0$,$\langle J_z\rangle=m_j$。故上式即

$$\langle\sigma_x\rangle=0,\ \langle\sigma_y\rangle=0\tag{7a}$$

$$\langle\sigma_z\rangle=m_j\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{j(j+1)}\tag{7b}$$

以 $l=j\pm\frac{1}{2}$ 代入上式,可得

$$\langle\sigma_z\rangle=\begin{cases}m_j/j, & j=l+\dfrac{1}{2}\\[2ex] -m_j/(j+1), & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}\tag{8}$$

利用 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{J}-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$,易得 $\boldsymbol{L}$ 在 $|ljm_j\rangle$ 态下的平均值为

$$\begin{aligned}\langle L_x\rangle&=0\\\langle L_y\rangle&=0\end{aligned}\tag{9a}$$

$$\langle L_z \rangle = \langle J_z \rangle - \frac{1}{2}\langle \sigma_z \rangle = m_j \frac{j(j+1)+l(l+1)-3/4}{2j(j+1)} \tag{9b}$$

*8.20 **电子的磁矩(算符)为**

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e c}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{s}) \tag{1}$$

试对 $|ljm_j\rangle$ 态计算 μ_z 平均值。

解: 如以玻尔磁子 $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ 作为磁矩单位,则 $\boldsymbol{\mu}$ 可写为(取 $\hbar=1$)

$$\boldsymbol{\mu} = -(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{s}) = -(\boldsymbol{J}+\boldsymbol{s}) = -\left(\boldsymbol{J} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right) \tag{2}$$

利用上题结果,即得

$$\langle ljm_j | \mu_z | ljm_j \rangle = -g m_j \tag{3}$$

其中

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \quad (\text{Lande } g \text{ 因子}) \tag{4}$$

通常以 m_j 取最大值($m_j = j$)时 μ_z 的平均值作为磁矩观测值的定义,记作 μ。对于电子,

$$\mu = \langle ljj | \mu_z | ljj \rangle = -gj \tag{5}$$

即

$$\mu = \begin{cases} -\left(j + \dfrac{1}{2}\right), & j = l + \dfrac{1}{2} \\ -\dfrac{j(2j+1)}{2j+2}, & j = l - \dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{6}$$

CHAPTER 9

9 估算法　测不准关系

【内容提要】

若算符 A, B 对易,即$[A, B]=0$,则 A 和 B 有共同的本征函数系。在 A 和 B 的共同的本征函数系中测量 A, B,有确定值。

若算符 A, B 不对易,即$[A, B]\neq 0$,则必有

$$\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta B)^2}\geq\frac{1}{2}\left|\overline{[A, B]}\right|$$

简记为

$$\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{1}{2}\left|\overline{[A, B]}\right|$$

特别地,

$$\Delta x\Delta P_x\geq\ /\ 2$$

另外有

$$\Delta E\Delta t\geq\ /\ 2$$

实用上取

$$\Delta x\Delta p\sim\quad,\quad\Delta E\Delta\tau\sim$$

【典型习题解答】

9.1　粒子在宽为 a 的无限深方势阱中运动,估算其基态能量。

解:

$$\Delta x = d\ 2$$

由不确定关系,知

$$\Delta p\geq\ /\ a$$

由于在束缚态中,$\overline{p}=0$,故得能量

$$E=\frac{1}{2m}\overline{p^2}=\frac{1}{2m}(\overline{p^2}-\overline{p}^2)=\frac{1}{2m}(\Delta p)^2\geq\frac{^2}{2ma^2}$$

即基态能量估计有下限:$\dfrac{^2}{2ma^2}$

9.2 估算一维谐振子的基态能量。

解法 1: **一维谐振子**, $H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

由于 H **对称,又只存在束缚态,故知** $\overline{x}=0,\ \overline{p}=0$, **于是利用不确定关系**

$$E=\overline{H}=\frac{1}{2m}\overline{p^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}=\frac{1}{2m}\overline{(\Delta p)^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{(\Delta x)^2}$$

$$\geq 2\quad\frac{1}{2m}\overline{(\Delta p)^2}\cdot\frac{1}{2}m\omega^2\overline{(\Delta x)^2}=\omega\quad\overline{(\Delta p)^2}\cdot\overline{(\Delta x)^2}=\omega\Delta p\cdot\Delta x\geq\frac{1}{2}\quad\omega$$

于是估计谐振子的基态能量为 $\frac{1}{2}\quad\omega$。**在中间运算中用了基本的代数不等式**: $a^2+b^2\geq 2|ab|$。

解法 2: **由递推公式**:

$$x|n\rangle=\frac{1}{2\alpha}[\quad n|n-1\rangle+\quad n+1|n+1\rangle]$$

$$x^2|n\rangle=\frac{1}{2\alpha^2}[\quad n(n-1)|n-2\rangle+(2n+1)|n\rangle+\quad(n+1)(n+2)|n+2\rangle]$$

可得 $x|0\rangle=\frac{1}{2\alpha}|1\rangle,\quad x^2|0\rangle=\frac{1}{2\alpha^2}(|0\rangle+\quad 2|2\rangle)$

由 $|n\rangle$ **的正交归一性可知,对基态,**

$$\overline{x}=0,\quad\overline{x^2}=\frac{1}{2\alpha^2}$$

又由导数的递推关系:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}|n\rangle=\frac{\alpha}{2}[\quad n|n-1\rangle-\quad n+1|n+1\rangle]$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}|n\rangle=\frac{\alpha^2}{2}[\quad n(n-1)|n-2\rangle-(2n+1)|n\rangle+\quad(n+1)(n+2)|n+2\rangle]$$

则 $-\mathrm{i}\quad\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}|0\rangle=\mathrm{i}\quad\frac{\alpha}{2}|1\rangle,\quad -\ ^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}|0\rangle=\frac{\alpha^2\ ^2}{2}(|0\rangle-\quad 2|2\rangle)$

所以 $\overline{p}=0,\quad\overline{p^2}=\frac{\alpha^2\ ^2}{2}$

所以 $\Delta x\Delta p=\quad\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p)^2}=\frac{\quad}{2},\quad E\sim\frac{\overline{p^2}}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{x^2}=\frac{1}{2}\quad\omega$

9.3 估算氢原子的基态能量。

解: **氢原子** $H=\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}^2-\frac{e^2}{r}$

如果只考虑基态,它可写为

$$H = \frac{1}{2\mu}p_r^2 - \frac{e^2}{r}, \qquad p_r = -\mathrm{i}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{1}{r}\right)$$

p_r **与** r **共轭,于是** $\Delta p_r \Delta r \sim$

$$\Delta r \sim \bar{r}, \qquad \text{所以 } \Delta p_r \sim \frac{}{\bar{r}}$$

$$E = \frac{1}{2\mu}\overline{p_r^2} - \overline{\frac{e^2}{r}} \sim \frac{^2}{2\mu \bar{r}^2} - \frac{e^2}{\bar{r}} \tag{1}$$

求极值:

$$0 = \frac{\partial E}{\partial \bar{r}} = -\frac{^2}{\mu \bar{r}^3} + \frac{e^2}{\bar{r}^2}$$

由此得

$$\bar{r} = \frac{^2}{\mu e^2} = a(\text{玻尔半径}) \tag{2}$$

基态能量

$$E \sim \frac{^2}{2\mu a^2} - \frac{e^2}{a} = -\frac{\mu e^4}{2\,^2} = -\frac{e^2}{2a}$$

这里用数学分析的方法求极值,运算中做了一些不严格的代换如 $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \sim \frac{1}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\bar{r}}$ **等,这在估计中是允许的。**

9.4 在斯特恩—盖拉赫实验中,从恒温器发出一束银原子,温度为 1200K,让原子束穿过一圆形小孔加以准直。有人试图缩小小孔,使屏上银原子的斑点缩小。但这不能无限小下去。设小孔到屏的距离为 1m,试估计用缩小小孔法所得到的斑点的最小直径。

解:设银原子沿 x **方向前进,则银原子的动量** p_x **可由能量均分定理算出** $p_x = \sqrt{mkT}$ $\left(p_x^2/2m = \frac{1}{2}kT\right)$**,其中** m **为银原子质量。**

当银原子穿过准直小孔时,在与 x **方向垂直的** y **方向,受到一个限制** $\Delta y = a$**,** a **为小孔半径,由不确定关系,可知此时银原子在** y **方向有一动量**

$$p_y = \Delta p_y \geq /2\Delta y = /2a$$

于是银原子的走向与 x **方向有一偏离范围,角度设为** α**,**

$$\tan\alpha = p_y/p_x \geq /2a\sqrt{mkT}$$

经 $l = 1\,\mathrm{m}$ **垂直距离而射到屏上,形成圆斑,其直径** D **为**

$$D = 2(a + l\tan\alpha) \geq 2(a + l\,/2a\sqrt{mkT}) \tag{1}$$

可见减小小孔孔径 a 并不能使光斑直径 D 无限小,最小的 D 可用极值求出:

$$0 = \frac{D}{a} = 2(1 - l / 2a^2 \quad mkT)$$

由此得

$$a_0 = \quad \frac{l}{2 \quad mkT}^{1/2} \qquad (2)$$

式(2)代入式(1),得

$$D_{min} = 4a_0 = \quad 8l \; d^{\prime} \; (mc^2 \; kT)^{1/4} = 4\times10^{-6}(\mathrm{m})$$

9.5 在弗兰克和赫兹实验中,用电子束撞击氢原子,使氢原子跳到第一激发态。实验发现,即使入射电子束具有单一的能量,引起跃迁的电子能量损失也不一样。设末态电子能量的起伏为 10^{-6} eV,估计氢原子第一激发态的寿命。

解:电子束末态能量的起伏与氢第一激发态的能级宽度 ΔE 有关。由能量守恒定律知,$\Delta E = 10^{-6}$ eV。由不确定关系,知这能级不稳定而有一寿命 τ,其值为

$$\tau \sim \; / \; \Delta E = 7\times10^{-10}(\mathrm{s})$$

9.6 求一维谐振子能量本征态中的不确定量 $\Delta x \Delta p$。

解:在谐振子定态中,由于 $\overline{p} = 0$, $\overline{x} = 0$,故 $\overline{p^2} = \overline{(\Delta p)^2}$, $\overline{x^2} = \overline{(\Delta x)^2}$。

但根据维里定理,

$$\overline{T} = \overline{V} = E_n / 2$$

即

$$\frac{1}{2m}\overline{p^2} = \frac{1}{2} m\omega^2 \; \overline{x^2} = \frac{E_n}{2}$$

故有

$$\overline{p^2} = mE_n, \quad \overline{x^2} = \frac{E_n}{m\omega^2}$$

或

$$\overline{(\Delta p)^2} = mE_n, \quad \Delta p = \quad mE_n = \quad n + \frac{1}{2} \quad m \;\; \omega$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \frac{E_n}{m\omega^2}, \quad \Delta x = \quad E_n / \; m\omega^2 = \quad n + \frac{1}{2} \quad / \; m\omega$$

这样,我们得第 n 个激发态中不确定量为

$$\Delta x \cdot \Delta p = \quad n + \frac{1}{2} \quad = E_n / \; \omega$$

从前面的表达式可以看出,对于谐振子而言,知道了定态中的方差 $\overline{(\Delta x)^2}$ 或 $\overline{(\Delta p)^2}$,就可以确定能量。

从不确定量的式子可看到,能级愈高,不确定量愈大。

9.7　估计谐振子第一激发态的能量。

解：第一激发态应有一节点，由于有宇称，此节点在原点。设此态能量为 E，则经典反转点(动能为零的点)的位置 x 应满足

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 = E \text{ 或 } x = \quad 2E/\mu\omega^2$$

这距离相当于半个德布罗意波长 $\lambda/2 = x$。于是由德布罗意关系，知动量为

$$p = 2\pi \ /\lambda = \pi \ /x$$

这样，粒子的能量是

$$E = p^2/2\mu = \pi^2 \ ^2/2\mu x^2 = \pi^2 \ ^2\omega^2/4E$$

或

$$E = \pi \ \omega/2$$

这一估计值显然与精确值 $3 \ \omega/2$ 相差不大。

要提醒的是，在本例的估计法中，没有利用不确定关系，而是用了节点的概念和德布罗意波的概念，这是一种新的估计方法。

CHAPTER 10

10 近似方法

【内容提要】

1 . **定态微扰理论**

适用范围:求分立能级及所属波函数的修正。**适用条件是**:一方面要求 H_0 的本征值和本征函数已知或较易计算,另一方面又要求 H_0 把 H 的主要部分尽可能包括进去,使剩下的微扰 H' 比较小,以保证微扰计算收敛较快,即

$$\left|\frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}\right| \ll 1$$

(1) **非简并情况**

$$H = H_0 + H'$$

$$E_k = E_k^{(0)} + H'_{kk} + \sum_n{}' \frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}} + \cdots$$

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \sum_n{}' \frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}\psi_n^{(0)} + \cdots$$

(2) **简并情况**　**能级的一级修正由久期方程**

$$\det|H'_{\mu\nu} - E_k^{(1)}\delta_{\mu\nu}| = 0$$

即

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E_k^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1f_k} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_k^{(1)} & \cdots & H'_{2f_k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H'_{f_k1} & H'_{f_k2} & \cdots & H'_{f_kf_k}-E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

给出。$E_k^{(1)}$ **有** f_k **个实根,记为**

$$E_{k\alpha}^{(1)}, \alpha = 1, 2, \cdots, f_k$$

分别把每一个根 $E_{k\alpha}^{(1)}$ 代入方程 $\sum_{\nu=1}^{f_k}(H'_{\mu\nu} - E_{k\alpha}^{(1)}\delta_{\mu\nu})a_\nu = 0$，即可求得相应的解，记为 $a_{\alpha\nu}$，于是得出新的零级波函数

$$\sum_\nu a_{\alpha\nu} \mid k\nu\rangle = \mid \ {}_{k\nu}\rangle$$

相应能量为

$$E_k = E_k^{(0)} + E_{k\alpha}^{(1)}$$

2．变分法

选择尝试波函数 (λ)，计算 H 的平均值 $\langle H\rangle$，它是变分参量 λ 的函数，由极值条件 $\left.\frac{\delta\langle H\rangle}{\delta\lambda}\right|_{\lambda_0} = 0$ 定出 λ，求出 $\langle H(\lambda_0)\rangle$，它表示基态能量的上限。

能精确求解的量子体系并不很多，而有时问题也并不一定要求有十分精确的答案，于是我们就需要发展求解的近似方法。从与时间的关系讲，近似方法有一类是与时间无关的，用以求能级、期望值等；另一类是随时间变化的，主要求跃迁几率等。从如何取近似的做法而言，有小参数展开的，如微扰论，WKB 近似等；有从整体讨论问题的，如变分法。要根据具体问题的特征选择恰当的近似方法。

【典型习题解答】

10.1 一个一维无限深方势阱如图 10.1，在 $x = 0$ 和 $x = L$ 处有两个无限高壁，两个宽为 a，高为 V_0 的小微扰势垒中心位于 $x = L/4$ 和 $x = 3L/4$ 处，a 是小量(例如 an $L/100$)。试用一级微扰论计算修正后的基态能量值及 $n = 2$ 和 $n = 4$ 的能级差。

解：这是一个无限深方势阱系统，微扰能量和波函数为

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2\ {}^2}{2\mu L^2}n^2, \ n = 1, 2, \cdots$$

$$\psi_n^{(0)} = \frac{2}{L}\sin\frac{n\pi}{L}x$$

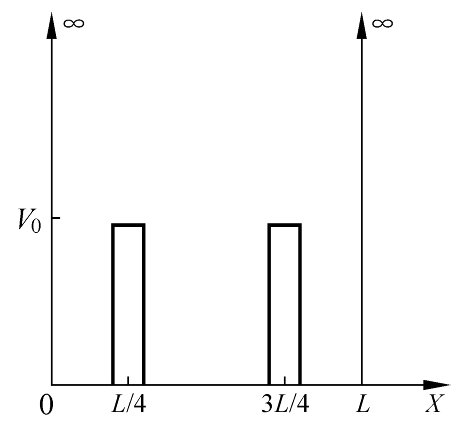

图 10.1

而微扰位势为

$$H' = \begin{cases} V_0, & \frac{L}{4} - \frac{a}{2} < x < \frac{L}{4} + \frac{a}{2} \text{及} \frac{3L}{4} - \frac{a}{2} < x < \frac{3L}{4} + \frac{a}{2} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

在一级微扰下，能级修正为

$$
\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle n \mid H' \mid n\rangle = \int_0^L \mathrm{d}x\, \psi_n^{(0)*}(x)\, H' \psi_n^{(0)}(x) \\
&= V_0 \int_{L/4-a/2}^{L/4+a/2} \mathrm{d}x \times \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + V_0 \int_{3L/4-a/2}^{3L/4+a/2} \mathrm{d}x \times \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \\
&= \frac{2V_0 a}{L} - \frac{V_0}{n\pi}\left(\cos\frac{n\pi}{2} + \cos\frac{3n\pi}{2}\right)\sin\frac{n\pi a}{L} \\
&= \frac{2V_0 a}{L} - \frac{V_0}{n\pi}\left(2\cos n\pi \times \cos\frac{n\pi}{2}\right)\sin\frac{n\pi a}{L} \\
&= \begin{cases} 2V_0 a/L, & n = \text{奇数} = 2k+1 \\ \dfrac{2V_0 a}{L} - (-1)^k \dfrac{V_0}{k\pi}\sin\dfrac{2k\pi a}{L}, & n = \text{偶数} = 2k \end{cases}
\end{aligned}
$$

修正后基态能量

$$
E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2} + \frac{2V_0 a}{L}
$$

修正后 $n=4$ 和 $n=2$ 的能级差

$$
\begin{aligned}
\Delta E &= \left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2}\times 4^2 + \frac{2V_0 a}{L} - \frac{V_0}{2\pi}\sin\frac{4\pi a}{L}\right) - \left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2}\times 2^2 + \frac{2V_0 a}{L} + \frac{V_0}{\pi}\sin\frac{2\pi a}{L}\right) \\
&= \frac{6\pi^2\hbar^2}{\mu L^2} - \frac{V_0}{\pi}\left(\frac{1}{2}\sin\frac{4\pi a}{L} + \sin\frac{2\pi a}{L}\right)
\end{aligned}
$$

在 $a/L \ll 1$ 的情况下, ΔE 可取为

$$
\Delta E = \frac{6\pi^2\hbar^2}{\mu L^2} - \frac{4V_0 a}{L} + \frac{20V_0}{3\pi}\left(\frac{\pi a}{L}\right)^3
$$

10.2　一根长为 l 的无质量细绳一端固定,另一端系一质量为 μ 的质点,在重力作用下质点在竖直平面内摆动。

① 在小角近似下求系统能级;

② 求由于小角近似的误差而产生的基态能量的最低阶修正。

解: ① 以质点静止不动时的平衡点为势能零点,则质点所受位势为

$$
V = \mu g l(1-\cos\theta) \approx \frac{1}{2}\mu g l\theta^2
$$

θ 为质点偏离平衡位置时的极角,最后一步显然采用了小角近似。于是

$$
H = T + V = \frac{1}{2}\mu l^2\dot{\theta}^2 + \frac{1}{2}\mu g l\theta^2 = \frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2
$$

$$
x = l\theta, \quad \omega = \sqrt{g/l}
$$

于是系统的能级为

$$
E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{g/l}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots
$$

② 为求能级的修正,我们先求在小角近似中去掉的最低阶相互作用:

$$\Delta V = \mu g l(1 - \cos\theta) - \frac{1}{2}\mu g l\theta^2 \approx -\frac{1}{4!}\mu g l\theta^4 = -\frac{1}{24}\frac{\mu g}{l^3}x^4$$

这可以看作微扰,我们求由它加入后对基态的能级修正。

利用有关产生算符和湮灭算符的知识,

$$x = \sqrt{\frac{}{2\mu\omega}}(a + a^+)$$

所以有
$$x^2|0\rangle = \frac{}{2\mu\omega}(a + a^+)^2|0\rangle = \frac{}{2\mu\omega}(|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle)$$

于是基态的能量修正为

$$\Delta E_0 = \langle 0|\Delta V|0\rangle = -\frac{\mu g}{24 l^3}\left(\frac{}{2\mu\omega}\right)^2(\langle 0| + \sqrt{2}\langle 2|)(|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle)$$

$$= -\frac{1}{32}\frac{{}^2}{\mu l^2}$$

在本例中,连微扰本身也要自己找出来(题目并未明显给出),这就比较接近于实际问题了。

10.3　一维谐振子的能量算符为

$$H_0 = -\frac{{}^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \tag{1}$$

设受到作用势

$$H' = \frac{\lambda}{2}\mu\omega^2 x^2,\quad |\lambda| \ll 1 \tag{2}$$

的微扰作用,试求各能级的微扰修正,并和精确解比较。

解: H_0 的本征解记为 $\psi_n^{(0)}$,本征值为

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

在 H_0 表象(以 $\psi_n^{(0)}$ 为基矢)中,x 的矩阵元中不为零的类型为

$$x_{n+1,n} = x_{n,n+1} = \sqrt{n+1}\times\frac{1}{\sqrt{2}\alpha} = \left(\frac{n+1}{2}\times\frac{}{\mu\omega}\right)^{1/2} \tag{4}$$

因此,不等于 0 的微扰矩阵元有下列类型:

$$H'_{nn} = \frac{\lambda}{2}\mu\omega^2\sum_k x_{nk}x_{kn} = \frac{\lambda}{2}\mu\omega^2(x_{n,n-1}x_{n-1,n} + x_{n,n+1}x_{n+1,n})$$

$$= \frac{\lambda}{2}\mu\omega^2\times\frac{}{\mu\omega}\left(\frac{n}{2} + \frac{n+1}{2}\right) = \frac{\lambda}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega = \frac{\lambda}{2}E_n^{(0)} \tag{5}$$

$$H'_{n,n+2} = H'_{n+2,n} = \frac{\lambda}{2}\mu\omega^2 x_{n,n+1}x_{n+1,n+2} = \frac{\lambda}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\omega \tag{6}$$

$$H'_{n,n-2} = H'_{n-2,n} = \frac{\lambda}{2}\mu\omega^2 x_{n,n-1}x_{n-1,n-2} = \frac{\lambda}{4}\sqrt{n(n-1)}\,\hbar\omega \tag{7}$$

(其余矩阵元皆为 0,比如 $H'_{n,n\pm1} \sim x_{n,n\pm1}x_{n\pm1,n\pm1}=0$)。

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{8}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_k{}'\left[\,|H'_{kn}|^2/(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})\right] = \frac{1}{2\hbar\omega}\{|H'_{n-2,n}|^2-|H'_{n+2,n}|^2\}$$

$$= \frac{1}{2\hbar\omega}\frac{\lambda^2}{16}[n(n-1)-(n+1)(n+2)]\hbar^2\omega^2 = -\frac{\lambda^2}{8}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{9}$$

本题可精确求解,因为

$$H = H_0 + H' = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}(1+\lambda)\mu\omega^2x^2$$

令
$$\omega' = \omega\sqrt{1+\lambda}$$

则
$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega'^2x^2 \tag{10}$$

因此,
$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega' = \left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{1+\lambda}\,\hbar\omega \tag{11}$$

因为$|\lambda|\ll 1$,将$\sqrt{1+\lambda}$作二项式展开,即得

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\frac{\lambda^3}{16}-\cdots\right)\hbar\omega \tag{12}$$

保留至 λ^2 项,则和微扰论结果完全一致。

10.4 类氢原子中,电子与核的库仑相互作用能为 $V(r)=-Ze^2/r$,当核电荷由 $Ze\to(Z+1)e$时(β衰变),相互作用能增加了 $H'=-e^2/r$。

① 试用微扰论讨论体系的基态能量的一级修正;

② 计算结果与严格解比较。

解:
$$H_0 = p^2/2\mu - Ze^2/r,\quad H' = -e^2/r \tag{1}$$

H_0 的基态解为
$$E_1^{(0)} = -\frac{Z^2e^2}{2a},\quad \psi_{00} = \left(\frac{Z^3}{\pi a^3}\right)^{1/2}e^{-Zr/a} \tag{2}$$

能级的一级修正

$$E_1^{(1)} = \langle 100|H'|100\rangle = \frac{Z^3}{\pi a^3}(-e^2)\times4\pi\int_0^\infty e^{-2Zr/a}\times\frac{1}{r}\times r^2\,dr$$

$$= -\frac{4Z^3e^2}{a^3}\times\frac{a^2}{4Z^2} = -\frac{Ze^2}{a} \tag{3}$$

严格解:
$$E_1^{(0)} = -\frac{Z^2e^2}{2a}\to E_1 = -\frac{(Z+1)^2e^2}{2a}$$

$$E_1^{(1)\prime} = \Delta E_1 = E_1 - E_1^{(0)} = -\frac{e^2}{2a}[(Z+1)^2 - Z^2] = -\frac{e^2}{a}\left(Z+\frac{1}{2}\right)$$

当 Z 较大时,微扰论可得到较好的近似。

10.5　**在势场中作低速运动的粒子,计及相对论质-能关系后,H 可近似取为**

$$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 - \frac{1}{8m^3c^2}\boldsymbol{p}^4 + V(\boldsymbol{r}) \tag{1a}$$

其中第二项为动能的相对论修正,可作为微扰处理(这里没有考虑与自旋有关的相对论修正)。试对谐振子和类氢离子,计算这个修正项对能级的影响。

解:将(1a)式写成

$$H = H_0 + H' \tag{1b}$$

其中

$$H_0 = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{r}), \qquad H' = -\frac{1}{8m^3c^2}\boldsymbol{p}^4 \tag{2}$$

$$H' = -\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right)^2 = -\frac{1}{2mc^2}(H_0 - V)^2$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}(H_0^2 + V^2 - H_0V - VH_0) \tag{3}$$

① **一维谐振子,H_0 的本征函数和本征值为 $\psi_n^{(0)}$, $E_n^{(0)}$,势能**

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

据维里定理,在 $\psi_n^{(0)}$ 态中 V 的平均值

$$\langle\psi_n^{(0)}|V|\psi_n^{(0)}\rangle = \frac{1}{2}E_n^{(0)} = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{4}$$

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\langle\psi_n^{(0)}|(H_0^2 + V^2 - H_0V - VH_0)|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}[(E_n^{(0)})^2 - 2E_n^{(0)}\langle V\rangle_n + \langle V^2\rangle_n]$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\langle V^2\rangle_n = -\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2\right)^2\langle x^4\rangle_n \tag{5}$$

据题 10.3

$$\langle x^4\rangle_n = (x^2)_{nn}^2 + (x^2)_{n,n+2}^2 + (x^2)_{n,n-2}^2$$

$$= \left(\frac{1}{2\alpha^2}\right)^2 \times [(n+n+1)^2 + (n+1)(n+2) + n(n-1)]$$

$$= \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1)\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} \tag{6}$$

代入式(5),即得

$$E_n^{(1)} = -\frac{3}{16}\left[n^2 + \left(n+\frac{1}{2}\right)^2\right]\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2} \tag{7}$$

* ② 类氢离子,$V(r) = -Ze^2/r$, H_0 本征函数和本征值为

$$\psi_{nlm}^{(0)} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{8}$$

$$E_n^{(0)} = -\frac{Z^2e^2}{2n^2a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{9}$$

由于 $\boldsymbol{p}^4$ 与 $\boldsymbol{L}^2$, L_z 对易, H'作用于 $\psi_{nlm}^{(0)}$ 不改变量子数 l, m,因此在属于同一个 $E_n^{(0)}$ 的各个简并态(l, m 取不同值)之间, H'的非对角矩阵元全部为 0,即

$$\langle nlm|H'|nl'm'\rangle = \langle H'\rangle_{nlm}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{10}$$

从而在计算能级的一级微扰修正时,可以利用非简并态微扰论,即

$$E_{nlm}^{(1)} = \langle H'\rangle_{nlm} = -\frac{1}{2mc^2}\langle H_0^2 + V^2 - H_0V - VH_0\rangle_{nlm}$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left[\left(E_n^{(0)}\right)^2 - 2E_n^{(0)}\langle V\rangle_{nlm} + \langle V^2\rangle_{nlm}\right] \tag{11}$$

据维里定理,

$$\langle V\rangle_{nlm} = 2E_n^{(0)} \tag{12}$$

利用公式

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm} = \frac{Z^2}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3a^2} \tag{13}$$

可得

$$\langle V^2\rangle_{nlm} = \left\langle\frac{Z^2e^4}{r^2}\right\rangle_{nlm} = \frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}\left(\frac{Z e^2}{a}\right)^2 \tag{14}$$

将式(12)、(14)代入式(11),得

$$E_{nlm}^{(1)} = -mc^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\frac{Z^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4}\right) \tag{15}$$

能级的“l简并”已经消除。对于氢气原子($Z=1$)的基态,修正为

$$E_{100}^{(1)}(Z=1) = -\frac{5}{8}\left(\frac{1}{137}\right)^4 mc^2 = -9.1\times10^{-4}\ \text{eV}$$

和自旋——轨道耦合能的量级相同。

10.6 粒子在一维势场

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x<0,\ x>a \\ \lambda\delta\left(x-\frac{a}{2}\right), & 0\leq x\leq a \end{cases} \tag{1}$$

中运动,λ甚小,试求基态能量准确到 λ^2 的修正值以及 λ应满足的条件。

解: 一维无限深势阱,微扰取

$$H' = \lambda\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \tag{2}$$

$$E_n^{(0)} = n^2\pi^2\hbar^2/2\mu a^2, \quad \psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \tag{3}$$

求到二级,矩阵元一般形式

$$\langle n|H'|l\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{n\pi x}{a}\lambda\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)\sin\frac{l\pi x}{a}\mathrm{d}x = \frac{2\lambda}{a}\sin\frac{n\pi}{2}\sin\frac{l\pi}{2} \tag{4}$$

基态, $n=1$。一级修正

$$E_1^{(1)} = \langle 1|H'|1\rangle = \frac{2\lambda}{a} \tag{5}$$

二级修正

$$E_1^{(2)} = \sum_{l\neq 1}\frac{|\langle 1|H'|l\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_l^{(0)}} = \sum_{l\neq 1}\frac{4\lambda^2}{a^2}\times\frac{\sin^2\frac{l\pi}{2}}{E_1^{(0)}(1-l^2)}$$

$$= -\frac{8\mu\lambda^2}{\pi^2\hbar^2}\sum_{l\neq 1}\frac{1-\cos l\pi}{2(l^2-1)} = -\frac{8\mu\lambda^2}{\pi^2\hbar^2}\sum_{l\neq 1}\frac{1-(-1)^l}{2(l^2-1)}$$

① 当 l 为偶数时, $1-(-1)^l=0$,这时 $E_1^{(2)}=0$;

② 当 l 为奇数时,令 $l=2k+1$, $k=1,2,3,\cdots$,上式给出

$$E_1^{(2)} = -\frac{8\mu\lambda^2}{\pi^2\hbar^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{4k(k+1)} = -\frac{2\mu\lambda^2}{\pi^2\hbar^2}\sum_{k=1}^{\infty}\left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+1}\right) = -\frac{2\mu\lambda^2}{\pi^2\hbar^2} \tag{6}$$

所以

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} + \frac{2\lambda}{a} - \frac{2\mu\lambda^2}{\pi^2\hbar^2} \tag{7}$$

由 $|E_1^{(2)}| \ll |E_1^{(1)}| \ll |E_1^{(0)}|$,可得

$$\lambda \ll \pi^2\hbar^2/\mu a \tag{8}$$

10.7 **氢原子处在平行的均匀静电场 ε 和均匀静磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,不考虑自旋效应,试用微扰论讨论 $n=2$ 的氢原子能级分裂情形。已知** $\int\psi_{210}^* r\cos\theta\psi_{200}\mathrm{d}\tau = 3a$ 。

解:取 ε 和 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴方向,则

$$H' = e\varepsilon z + \frac{eB}{2\mu c}L_z \tag{1}$$

对 $n=2$ 的氢原子能级, $|\psi^{(0)}\rangle = |2lm\rangle$,四重简并:

$$\underbrace{|200\rangle}_{l=0};\ \underbrace{|210\rangle,\ |211\rangle,\ |21-1\rangle}_{l=1}$$

记为 $|1\rangle$ $|2\rangle$ $|3\rangle$ $|4\rangle$ (编号)

① 对 z 的矩阵元, $\langle 2l'm'|z|2lm\rangle = \langle 2l'm'|r\cos\theta|2lm\rangle$

要使之不等于 0,必须有 $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$

故 z 不等于零的矩阵元只有

$$(z)_{12} = \langle 200|z|210\rangle = (z)_{21} = \langle 210|z|200\rangle = 3a \qquad (2)$$

② 考虑 L_z 的矩阵元:

$$\langle 2l'm'|L_z|2lm\rangle = m\ \delta_{l'l}\delta_{m'm}\ (\text{已对角化}) \qquad (3)$$

易得

$$\begin{aligned}\langle 211|L_z|211\rangle &= (L_z)_{33} = \\ \langle 21-1|L_z|21-1\rangle &= (L_z)_{44} = -\end{aligned} \qquad (4)$$

L_z 的其他矩阵元皆为 0。于是有

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & 3e\varepsilon a & 0 & 0 \\ 3e\varepsilon a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_B B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}, \quad \mu_B = \frac{e}{2\mu c}(\text{玻尔磁子}) \qquad (5)$$

解久期方程

$$\det|H'_{\mu\nu} - E_2^{(1)}\delta_{\mu\nu}| = 0 \qquad (6)$$

得

$$[(E_2^{(1)})^2 - (3e\varepsilon a)^2]\times[(E_2^{(1)})^2 - (\mu_B B)^2] = 0$$

解得

$$E_2^{(1)} = \pm 3e\varepsilon a, \quad \pm\mu_B B$$

若 $3e\varepsilon a \neq \mu_B B$,则能级简并全部解除。

10.8 质量为 m 的粒子在二维无限深势阱中运动,$(0\leq x, y\leq\pi)$。阱内有一势

$$V(x, y) = \lambda\cos x\cos y$$

① 写出 $\lambda = 0$ 时能量最低的四个本征值和相应的本征函数;

② λ 很小,求第一激发态能量至 λ 级、基态能量至 λ^2 级。

解: ① $\lambda = 0$,无微扰,有

$$\begin{aligned} E_{n_x n_y} &= \frac{{}^2}{2m}(n_x^2 + n_y^2) \\ \psi_{n_x n_y} &= \frac{2}{\pi}\sin n_x x \sin n_y y \end{aligned} \qquad 0\leq x, y\leq\pi,\ n_x, n_y = 1, 2, \cdots$$

能量最低的四个态为:

基态,

$$E_{11}^{(0)} = \frac{{}^2}{m}$$

$$\psi_1^{(0)} = \frac{2}{\pi}\sin x\sin y$$

第一激发态,

$$E_{12}^{(0)} = \frac{5\ {}^2}{2m}$$

$$\psi_{12}^{(0)} = \frac{2}{\pi}\sin x\sin 2y$$

$$\psi_{21}^{(0)} = \frac{2}{\pi}\sin 2x\sin y$$

第二激发态, $E_{22}^{(0)} = \frac{4\ \ ^{2}}{m}$

$$\psi_{22}^{(0)} = \frac{2}{\pi}\sin 2x\sin 2y$$

第三激发态, $E_{13}^{(0)} = \frac{5\ \ ^{2}}{m}$

$$\psi_{13}^{(0)} = \frac{2}{\pi}\sin x\sin 3y$$

$$\psi_{31}^{(0)} = \frac{2}{\pi}\sin 3x\sin y$$

② **λ很小,取微扰** $H' = \lambda\cos x\cos y$

$$\langle n_x' n_y' \mid H' \mid n_x n_y\rangle = \psi^*_{n_x' n_y'}\lambda\cos x\cos y\,\psi_{n_x n_y}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$= \frac{\lambda}{\pi^2}\int_0^\pi 2\cos x\sin n_x' x\sin n_x x\,\mathrm{d}x\int_0^\pi 2\cos y\sin n_y' y\sin n_y y\,\mathrm{d}y$$

$$= \frac{\lambda}{\pi^2}\int_0^\pi [\sin(n_x' + 1)x + \sin(n_x' - 1)x]\sin n_x x\,\mathrm{d}x$$

$$\times\int_0^\pi [\sin(n_y' + 1)y + \sin(n_y' - 1)y]\sin n_y y\,\mathrm{d}y$$

$$= \frac{\lambda}{\pi^2}\times\frac{\pi^2}{4}[\delta_{n_x'+1,n_x} + \delta_{n_x'-1,n_x}]\times[\delta_{n_y'+1,n_y} + \delta_{n_y'-1,n_y}]$$

$$= \frac{\lambda}{4}\times[\delta_{n_x'+1,n_x} + \delta_{n_x'-1,n_x}]\times[\delta_{n_y'+1,n_y} + \delta_{n_y'-1,n_y}]$$

基态,无简并,

$$E_{11}^{(1)} = \langle 11 \mid H' \mid 11\rangle = 0$$

$$E_{11}^{(2)} = \sum_{n_x\neq 1, n_y\neq 1}\frac{|\langle 11 \mid H' \mid n_x n_y\rangle|^2}{E_{11}^{(0)} - E_{n_x n_y}^{(0)}} = \frac{|\langle 11 \mid H' \mid 22\rangle|^2}{E_{11}^{(0)} - E_{22}^{(0)}}$$

$$= \frac{\lambda^2/16}{(\ \ ^2/m)(1-4)} = -\frac{m\lambda^2}{48\ \ ^2}$$

所以 $E_{11} = E_{11}^{(0)} + E_{11}^{(1)} + E_{11}^{(2)} = \frac{\ \ ^2}{m} - \frac{m\lambda^2}{48\ \ ^2}$

第一激发态,二重简并,

由 $\det|H'_{\mu\nu} - E_{12}^{(1)}\delta_{\mu\nu}| = 0$，可求出 $E_{12}^{(1)}$，其中

$$H'_{11} = \langle 12|H'|12\rangle = 0$$

$$H'_{22} = \langle 21|H'|21\rangle = 0$$

$$H'_{12} = H'_{21} = \langle 12|H'|21\rangle = \frac{\lambda}{4}$$

所以

$$\begin{vmatrix} -E_{12}^{(1)} & \lambda\ 4 \\ \lambda\ 4 & -E_{12}^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

解得

$$E_{12}^{(1)} = \pm\frac{\lambda}{4},\quad E_{12} = E_{12}^{(0)} + E_{12}^{(1)} = \frac{5\ ^{2}}{2m} \pm \frac{\lambda}{4}$$

10.9 粒子在二维无限深方势阱

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < a \\ \infty, & \text{其他区域} \end{cases} \tag{1}$$

中运动。

① 试写出能级和能量本征函数(能量最低的两个态)；

② 加上微扰 $\quad H' = \lambda xy \quad$ (2)

求最低的两个能级的一级微扰修正。

解：① 能级和能量本征函数为

$$E_{n_1 n_2}^{(0)} = \frac{\pi^2\ ^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2),\quad n_1, n_2 = 1, 2, 3, \cdots \tag{3}$$

$$\psi_{n_1 n_2}^{(0)} = \frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a},\quad (\text{阱内，下同}) \tag{4}$$

基态是非简并的，能级 $E_{11}^{(0)}$，本征函数为

$$\psi_{11}^{(0)} = \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a} \tag{5}$$

第一激发态是二重简并的，能级 $E_{12}^{(0)}$，本征函数为

$$\begin{aligned} \psi_{12}^{(0)} &= \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a} = \psi_a \\ \psi_{21}^{(0)} &= \frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a} = \psi_\beta \end{aligned} \tag{6}$$

② 基态能级的一级修正等于 H' 的平均值，即

$$E_{11}^{(1)} = \langle\psi_{11}^{(0)}|H'|\psi_{11}^{(0)}\rangle = \frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a\int_0^a xy\sin^2\frac{\pi x}{a}\sin^2\frac{\pi y}{a}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{\lambda}{4}a^2 \tag{7}$$

对于 ψ_a 和 ψ_β，容易算出 H' 的矩阵元为

$$H'_{\alpha\alpha} = H'_{\beta\beta} = \frac{\lambda}{4}a^2, \quad H'_{\alpha\beta} = H'_{\beta\alpha} = \frac{256}{81\pi^4}\lambda a^2 \tag{8}$$

在$\{\psi_\alpha, \psi_\beta\}$子空间中,$H'$的矩阵表示为

$$H' = \frac{\lambda}{4}a^2 \begin{pmatrix} 1 & 1024/81\pi^4 \\ 1024/81\pi^4 & 1 \end{pmatrix} \tag{9}$$

由 $\det|H'_{\mu\nu} - E^{(1)}_{12}\delta_{\mu\nu}| = 0$,**可解得**$(\mu,\nu = \alpha,\beta)$

$$E^{(1)}_{12} = H'_{\alpha\alpha} \pm H'_{\alpha\beta} = \frac{\lambda}{4}a^2\left(1 \pm \frac{1024}{81\pi^4}\right) = \frac{\lambda}{4}a^2(1 \pm 0.13) = \lambda a^2 \times \begin{cases} 0.2825 \\ 0.2175 \end{cases} \tag{10}$$

结论:**在微扰作用下,基态能级升高** $\lambda a^2/4$,**第一激发能级的重心也升高** $\lambda a^2/4$,**同时分裂为二,裂距为** $0.065(\lambda a^2)$。

10.10　**将一基态氢原子置于** z **方向均匀磁场** $\boldsymbol{B}$ **中。**

①　**计算其能级分裂;**

②　**若再加一** z **方向交变磁场** $B' = A\cos\omega t$,**问能否使它从其中一个能级跃迁到另一个能级?试以计算说明;**

③　**如果是在** x **方向加一交变磁场** $B' = A\cos\omega t$,**问能否发生跃迁?磁场变化的频率应为多少?**

解:①　$H' = -\mu\cdot\boldsymbol{B} = \frac{e}{2\mu c}(L_z + 2s_z)B = \frac{eB}{2\mu c}(L_z + 2s_z) = \omega_L(L_z + 2s_z)$

其中

$$\omega_L = \frac{eB}{2\mu c}$$

$H = H_0 + H'$,**本征态**$|nlmm_s\rangle$,**无耦合。**

基态,$n = 1$,$l = 0$,$m = 0$,$m_s = \pm 1/2$,**二重简并。微扰矩阵元**

$$\langle 100m_s|H'|100m'_s\rangle = \omega_L\cdot 2m_s\ \delta_{m_s m'_s}$$

$$E^{(1)}_1 = \left\langle 100\pm\frac{1}{2}\right|H'\left|100\pm\frac{1}{2}\right\rangle = \pm\ \omega_L$$

$$\left.\begin{aligned} E_{100-\frac{1}{2}} &= E_{100} - \omega_L \\ E_{100\frac{1}{2}} &= E_{100} + \omega_L \end{aligned}\right\}\ \text{间距}\ 2\omega_L$$

②

$$H' = -\mu\cdot\boldsymbol{B}' = \frac{eA}{2\mu c}(L_z + 2s_z)\cos\omega t = W\cos\omega t$$

$$W = \frac{eA}{2\mu c}(L_z + 2s_z)$$

微扰(跃迁)矩阵元

$$\left\langle 100\frac{1}{2}\right|W\left|100-\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{eA}{2\mu c}\left\langle 100\frac{1}{2}\right|100-\frac{1}{2}\right\rangle = 0$$

故不能引起跃迁。

③
$$H' = W\cos\omega t$$
$$W = \frac{eA}{2\mu c}(L_x + 2s_x)$$

矩阵元

$$\left\langle 100\ \frac{1}{2}\right| W \left|100\ -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{eA}{\mu c}\left\langle 100\ \frac{1}{2}\right| s_x \left|100\ -\frac{1}{2}\right\rangle$$
$$= \frac{eA}{2\mu c}\left\langle 100\ \frac{1}{2}\middle|100\ \frac{1}{2}\right\rangle \neq 0$$

跃迁速率公式:
$$w_{k'k} = \frac{\pi}{2}|W_{k'k}|^2\delta(E_{k'} - E_k - \ \omega)$$
$$E_k = E_{100-1/2} = E_{100} - \ \omega_L$$
$$E_{k'} = E_{100+1/2} = E_{100} + \ \omega_L$$

要实现 $k\to k'$态的跃迁,即要 $w_{k'k}\neq 0$,须满足
$$\omega = E_{k'} - E_k = 2\ \omega_L$$

所以
$$\omega = 2\omega_L = \frac{eB}{\mu c}$$

10.11 一维无限深势阱$(0 < x < a)$如图 10.2 所示,其中的粒子受到微扰

$$H' = \begin{cases} 2\lambda x/a, & 0 < x < a/2 \\ 2\lambda(1 - x/a), & a/2 < x < a \end{cases}$$

图 10 2

的作用,求基态能量的一级修正。

解: 一维无限深势阱的能量本征值及本征函数为

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2\ ^2 n^2}{2\mu a^2},\quad \psi_n^{(0)} = \frac{2}{a}\sin\frac{n\pi x}{a},\quad n = 1,2,3,\cdots$$

基态,
$$E_1^{(0)} = \frac{\pi^2\ ^2}{2\mu a^2},\quad \psi_1^{(0)} = \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}$$

基态能量的一级修正为

$$E_1^{(1)} = H'_{11} = \int_0^a |\psi_1^{(0)}(x)|^2 H'(x)\mathrm{d}x$$
$$= \frac{2}{a}\int_0^{a/2}\sin^2\frac{\pi x}{a}\times\frac{2\lambda x}{a}\mathrm{d}x + \frac{2}{a}\int_{a/2}^a\sin^2\frac{\pi x}{a}\times 2\lambda\left(1 - \frac{x}{a}\right)\mathrm{d}x$$

作变换:
$$u = \frac{\pi x}{a},\quad x = \frac{au}{\pi},\quad \mathrm{d}x = \frac{a}{\pi}\mathrm{d}u$$

$$\nu=\pi-\frac{\pi x}{a},\quad x=a-\frac{a\nu}{\pi},\quad \mathrm{d}x=-\frac{a}{\pi}\mathrm{d}\nu$$

代入上式完成积分:

$$E_1^{(1)}=\frac{4\lambda}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}\sin^2 u\cdot u\mathrm{d}u-\frac{4\lambda}{\pi^2}\int_{\pi/2}^{0}\sin^2(\pi-\nu)\cdot\nu\mathrm{d}\nu$$

$$=\frac{8\lambda}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}\sin^2 u\cdot u\mathrm{d}u=\left(\frac{1}{2}+\frac{2}{\pi^2}\right)\lambda$$

$$E_1=E_1^{(0)}+E_1^{(1)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}+\left(\frac{1}{2}+\frac{2}{\pi^2}\right)\lambda$$

*10.12　苯的“自由电子模型”把电子看成在一个环形势场中运动,并受到具有 C_6 对称性的微扰作用。

① 在不计及微扰的作用时,可以看作电子是在半径为 R 的环上自由运动,试写出能量本征值与本征函数;

② 设微扰势可以表示成

$$H'=V(\phi)=-V_0\cos6\phi \tag{1a}$$

在一级微扰下计算能量及相应的本征函数。

解: ① 自由电子的哈密顿为

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2$$

取Δ^2的球坐标(r,θ,ϕ)表示,并取 $r=R,\theta=\frac{\pi}{2}$,即得

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} \tag{2}$$

这就是在环上自由运动粒子的能量算符,其本征函数和本征值为

$$\psi_n^{(0)}(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi},\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{3}$$

$$E_n^{(0)}=\frac{n^2\hbar^2}{2mR^2} \tag{4}$$

除基态$(n=0)$外,所有能级都是二重简并的。

② 微扰算符可以写成

$$H'=-V_0\cos6\phi=-\frac{V_0}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}6\phi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}6\phi}) \tag{1b}$$

对任何 n,显然

$$H'_{nn}=\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle=0 \tag{5}$$

在一级微扰作用下,属于同一个能级的两个简并态能够发生耦合的只有 $n=\pm3$,即

$$H'_{-3,3} = H'_{3,-3} = -\frac{V_0}{2} \tag{6}$$

因此,在$\{\psi_3^{(0)},\psi_{-3}^{(0)}\}$子空间,$H'$的矩阵表示为

$$H' = -\frac{V_0}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{7}$$

(3 行 -3 列,或 -3 行 3 列矩阵元≠0),相当于一个二能级系统,由文献[1]:

$$E_{\pm}^{(1)} = \frac{1}{2}\left[(H'_{11} + H'_{22}) \pm \sqrt{(H'_{11} - H'_{22})^2 + 4|H'_{12}|^2}\right]$$

现在,

$$H'_{11} = H'_{22} = 0$$

$$H'_{12} = H'_{21} = -\frac{V_0}{2}$$

所以

$$E_{\pm}^{(1)} = \pm |H'_{12}|$$

本题,即

$$E_3^{(1)} = \pm\frac{V_0}{2} \tag{8}$$

相应的零级波函数为

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_3^{(0)} \pm \psi_{-3}^{(0)}] \tag{9}$$

其他能级($n\neq\pm3$)的一级微扰修正为 0,在一级微扰下能级不分裂,简并没有消除。

***10.13　质量为 m 的粒子在一维区域 $-\frac{L}{2}\leq x\leq\frac{L}{2}$中自由运动,波函数满足周期性边界条件**

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right)$$

① 试写出能级和能量本征函数;

② 如粒子还受到一个"陷阱"的作用,作用势为

$$H' = -V_0 e^{-x^2/a^2}, \quad a \ll L \tag{1}$$

试用微扰论计算能级修正(一级近似)。

解:① 作自由运动的粒子,能量本征函数为

$$\psi^{(0)} \sim e^{\pm ikx}, \quad 或 \quad \cos kx, \sin kx \tag{2}$$

由周期性边条件,求得

$$k = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{3}$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{(2\pi n\hbar)^2}{2mL^2} \tag{4}$$

除基态($n=0$)外,其他能级都是二重简并的。考虑到微扰的特点,我们取式(2)中后两种函数作为"基矢",它们具有确定的宇称,而且相互正交,这两个函数经归一化后,记为

$$\left.\begin{aligned} \psi_{n+}^{(0)} &= \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{2n\pi x}{L} \\ \psi_{n-}^{(0)} &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{2n\pi x}{L} \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

下标"+"、"-"标明波函数的宇称。

② 微扰 H'为偶宇称,因此

$$H'_{n+n-} = \langle \psi_{n+}^{(0)} | H' | \psi_{n-}^{(0)} \rangle = 0 \tag{6}$$

亦即 $\psi_{n+}^{(0)}$ 和 $\psi_{n-}^{(0)}$ 已经是正确的零级波函数。能级的一级微扰修正等于 H'的平均值,即

$$\begin{aligned} E_{n+}^{(1)} &= H'_{n+n+} = -\frac{2V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-x^2/a^2}\cos^2\frac{2n\pi x}{L} \\ &= -\frac{2V_0}{L}\int_0^{L/2}\mathrm{d}x\left(1+\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)\mathrm{e}^{-x^2/a^2} \approx -\frac{2V_0}{L}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\left(1+\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)\mathrm{e}^{-x^2/a^2} \end{aligned}$$

$$\text{公式:}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-a^2x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2a},\quad \int_0^\infty \mathrm{e}^{-a^2x^2}\cos bx\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}\,\mathrm{e}^{-b^2/4a^2}}{2a}$$

所以

$$E_{n+}^{(1)} = -\frac{\sqrt{\pi}V_0 a}{L}\left(1+\mathrm{e}^{-4\pi^2n^2a^2/L^2}\right) \tag{7}$$

$$\begin{aligned} E_{n-}^{(1)} &= H'_{n-n-} = -\frac{2V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-x^2/a^2}\sin^2\frac{2n\pi x}{L} \\ &\approx -\frac{2V_0}{L}\int_0^\infty \mathrm{d}x\left(1-\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)\mathrm{e}^{-x^2/a^2} = -\frac{\sqrt{\pi}V_0 a}{L}\left(1-\mathrm{e}^{-4\pi^2n^2a^2/L^2}\right) \end{aligned} \tag{8}$$

表明:在"陷阱"作用下,能级下降,并分裂为二,奇宇称态 $\psi_{n-}^{(0)}$ 受陷阱影响较小,能级下降小;偶宇称态 $\psi_{n+}^{(0)}$ 受陷阱影响大,能级下降大。裂距为

$$\Delta E_n = E_{n-}^{(1)} - E_{n+}^{(1)} \approx \frac{2\sqrt{\pi}V_0 a}{L}\mathrm{e}^{-4\pi^2n^2a^2/L^2} \tag{9}$$

n越小裂距越大。最大裂距为(当 $n=1$)

$$\Delta E_1 \approx 2\sqrt{\pi}\,\frac{V_0 a}{L}\mathrm{e}^{-4\pi^2 a^2/L^2} \sim 2\sqrt{\pi}\,\frac{V_0 a}{L}\quad (a \ll L) \tag{10}$$

基态$(n=0, k=0)$, **能级无简并,零级波函数为**

$$\psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}} \tag{11}$$

在陷阱作用下,能级移动

$$\Delta E_0 = E_0^{(1)} = \langle \psi_0^{(0)} | H' | \psi_0^{(0)} \rangle = -\frac{V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-x^2/a^2} \approx -\sqrt{\pi}\,V_0 a/L \tag{12}$$

CHAPTER 11

11 粒子数表象

【内容提要】

以线性谐振子的哈密顿 H 的本征态 $|n\rangle$ 为基矢。

采用自然单位：$\hbar=\mu=\omega=1$，能量单位 $\hbar\omega$，长度单位 $\sqrt{\hbar/\mu\omega}$，动量单位 $\sqrt{\mu\hbar\omega}$。则

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

令

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}(x+\mathrm{i}p),\quad a^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\mathrm{i}p)$$

a^{+} 称为升算符(或产生算符)，a 称为降算符(或湮灭算符)。有

$$x=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^{+}+a\right),\quad p=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^{+}-a\right),\quad [a,a^{+}]=1$$

$$H=\left(a^{+}a+\frac{1}{2}\right)=\left(N+\frac{1}{2}\right)$$

$N=a^{+}a$，为粒子数算符。

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^{+})^{n}|0\rangle$$

$$N|n\rangle=n|n\rangle,\quad H|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle,\quad \langle n|n'\rangle=\delta_{nn'}$$

$$a^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle,\quad a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

x 与 p 的矩阵元(加上自然单位)

$$x_{n'n}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}+\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

$$p_{n'n} = \frac{i}{2}\left(\; n+1\,\delta_{n',n+1} - \; n\,\delta_{n',n-1}\right) \quad \mu\,\omega$$

相干态$|\alpha\rangle$是湮灭算符的本征态,满足

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad |\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_n \frac{\alpha^n}{\; n!}|n\rangle = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}|0\rangle$$

【典型习题解答】

11.1 **对一维谐振子,定义**

$$b = \frac{1}{2\mu\,\omega}(\mu\omega x + ip), \quad b^+ = \frac{1}{2\mu\,\omega}(\mu\omega x - ip) \tag{1}$$

① **求**$[b, b^+]$;

② **若** $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, $E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\omega$, $n = 0, 1, 2, \cdots$ 且 $\langle n|n\rangle = 1$,**求** $b^+ b|n\rangle$, $b^+|n\rangle$, $b|n\rangle$。

③ **计算矩阵元** x_{mn}, p_{mn} **并求谐振子的**$\langle T\rangle_n$, $\langle V\rangle_n$。

解:① **利用**$[x, p] = i$,**可得**

$$[b, b^+] = \cdots = \frac{1}{2\mu\,\omega}\{[\mu\omega x, -ip] + [ip, \mu\omega x]\} = 1 \tag{2}$$

②

$$b^+ b = \frac{1}{2\mu\,\omega}(\mu\omega x - ip)(\mu\omega x + ip)$$

$$= \frac{1}{\omega}\left(\frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\right) + \frac{i}{2}[x, p] = \frac{H}{\omega} - \frac{1}{2}$$

所以

$$b^+ b|n\rangle = \left(\frac{H}{\omega} - \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)|n\rangle = n|n\rangle \tag{3}$$

$$b^+ b b^+|n\rangle = b^+(b^+ b + 1)|n\rangle = b^+(n+1)|n\rangle = (n+1)b^+|n\rangle$$

可令

$$b^+|n\rangle = c|n+1\rangle \quad (c\,\text{为常数}) \tag{4}$$

又

$$\langle n|bb^+|n\rangle = \langle n|(b^+ b + 1)|n\rangle$$

即

$$\langle n+1|c^* c|n+1\rangle = \langle n|(n+1)|n\rangle$$

亦即

$$|c|^2\langle n+1|n+1\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle$$

或

$$|c|^2 = n+1$$

取

$$c = \; n+1$$

代入式(4),**即得**

$$b^+|n\rangle = \; n+1\,|n+1\rangle \tag{5}$$

由此,

$$b^+|n-1\rangle = \; n\,|n\rangle$$

所以

$$|n\rangle = \frac{b^+}{\sqrt{n}}|n-1\rangle$$

$$b|n\rangle = b\frac{1}{\sqrt{n}}b^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}bb^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}(b^+b+1)|n-1\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}}(n-1+1)|n-1\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{6}$$

③ **由式**(1)**反解出**

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(b+b^+),\quad p = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}(b-b^+) \tag{7}$$

$$x_{mn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\langle m|(b+b^+)|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left[\langle m|\sqrt{n}|n-1\rangle + \langle m|\sqrt{n+1}|n+1\rangle\right]$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left[\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\right] = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\delta_{m,n+1}\right] \tag{8}$$

$$p_{mn} = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}\langle m|(b-b^+)|n\rangle = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}\left[\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\right]$$

$$= -\mathrm{i}\alpha\hbar\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{m,n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\delta_{m,n+1}\right] \tag{9}$$

$$\langle n|T|n\rangle = \left\langle n\left|\frac{p^2}{2\mu}\right|n\right\rangle = -\frac{\hbar\omega}{4}\langle n|(b-b^+)^2|n\rangle$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\langle n|(bb^+ + b^+b)|n\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\langle n|(2b^+b+1)|n\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{1}{2}E_n \tag{10}$$

$$\langle n|V|n\rangle = \left\langle n\left|\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right|n\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\langle n|(b+b^+)^2|n\rangle$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\langle n|(bb^+ + b^+b)|n\rangle = \frac{1}{2}E_n \tag{11}$$

11.2　对一维谐振子，求消灭算符 a 的本征态，将其表示成各能量本征态 $|n\rangle$ 的线性迭加。

解：我们已知有

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{1}$$

除 $n=0$ **以外，一般** $|n\rangle$ **不是算符** a **的本征态(因为** $\hat{N}=a^+a$ **和** a **不对易)。设** a **的本征态** $|\alpha\rangle$ **为**

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\alpha)\,|n\rangle \tag{2}$$

满足本征方程

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{3}$$

α为本征值。式(2)**代入式**(3),**利用式**(1),**得**

$$a\sum_{n=0}^{\infty} C_n(\alpha)\,|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \alpha\sum_{n=0}^{\infty} C_n\,|n\rangle$$

以 $\langle n'-1|$ **左乘上式,并利用** $\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$,**即得**

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{n}}\alpha C_{n-1} \tag{4}$$

依次递推,即得

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0 \tag{5}$$

由归一化条件(**据式**(2))**有**

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_n |C_n|^2 = |C_0|^2\sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = 1$$

因为

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = e^{|\alpha|^2}$$

所以

$$C_0 = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\cdot e^{i\delta},\ \delta\text{为实数} \tag{6}$$

可取 $\delta=0$,**这时由式**(2)、**式**(5)、**式**(6)**三式可得**

$$|\alpha\rangle = \sum_n C_n\,|n\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle \tag{7}$$

此即算符 a **的本征态。由于** a **并非厄米算符,所以其本征值** α **原则上可取任意复数。式**(7)**称为谐振子的相干态**(coherent states),**其中** $|n\rangle$ **态的份额为**

$$|\langle n|\alpha\rangle|^2 = |C_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2} \tag{8}$$

11.3 证明谐振子相干态可以表示成

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}|0\rangle \tag{1}$$

并求出 $|\alpha\rangle$ **在** x **表象中的表示式** $\langle x|\alpha\rangle$ **(即波函数)。**

解:由

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1 \tag{2}$$

得
$$[a,\alpha a^{+}-\alpha^{*}a]=\alpha[a,a^{+}]=\alpha \tag{3}$$
反复利用式(3),可得
$$[a,(\alpha a^{+}-\alpha^{*}a)^{n}]=n\alpha(\alpha a^{+}-\alpha^{*}a)^{n-1} \tag{4}$$
因此
$$[a,\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a}]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[a,(\alpha a^{+}-\alpha^{*}a)^{n}]$$
$$=\sum_{n=1}^{\infty}\alpha\frac{(\alpha a^{+}-\alpha^{*}a)^{n-1}}{(n-1)!}=\alpha\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a} \tag{5a}$$
即对于任何$|\psi\rangle$,均有
$$a\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a}|\psi\rangle=\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a}(a+\alpha)|\psi\rangle \tag{5b}$$
但对谐振子基态$|0\rangle$,有
$$a|0\rangle=0 \tag{6}$$
于是
$$a\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a}|0\rangle=\alpha\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a}|0\rangle \tag{7}$$
亦即 $\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a}|0\rangle$ 是算符 a 的本征态,本征值为 α。因此,这就是相干态。

利用 Glauber 公式
$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[A,B]} \tag{8}$$
可得
$$\mathrm{e}^{\alpha a^{+}-\alpha^{*}a}=\mathrm{e}^{\alpha a^{+}}\mathrm{e}^{-\alpha^{*}a}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}} \tag{9}$$
代入式(1),得
$$|\alpha\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}\mathrm{e}^{\alpha a^{+}}\mathrm{e}^{-\alpha^{*}a}|0\rangle$$
其中
$$\mathrm{e}^{-\alpha^{*}a}|0\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\alpha^{*})^{n}}{n!}a^{n}|0\rangle=|0\rangle$$
求和项 $\sum\limits_{n=0}^{\infty}$ 中,只有 $n=0$ 时不为 0;n 为其他任何数,皆得 0。因此
$$|\alpha\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}\mathrm{e}^{\alpha a^{+}}|0\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}\sum_{n}\frac{\alpha^{n}}{n!}(a^{+})^{n}|0\rangle$$
$$=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{n}}{n!}|n\rangle \tag{10}$$
写成 x 表象中的波函数,即为

$$\psi_\alpha(x)=\langle x\mid\alpha\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x)\qquad(11)$$

11.4 **折合质量为 μ,力常数为 k 的谐振子受到微扰**

$$H'=cx^3+bx^4$$

作用,试导出此简谐振子第 n 个本征态的一级修正能量。

解: **取粒子数表象**, H'**表为**

$$H'=c\left[\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^+)\right]^3+b\left[\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^+)\right]^4$$

能量一级修正

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=c\left\langle n\left|\left[\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^+)\right]^3\right|n\right\rangle+b\left\langle n\left|\left[\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^+)\right]^4\right|n\right\rangle\qquad(1)$$

展开式(1)**时,凡其中** a,a^+ **幂次不等的项皆为零,因此第一项全部为** 0,**第二项保留了** 6 **个矩阵元不为** 0。**于是得**

$$E_n^{(1)}=\frac{b}{4\alpha^4}\langle n|[a^+a^+aa+aaa^+a^++aa^+aa^++a^+aa^+a+aa^+a^+a+a^+aaa^+]|n\rangle$$

利用

$$a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle,\quad a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$$
$$a^+a|n\rangle=n|n\rangle,\quad aa^+|n\rangle=(n+1)|n\rangle$$

得

$$E_n^{(1)}=\frac{b}{4\alpha^4}\langle n|[n(n-1)+(n+1)(n+2)+(n+1)^2+n^2+2n(n+1)]|n\rangle$$

$$=\frac{3b}{4\alpha^4}(2n^2+2n+1)=\frac{3b\hbar^2}{4k\mu}(2n^2+2n+1)$$

其中
$$\alpha^4=\frac{\mu^2\omega^2}{\hbar^2},\quad k=\mu\omega^2$$

在平时运算中,以下几个式子经常使用:

$$x=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^+)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}(a-a^+)$$

$$p=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\alpha}{\sqrt{2}}(a-a^+)$$

11.5 **一个各向同性的二维谐振子,质量为 μ,频率为 ω,在加入微扰 $H'=\lambda xy$ 后,求基态和第一激发态的一级能量修正。**

解:取粒子数表象,

$$H_0 = \omega\ a_x^+ a_x + \frac{1}{2} + \omega\ a_y^+ a_y + \frac{1}{2}$$

其解为 $E_n^{(0)} = \omega(N+1),\quad N = n_x + n_y,\quad n_x, n_y = 0,1,2,\cdots$

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = |n_x n_y\rangle$$

微扰 $H' = \lambda xy = \dfrac{\lambda}{2\mu\omega}(a_x^+ + a_x)(a_y^+ + a_y)$

基态能量一级修正

$$E_0^{(1)} = \frac{\lambda}{2\mu\omega}\langle 00|(a_x^+ + a_x)(a_y^+ + a_y)|00\rangle$$

$$= \frac{\lambda}{2\mu\omega}[\langle 0|a_x^+|0\rangle + \langle 0|a_x|0\rangle][\langle 0|a_y^+|0\rangle + \langle 0|a_y|0\rangle] = 0$$

再计算第一激发态的一级能量修正。微扰矩阵元

$$H'_{11} = \frac{\lambda}{2\mu\omega}\langle 10|(a_x^+ + a_x)(a_y^+ + a_y)|10\rangle$$

$$= \frac{\lambda}{2\mu\omega}[\langle 1|a_x^+|1\rangle + \langle 1|a_x|1\rangle][\langle 0|a_y^+|0\rangle + \langle 0|a_y|0\rangle] = 0$$

同理, $H'_{22} = \dfrac{\lambda}{2\mu\omega}\langle 01|(a_x^+ + a_x)(a_y^+ + a_y)|01\rangle = 0$

$$H'_{12} = H'_{21} = \frac{\lambda}{2\mu\omega}\langle 10|(a_x^+ + a_x)(a_y^+ + a_y)|01\rangle$$

$$= \frac{\lambda}{2\mu\omega}[\langle 1|a_x^+|0\rangle + \langle 1|a_x|0\rangle][\langle 0|a_y^+|1\rangle + \langle 0|a_y|1\rangle]$$

$$= \frac{\lambda}{2\mu\omega}\langle 1|1\rangle\langle 0|0\rangle = \frac{\lambda}{2\mu\omega}$$

由久期方程

$$\begin{vmatrix} -E_1^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{12} & -E_1^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

可求得 $E_1^{(1)} = \pm\dfrac{\lambda}{2\mu\omega}$

简并消除。

11.6 **设哈密顿算符** $H=\varepsilon a^{+}a+\lambda(a^{+}+a)$**,其中** ε **是正实数,** λ **是正参数,** a^{+} **和** a **为玻色型产生算符和消灭算符,求出** H **的基态本征值(准至** λ^{2} **级)和相应的本征态(准至** λ **级)。**

解法 1: **取**

$$H_{0}=\varepsilon a^{+}a,\quad H'=\lambda(a^{+}+a) \tag{1}$$

$$H_{0}|n\rangle=\varepsilon a^{+}a|n\rangle=\varepsilon n|n\rangle \tag{2}$$

H_{0} **本征解为**

$$E_{n}^{(0)}=n\varepsilon,\quad |\psi_{n}^{(0)}\rangle=|n\rangle \tag{3}$$

微扰矩阵元

$$\langle k|H'|0\rangle=\langle k|\lambda(a^{+}+a)|0\rangle=\lambda(\langle k|a^{+}|0\rangle+\langle k|a|0\rangle)=\lambda\delta_{1,k} \tag{4}$$

基态能量一级修正

$$E_{0}^{(1)}=\langle 0|H'|0\rangle=0 \tag{5}$$

二级修正

$$E_{0}^{(2)}=\sum_{k\neq 0}\frac{|\langle k|H'|0\rangle|^{2}}{E_{0}^{(0)}-E_{k}^{(0)}}=\sum_{k\neq 0}\frac{\lambda^{2}\delta_{1,k}}{-k\varepsilon}=-\frac{\lambda^{2}}{\varepsilon} \tag{6}$$

准至 λ^{2}**,基态本征值为**

$$E_{0}=E_{0}^{(0)}+E_{0}^{(1)}+E_{0}^{(2)}=-\frac{\lambda^{2}}{\varepsilon} \tag{7}$$

基态波函数一级修正

$$|\psi_{0}^{(1)}\rangle=\sum_{k\neq 0}\frac{\langle k|H'|0\rangle}{E_{0}^{(0)}-E_{k}^{(0)}}|k\rangle=-\frac{\lambda}{\varepsilon}|1\rangle \tag{8}$$

准至 λ **级,基态波函数为**

$$|\psi_{0}\rangle=|0\rangle-\frac{\lambda}{\varepsilon}|1\rangle \tag{9}$$

解法 2: **严格解。令**

$$b^{+}=a^{+}+\frac{\lambda}{\varepsilon},\quad b=a+\frac{\lambda}{\varepsilon}$$

有对易关系 $[b,b^{+}]=[a,a^{+}]=1$

即 b^{+}, b **亦为玻色型产生和消灭算符,**

$$b^{+}b=\left(a^{+}+\frac{\lambda}{\varepsilon}\right)\left(a+\frac{\lambda}{\varepsilon}\right)=a^{+}a+\frac{\lambda}{\varepsilon}(a^{+}+a)+\frac{\lambda^{2}}{\varepsilon^{2}}$$

所以

$$H=\varepsilon b^{+}b-\frac{\lambda^{2}}{\varepsilon}$$

取$(H, b^+ b)$**为完全集，它们的共同本征态为**$|\psi_n\rangle = |n\rangle$**，则有**

$$E_n = n\varepsilon - \frac{\lambda^2}{\varepsilon}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

由此得基态

$$E_0 = -\frac{\lambda^2}{\varepsilon}$$

又因为基态 $n = 0$**，所以**$|n\rangle \to |0\rangle$。

得

$$|\psi\rangle = |0\rangle$$

CHAPTER 12

12 全同粒子

【内容提要】

1．量子力学中，把内禀属性(静质量、电荷、自旋、磁矩、寿命等)相同的粒子称为全同粒子。

2．全同性原理：由于全同粒子的不可区分性，使得全同粒子所组成的体系中，二全同粒子相互代换不引起物理状态的改变。

全同性原理或表述为交换对称性：任何可观测量，特别是 Hamilton 量，对于任何两个粒子交换是不变的。

这就给描述全同粒子系的波函数带来很强的限制，即要求全同粒子系的波函数对于粒子交换具有一定的对称性。

全同性是一个可观测量。

3．全同粒子系的波函数的交换对称性与粒子的自旋有确定的联系。凡自旋为整数倍($s=0,1,2,\cdots$)的粒子，波函数对于两个粒子交换总是对称的，例如 π 介子($s=0$)，光子($s=1$)。它们遵守 Bose 统计，称为 Bose 子。凡自旋为 半奇数倍($s=1/2,3/2,\cdots$)的粒子，波函数对于两个粒子交换总是反对称的，例如电子，质子，中子等。它们遵守 Fermi 统计，称为 Fermi 子。

由"基本粒子"组成的复杂粒子，例如 α 粒子(氦核)或其他原子核，如在讨论的问题或过程中内部状态保持不变，即内部自由度完全被冻结，则全同性概念仍然适用，也可以当成一类全同粒子来处理。如果它们是由 Bose 子组成，则仍为 Bose 子。如它们由奇数个 Fermi 子组成，则仍为 Fermi 子；但如由偶数个 Fermi 子组成，则构成 Bose 子。

4．Pauli 不相容原理：不容许有两个全同的 Fermi 子处于同一个单粒子态。

在历届研究生入学试题中，有关全同粒子体系的问题主要是处理常见的两个或三个无相互作用的独立的全同粒子体系能量本征值问题(少数虽有相互作用但可用近似方法处理)。这类问题对考生的基本要求是：(1)明确全同粒子体系的物理特

性;(2)熟练掌握由完整的单粒子态构造体系对称(玻色子体系)或反对称(费米子体系)整体波函数的技巧及有关的数学计算(各基矢的对称化,态空间的直积等)。

【典型习题解答】

12.1　考虑在无限深势阱$(0 < x < a)$中运动的两电子体系,略去电子间的相互作用以及一切与自旋有关的相互作用,求体系的基态和第一激发态的波函数和能量。

解:二电子体系,总波函数反对称。

一维势阱中,体系能级为

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\pi^2\ {}^2}{2\mu a^2}(n_1^2 + n_2^2),\quad n_1, n_2 = 1, 2, \cdots$$

(1) 基态:　$E_{11} = \pi^2\ {}^2 / \mu a^2$

空间部分波函数是对称的:

$$\psi_1 = {}_1(1)\ {}_1(2),\qquad {}_n = \frac{2}{a}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

自旋部分波函数是反对称的:

$$\chi_{00} = \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)]$$

总波函数

$$\Phi = \psi_1\chi_{00} = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} {}_1(1)\alpha(1) & {}_1(2)\alpha(2) \\ {}_1(1)\beta(1) & {}_1(2)\beta(2) \end{vmatrix}$$

(2) 第一激发态:　$E_{12} = 5\pi^2\ {}^2 / 2\mu a^2$

空间部分波函数:　$\psi_{S,A} = \frac{1}{2}[\ {}_1(1)\ {}_2(2) \pm {}_1(2)\ {}_2(1)]$

自旋部分波函数:　$\chi_S(1,2) = \begin{cases} \alpha(1)\alpha(2) \\ \beta(1)\beta(2) \\ \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] \end{cases}$

$$\chi_A(1,2) = \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)]$$

二电子体系的总波函数

$$\Phi=\begin{cases}\psi_A\chi_S=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(1)\psi_2(2)-\psi_1(2)\psi_2(1)]\cdot\begin{cases}\alpha(1)\alpha(2)\\ \beta(1)\beta(2)\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)]\end{cases}\\ \psi_S\chi_A=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(1)\psi_2(2)+\psi_1(2)\psi_2(1)]\cdot[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]\end{cases}$$

基态不简并,第一激发态是四重简并的。

12.2　**两个自旋 1/2,质量为 m 的无相互作用的全同费米子同处线性谐振子场中,写出基态和第一激发态的能量本征值和本征函数,指出简并度。**

解: 单粒子能级及其波函数(空间部分)为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad \psi_n=N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}H_n(\alpha x)$$

$$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\quad n=0,1,2,\cdots$$

二粒子体系总波函数应是反对称的:

$$\Phi_A(1,2)=\psi_S(1,2)\chi_A(1,2)$$

或

$$\Phi_A(1,2)=\psi_A(1,2)\chi_S(1,2)$$

(1) 基态:

$$E_0=E_0(1)+E_0(2)=\hbar\omega$$

$$\Phi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(1)\psi_0(2)[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)],\text{不简并。}$$

(2) 第一激发态:

$$E_1=2\hbar\omega$$

$$\Phi_1=\begin{cases}\psi_A\chi_S=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(1)\psi_1(2)-\psi_0(2)\psi_1(1)]\begin{cases}\alpha(1)\alpha(2)\\ \beta(1)\beta(2)\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)]\end{cases}\\ \psi_S\chi_A=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(1)\psi_1(2)+\psi_0(2)\psi_1(1)]\cdot[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]\end{cases}$$

是四重简并的。

12.3　**一维无限深,宽为 1 的势阱中含有三个电子,势**

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0\leq x\leq 1\\ \infty, & \text{其他}\end{cases}$$

在温度 $T=0(\mathrm{K})$,并忽略库仑相互作用近似下,三个电子的平均能量 $E=$

12.4eV。问在同样近似下,在阱中若有四个电子时,其平均能量是多少?

解:
$$E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2\mu a^2 = n^2 E_1,\quad n=1,2,\cdots$$

根据 Pauli 原理,仅可能有两个电子处于基态(↑↓),故有

$$12.4\times 3 = 2E_1 + E_2 = 2E_1 + 2^2 E_1 = 6E_1$$

得
$$E_1 = 6.2\text{eV}$$

四个电子时,平均能量

$$E = \frac{1}{4}(2E_1 + 2E_2) = \frac{1}{4}(2E_1 + 2\times 2^2 E_1) = \frac{5}{2}E_1 = 15.5\text{eV}$$

12.4 两个质量为 μ、自旋 1/2 的全同费米子处在一维无限深势阱中,阱宽为 L,粒子间相互作用势 $V(x_1 - x_2)$可作为微扰。试用单粒子态和自旋态组出三个最低能态,用一阶微扰论计算第二、第三个最低能态的能量,忽略自旋相关力,积分不必求出。

解:单粒子波函数

空间部分

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\dfrac{n\pi}{L}x, & x\in[0,L] \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

自旋部分
$$\chi_{SM_S}$$

二粒子波函数可分离变量,

自旋部分

$$S=0,\ \text{单态}\ \chi_{00}$$

$$S=1,\ \text{三重态}\ \chi_{1M_S},\ M_S = 1,0,-1$$

空间部分

$$\Psi^A_{nm}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)],\ (n\neq m)$$

$$\Psi^S_{nm}(x_1,x_2) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) + \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)], & (n\neq m) \\ \psi_n(x_1)\psi_n(x_2) \end{cases}$$

所以总波函数

$$\Phi = \begin{cases} \Psi^A_{nm}(x_1,x_2)\chi^S_{SM_S} \\ \Psi^S_{nm}(x_1,x_2)\chi^A_{SM_S} \end{cases}$$

一维无限深势阱,

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2}(n^2+m^2),\quad n,m=1,2,\cdots$$

(1) 基态, $n=m=1$, $E_0=\pi^2\hbar^2/\mu L^2$

空间波函数对称,自旋波函数反对称: $\Phi_0=\Psi_{11}^S\chi_{00}$,非简并。

(2) 第一激发态, $n=1$, $m=2$, $E_1=5\pi^2\hbar^2/2\mu L^2$。

$$\Phi_1=\begin{cases}\Psi_{12}^A\chi_{1M_S},\ M_S=1,0,-1\\ \Psi_{12}^S\chi_{00}\end{cases}\quad \text{简并度}:4$$

(3) 第二激发态: $n=2$, $m=2$, $E_2=4\pi^2\hbar^2/\mu L^2$

空间对称,自旋反对称: $\Phi_2=\Psi_{22}^S(x_1,x_2)\chi_{00}$,非简并。

考虑相互作用势 $V(x_1-x_2)$,因为忽略自旋相关力,计算一级微扰修正,对于第一激发态:

$$\Delta E_1^A=\int \mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\,|\Psi_{12}^A(x_1,x_2)|^2V(x_1-x_2)$$

$$\Delta E_1^S=\int \mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\,|\Psi_{12}^S(x_1,x_2)|^2V(x_1-x_2)$$

对于第二激发态:

$$\Delta E_2=\int \mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\,|\Psi_{22}^S(x_1,x_2)|^2V(x_1-x_2)$$

12.5 宽为 L 的一维盒子内有两个质量均为 μ 的无自旋的粒子,其相互作用势为 $V(x_1,x_2)=a\delta(x_1-x_2)$,计算基态能量,精确到 a 的一次项。

解: 先不考虑 δ 势,则二粒子在无限深势阱

$$V(x_1,x_2)=\begin{cases}0, & 0\leq x_1,x_2\leq L\\ \infty, & \text{其他}\end{cases}$$

中运动,其哈密顿量为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_2^2}+V(x_1,x_2)$$

据无限深势阱结果,有

$$\Psi_{nm}(x_1,x_2)=\psi_n(x_1)\psi_m(x_2)=\frac{2}{L}\sin\frac{n\pi}{L}x_1\sin\frac{m\pi}{L}x_2$$

$$E_{nm}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2}(n^2+m^2)$$

基态, $$E_{11}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu L^2}$$

考虑 δ 势,基态能量修正到一级近似,

$$E_{11}^{(1)} = \overline{H'} = \int \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2\, a\delta(x_1 - x_2) \left(\frac{2}{L}\right)^2 \sin^2\frac{\pi x_1}{L} \sin^2\frac{\pi x_2}{L}$$

$$= \frac{4a}{L^2}\int_0^L \mathrm{d}x_1 \sin^4\frac{\pi x_1}{L} = \frac{3a}{2L}$$

所以
$$E_{11} = E_{11}^{(0)} + E_{11}^{(1)} = \frac{\pi^2\ ^2}{\mu L^2} + \frac{3a}{2L}$$

12.6　一维势阱具有下列单粒子能量本征态:

$$\psi_a(x), \psi_b(x), \psi_c(x), \cdots;\text{对应能级 } E_a < E_b < E_c < \cdots$$

两个无相互作用的粒子置于该势阱中。对下列不同情况写出:两粒子体系可具有的两个最低总能量值及相应的简并度;与上述能级对应的所有二粒子波函数。

① 两个自旋为 1/2 的可区分粒子;

② 两个自旋为 1/2 的全同粒子;

③ 两个自旋为 0 的全同粒子。

解:无相互作用时,二粒子空间波函数满足的 S.eq 为

$$\left[-\frac{\ ^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_1^2} - \frac{\ ^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_2^2} + V(x_1) + V(x_2)\right]\psi_i(x_1)\psi_j(x_2) = (E_i + E_j)\psi_i(x_1)\psi_j(x_2)$$

① 自旋 1/2,二可区分粒子,不必对称化。

基态:总能量
$$E_a + E_a = 2E_a$$

波函数为

$$\left.\begin{array}{l}\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|00\rangle \\ \psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|1M_S\rangle\ (M_S = 0, \pm 1)\end{array}\right\}\text{,四重简并。}$$

第一激发态:总能量
$$E_a + E_b$$

波函数为

$$\left.\begin{array}{l}\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)|00\rangle \\ \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)|1M_S\rangle \\ \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)|00\rangle \\ \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)|1M_S\rangle\end{array}\right\}\quad M_S = 0, \pm 1,\quad 8\text{ 重简并。}$$

② 自旋 1/2,二全同粒子,总波函数是反对称的。

基态:总能量
$$E_a + E_a = 2E_a$$

波函数为

$$\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|00\rangle\text{,非简并。}$$

第一激发态:总能量
$$E_a + E_b$$

波函数为

$$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)+\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)]\,|00\rangle\\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)-\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)]\,|1M_S\rangle\end{array}\right\}$$ 四重简并。

③ 自旋为 0,二全同粒子,总波函数是对称的。

基态:总能量 $E_a+E_a=2E_a$

波函数为

$$\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)\,|00\rangle$$,不简并。

第一激发态:总能量 E_a+E_b

波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)+\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)]\,|00\rangle$$,不简并。

【③中的 $|00\rangle$ 与①、②中的 $|00\rangle$ 意义不同,③中的 $|00\rangle$ 为自旋对称态,而①、②中的 $|00\rangle$ 为自旋反对称态。】

12.7 **两个质量为 m 的粒子处于一个边长为 $a>b>c$ 的长方形盒子中,粒子间的相互作用势为 $V=A\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$,体系处于与下列条件相容的最低能量态。试用一阶微扰论就下列条件分别计算体系能量:**

① 粒子不同;② 零自旋全同粒子;③ 自旋平行的自旋 1/2 粒子。

解:① 非微扰体系,$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi(\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_2)$(直积)

最低能态:

$$\Psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\begin{cases}\frac{8}{abc}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}\sin\frac{\pi y_1}{b}\sin\frac{\pi y_2}{b}\sin\frac{\pi z_1}{c}\sin\frac{\pi z_2}{c} & \begin{array}{l}0<x_i<a\\ 0<y_i<b,\ i=1,2\\ 0<z_i<c\end{array}\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

$$E_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)$$

一阶微扰

$$\begin{aligned}\Delta E&=\iint \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\Psi_0^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)A\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\Psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\\ &=A\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\,|\Psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1)|^2\\ &=\left(\frac{8}{abc}\right)^2\iiint\mathrm{d}x_1\mathrm{d}y_1\mathrm{d}z_1\sin^4\frac{\pi x_1}{a}\sin^4\frac{\pi y_1}{b}\sin^4\frac{\pi z_1}{c}\\ &=\frac{27A}{8abc}\end{aligned}$$

所以

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m}\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}\right) + \frac{27A}{8abc}$$

　　② 体系波函数对粒子交换对称，

最低能态

$$\Psi_S(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \Psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$$

一级修正后的能量

$$E_S = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m}\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}\right) + \frac{27A}{8abc}$$

　　③ 自旋平行，则自旋对称，空间反对称，总波函数反对称。

$$\text{因为 } a > b > c\text{，所以}\frac{1}{a^2} < \frac{1}{b^2} < \frac{1}{c^2}$$

能量最低态[$n_{1x} = 1$(**或** 2), $n_{1y} = 1$, $n_{1z} = 1$; $n_{2x} = 2$(**或** 1), $n_{2y} = 1$, $n_{2z} = 1$ **的态能量最低**]

$$\Psi_A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{211}(\boldsymbol{r}_1)\Psi_{111}(\boldsymbol{r}_2) - \Psi_{211}(\boldsymbol{r}_2)\Psi_{111}(\boldsymbol{r}_1)] \qquad (\Delta)$$

$$E_A = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m}\left(\frac{5}{2a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}\right)$$

一阶微扰

$$\Delta E = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \Psi_A^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) A\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)\Psi_A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = 0$$

(**当对** $\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$ **积分时，由于** $\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$**的作用，使得** $\boldsymbol{r}_2 \to \boldsymbol{r}_1$**，于是** $\Psi_A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$[**式**($\Delta$)]**中两项完全相同，相减后相消而使** $\Psi_A = 0$)。

所以

$$E_A = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m}\left(\frac{5}{2a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}\right)$$

即只考虑反对称空间波函数 Ψ_A **的能量。**

　　若换为两个谐振子，也类似处理。

CHAPTER 13

量子跃迁　散射

13

【内容提要】

1．由$|k\rangle \to |m\rangle$的跃迁几率是

$$P_{k\to m}(t) = |a_m(t)|^2 = \frac{1}{{}^2}\left|\int_0^t H'_{mk}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mk}t'}\,\mathrm{d}t'\right|^2$$

此公式适用的条件是

$$|P_{k\to m}(t)| \ll 1,\quad 对于\ m\neq k$$

2．对于周期性微扰：$H'(t) = F\cos\omega t$，有

$$P_{k\to m}(t) = \frac{\pi t}{2}|F_{mk}|^2\delta(E_m - E_k \pm \ \omega)$$

而单位时间的跃迁几率（即跃迁速率）为

$$w_{k\to m} = \frac{\mathrm{d}P_{k\to m}}{\mathrm{d}t} = \frac{\pi}{2}|F_{mk}|^2\delta(E_m - E_k \pm \ \omega)$$

如果末态是连续谱，由能量为E_k的态跃迁到能量间隔为$E_m \to E_m + \Delta E_m$的态的跃迁几率由费米黄金规则给出

$$P = \frac{2\pi t}{\ }|H'_{mk}|^2\rho(E_m)$$

跃迁速率为

$$w = \frac{2\pi}{\ }|H'_{mk}|^2\rho(E_m)$$

$\rho(E_m)$是末态的态密度。

3．光的发射和吸收

自然光照射到原子上，跃迁几率由坐标矩阵给出，是偶极跃迁。设原子从k态跃迁到m态（并设$E_m > E_k$），受激辐射系数B_{km}等于吸收系数B_{mk}，为

$$B_{km} = B_{mk} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} | \boldsymbol{r}_{km} |^2$$

自发辐射系数为

$$A_{km} = \frac{4e^2 \omega_{mk}^3}{3\hbar c^3} | \boldsymbol{r}_{km} |^2$$

4. 微分散射截面 $\sigma(\theta, \phi)$ 是单位时间内散射到 (θ, ϕ) 方向单位立体角内的粒子数 $\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\Omega}$ 与入射粒子流强度 j_i 之比:

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{1}{j_i} \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\Omega}$$

总散射截面

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \phi) \mathrm{d}\Omega$$

5. 中心力场中的弹性散射

(1) 分波法

微分散射截面

$$\sigma(\theta) = | f(\theta) |^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \right|^2$$

总截面

$$\sigma = \int \sigma(\theta) \mathrm{d}\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

其中 σ_l 为第 l 个分波的散射截面,

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

适用范围: 低能散射。$l \geq ka$ 的分波散射截面可略去。

光学定理: $\sigma = \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f(0)$

它给出向前散射振幅 $f(0)$ 与总截面的关系。

(2) Born 近似

微分散射截面

$$\sigma(\theta) = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2} \left| \int_0^{\infty} r V(r) \sin qr \,\mathrm{d}r \right|^2, \quad q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

适用条件: 高能散射。

【典型习题解答】

13.1 **基态氢原子处于平行板电场中,电场为**

$$\varepsilon=\begin{cases}0, & t\leqslant 0\\ \varepsilon_0 e^{-t/\tau}, & t>0\end{cases}$$

求经过长时间后氢原子处于 $2p$ 态的几率。

解:氢原子基态即 $1s$ 态,波函数为

$$\psi_{100}=(\pi a^3)^{-1/2}e^{-r/a}$$

$2p$ **态是三重简并的:**

$$\psi_{210}=\left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2}\frac{r}{\sqrt{3}a}e^{-r/2a}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$\psi_{21\pm 1}=\left(\frac{1}{2a}\right)^{3/2}\frac{r}{\sqrt{3}a}e^{-r/2a}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

跃迁几率

$$P_{1s\to 2p}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{2p,1s}(t')e^{i\omega_{21}t'}dt'\right|^2 \tag{1}$$

先计算各跃迁矩阵元 $H'_{2p,1s}$。**设电场沿** z **轴方向,则微扰哈密顿量**

$$H'=e\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{r}=e\varepsilon_0 r\cos\theta\, e^{-t/\tau}\ (t>0)$$

$$\begin{aligned}H'_{210,100}&=e\varepsilon_0 e^{-t/\tau}\int\psi_{210}^* r\cos\theta\,\psi_{100}\,dV\\&=e\varepsilon_0 e^{-t/\tau}\times\frac{1}{4\sqrt{2}\pi a^4}\int_0^\infty r^4 e^{-3r/2a}dr\int_0^\pi\cos^2\theta\sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\\&=e\varepsilon_0 e^{-t/\tau}\times\frac{1}{4\sqrt{2}\pi a^4}\left(\frac{2a}{3}\right)^5\times 4!\times\frac{4\pi}{3}\\&=\frac{\sqrt{2}\times 2^7}{3^5}ae\varepsilon_0 e^{-t/\tau}\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}H'_{211,100}&=e\varepsilon_0 e^{-t/\tau}\int\psi_{211}^* r\cos\theta\,\psi_{100}\,dV\\&=e\varepsilon_0 e^{-t/\tau}\int R_{21}^* R_{10}\, r\cos\theta\, Y_{11}^* Y_{00}\,dV=0\end{aligned}$$

同理, $H'_{21-1,100}=0$

故从 $1s\to 2p$ **态的跃迁几率即是从** $\psi_{100}\to\psi_{210}$ **态的跃迁几率。将式**(2)**代入式**(1),**完成积分,得**

$$P_{1s\to 2p} = \frac{2^{15} a_0^2 e^2 \varepsilon_0^2}{3^{10} \hbar^2}\left|\int_0^t e^{-t'/\tau + i\omega_{21} t'}\,dt'\right|^2$$

$$= \frac{2^{15} a_0^2 e^2 \varepsilon_0^2}{3^{10} \hbar^2}\cdot\left|\frac{1 - e^{-(1/\tau - i\omega_{21})t}}{1/\tau - i\omega_{21}}\right|^2 \xrightarrow{t\to\infty} \frac{2^{15} a_0^2 e^2 \varepsilon_0^2}{3^{10} \hbar^2}\cdot\frac{\tau^2}{1+\omega_{21}^2\tau^2}$$

其中
$$\omega_{21} = \frac{1}{\hbar}(E_2 - E_1) = \frac{1}{2}\frac{\mu e^4}{\hbar^3}\left(1 - \frac{1}{2^2}\right) = \frac{3\mu e^4}{8\hbar^3}$$

13.2 试计算在电场 $\varepsilon = \varepsilon_0 e^{-t/\tau}$ 作用下,经过充分长的时间后,电荷为 q 的线性谐振子由基态跃迁到其他能级的几率。

解: 将这一随时间衰减的电场的作用视为含时微扰,并设电场沿 x 轴正向,则微扰哈密顿量为

$$H' = -qx\varepsilon_0 e^{-t/\tau}$$

初态$|0\rangle$→末态$|k\rangle$的跃迁几率(一级近似)

$$P_{0\to k}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{k0}(t')e^{i\omega_{k0}t'}\,dt'\right|^2 = \frac{q^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\left|\int_0^t x_{k0}\,e^{-t'/\tau + i\omega_{k0}t'}\,dt'\right|^2 \quad (1)$$

矩阵元

$$x_{k0} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*(x)\,x\,\psi_0(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*(x)\cdot\frac{1}{\alpha}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\delta_{k1}$$

代入式(1),得

$$P_{0\to k} = \frac{q^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\right)^2\left|\int_0^t e^{-\left(\frac{1}{\tau} - i\omega_{10}\right)t'}\,dt'\right|^2$$

$$= \frac{q^2\varepsilon_0^2}{2\alpha^2\hbar^2}\left|\frac{1}{-\left(\frac{1}{\tau} - i\omega_0\right)}\left[e^{-\left(\frac{1}{\tau} - i\omega_{10}\right)t} - 1\right]\right|^2$$

当 $t \gg \tau$ 时,$e^{-\left(\frac{1}{\tau} - i\omega_{10}\right)t} \to 0\cdot e^{i\omega_{10}t} = 0$,而 $\omega_0 = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} = \frac{\hbar\omega}{\hbar} = \omega$,所以

$$P_{0\to k} = P_{0\to 1} = \frac{q^2\varepsilon_0^2}{2\alpha^2\hbar^2}\cdot\frac{\tau^2}{1+\omega^2\tau^2} = \frac{q^2\varepsilon_0^2\tau^2}{2\mu\hbar\omega(1+\omega^2\tau^2)}$$

13.3 求线性谐振子偶极跃迁的选择定则。

解: 偶极近似(即只考虑电场的作用,忽略磁场作用)的情况下,$H' = e\varepsilon x$。跃迁几率 $P_{n\to n'}$ 与矩阵元 $|x_{n'n}|^2$ 成正比。当 $|x_{n'n}| = 0$ 时,跃迁几率为零。故跃迁几率 $P_{n\to n'} \neq 0$ 的条件为 $|x_{n'n}| \neq 0$。

$$x_{n'n} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n'}(x)\,x\,\psi_n(x)\,dx$$

在线性谐振子的情况下,利用

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

得

$$x_{n'n}=\frac{1}{\alpha}\times\frac{n}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n'}(x)\psi_{n-1}(x)\,\mathrm{d}x+\frac{1}{\alpha}\times\frac{n+1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n'}(x)\psi_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{2\alpha}[\ n\,\delta_{n',n-1}+\ n+1\,\delta_{n',n+1}]$$

可见,要使$|x_{n'n}|\neq 0$,必须

$$n'=n-1\ 或\ n'=n+1$$

即要满足

$$\Delta n=n'-n=\pm 1$$

此即线性谐振子偶极跃迁的选择定则。

13.4 对低能粒子散射,设只考虑 s 波和 p 波,写出散射截面的一般形式。

解:

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2$$

只考虑 s 波和 p 波,则只取 $l=0,1$,于是

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0 P_0(\cos\theta)+3\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}\sin\delta_1 P_1(\cos\theta)|^2$$

$P_0(\cos\theta)=1$, $P_1(\cos\theta)=\cos\theta$,代入上式,得

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{k^2}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0+3\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}\sin\delta_1\cos\theta|^2$$

$$=\frac{1}{k^2}[\sin^2\delta_0+6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1)\cos\theta+9\sin^2\delta_1\cos^2\theta]$$

$$=\frac{1}{k^2}(A_0+A_1\cos\theta+A_2\cos^2\theta)$$

其中 $A_0=\sin^2\delta_0$, $A_1=6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1)$, $A_2=9\sin^2\delta_1$

13.5 用玻恩近似法计算如下势散射的微分截面:

① $V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>0\end{cases}$

② $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha r^2}$

③ $V(r)=\kappa\mathrm{e}^{-\alpha r}/r$

④ $V(r)=\gamma\delta(r)$

解：本题的势场皆为中心势场，故有

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,\mathrm{d}r,\quad q=2k\sin\frac{\theta}{2}\tag{1}$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2}\left|\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,\mathrm{d}r\right|^2\tag{2}$$

① $$\int_0^a r(-V_0)\sin qr\,\mathrm{d}r=-\frac{V_0}{q^2}(\sin qa-qa\cos qa)$$

所以
$$\sigma(\theta)=\frac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4q^6}(\sin qa-qa\cos qa)^2$$

② $$\int_0^\infty r(V_0\mathrm{e}^{-\alpha r^2})\sin qr\,\mathrm{d}r=\frac{V_0}{2\mathrm{i}}\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-\alpha r^2}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr}]\mathrm{d}r$$

$$=\frac{V_0}{2\mathrm{i}}\left[\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-\alpha\left(r-\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2-\frac{q^2}{4\alpha}}\mathrm{d}r-\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-\alpha\left(r+\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2-\frac{q^2}{4\alpha}}\mathrm{d}r\right]$$

$$=\frac{V_0}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\frac{q^2}{4\alpha}}\left[\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-\alpha\left(r-\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2}\mathrm{d}r-\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-\alpha\left(r+\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2}\mathrm{d}r\right]$$

$$=\frac{V_0}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\frac{q^2}{4\alpha}}[I_1-I_2]\tag{3}$$

其中

$$I_1=\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-\alpha\left(r-\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2}\mathrm{d}r=\int_0^\infty(r-\mathrm{i}q/2\alpha)\mathrm{e}^{-\alpha\left(r-\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2}\mathrm{d}r+\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\alpha\left(r-\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2}\mathrm{d}r$$

$$=\int_0^\infty\xi\mathrm{e}^{-\alpha\xi^2}\mathrm{d}\xi+\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\alpha\xi^2}\mathrm{d}\xi=\frac{1}{2\alpha}+\frac{\mathrm{i}q\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}}\tag{4}$$

类似地可求得

$$I_2=\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-\alpha\left(r+\frac{\mathrm{i}q}{2\alpha}\right)^2}\mathrm{d}r=\frac{1}{2\alpha}-\frac{\mathrm{i}q\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}}\tag{5}$$

式(4)、(5)**代入式**(3)，**得**

$$\int_0^\infty r(V_0\mathrm{e}^{-\alpha r^2})\sin qr\,\mathrm{d}r=\frac{V_0}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-q^2/4\alpha}\cdot\frac{\mathrm{i}q\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}}=\frac{V_0q\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}}\mathrm{e}^{-q^2/4\alpha}\tag{6}$$

代入式(2)，**得**

$$\sigma(\theta)=\frac{\pi\mu^2V_0^2}{4\hbar^4\alpha^3}\mathrm{e}^{-q^2/2\alpha}\tag{7}$$

③ $$\int_0^\infty r(\kappa e^{-\alpha r}/r)\sin qr\,\mathrm{d}r = \kappa\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qr\,\mathrm{d}r = I = -\frac{\kappa}{\alpha}\int_0^\infty \sin qr\,\mathrm{d}e^{-\alpha r}$$

$$= -\frac{\kappa}{\alpha}\sin qr e^{-\alpha r}\Big|_0^\infty - q\int_0^\infty e^{-\alpha r}\cos qr\,\mathrm{d}r = \frac{q\kappa}{\alpha}\int_0^\infty -\frac{1}{\alpha}\cos qr\,\mathrm{d}e^{-\alpha r}$$

$$= -\frac{q\kappa}{\alpha^2}\cos qr e^{-\alpha r}\Big|_0^\infty + q\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qr\,\mathrm{d}r = -\frac{q\kappa}{\alpha^2} - 1 + \frac{q}{\kappa}I$$

由此解得

$$I = \int_0^\infty r(\kappa e^{-\alpha r}/r)\sin qr\,\mathrm{d}r = \frac{q\kappa}{\alpha^2+q^2} \tag{8}$$

代入式(2),**解得**

$$\sigma(\theta) = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2}\left|\frac{q\kappa}{\alpha^2+q^2}\right|^2 = \frac{4\mu^2\kappa^2}{\hbar^4(\alpha^2+q^2)^2} \tag{9}$$

④ $$f(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\, e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})$$

将 $V(r)=\gamma\delta(r)$**代入,得**

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\, e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\gamma\delta(\boldsymbol{r}) = -\frac{\mu\gamma}{2\pi\hbar^2}$$

所以

$$\sigma(\theta) = |f(\theta,\varphi)|^2 = \frac{\mu^2\gamma^2}{4\pi^2\hbar^4} \tag{10}$$

可见,$\sigma(\theta)$**与** θ、φ**均无关,是各向同性的**,$\sigma=\dfrac{\mu^2\gamma^2}{4\pi^2\hbar^4}$。

13.6 高能粒子受到下列势场散射,求微分散射截面。

① $V(r)=\alpha/r^2$; ② $V(r) = \begin{cases} 0, & (r>a) \\ \dfrac{Ze^2}{r} - \dfrac{r}{b}, & r<a,\ b=\dfrac{a^2}{Ze^2} \end{cases}$

解:本题的势场皆为中心势场,故有

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,\mathrm{d}r,\quad q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{1}$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2}\left|\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,\mathrm{d}r\right|^2 \tag{2}$$

① $$\sigma(\theta) = \frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2}\left|\int_0^\infty \alpha\cdot\frac{\sin qr}{r}\mathrm{d}r\right|^2 = \frac{4\mu^2\alpha^2}{\hbar^4 q^2}\cdot\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 = \frac{\pi^2\alpha^2\mu^2}{4\hbar^4 k^2\sin^2(\theta/2)}$$

②
$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^a r\left(\frac{Ze^2}{r}-\frac{r}{b}\right)\sin qr\,\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2 qb}\int_0^a r^2\sin qr\,\mathrm{d}r-\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 q}\int_0^a \sin qr\,\mathrm{d}r \tag{3}$$

其中二积分

$$I_1=\int_0^a r^2\sin qr\,\mathrm{d}r=-\frac{a^2}{q}\cos qa+\frac{a^2}{q^2}\sin qa+\frac{2}{q^3}(\cos qa-1) \tag{4}$$

$$I_2=\int_0^a \sin qr\,\mathrm{d}r=\frac{1}{q}-\frac{1}{q}\cos qa \tag{5}$$

式(4)、(5)**连同** $b=\frac{a^2}{Ze^2}$**一并代入式**(3)，**得**

$$f(\theta)=\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 qa^2}\left[-\frac{a^2}{q}\cos qa+\frac{2a}{q^2}\sin qa+\frac{2}{q^3}\cos qa-\frac{2}{q^3}\right]$$

$$-\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 q}\left(\frac{1}{q}-\frac{1}{q}\cos qa\right)$$

$$=\frac{4\mu Ze^2}{\hbar^2 q^4 a^2}\left(qa\sin qa+\cos qa-1-\frac{q^2a^2}{2}\right)$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{16\mu^2Z^2e^4}{\hbar^4 q^8 a^4}\left(qa\sin qa+\cos qa-1-\frac{q^2a^2}{2}\right)^2 \tag{6}$$

参 考 书 目

1 曾谨言．量子力学导论．第二版．北京:北京大学出版社,1998
2 苏汝铿．量子力学．上海:复旦大学出版社,1997
3 尹鸿钧．量子力学．合肥:中国科学技术大学出版社,1999 .10
4 钱伯初,曾谨言著．量子力学习题精选与剖析．第二版．北京:科学出版社,1999
5 周世勋．量子力学教程．北京:人民教育出版社,1979
6 阮图南,徐辅新,顾恩普主编．大学物理解题法诠释．合肥:安徽教育出版社,1994.12 第一版。
7 马涛,倪致祥,张德明,谈欣柏编．量子力学．合肥:安徽教育出版社,1986