量子力学练习题参考答案

一、 简答题

1. 简述光电效应中经典物理学无法解释的实验现象。

答：光电效应中经典物理学无法解释的实验现象有：

（**1**）对入射光存在截止频率ν_0，小于该频率的入射光没有光电子逸出；（**2**）逸出的光电子的能量只与入射光的频率ν有关，入射光的强度无关；（**3**）截止频率只与材料有关而与光强无关；（**4**）入射光的强度只影响逸出的光电子的数量；（**5**）无论多弱的光，只要其频率大于截止频率，一照射到金属表面，就有光电子逸出。

2. 简述 **Planck** 的光量子假设。

答：**Planck** 的光量子假设为，对于一定的频率为ν的辐射，物体吸收或发射的能量只能以$h\nu$为单位来进行。

3. 写出 **Einstein** 光电方程，并阐述 **Einstein** 对光电效应的量子解释。

答：**Einstein** 光电方程为$h\nu=\frac{1}{2}mv^2+W$。

Einstein 对光电效应的量子解释为：

（**1**）存在截止频率ν_0，$W=h\nu_0$，小于该频率的入射光无光电子逸出；（**2**）无论多弱的光，只要$\nu>\nu_0$，一经照射，马上就有光电子逸出；（**3**）逸出功由材料决定，即截止频率由材料决定；（**4**）光强代表总入射能量的多少，并不代表单个光子的能量，光强只影响光电子的数量而不影响其能量，即光电子的能量与入射光的频率有关与光强无关。

4.　简述 **Compton** 散射实验。

答：如果光具有粒子性，当高能光子与低能电子碰撞时，光子就会损失能量，波长就会增加，这个实验就是康普顿散射实验，它证实了光的粒子性。

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c}\left(1-\cos\theta\right)$$

5.　简述 **Bohr** 的量子论，并对它进行简单的评价。

答：**Bohr** 的量子论是建立在以下的假设上的

（**1**）定态假设：电子在原子中可以处于某种特定的状态（定态）而不辐射能量；

（**2**）量子化假设　$\oint p_k \mathrm{d}q_k = n_k h$；

（**3**）频率条件　$h\nu = E_i - E_f$。

Bohr 的量子论用量子化假设来论证量子化，带有明显的人为的性质，仍然保留经典轨道的概念，无法处理更复杂的原子的光谱，只能处理周期运动，不能处理非束缚态问题。但在处理氢原子光谱时取得很大的成功，说明其假设有一定的合理成份。

6.　写出 **Sommerfeld** 用正则坐标与正则动量表示的量子化条件。

答：$\oint p_k \mathrm{d}q_k = n_k h \quad (n_k = 1,2,3,\cdots)$

其中(q_k, p_k)代表一对共轭的正则坐标和动量。

7.　利用光波的双缝干涉实验，说明 **Born** 的概率波解释。

答：**Born** 认为，微观粒子的运动状态用“波函数”来描述，粒子通过双缝时，每一个缝都有一个所谓的“波”通过，只不过与经典波的强度对应的，是粒子在某点附近出现的相对概率。对通过双缝的粒子，其概率“分成”了两束（波动性），但对某个具体的粒子，它只能通过其中的一个缝（粒子

性）。

8． 阐述概率波波函数的基本特性。

答：波函数的统计诠释，必然要求波函数具有下面的性质

（**1**）波函数必须是有界且平方可积的；

（**2**）波函数可以有一个常数因子的不确定性；

（**3**）概率密度（即$\psi^*\psi$）必须是单值的；

（**4**）波函数必须是连续的。

9． 设$\psi(x)=e^{-ikx}$，粒子的位置几率的分布如何？此波函数能否归一化？

答：粒子位置分布的概率密度为

$$\rho=\psi^*(x)\psi(x)=e^{ikx}e^{-ikx}=1$$

在整个位置空间，粒子的概率分布相同，这不是真实的物理问题，是对物理问题进行理想化处理的结果，波函数不能归一化。

10． 设$\psi(x)=\delta(x)$，粒子的位置几率的分布如何？此波函数能否归一化？

答：粒子位置分布的概率密度为

$$\rho=\psi^*(x)\psi(x)=\delta^2(x)$$

利用公式$\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\delta(x-x_0)\mathrm{d}x=f(x_0)$，得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta^2(x)\mathrm{d}x=\delta(0)=\infty$$

该波函数也不能归一化，这也不是真实的物理问题，是对物理问题进行理想化处理的结果。

11． 设粒子波函数为$\psi(x,y,z)$，写出在$(x,x+\mathrm{d}x)$范围找到粒子的几率。

答：在$(x,x+\mathrm{d}x)$范围找到粒子的几率为

$$\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\mathrm{d}z\psi^*(x,y,z)\psi(x,y,z)$$

或者： $\left[\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\,\mathrm{d}y\mathrm{d}z\right]\mathrm{d}x$

12. ***N*** 粒子系的波函数为 $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)$，写出在 $(\vec{r}_1,\vec{r}_1+\mathrm{d}\vec{r}_1)$ 中找到粒子 **1** 的几率（其它粒子的位置不限）。

答：在 $(\vec{r}_1,\vec{r}_1+\mathrm{d}\vec{r}_1)$ 范围找到粒子的几率为

$$\mathrm{d}\vec{r}_1\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\vec{r}_2\cdots\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\vec{r}_N\psi^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)$$

13. 设一维自由粒子的初态 $\psi(x,0)=e^{ip_0x/\hbar}$，写出 $\psi(x,t)$。

答：对一维自由粒子，其波函数为平面波的形式为

$$\psi(x,t)=e^{ip_0x/\hbar}\cdot e^{-iEt/\hbar}=e^{-i(Et-p_0x)/\hbar}$$

14. 写出动量算符、动能算符以及在直角坐标系中角动量各分量的算符的表达式。

答：动量算符 $\hat{p}=-i\hbar\nabla$

动能算符 $\hat{T}=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla\right)^2$

角动量各分量的算符

$$\hat{L}_x=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)，\quad \hat{L}_y=-i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)，\quad \hat{L}_z=-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

15. 写出在球面坐标系下角动量平方算符的表达式。

答：$\hat{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

16. 简述粒子动量与位置的不确定关系。

答：若要想精确地知道粒子的动量值，就无法得知粒子的具体位置；要想精确地知道粒子的位置，就无法得知粒子的具体动量值，位置分布的均方差和动量分布的均方差受到下面关系的制约

$$\Delta x\cdot\Delta p\geq\frac{\hbar}{2}$$

17. 简述量子力学的态叠加原理。

答：量子力学的态叠加原理是指如果ψ_1、ψ_2、ψ_3……均是体系的可能状态，则它们的线性组合

$$\psi=\sum_n C_n\psi_n$$

也是体系的可能状态。

18. 描述微观粒子的隧道效应。

答：微观粒子入射到势场中时，可以穿透大于粒子入射能量的势场，这种效应称为隧道效应。

19. 写出一维谐振子的 **Hamilton** 量、定态 **Schrödinger** 方程以及能量本征值的表达式。

答：一维谐振子的 **Hamilton** 量为 $\widehat{H}=\hat{T}+V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

定态 **Schrödinger** 方程为 $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)=E\psi(x)$

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

20. 简述处于基态的一维谐振子的特征长度（经典回转点）。

答：一维谐振子的基态能量为 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$

此时对应于经典振子的振幅为 $\frac{1}{2}m\omega^2A^2=\frac{1}{2}\hbar\omega$

于是有 $x_0=A=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

x_0称为谐振子的特征长度（经典回转点），也就是经典谐振子的振幅，经典粒子无法逾越此禁区，但是微观粒子能够穿越此经典禁区。

21. 简述“箱归一化”方法的基本思想。

答:“箱归一化”方法,其基本思想是先把波函数限制在一个正六面体的“箱”中，此时体系所处的状态是束缚态，能够把波函数归一化。当把波函数归一化后，再把“箱”扩展到无穷空间，由此来确定波函数中的“归一化常数”。

22.　完整阐述不确定性原理。

答：由于粒子波函数对空间、动量、动能、总能量、角动量等的概率分布的同时决定，也使得它们的分布同时制约，这种制约就是不确定性原理，它是任何两个力学量在任何状态下的涨落（用均方差表示）必须满足的相互制约关系，公式表示为

$$\Delta A\cdot\Delta B\geq\frac{1}{2}\cdot\left|\overline{[\widehat{A},\widehat{B}]}\right|$$

23.　如果算符 $\hat{A}$ 的本征值分别为 $A_1,A_2,A_3,\cdots$，在算符 $\hat{A}$ 的自身表象中写出算符 $\hat{A}$ 的矩阵形式。

答：算符在其自身的表象中，矩阵的表示形式为一对角矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} A_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & A_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & A_3 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

24.　什么是守恒量？简述在概率密度分布不随时间改变的问题上，定态与守恒量的区别。

答：如果力学量算符 $\widehat{A}$ 满足：（**1**）不显含时间；（**2**）与体系 **Hamilton** 算符 $\widehat{H}$ 对易，则称力学量 **A** 为体系的一个守恒量。

在概率密度分布不随时间改变的问题上，定态与守恒量的区别为：在定态下，所有力学量的概率分布不随时间改变；在一切状态下，守恒量的概率

分布不随时间改变。

25. 在S_z表象下，写出算符$\hat{S}_z$及其本征态$|\uparrow\rangle$和$|\downarrow\rangle$的矩阵表达式。

答：在S_z表象下，算符$\hat{S}_z$的矩阵表达式为

$$\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

其本征态$|\uparrow\rangle$和$|\downarrow\rangle$的矩阵表达式分别为

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{和} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

26. 设角动量$\hat{J}_1$和$\hat{J}_2$彼此独立，其量子数分别为$j_1 = 1$、$j_2 = \frac{1}{2}$，在无偶合表象中写出总角动量$\hat{J}_1 + \hat{J}_2$的所有本征态。

答：无偶合表象中总角动量$\hat{J}_1 + \hat{J}_2$的所有本征态为（根据$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$）

$|1,1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$、$|1,1,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$、$|1,0,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$、$|1,0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$、$|1,-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$和$|1,-1,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$

27. 设角动量$\hat{J}_1$和$\hat{J}_2$彼此独立，其量子数分别为$j_1 = 1$、$j_2 = \frac{1}{2}$，在偶合表象中写出总角动量$\hat{J}_1 + \hat{J}_2$的所有本征态。

答：偶合表象中总角动量$\hat{J}_1 + \hat{J}_2$的所有本征态为（根据$|j_1, j_2, j, m\rangle$）

$|1,\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle$、$|1,\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$、$|1,\frac{1}{2},\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle$、$|1,\frac{1}{2},\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle$、$|1,\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$和$|1,\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$

28. 对非简并态的微扰，写出能级与波函数的一级近似值与能级的二级近似值。

答：对非简并态的微扰，能级与波函数的一级近似值分别为

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn}$$

$$\psi_n=\psi_n^{(0)}+\sum_k{}'\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}$$

其中 $H'_{kn}\equiv\langle\psi_k^{(0)}|\widehat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle$。

能级的二级近似值为

$$E_n=E_n^{(0)}+H'_{nn}+\sum_k{}'\frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$$

29. 简述变分法的基本思想。

答：变分法的基本思想是，首先选取含有参数λ的尝试性波函数$\psi(\lambda)$，用之求体系 **Hamilton** 量$\widehat{H}$的平均值$\overline{H}(\lambda)$；然后求体系 **Hamilton** 量的平均值取最小值时参数λ的取值，由此得出体系 **Hamilton** 量平均值的最小值$\overline{H}_{\min}$，这就是体系基态能量E_0的近似值。

30. 设体系的微扰$\hat{H}'$从$t=0$时刻开始引入，在微扰作用下，在时刻$[0,t]$内体系从初态Φ_k跃迁到终态Φ_m的概率是多少？

答：在时刻$[0,t]$内体系从初态Φ_k跃迁到终态Φ_m的概率是

$$W_{mk}=|a_m(t)|^2$$

其中$a_m(t)=\dfrac{1}{i\hbar}\displaystyle\int_0^t e^{i\omega_{mk}\tau}H'_{mk}\mathrm{d}\tau$，$H'_{mk}=\displaystyle\int\varphi_m^*\widehat{H}'(t)\varphi_k\mathrm{d}\tau$，$\omega_{mk}=(E_m-E_k)/\hbar$

二、 证明题

1. 证明黑体辐射的辐射本领$E(\nu,T)$与$E(\lambda,T)$之间的关系。

证明：黑体的辐射本领是指辐射体单位面积在单位时间辐射出来的、单位频率间隔内的能量，用$E(\nu,T)$表示。由于$\nu=c/\lambda$，所以黑体的辐射本领也可以表示成$E(\lambda,T)$。由定义得单位面积、单位时间内辐射的能量为

$$\int_0^\infty E(\nu,T)\mathrm{d}\nu = \int_0^\infty E(\lambda,T)\mathrm{d}\lambda$$

利用$\nu = c/\lambda$，得　$\mathrm{d}\nu = -\frac{c}{\lambda^2}\mathrm{d}\lambda$，所以有

$$\int_0^\infty E(\nu,T)\mathrm{d}\nu = \int_\infty^0 E(\nu,T)\left(-\frac{c}{\lambda^2}\right)\mathrm{d}\lambda$$

$$= \int_0^\infty \frac{c}{\lambda^2} E(\nu,T)\mathrm{d}\lambda$$

由此得到辐射本领的频率表示与波长表示之间的关系为：

$$E(\lambda,T) = \frac{\nu^2}{c} E(\nu,T)$$

2.　从 **Schrödinger** 方程出发，证明量子力学中定域几率守恒的表达式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

式中，概率流密度$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$，并阐明定域几率守恒表达式的物理意义。

证明：由 **Schrödinger** 方程$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$两边左乘$\psi^*$，得

$$\psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \psi^* \hat{H}\psi \qquad \textbf{(1)}$$

上式取复共轭，考虑到$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$为实算符，得

$$\psi\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right) = \psi \hat{H}\psi^* \qquad \textbf{(2)}$$

（**1**）式与（**2**）式相减，得

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

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

上式对任意闭区域Ω积分，得

$$i\hbar\int_\Omega\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right)\mathrm{d}\vec{r}=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_\Omega\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)\mathrm{d}V$$

即 $\int_\Omega\frac{\partial}{\partial t}\rho\mathrm{d}\vec{r}=-\int_\Omega(\nabla\cdot\vec{j})\mathrm{d}V$

考虑到积分区域的任意性，即有 $\frac{\partial}{\partial t}\rho+\nabla\cdot\vec{j}=0$

上式在量子力学中称为概率守恒定律的微分形式，它表明：在非相对论量子力学中，粒子既不会产生，也不会湮灭，某个地方出现粒子的概率增加了，一定是有概率“流”进去，别的地方出现粒子的概率必定会减少。反之，某个地方出现粒子的概率减少了，一定是有概率“流”出去，别的地方出现粒子的概率必定会增加。

3. 设$\psi_1(\vec{r},t)$和$\psi_2(\vec{r},t)$均为同一 **Schrödinger** 方程的两个解，证明：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\mathrm{d}^3r\psi_1^*(\vec{r},t)\psi_2(\vec{r},t)=0$$

证明：由题意，有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(\vec{r},t)=\hat{H}\psi_1(\vec{r},t)\qquad\textbf{(1)}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2(\vec{r},t)=\hat{H}\psi_2(\vec{r},t)\qquad\textbf{(2)}$$

由$\psi_1^*\cdot(2)-\psi_2\cdot(1)^*$，得

$$i\hbar\psi_1^*\frac{\partial}{\partial t}\psi_2+i\hbar\psi_2\frac{\partial}{\partial t}\psi_1^*=\psi_1^*\hat{H}\psi_2-\psi_2\hat{H}\psi_1^*$$

上式对全空间积分，得

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \mathrm{d}^3 r(\psi_1{}^*\psi_2)=\int \mathrm{d}^3 r(\psi_1{}^*\hat{H}\psi_2-\psi_2\hat{H}\psi_1{}^*)$$

$$=(\psi_1,\hat{H}\psi_2)-(\psi_2{}^*,\hat{H}\psi_1{}^*) \qquad \textbf{(3)}$$

由于算符 $\hat{H}$ 为厄米算符，且为实算符，有

$$(\psi_2{}^*,\hat{H}\psi_1{}^*)=(\psi_2{}^*,\hat{H}^+\psi_1{}^*)$$

$$=(\psi_1,\hat{H}^*\psi_2)=(\psi_1,\hat{H}\psi_2)$$

由（**3**）式可见

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \mathrm{d}^3 r(\psi_1{}^*\psi_2)=0$$

4． 证明：如果 $\psi(\bar{r})$ 是定态 **Schrödinger** 方程的解，则其 $\psi(\bar{r})^*$ 也是定态 **Schrödinger** 方程的解，并且与 $\psi(\bar{r})$ 对应同一能量本征值。

证明：由定态 **Schrödinger** 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})\right)\psi(\bar{r})=E\psi(\bar{r})$$

注意到算符 $\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})$ 为实算符，即 $\widehat{H}^*=\widehat{H}$，上式取复共轭，得

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})\right)\psi(\bar{r})^*=E\psi(\bar{r})^*$$

显然 $\psi(\bar{r})^*$ 也是 **Schrödinger** 方程的解，且与 $\psi(\bar{r})$ 对应同一能量本征值。

5． 证明：如果 $V(\bar{r})$ 具有空间反演不变性，即 $V(\bar{r})=V(-\bar{r})$，并且 $\psi(\bar{r})$ 是定态 **Schrödinger** 方程的解，则 $\psi(-\bar{r})$ 也是定态 **Schrödinger** 方程的解，并且与 $\psi(\bar{r})$ 对应同一能量本征值。

证明：定态 **Schrödinger** 方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

因为算符

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

具有的空间反演不变性，即

$$\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2}+\frac{\partial^2}{\partial(-y)^2}+\frac{\partial^2}{\partial(-z)^2}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

对定态 **Schrödinger** 方程做变换$\vec{r}\to-\vec{r}$，得

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(-\vec{r})\right)\psi(-\vec{r})=E\psi(-\vec{r})$$

再根据题设， $V(\vec{r})=V(-\vec{r})$，得

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\psi(-\vec{r})=E\psi(-\vec{r})$$

由此可见，$\psi(-\vec{r})$也是定态 **Schrödinger** 方程的解，且与$\psi(\vec{r})$对应同一能量本征值。

6. 证明：对一维阶梯形势场

$$V(x)=\begin{cases}V_1 & (x<a)\\ V_2 & (x>a)\end{cases}$$

若(V_1-V_2)有限，则定态波函数$\psi(\vec{r})$及其导数$\psi'(\vec{r})$一定是连续的。

证明：由一维定态 **Schrödinger** 方程

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

整理，得

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi(x) \qquad \text{（1）}$$

显然，在$V(x)$连续区域，$\psi''(x)$存在，所以，$\psi'(x)$和$\psi(x)$一定是连续的。

在$x=a$处，$V(x)\psi(x)$发生跃变，但变化有限（由于V_2-V_1有限）。

（**1**）式在区域$[a-0^+, a+0^+]$积分，得

$$\psi'(a+0^+) - \psi'(a-0^+) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-0^+}^{a+0^+}\left[E - V(x)\right]\psi(x)\mathrm{d}x = 0$$

由此可见，$\psi'(x)$在$x=a$点连续，因此，在$x=a$点，$\psi(x)$也连续。

7. 证明：如果$\psi_1(x)$和$\psi_2(x)$是一维定态 **Schrödinger** 方程的对应同一能量本征值的解，则

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = C \text{（常数）}$$

并且对于束缚态，有$C=0$。

证明：由题意，有

$$\psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi_1(x) = 0 \qquad \text{（1）}$$

$$\psi_2''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi_2(x) = 0 \qquad \text{（2）}$$

$\psi_1\cdot(2) - \psi_2\cdot(1)$，得

$$\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'' = 0$$

上式即 $(\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1')' = 0$

所以有

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = C \qquad \text{（3）}$$

对于束缚态，$x\to\infty$时，$\psi\to 0$，则（**3**）式中$C=0$。

所以，对同属于能量E的任何两个束缚态波函数ψ_1和ψ_2，必定有

$$\psi_1\psi_2' = \psi_2\psi_1'$$

8. 证明：如果在规则势场（即不存在奇点的势场）中运动的粒子处于束缚态，则波函数一定是不简并的。

证明：设ψ_1和ψ_2均是定态 **Schrödinger** 方程的对应于同一能量本征值的解，且是束缚态，于是，有

$$\psi_1\psi_2' = \psi_2\psi_1'$$

上式可整理成 $\dfrac{\psi_1'}{\psi_1} = \dfrac{\psi_2'}{\psi_2}$

积分，得 $\ln\psi_1 = \ln\psi_2 + C$

上式可写成$\ln\dfrac{\psi_1}{\psi_2} = C$，也就是$\psi_1 = C'\psi_2$

由此可见，ψ_1与ψ_2线性相关，能级不简并。

9. 证明坐标与动量算符之间的对易关系式

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

证明：对任意波函数$\psi(\vec{r}, t)$，有

$$(x\hat{p}_x)\psi = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi$$

$$(\hat{p}_x x)\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar\psi - i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi$$

所以，有

$$[x, \hat{p}_x]\psi \equiv (x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\psi = i\hbar\psi$$

由算符相等的定义，得 $[x,\hat{p}_x]=i\hbar$

10． 证明：不管体系处于什么状态，厄米算符的平均值必为实数。

证明：根据厄米算符的定义 $\hat{A}=\hat{A}^{+}=\tilde{\hat{A}}*$，以及转置算符的定义

$$(\psi,\tilde{\hat{A}}\varphi)=(\varphi*,\hat{A}\psi*)$$

有 $(\psi,\hat{A}\varphi)=(\psi,\hat{A}^{+}\varphi)=(\varphi*,\hat{A}*\psi*)=(\varphi,\hat{A}\psi)*$

于是，厄米算符的平均值

$$<A>=(\psi,\hat{A}\psi)=(\psi,\hat{A}\psi)*=<A>*$$

要使上式成立，显然厄米算符 $\hat{A}$ 的平均值必须为实数。

11． 证明：若线性厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 有不止一个共同本征函数，且这些共同本征函数构成完备系，则算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 必定可以对易。

证明：设线性厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同的完备本征函数系为 $\{\psi_n\}$，则对空间中任意一个波函数 ψ，可按该完备函数系展开为

$$\psi=\sum_n C_n\psi_n$$

于是，有

$$(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi=\sum_n C_n(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi_n$$

$$=\sum_n C_n(A_nB_n-B_nA_n)\psi_n=0$$

即 $[\hat{A},\hat{B}]=0$

12． 证明：如果一个量子力学体系存在守恒量 A，则在体系的任何状态下，守恒量 A 的概率分布不随时间改变。

证明：如果 **A** 是守恒量，则根据守恒量的定义，**A** 不显含时间且$[\widehat{A},\widehat{H}]=0$。取包括力学量$\widehat{H}$和$\widehat{A}$在内的一组力学量完全集的完备基$\{\psi_n\}$，对于任意态矢量$|\psi\rangle$，有

$$|\psi\rangle=\sum_n a_n|\psi_n\rangle$$

则守恒量A的平均值为

$$\overline{A}=\langle\psi|\widehat{A}|\psi\rangle=\sum_{m,n}A_n a_m{}^* a_n\langle\psi_m|\psi_n\rangle=\sum_n A_n a_n{}^* a_n$$

守恒量 **A** 的概率分布不随时间改变，是指$a_n{}^*a_n$值不随时间改变。

$$\frac{\mathrm{d}(a_n{}^*a_n)}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}a_n{}^*}{\mathrm{d}t}a_n+c.c.=\langle\frac{\partial}{\partial t}\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle+c.c.\qquad\text{（展开系数）}$$

$$=\langle\frac{\widehat{H}}{i\hbar}\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle+c.c.\qquad\text{（Schrödinger 方程）}$$

$$=-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\widehat{H}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle+c.c.\qquad\text{（厄米算符）}$$

$$=-\frac{E_n}{i\hbar}\langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle+c.c.\qquad\text{（本征函数）}$$

$$=-\frac{E_n}{i\hbar}\left|\langle\psi|\psi_n\rangle\right|^2+c.c.$$

$$=0\qquad\text{（}-\frac{E_n}{i\hbar}\left|\langle\psi|\psi_n\rangle\right|^2\text{为纯虚数）}$$

此即守恒量 **A** 的概率分布不随时间改变。

13. 在σ_z表象中，利用算符的对易关系证明：$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$。

证明：首先证明 **Pauli** 算符的反对易关系式 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=0$

利用 **Pauli** 算符的反对易关系式$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y=2i\hat{\sigma}_x$，得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=\frac{1}{2i}\left[(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\right]$$

$$=\frac{1}{2i}\left[(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y^2)+(\hat{\sigma}_y^2\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\right]$$

$$=\frac{1}{2i}(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_z+\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)=0$$

把 **Pauli** 算符的对易关系式 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=2i\hat{\sigma}_z$

与反对易关系式 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=0$

相加，得 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=i\hat{\sigma}_z$

两边右乘$\hat{\sigma}_z$，利用$\hat{\sigma}_z^2=1$，即得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$$

14. 证明：如果角动量$\hat{J}_1$和$\hat{J}_2$彼此独立，则对于总角动量$\hat{J}=\hat{J}_1+\hat{J}_2$仍然有：$\hat{\vec{J}}\times\hat{\vec{J}}=i\hbar\hat{\vec{J}}$。

证明：由于$\hat{J}_1$和$\hat{J}_2$彼此独立，有 $[\hat{\vec{J}}_1,\hat{\vec{J}}_2]=0$

于是，得

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y]=[\hat{J}_{1x}+\hat{J}_{2x},\hat{J}_{1y}+\hat{J}_{2y}]$$

$$=[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{1y}]+[\hat{J}_{2x},\hat{J}_{2y}]$$

$$=i\hbar\hat{J}_{1z}+i\hbar\hat{J}_{2z}=i\hbar\hat{J}_z \qquad \textbf{(1)}$$

同理可证

$$[\hat{J}_y,\hat{J}_z]=i\hbar\hat{J}_x \qquad \textbf{(2)}$$

$$[\hat{J}_z,\hat{J}_x]=i\hbar\hat{J}_y \qquad \textbf{(3)}$$

上面的（**1**）、（**2**）、（**3**）三式合写起来就是

$$\hat{\vec{J}}\times\hat{\vec{J}}=i\hbar\hat{\vec{J}}$$

15. 证明：如果角动量$\hat{J}_1$和$\hat{J}_2$彼此独立，则对于总角动量$\hat{J}=\hat{J}_1+\hat{J}_2$仍然有：$[\hat{J}^2,\hat{J}_\alpha]=0$（其中$\alpha=1,2,3$分别表示$x,y,z$）。

证明：由于$\hat{J}_1$和$\hat{J}_2$彼此独立，有 $[\hat{\vec{J}}_1,\hat{\vec{J}}_2]=0$

于是，得

$$
\begin{aligned}
&[\hat{J}^2,\hat{J}_x]=[\hat{J}_1^2+\hat{J}_2^2+2\hat{\vec{J}}_1\cdot\hat{\vec{J}}_2,\hat{J}_{1x}+\hat{J}_{2x}]\\
&=2[\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x}+\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y}+\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z},\hat{J}_{1x}+\hat{J}_{2x}]\\
&=2\left\{\hat{J}_{2y}[\hat{J}_{1y},\hat{J}_{1x}]+\hat{J}_{2z}[\hat{J}_{1z},\hat{J}_{1x}]+\hat{J}_{1y}[\hat{J}_{2y},\hat{J}_{2x}]+\hat{J}_{1z}[\hat{J}_{2z},\hat{J}_{2x}]\right\}\\
&=2\left\{\hat{J}_{2y}(-i\hbar\hat{J}_{1z})+\hat{J}_{2z}(i\hbar\hat{J}_{1y})+\hat{J}_{1y}(-i\hbar\hat{J}_{2z})+\hat{J}_{1z}(i\hbar\hat{J}_{2y})\right\}=0
\end{aligned}
$$

同理可得 $[\hat{J}^2,\hat{J}_y]=0$

$$[\hat{J}^2,\hat{J}_z]=0$$

三式合写起来就是 $[\hat{J}^2,\hat{J}_\alpha]=0$（其中$\alpha=1,2,3$分别表示$x,y,z$）。

16. 根据轨道角动量升降算符的定义：$\hat{L}_+=\hat{L}_x+i\hat{L}_y$， $\hat{L}_-=\hat{L}_x-i\hat{L}_y$，证明：

$$[\hat{L}_+,\hat{L}_-]=2\hbar\hat{L}_z$$

证明：由轨道角动量升降算符的定义，有

$$
\begin{aligned}
&\hat{L}_+\hat{L}_-=(\hat{L}_x+i\hat{L}_y)(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\\
&=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2-i(\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x)\\
&=\hat{L}^2-\hat{L}_z^2+\hbar\hat{L}_z
\end{aligned}
$$

同理，有

$$\hat{L}_-\hat{L}_+=(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)(\hat{L}_x+i\hat{L}_y)=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+i(\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x)$$

$$=\hat{L}^2-\hat{L}_z^2-\hbar\hat{L}_z$$

于是，得

$$[\hat{L}_+,\hat{L}_-]=\hat{L}_+\hat{L}_--\hat{L}_-\hat{L}_+=2\hbar\hat{L}_z$$

17. 在 **Pauli** 表象下，用矩阵形式证明：

$$\hat{\sigma}_+|\uparrow\rangle=0,\qquad \hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle=2|\uparrow\rangle$$

证明： **Pauli** 表象就是$\hat{\sigma}_z$表象，有算符的矩阵形式

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\ \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\ \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

由此，得

$$\hat{\sigma}_+=\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0&2\\0&0\end{pmatrix}$$

所以，有

$$\hat{\sigma}_+|\uparrow\rangle=\begin{pmatrix}0&2\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$$

$$\hat{\sigma}_+|\downarrow\rangle=\begin{pmatrix}0&2\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=2|\uparrow\rangle$$

18. 对于一维谐振子的产生算符$\hat{a}^+$和湮灭算符$\hat{a}$，证明

$$\hat{a}^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

证明：由对易关系$[\hat{N},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger$（即$\hat{N}\hat{a}^\dagger=\hat{a}^\dagger\hat{N}+\hat{a}^\dagger$），有

$$\widehat{N}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \hat{a}^{\dagger}\widehat{N}|n\rangle + \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \hat{a}^{\dagger}n|n\rangle + \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = (n+1)\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$$

由于谐振子势场为规则势场，波函数不简并，$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$是算符$\widehat{N}$的对应于本征值$n+1$的本征态，所以$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$与$|n+1\rangle$最多只差一个常数，即

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = C|n+1\rangle$$

由此得

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \int \psi_n{}^* \hat{a}\hat{a}^{\dagger}\psi_n \mathrm{d}\tau = \int \psi_n{}^* (\hat{a}^{\dagger})^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}\psi_n \mathrm{d}\tau$$

$$= \int \hat{a}^{\dagger}\psi_n (\hat{a}^{\dagger})^* \psi_n{}^* \mathrm{d}\tau = \int \hat{a}^{\dagger}\psi_n (\hat{a}^{\dagger}\psi_n)^* \mathrm{d}\tau$$

$$= \int C\psi_{n+1} C^* \psi_{n+1}{}^* \mathrm{d}\tau = CC^* \int \psi_{n+1}\psi_{n+1}{}^* \mathrm{d}\tau = CC^*$$

从另外一个角度看，有

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \langle n|(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+1)|n\rangle = \langle n|(\widehat{N}+1)|n\rangle = n+1$$

比较上面两式，为简单起见，取C为正实数，有$C=\sqrt{n+1}$，于是，得

$$\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

类似地，由对易关系$[\widehat{N},\hat{a}] = -\hat{a}$（即$\widehat{N}\hat{a} = \hat{a}\widehat{N} - \hat{a}$），得

$$\widehat{N}\hat{a}|n\rangle = \hat{a}\widehat{N}|n\rangle - \hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

由于谐振子势场为规则势场，波函数不简并，$\hat{a}|n\rangle$是算符$\widehat{N}$的对应于本征值$n-1$的本征态，所以$\hat{a}|n\rangle$与$|n-1\rangle$最多只差一个常数，即

$$\hat{a}|n\rangle = C|n-1\rangle$$

由此得

$$\langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle = \int \psi_n{}^* \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\psi_n \mathrm{d}\tau$$

$$= \int \hat{a}\psi_n \hat{a}^* \psi_n{}^* \mathrm{d}\tau = \int \hat{a}\psi_n (\hat{a}\psi_n)^* \mathrm{d}\tau$$

$$= \int C\psi_{n-1} C^* \psi_{n-1}{}^* \mathrm{d}\tau = CC^* \int \psi_{n-1}\psi_{n-1}{}^* \mathrm{d}\tau = CC^*$$

从另外一个角度看，有

$$\langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle=\langle n|\hat{N}|n\rangle=\langle n|n|n\rangle=n$$

比较上面两式，为简单起见，取C为正实数，有$C=\sqrt{n}$，于是，得

$$\hat{a}\,|\,n\rangle=\sqrt{n}\,|\,n-1\rangle$$

三、 计算题

1. 质量为m的粒子在一维无限深方势阱（$a>0$）

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

中运动，用 **de Broglie** 的驻波条件，求粒子能量的可能值。

解：由驻波条件，势阱宽度与半波长的整数倍相等，得

$$a=n\cdot\frac{\lambda}{2}\qquad(n=1,2,3,\cdots)$$

由 **de Broglie** 物质波假设，粒子动量为

$$p=\frac{h}{\lambda}=\frac{nh}{2a}$$

于是，粒子能量为

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{n^2h^2}{8ma^2}=\frac{\pi^2n^2\hbar^2}{2ma^2}\quad(n=1,2,3,\cdots)$$

2. 设质量为m的粒子限制在长、宽、高分别为a、b、c的箱内运动，用 **Sommerfeld** 量子化条件求粒子能量的可能取值。

解：由 **Sommerfeld** 量子化条件

$$\oint p_k\mathrm{d}q_k=n_kh\quad n_k=1,2,3,\cdots$$

在直角坐标系中，对x分量，有

$$\oint p_x \mathrm{d}x = n_1 h \quad n_1 = 1, 2, 3, \cdots$$

当粒子处于一定的能级上时，能量是固定的，如果势能为零，此时粒子的能量就是动能，处于一定能量状态上的粒子，其动量是一个定值，可以把它移到积分号外。所以，有

$$p_x \oint \mathrm{d}x = n_1 h$$

在 x 方向上，箱的宽度为 a，相当于宽度为 a 的无限深势阱，有

$$2ap_x = n_1 h \quad 即 \quad p_x = \frac{n_1 h}{2a}$$

同样可求 $p_y = \dfrac{n_2 h}{2b}$， $p_z = \dfrac{n_3 h}{2c}$

由此得粒子能量

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right) \qquad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \cdots$$

3. 设质量为 m 的粒子在谐振子势 $V(x) = \dfrac{1}{2} m\omega^2 x^2$ 中运动，用 **Sommerfeld** 量子化条件求粒子能量 E 的可能取值。

（积分公式：$\int \sqrt{a^2 - x^2} \mathrm{d}x = \dfrac{x}{2}\sqrt{a^2 - x^2} + \dfrac{a^2}{2} \arcsin \dfrac{x}{a} + C$）

解：由 **Sommerfeld** 量子化条件

$$\oint p_k \mathrm{d}q_k = n_k h \quad n_k = 1, 2, 3, \cdots$$

取直角坐标系，对一维情况，有

$$\oint p_x \mathrm{d}x = n_1 h \quad n_1 = 1, 2, 3, \cdots$$

当粒子处于一定的能级上时，能量是固定的，但此时势能不为零，粒子动能随势能的变化而变化，也就是说此时动量是位置的函数，动量不能看成常数而放到积分号外。

但是动量可以用动能表示，动能可以用总能量与势能表示，总能量可以用振幅表示，如果我们能够求出量子化的振幅，则可以求出量子化的总能量。

由此思路，得

$$\begin{aligned}\oint p\mathrm{d}x &= 2\int_{-a}^{a} p\mathrm{d}x = 2\int_{-a}^{a}\sqrt{2mE_k}\mathrm{d}x \\ &= 2\int_{-a}^{a}\sqrt{2m(E-V)}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

由于总能量 $E = V(x)|_{x=a} = \dfrac{1}{2}m\omega^2 a^2$

$$\oint p\mathrm{d}x = 2\int_{-a}^{a}\sqrt{2m(E-V)}\mathrm{d}x = 2m\omega\int_{-a}^{a}\sqrt{a^2-x^2}\mathrm{d}x$$

利用积分公式 $\int\sqrt{a^2-x^2}\mathrm{d}x = \dfrac{x}{2}\sqrt{a^2-x^2} + \dfrac{a^2}{2}\arcsin\dfrac{x}{a} + C$，得

$$\begin{aligned}\oint p\mathrm{d}x &= 2m\omega\int_{-a}^{a}\sqrt{a^2-x^2}\mathrm{d}x = \pi m\omega a^2 \\ &= nh \qquad (\,n = 1,2,3,\cdots)\end{aligned}$$

由此得量子化振幅 $a = \sqrt{\dfrac{nh}{\pi m\omega}} = \sqrt{\dfrac{2n\hbar}{m\omega}}$

于是得到量子化的能量值

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 = n\hbar\omega \qquad (\,n = 1,2,3,\cdots)$$

4. 一个平面转子的转动惯量为 I，用 **Sommerfeld** 量子化条件求能量的可能取值。

解：在经典力学中，对平面转动，一般选取极坐标系。在此，我们选取广

义坐标φ，则广义速度为$\dot{\varphi}=\omega$，广义动量为

$$p_\varphi=\frac{\partial T}{\partial \dot{\varphi}}=\frac{\partial T}{\partial \omega}=\frac{\partial}{\partial \omega}\left(\frac{1}{2}I\omega^2\right)=I\omega$$

由此得粒子的动能为

$$E=\frac{1}{2}I\omega^2=\frac{1}{2I}(I\omega)^2=\frac{p_\varphi^2}{2I}$$

对微观粒子，只要能求出量子化的广义动量，则能求出动能。由 **Sommerfeld** 量子化条件得

$$\oint p_k \mathrm{d}q_k=\int_0^{2\pi} p_\varphi \mathrm{d}\varphi=p_\varphi\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi$$

$$=2\pi p_\varphi=nh$$

$$p_\varphi=\frac{nh}{2\pi}$$

所以 $E=\frac{p_\varphi^2}{2I}=\frac{n^2h^2}{8I\pi^2}=\frac{n^2\hbar^2}{2I}\qquad (n=1,2,3,\cdots)$

5. 设$\psi(x)=Ae^{-\alpha^2x^2/2}$，$\alpha$为常数。求归一化常数$A$。

解： 利用公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}\mathrm{d}x=2\left(xe^{-x^2}\Big|_0^{+\infty}-\int_0^{+\infty}x\mathrm{d}(e^{-x^2})\right)=0+2\int_0^{+\infty}e^{-x^2}x\mathrm{d}x^2$$

$$=2\int_0^{+\infty}e^{-t}t^{\left(\frac{3}{2}-1\right)}\mathrm{d}t=2\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$$

$$=2\Gamma\left(\frac{1}{2}+1\right)=\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}$$

得 $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\psi^*\psi=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xA^*Ae^{-\alpha^2x^2}=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xe^{-\alpha^2x^2}$

$$=\frac{|A|^2}{|\alpha|}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xe^{-x^2}=\frac{|A|^2}{|\alpha|}\sqrt{\pi}$$

再利用归一化条件 $\int \mathrm{d}\tau\psi^*\psi = 1$

由此求出归一化常数 $|A| = \sqrt{\frac{|\alpha|}{\sqrt{\pi}}}$

可以把它取为正实数，得 $A = \sqrt{\frac{|\alpha|}{\sqrt{\pi}}}$

6. 设粒子在宽度为 a 的一维无限深势阱中运动，能量本征值为 $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}$，对应的归一化本征函数为 $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$。如果粒子的状态由波函数

$$\psi(x) = Ax(a-x) \quad (0 < x < a)$$

描写，求归一化常数 A、粒子能量的几率分布和能量的平均值。

解：由归一化条件，有 $\int_0^a A^* A x^2 (a-x)^2 \mathrm{d}x = 1$

左边积分后得 $\frac{a^5}{30} A^* A = 1$

取归一化常数为正实数，得 $A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$

把波函数 $\psi(x)$ 按归一化本征函数系 $\{\psi_n(x)\}$ 展开，展开系数为

$$a_n = \langle\psi_n|\psi\rangle = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\cdot\sqrt{\frac{30}{a^5}}\, x(a-x)\mathrm{d}x$$

$$= \frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3}[1-(-1)^n]$$

能量的几率密度分布为

$$\rho_n = |a_n|^2 = \frac{240}{n^6\pi^6}[1-(-1)^n]^2$$

能量平均值

$$\overline{E}=\langle\psi\,|\,\widehat{H}\,|\,\psi\rangle=\int_0^a Ax(a-x)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[Ax(a-x)\right]\right\}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\hbar^2A^2}{m}\int_0^a x(a-x)\mathrm{d}x=\frac{1}{6m}\hbar^2A^2a^3=\frac{5}{ma^2}\hbar^2$$

能量平均值也可以这样求：

$$\overline{E}=\sum_{n=1}^{\infty}\rho_nE_n=\frac{120\hbar^2}{\pi^4ma^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^4}[1-(-1)^n]^2$$

但这种方法求和困难。

7. 设 $t=0$ 时，质量为 m 的粒子的状态为

$$\psi(x)=A\left(\sin^2 kx+\frac{1}{2}\cos kx\right)$$

求此时粒子的平均动量与平均动能。

解：由于 $\sin^2 kx=\frac{1}{2}(1-\cos 2kx)$，波函数在整个空间的形式是相同的，也就是平面波的形式，所以，波函数是不能归一化的，也就是说，不能用下面的公式求平均值

$$\overline{A}=\frac{\langle\psi\,|\,\hat{A}\,|\,\psi\rangle}{\langle\psi\,|\,\psi\rangle}$$

由 **Euler** 公式，有

$$\sin^2 kx=\left(\frac{e^{ikx}-e^{-ikx}}{2i}\right)^2，\quad \cos kx=\frac{e^{ikx}+e^{ikx}}{2}$$

描述粒子状态的波函数可以写成

$$\psi(x)=A\left(\sin^2 kx+\frac{1}{2}\cos kx\right)=\frac{A}{4}(2-e^{i2kx}-e^{-i2kx}+e^{ikx}+e^{-ikx})$$

$$=\frac{A}{4}(2e^{i0x}-e^{i2kx}-e^{-i2kx}+e^{ikx}+e^{-ikx})$$

$$=\frac{A}{4}(2e^{ip_0x/\hbar}-e^{ip_1x/\hbar}-e^{ip_2x/\hbar}+e^{ip_3x/\hbar}+e^{ip_4x/\hbar})$$

这是由 **5** 个平面波叠加而成的波函数，平面波是无法正常归一化的。这 **5** 个平面波的动量分别为

$$p_1=0，\ p_2=2k\hbar，\ p_3=-2k\hbar，\ p_4=k\hbar，\ p_5=-k\hbar$$

动量的平均值为

$$\overline{p}=\frac{4^2\cdot 0+(-1)^2\cdot 2k\hbar+(-1)^2\cdot(-2k\hbar)+1^2\cdot k\hbar+1^2\cdot(-k\hbar)}{2^2+(-1)^2+(-1)^2+1^2+1^2}=0$$

动能的平均值为

$$\overline{T}=\frac{1}{2m}\cdot\frac{2^2\cdot 0^2+(-1)^2\cdot(2k\hbar)^2+(-1)^2\cdot(-2k\hbar)^2+1^2\cdot(k\hbar)^2+1^2\cdot(-k\hbar)^2}{2^2+(-1)^2+(-1)^2+1^2+1^2}$$

$$=\frac{5k^2\hbar^2}{8m}$$

8. 在坐标表象中，利用求平均值的方法，推导一维动量算符的表达式。

解：在一维情况下，设粒子在 $\boldsymbol{t=0}$ 时刻的波函数为$\psi(x)$，则 **Fourier** 变换关系式为

$$\psi(x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p$$

$$\varphi(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}\mathrm{d}x$$

$\varphi(p)$为动量表象中的波函数，由此可以求出粒子的动量平均值

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)^*p\varphi(p)\mathrm{d}p=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)^*e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}x\right]p\varphi(p)\mathrm{d}p$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)^*e^{ipx/\hbar}p\varphi(p)\mathrm{d}x\mathrm{d}p$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)^*\left\{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left[e^{ipx/\hbar}\varphi(p)\right]\right\}\mathrm{d}x\mathrm{d}p$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi(x)^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi(x)^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)$$

记 $\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$，这就是动量算符，推广到三维形式为 $\hat{p}=-i\hbar\nabla$。

9. 在一维空间中，设粒子的态函数为 $\psi(x)=\delta(x-a)$，求动量表象下粒子态函数的表达式。

解：$\varphi(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}\mathrm{d}x$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)e^{-ipx/\hbar}\mathrm{d}x=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{-ipa/\hbar}$$

由此可见，粒子在动量空间的分布是均匀的，即粒子的位置确定时，动量则是完全不能确定的。

10. 在一维空间中，设粒子的态函数为 $\varphi(p)=\delta(p-p_0)$，求坐标表象下粒子态函数的表达式。

解：$\psi(x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(p-p_0)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}e^{ip_0x/\hbar}$$

由此可见，粒子在坐标空间的分布是均匀的，即粒子的动量确定时，位置则是完全不能确定的。

11.　试从一维自由粒子的波函数出发，推测微观粒子的运动规律（即 **Schrödinger** 方程）。

解：在经典物理中，光波的平面波函数表达式为

$$y = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

根据 **Einstein** 的光量子理论，$E = h\nu$，$p = h/\lambda$，有

$$\omega = 2\pi\nu = 2\pi\frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}，\quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\frac{p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

光波的平面波函数可写成

$$y = Ae^{-i(Et - px)/\hbar} \qquad （1）$$

在上面的处理中，由于光波的经典波动方程精确地描述了光的干涉与衍射等实验现象，我们保留了波动方程的经典形式。但另一方面，我们引入了量子化的概念，利用了光子的能量与动量来描述光的波动性，反映了波动性与粒子性的统一。

由 **de Broglie** 的物质波假设，我们有理由相信，（**1**）式也应该是物质波（概率波）的平面波（自由粒子）形式。所以，可以把概率波的平面波形式写成

$$\psi(x,t) = Ae^{-i(Et - px)/\hbar} \qquad （2）$$

（**2**）式对时间求导，得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = EAe^{-i(Et - px)/\hbar} = E\psi \qquad （3）$$

又由于

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[Ae^{-i(Et - px)/\hbar}\right]$$

$$=\frac{p^2}{2m}\left[Ae^{-i(Et-px)/\hbar}\right]=T\psi \qquad (4)$$

对自由粒子，有$E=T$，由（**3**）与（**4**）式，得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi \qquad (5)$$

对于非自由粒子，$E=T+V$，由此猜测对于非自由粒子，（**5**）式左边不应该改变，右边的$\frac{\hat{p}^2}{2m}$应该改为$\frac{\hat{p}^2}{2m}+V$，于是得 **Schrödinger** 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)，$$ 其中$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V$为 **Hamilton** 算符。

推广到三维形式为 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\hat{H}\psi(\vec{r},t)$

12. 利用分离变量法，由 **Schrödinger** 方程推导定态 **Schrödinger** 方程的表达式，并简述处于定态下粒子的基本性质。

解：设势能不显含时间，由 **Schrödinger** 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r},t)$$

分离变量，令$\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})f(t)$，得

$$\frac{i\hbar f'(t)}{f(t)}=\frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}=\lambda$$

由此得两微分方程

$$i\hbar f'(t)=\lambda f(t) \qquad (1)$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r})=\lambda\psi(\vec{r}) \qquad (2)$$

方程（**1**）的解为 $f(t)\sim e^{-i\lambda t/\hbar}$

方程（**2**）实际上就是算符$\widehat{H}$的本征方程，λ为本征值，也就是 **Hamilton** 量的可能取值，或者说能量的可能取值。该方程就是定态 **Schrödinger** 方程，也称为能量本征方程，写成具体形式为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \qquad (3)$$

此时，方程（**1**）的解可以写成$f(t)\sim e^{-iEt/\hbar}$，含时波函数可写成

$$\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar} \qquad (4)$$

由（**4**）式的波函数所描述的体系的状态，称为定态。（**4**）式称为体系的定态波函数。

处于定态下的粒子具有以下性质：

（**1**）空间概率密度分布不随时间改变；

（**2**）空间概率流密度不随时间改变；

（**3**）不显含时间的力学量的平均值不随时间改变。

13. 质量为m的粒子在一维无限深方势阱（$a>0$）

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

中运动，求粒子的能级和对应的波函数。

解：由定态 **Schrödinger** 方程 $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$

在区域$0<x<a$内，有 $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)=E\psi(x)$

令$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，定态 **Schrödinger** 方程的解为

$$\psi(x)=A\cos kx+B\sin kx$$

对无限深势阱，在区域$0<x<a$外，波函数为零。由连续性条件，在边界上波函数为零，即 $\psi|_{x=0}=0$，$\psi|_{x=a}=0$。

利用边界条件$\psi|_{x=0}=0$，得 $A=0$

利用边界条件$\psi|_{x=a}=0$，得 $k=\dfrac{n\pi}{a}\quad n=1,2,3,\cdots$

由此得能量本征值为 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\quad n=1,2,3,\cdots$

对应的本征函数为 $\psi_n(x)=B_n\sin\dfrac{n\pi}{a}x,\quad n=1,2,3,\cdots$

由归一化条件有

$$\int_0^a\psi_n{}^*(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x=|B_n|^2\int_0^a\sin^2\frac{n\pi}{a}x\mathrm{d}x$$

$$=|B_n|^2\ a=2$$

归一化常数B_n可取为 $B_n=\sqrt{\dfrac{2}{a}}$

归一化后，能量本征函数为

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x,\quad n=1,2,3,\cdots & 0<x<a\\ 0 & x<0,x>a\end{cases}$$

14. 质量为m的粒子在一维无限深方势阱（$a>0$）

$$V(x)=\begin{cases}0 & |x|<a/2\\ \infty & |x|\geq a/2\end{cases}$$

中运动，求粒子的能级和对应的波函数。

解：由定态 **Schrödinger** 方程 $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$

在区域$x<|a|/2$内，有$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)=E\psi(x)$

令$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，定态 **Schrödinger** 方程的解为

$$\psi(x)=A\cos kx+B\sin kx$$

对无限深势阱，在区域$x<|a|/2$外，波函数为零。由连续性条件，在边界上波函数为零，即 $\psi|_{x=\pm a/2}=0$。

对偶宇称解$\psi(x)\sim\cos kx$，利用边界条件$\psi|_{x=\pm a/2}=0$，有

$$k=\frac{(2n+1)\pi}{a}$$

此时能量本征值为 $E_n=\frac{(2n+1)^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$

对应的本征函数为 $\psi_n(x)=A_n\cos\frac{(2n+1)\pi}{a}x,\quad n=0,1,2,\cdots$

对奇宇称解$\psi(x)\sim\sin kx$，利用边界条件$\psi|_{x=\pm a/2}=0$，有

$$k=\frac{2n\pi}{a}$$

此时能量本征值为 $E_n=\frac{(2n)^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$

对应的本征函数为 $\psi_n(x)=B_n\sin\frac{2n\pi}{a}x,\quad n=1,2,3,\cdots$

综合奇偶宇称，能量本征值可以写成

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

归一化后，能量本征函数为

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\left.\begin{array}{ll}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\cos\dfrac{n\pi}{a}x, & n=1,3,5,\cdots \\ \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x, & n=2,4,6,\cdots\end{array}\right\} & |x|<a/2 \\ 0 & |x|\ge a/2\end{cases}$$

15. 质量为m的粒子在深度为V_0，宽度为a的方势阱

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

中运动，求阱口刚好出现束缚态能级的条件。

（说明：当$E<V_0$时，粒子处于束缚态，所谓的阱口，是指$E=V_0$的状态，阱口处的束缚态，是指$E\to V_0-0$时的束缚态）

解：由定态 **Schrödinger** 方程（能量本征方程）

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\bar{r})\right)\psi(\bar{r})=E\psi(\bar{r})$$

令$\alpha=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$，$\beta=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$，则阱内和阱外的能量本征方程分别为

$$\psi_1''+\alpha^2\psi_1=0,\quad |x|<a/2 \qquad \textbf{（1）}$$

$$\psi_2''-\beta^2\psi_2=0,\quad |x|>a/2 \qquad \textbf{（2）}$$

方程（**2**）的解为

$$\psi_2=D_1e^{-\beta x}+D_2e^{\beta x},\qquad |x|>a/2 \qquad \textbf{（3）}$$

“阱口刚好出现束缚态能级”这句话表明：①体系处于束缚态，即$E<V_0$；②刚好出现束缚态，即$E\to V_0$，或写成$E\approx V_0$。

由（**3**）式，利用束缚态条件$x\to\infty$时，$\psi\to0$，得

$$\psi_2=De^{-\beta|x|},\quad |x|>a/2 \qquad \textbf{（4）}$$

由于 $\beta=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$，当阱口刚好出现束缚态能级时，$E\approx V_0$，也即是 $\beta=0$，于是，有

$$\psi_2'=\pm\beta De^{-\beta|x|}=0$$

由于势的跃变有限，所以波函数及其一阶导数连续，阱内波函数必须满足边界条件 $\psi_1'\big|_{x=\pm a/2}=0$。在阱内，微分方程（**1**）的两个线性无关解分别为 $\cos\alpha x$、$\sin\alpha x$。

对于偶宇称解 $\psi_1\sim\cos\alpha x$，由边界条件 $\psi_1'\big|_{x=\pm a/2}=0$ 有

$$\sin\frac{\alpha a}{2}=0\text{，即}\quad \alpha a=2n\pi\quad n=1,2,3,\cdots$$

对于奇宇称解 $\psi_1\sim\sin\alpha x$，由边界条件 $\psi_1'\big|_{x=\pm a/2}=0$ 有

$$\cos\frac{\alpha a}{2}=0\text{，即}\quad \alpha a=(2n+1)\pi\quad n=1,2,3,\cdots$$

把奇偶宇称解合写起来，阱口刚好出现束缚态能级的条件为

$$\alpha a=n\pi\quad n=1,2,3,\cdots \tag{5}$$

注意到此时 $E\approx V_0$，$\alpha=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}\approx\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}$，由（**5**）式得束缚态能级

$$E\approx V_0=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

也就是当上述条件满足时，阱口刚好出现束缚态能级。

如果想要阱口刚好出现一个束缚态能级，则

$$E\approx V_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

此时阱口出现的是一个偶宇称态能级。

16. 质量为m的粒子被一维势垒

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

散射，设$E<V_0$，求反射系数与透射系数的表达式。

解：设粒子从左侧以能量E入射，则左侧有入射波与反向波，右侧只有透射波。显然，粒子不处于束缚态，粒子可以反射或透射到无穷远处，无穷远波函数不趋于零，不能归一化。体系的 **Schrödinger** 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_1=0 \qquad 0<x<a \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2=0 \qquad x<0,x>a \tag{2}$$

设$k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$，微分方程（**2**）的通解为

$$\psi_2(x)=C_1e^{-ikx}+C_2e^{ikx} \tag{3}$$

方程（**3**）由一个左行波与一个右行波组成，由于假设粒子从左侧入射，并且波函数可以相差一个常数，再考虑到右侧无反射波，所以（**3**）式可以写成

$$\psi_2(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Ae^{-ikx} & (x<0)\\ Be^{ikx} & (x>a)\end{cases} \tag{4}$$

设$\beta=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$，注意到$E<V_0$，微分方程（**1**）的通解为

$$\psi_1=Ce^{-\beta x}+De^{\beta x} \qquad (0<x<a) \tag{5}$$

由$x=0$点，波函数（**4**）、（**5**）及其一阶导数连续的条件，得

$$1+A=C+D \tag{6}$$

$$ik+ikA=-\beta C+\beta D \tag{7}$$

由 $x=a$ 点，波函数（**4**）、（**5**）及其一阶导数连续的条件，得

$$Ce^{\beta a}+De^{-\beta a}=Be^{ika} \qquad \textbf{（8）}$$

$$\beta(-Ce^{-\beta a}+De^{\beta a})=ikBe^{ika} \qquad \textbf{（9）}$$

由（**6**）、（**7**）、（**8**）、（**9**）式解出

$$A=\frac{(k^2+\beta^2)(e^{-\beta a}-e^{\beta a})}{(k-i\beta)^2e^{-\beta a}-(k+i\beta)^2e^{\beta a}} \qquad \textbf{（10）}$$

$$B=\frac{4ki\beta e^{-ika}}{(k+i\beta)^2e^{\beta a}-(k-i\beta)^2e^{-\beta a}} \qquad \textbf{（11）}$$

由（**11**）式整理，得

$$B=\frac{-2ik/\beta}{\left[1-(k/\beta)^2\right]\mathrm{sh}(\beta a)-i2\dfrac{k}{\beta}\mathrm{ch}(\beta a)}e^{-ika} \qquad \textbf{（12）}$$

由此得透射系数

$$T=B*B=\frac{4k^2\beta^2}{(k^2+\beta^2)^2\mathrm{sh}^2(\beta a)+4k^2\beta^2}$$

同样地，由（**10**）式可得反射系数

$$R=A*A=\frac{(k^2+\beta^2)^2\mathrm{sh}^2(\beta a)}{(k^2+\beta^2)^2\mathrm{sh}^2(\beta a)+4k^2\beta^2}$$

17. 质量为 m 的粒子被一维势阱

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

散射，求反射系数与透射系数的表达式，并求共振透射条件和共振透射能级。

解：设粒子从左侧以能量 E 入射，则左侧有入射波与反向波，右侧只有透射波。显然，粒子不处于束缚态，粒子可以反射或透射到无穷远处，无穷

远波函数不趋于零，不能归一化。体系的 **Schrödinger** 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi_1=0 \qquad 0<x<a \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2=0 \qquad x<0,x>a \tag{2}$$

设 $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$，微分方程（**2**）的通解为

$$\psi_2(x)=C_1e^{-ikx}+C_2e^{ikx} \tag{3}$$

方程（**3**）由一个左行波与一个右行波组成，由于假设粒子从左侧入射，并且波函数可以相差一个常数，再考虑到右侧无反射波，所以（**3**）式可以写成

$$\psi_2(x)=\begin{cases} e^{ikx}+Ae^{-ikx} & (x<0) \\ Be^{ikx} & (x>a) \end{cases} \tag{4}$$

设 $\beta=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$，注意到 $\beta>0$，微分方程（**1**）的通解为

$$\psi_1=Ce^{-i\beta x}+De^{i\beta x} \qquad (0<x<a) \tag{5}$$

由 $x=0$ 点，波函数（**4**）、（**5**）及其一阶导数连续的条件，得

$$1+A=C+D \tag{6}$$

$$ik+ikA=-i\beta C+i\beta D \tag{7}$$

由 $x=a$ 点，波函数（**4**）、（**5**）及其一阶导数连续的条件，得

$$Ce^{i\beta a}+De^{-i\beta a}=Be^{ika} \tag{8}$$

$$\beta(-Ce^{-i\beta a}+De^{i\beta a})=ikBe^{ika} \tag{9}$$

由（**6**）、（**7**）、（**8**）、（**9**）式解出

$$A=\frac{(k^2-\beta^2)(e^{-i\beta a}-e^{i\beta a})}{(k+\beta)^2e^{-i\beta a}-(k-\beta)^2e^{i\beta a}} \tag{10}$$

$$B=\frac{-4k\beta e^{-ika}}{(k-\beta)^2e^{i\beta a}-(k+\beta)^2e^{-i\beta a}} \qquad （**11**）$$

由（**11**）式得透射系数

$$T=B^*B=\left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k}{\beta}-\frac{\beta}{k}\right)^2\sin^2(\beta a)\right]^{-1} \qquad （**12**）$$

同样地，由（**10**）式可得反射系数

$$R=A^*A=1-\left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k}{\beta}-\frac{\beta}{k}\right)^2\sin^2(\beta a)\right]^{-1} \qquad （**13**）$$

由（**12**）式可见，只要满足条件$\sin(\beta a)=0$，此时粒子全部透射，透射系数$T=1$，这种现象称为共振透射，由此得共振透射条件为

$$\beta a=n\pi \quad n=1,2,3,\cdots \qquad （**14**）$$

即 $\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}a=n\pi \quad n=1,2,3,\cdots$

整理即得共振透射能级

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}-V_0 \quad n=1,2,3,\cdots \qquad （**15**）$$

18. 质量为m的粒子被一维势垒$V(x)=V_0\delta(x)$散射，求反射系数与透射系数的表达式。

解：一维定态 **Schrödinger** 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V_0\delta(x)\right]\psi \qquad （**1**）$$

假设粒子从势垒左侧入射。令$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$，由于波函数可以相差一个常数，再考虑到右侧无反射波，得方程（**1**）的解为

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ikx}+Ae^{-ikx} & (x<0) \\ Be^{ikx} & (x>0) \end{cases} \qquad (2)$$

对方程（**1**），在区间$[0^-,0^+]$积分，得

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi(0) \qquad (3)$$

在（**3**）式中利用（**2**）式，得

$$ikB-i(k-kA)=\frac{2m}{\hbar^2}V_0S \qquad (4)$$

在$x=0$点，波函数连续，由（**2**）式得

$$1+A=B \qquad (5)$$

解方程组（**4**）、（**5**），得

$$A=-\frac{imV_0}{\hbar^2 k+imV_0} \qquad (6)$$

$$B=\frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k+imV_0} \qquad (7)$$

由（**6**）式得反射系数

$$R=A^*A=\frac{mV_0^{\ 2}}{2\hbar^2 E+mV_0^{\ 2}}$$

由（**7**）式得透射系数

$$T=B^*B=\frac{(\hbar^2 k)^2}{(\hbar^2 k)^2+(mV_0)^2}$$

19. 质量为m的粒子在一维势阱$V(x)=-V_0\delta(x)$中运动，$V_0>0$，求束缚态能级和波函数。

（说明：束缚态条件为$x\to\pm\infty$时，$\psi(x)\to 0$）

解：一维定态 **Schrödinger** 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V_0\delta(x)\right]\psi \qquad (\mathbf{1})$$

对方程（**1**），在区间$[0^-,0^+]$积分，得

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi(0) \qquad (\mathbf{2})$$

对方程（**2**），再次在区间$[0^-,0^+]$积分，注意到波函数的有限性，得

$$\psi(0^+)-\psi(0^-)=0 \qquad (\mathbf{3})$$

上面（**2**）、（**3**）式表明：在$x=0$两侧，$\psi(x)$虽然有跃变，但是变化量是有限的，并且波函数是连续的。令$k=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$，在$x\neq 0$处，定态 **Schrodinger** 方程可写成

$$\psi''-k^2\psi=0 \qquad (\mathbf{4})$$

方程（**4**）的解为

$$\psi=C_1e^{-kx}+C_2e^{kx} \qquad (\mathbf{5})$$

题目要求的是束缚态能级，束缚态波函数必须满足当$x\to\pm\infty$时，$\psi\to 0$。显然k为虚数是无法满足这个要求的，则

$$k=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}>0 \qquad (\mathbf{6})$$

（**6**）式显然要求$E<0$，就是说在，当$E>0$时体系处于游离态，当$E<0$时体系处于束缚态。

利用$x\to\pm\infty$时，$\psi\to 0$的条件，由（**5**）式有

$$\psi=\begin{cases}C_1e^{-kx} & x>0\\ C_2e^{kx} & x<0\end{cases} \qquad (\mathbf{7})$$

由波函数连续的条件（**3**），得 $C_1=C_2=C$

再由波函数的一阶导数的跃变条件（**2**），得

$$-2Ck=-\frac{2mV_0C}{\hbar^2} \qquad （\mathbf{8}）$$

（**8**）式即$k=\frac{mV_0}{\hbar^2}$，由于$k=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$，由此得束缚态能级

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

这是体系唯一的束缚态能级。由归一化条件$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\mathrm{d}x=1$，得

$$\int_{-\infty}^{0}C^*Ce^{2kx}\mathrm{d}x+\int_{0}^{\infty}C^*Ce^{-2kx}\mathrm{d}x=1 \qquad （\mathbf{9}）$$

归一化常数可取为正实数，由（**9**）式得

$$C=\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}$$

于是，体系归一化波函数为

$$\psi=\begin{cases}\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}e^{-mV_0x/\hbar^2} & x>0\\ \frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}e^{mV_0x/\hbar^2} & x<0\end{cases}$$

20. 质量为m的一维谐振子的基态波函数为$\psi=e^{-\xi^2/2}$，其中$\xi=\alpha x$，$\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$，求在经典禁区出现粒子的概率。

（积分公式：$\int_0^{+\infty}e^{-x^2}\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$，$\int_0^1 e^{-x^2}\mathrm{d}x\approx 0.75$）

解：对于总能量为E的粒子，经典振子的振幅为

$$\frac{1}{2}m\omega^2A^2=E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega \qquad （\mathbf{1}）$$

由（**1**）式得

$$A=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}=\frac{1}{\alpha} \qquad \textbf{（2）}$$

一维谐振子经典振幅A称为谐振子的经典回转点，对经典粒子来说，$x>A$的地方没有粒子出现，$x>A$的地方称为经典禁区。但微观粒子能够在经典禁区出现，其概率为

$$\frac{\int_{-\infty}^{-A}\psi^*\psi\mathrm{d}x+\int_{A}^{+\infty}\psi^*\psi\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi\mathrm{d}x}=\frac{\int_{-\infty}^{-1/\alpha}\psi^*\psi\mathrm{d}x+\int_{1/\alpha}^{+\infty}\psi^*\psi\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi\mathrm{d}x}$$

$$=\frac{\int_{1/\alpha}^{+\infty}\psi^*\psi\mathrm{d}x}{\int_{0}^{+\infty}\psi^*\psi\mathrm{d}x}=\frac{\int_{1/\alpha}^{+\infty}e^{-\xi^2}\mathrm{d}x}{\int_{0}^{+\infty}e^{-\xi^2}\mathrm{d}x}$$

$$=\frac{\int_{1/\alpha}^{+\infty}e^{-\xi^2}\mathrm{d}(\alpha x)}{\int_{0}^{+\infty}e^{-\xi^2}\mathrm{d}(\alpha x)}=\frac{\int_{1}^{+\infty}e^{-\xi^2}\mathrm{d}\xi}{\int_{0}^{+\infty}e^{-\xi^2}\mathrm{d}\xi}$$

$$=\frac{0.75}{\sqrt{\pi}/2}=15.73\%$$

21. 求一维谐振子处在第一激发态时几率最大的位置。已知谐振子的本征函数为 $\psi_n(\xi)=N_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$，其中 $N_n=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}}$，$\xi=\alpha x$，$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$，**Hermitian** 多项式$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}e^{-\xi^2}$。

解：$n=1$对应于一维谐振子的第一激发态，此时有

$$\psi_1(\xi)=N_1 e^{-\xi^2/2}H_1(\xi)=2\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\xi e^{-\xi^2/2} \qquad \textbf{（1）}$$

一维谐振子的概率分布（概率密度）为

$$\rho=\psi_1{}^*(\xi)\psi_1(\xi)=\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\xi^2 e^{-\xi^2} \qquad \textbf{（2）}$$

令$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\rho = 0$，得

$$\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \cdot 2\xi(1-\xi^2)e^{-\xi^2} = 0 \qquad \textbf{（3）}$$

利用方程（**3**）求出　$\xi = 0$，$\xi = \pm 1$，$\xi = \infty$

由于

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\rho = \frac{4\alpha}{\sqrt{\pi}}(1-2\xi^2-3\xi^2+2\xi^4)e^{-\xi^2}$$

对$\xi = 0$，有$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\rho > 0$，对应$\rho$的最小值，此时$\rho = 0$。

对$\xi = \infty$，虽然有$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\rho = 0$，但$\xi = \infty$时由（**2**）式可以计算，此时$\rho = 0$，对应的是$\rho$的最小值。

对$\xi = \pm 1$，$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\rho < 0$，由此得几率最大的位置为

$$x = \frac{\xi}{\alpha} = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

22.　求角动量z分量算符

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

的本征值与本征函数。

解：角动量z分量算符的本征方程为

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi = l_z\psi \qquad \textbf{（1）}$$

方程（**1**）的通解为

$$\psi = Ce^{il_z\varphi/\hbar} \qquad \textbf{（2）}$$

由方程（**2**），利用自然边界条件$\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)$，得本征值

$$l_{zm}=m\hbar \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \qquad (3)$$

本征函数

$$\psi_m=Ce^{im\varphi}$$

再利用归一化条件$\int_0^{2\pi}\psi_m{}^*\psi_m\mathrm{d}\varphi=1$，得

$$2\pi C^*C=1$$

取归一化常数为正实数，有$C=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$，所以得归一化波函数为

$$\psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

23. 设平面转子的转动惯量为I，能量的经典表达式为$H=\dfrac{L^2}{2I}$，L为角动量。求该平面转子的能量本征值与本征态。

解：设转子绕 **z** 轴转动，由于$\hat{L}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，所以转子的 **Hamilton** 量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{L}_z^2}{2I}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

定态 **Schrödinger** 方程（能量本征方程）为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi=E\psi$$

令$k=\sqrt{\dfrac{2IE}{\hbar^2}}$，得方程的通解为 $\psi=C_1e^{-ik\varphi}+C_2e^{ik\varphi}$

由自然边界条件$\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)$，$k$的取值为

$$k=m \quad m=0,1,2,\cdots$$

由 $k=\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}$，得能量本征值为：$E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2I} \quad m=0,1,2,\cdots$

本征函数可取为

$$\psi_{-m}=C_1e^{-im\varphi}，\ \psi_m=C_2e^{im\varphi}$$

由正交归一化条件 $\int_0^{2\pi}\psi_n{}^*\psi_m\mathrm{d}\varphi=\delta_{mn}$，得

$$\psi_{-m}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-im\varphi}，\ \psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

或者合写成：$\psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots$

24. 求动量 x 分量算符的本征函数，并求一维波函数 $\psi(x)$ 在动量表象中的表示。

解：角动量 x 分量算符的本征方程为

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi=p_x\psi \tag{1}$$

方程通解为

$$\psi=Ce^{ip_xx/\hbar} \tag{2}$$

若没有其它的条件（即粒子不受约束），则动量本征值可取一切实数，波函数不能归一化。由于

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p'_x}\psi_{p''_x}\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}C^*Ce^{i(p'_x-p''_x)x/\hbar}\mathrm{d}x=\hbar\int_{-\infty}^{\infty}C^*Ce^{i(p'_x-p'')\xi}\mathrm{d}\xi \tag{3}$$

把（3）式与公式 $\delta(\varphi-\varphi')=\frac{1}{2\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{im(\varphi-\varphi')}$ 比较，得

$$\hbar C^*C=\frac{1}{2\pi}$$

取 C 为正实数，得 $\quad C=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}$

于是得满足封闭性条件的所谓“归一化”波函数为

$$\psi_{p_x}=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}e^{ip_x x/\hbar}$$

一维波函数$\psi(x)$在动量表象中的表示，就是$\psi(x)$按ψ_{p_x}展开的展开系数

$$\psi(x)=\int u(p_x)\varphi_{p_x}\mathrm{d}p_x$$

展开系数

$$u(p_x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int\psi(x)e^{-ip_x x/\hbar}\mathrm{d}x$$

由此可见，态矢$\psi(x)$按动量本征函数系$\{\psi_{p_x}\}$（动量表象）展开后的展开系数（动量表象中的表示）$u(p_x)$，就是坐标表象中波函数$\psi(x)$的 **Fourier** 变换式。

25. 求一维自由粒子的能量本征态。

解：一维自由粒子的 **Hamilton** 量为 $\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$

于是，得能量本征方程 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi=E\psi$

令$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$（对自由粒子，$E\geq 0$，显然有$k$为实数且$k>0$），上面的方程变成 $\psi''+k^2\psi=0$

该微分方程的两个线性无关特解为e^{-ikx}和e^{ikx}，所以，本征态可取为

$$\psi_{k-}=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-ikx},\quad \psi_{k+}=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{ikx}\qquad (k>0)$$

它们对应的能量本征值均为$E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}$，为二重简并。

两个线性无关的波函数也可以合写成 $\psi_k=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{ikx} \quad k\in(-\infty,+\infty)$

显然是平面波的形式，波函数是不能归一化的，归一化因子$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$只是为了使波函数ψ_k满足封闭性的要求

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_k^*\psi_{k'}\mathrm{d}x=\delta(k-k')$$

26. 求算符$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同本征函数系。

解：由于

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

所以，有

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\hat{L}_z^2 \qquad (1)$$

显然，有$[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$，即算符$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$有共同本征函数系。

$\hat{L}^2$的本征方程为

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi=\lambda\psi \qquad (2)$$

此方程的解为球谐函数

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \qquad (3)$$

其中$l=0,1,2,3,\cdots$， $m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$ 。

（3）式就是算符$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同本征函数。由所有的$Y_l^m(\theta,\varphi)$构成的本征函数系$\{Y_l^m(\theta,\varphi)\}$，就是算符$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同本征函数系。

27. 对总能量算符$\hat{E}$和时间算符$\hat{t}$，求对易子$[\hat{E},\hat{t}]$。

解：由于时间算符$\hat{t}$就是时间t本身，对任意波函数ψ，有

$$(\hat{E}t)\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(t\psi) = i\hbar\psi + i\hbar t\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

$$(t\hat{E})\psi = i\hbar t\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

于是，有

$$[\hat{E},\hat{t}]\psi = (\hat{E}t - t\hat{E})\psi = i\hbar\psi$$

由算符相等的定义，得

$$[\hat{E},\hat{t}] = i\hbar$$

28. 对于一维谐振子的能量本征态$|n\rangle$，有

$$x|n\rangle = \frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle + \sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle\right)$$

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}|n\rangle = \alpha\left[\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle - \sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle\right]$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}|n\rangle = \frac{\alpha^2}{2}\left[\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle - \sqrt{2n+1}|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle\right]$$

在一维谐振子的能量表象中，求坐标算符x，动量算符$\hat{p}$和 **Hamilton** 算符$\hat{H}$的矩阵表示。

解：力学量算符$\hat{A}$的矩阵表示为

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$，其中矩阵元 $A_{mn}=\langle\psi_m|\hat{A}|\psi_n\rangle$

在一维谐振子的能量表象中，坐标算符 x 矩阵表示的矩阵元为

$$x_{mn}=\langle m|x|n\rangle=\frac{1}{\alpha}\langle m|\left(\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle+\sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle\right)$$

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

由此得坐标算符 x 的矩阵表示

$$\mathbf{X}=\frac{1}{\alpha}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1/2} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1/2} & 0 & \sqrt{2/2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2/2} & 0 & \sqrt{3/2} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

动量算符 $\hat{p}$ 矩阵表示的矩阵元为

$$p_{mn}=\langle m|\hat{p}|n\rangle=-i\hbar\langle m|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}|n\rangle=-i\hbar\alpha\langle m|\left[\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle-\sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle\right]$$

$$=i\hbar\alpha\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m\,n+1}-\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m\,n-1}\right)$$

由此得动量算符 $\hat{p}$ 的矩阵表示

$$\mathbf{P}=i\hbar\alpha\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1/2} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1/2} & 0 & -\sqrt{2/2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2/2} & 0 & -\sqrt{3/2} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

Hamilton 算符 $\hat{H}$ 矩阵表示的矩阵元为

$$H_{nm}=\langle n|\widehat{H}|m\rangle=\langle m|E_n|n\rangle$$

$$=E_n\delta_{mn}=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega\delta_{mn}$$

由此得 **Hamilton** 算符 $\hat{H}$ 的矩阵表示

$$\mathbf{H}=\frac{1}{2}\hbar\omega\begin{pmatrix}1&0&0&0&\cdots\\0&3&0&0&\cdots\\0&0&5&0&\cdots\\0&0&0&7&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix}$$

29. 氢原子处于基态 $\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$，$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 为 **Bohr** 半径，求：

（**1**）r 的平均值；（**2**）势能 $-\frac{e^2}{r}$ 的平均值；（**3**）最可几的半径；（**4**）动能的平均值；（**5**）动量的几率分布函数。

解：（**1**）r 的平均值为

$$\bar{r}=\int r|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\mathrm{d}\tau=\frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}re^{-2r/a_0}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\int_0^{\infty}r^3e^{-2r/a_0}\mathrm{d}r$$　　　　利用公式：$\int_0^{\infty}x^ne^{-ax}\mathrm{d}x=\frac{n!}{a^{n+1}}$

$$=\frac{4}{a_0^3}\frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4}=\frac{3}{2}a_0$$

（**2**）势能 $-\frac{e^2}{r}$ 的平均值

$$\bar{U}=\overline{(-\frac{e^2}{r})}=-\frac{e^2}{\pi a_0^3}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{1}{r}e^{-2r/a_0}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=-\frac{e^2}{\pi a_0^3}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}e^{-2r/a_0}r\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=-\frac{4e^2}{a_0^3}\int_0^\infty e^{-2r/a_0}r\ dr$$

$$=-\frac{4e^2}{a_0^3}\frac{1}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^2}=-\frac{e^2}{a_0}$$

（**3**）电子出现在$r\to r+\mathrm{d}r$球壳内出现的几率为

$$\rho(r)\mathrm{d}r=\int_0^\pi\int_0^{2\pi}[\psi(r,\theta,\varphi)]^2r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{4}{a_0^3}e^{-2r/a_0}r^2\mathrm{d}r$$

由此得　$\rho(r)=\frac{4}{a_0^3}e^{-2r/a_0}r^2$

$$\frac{\mathrm{d}\rho(r)}{\mathrm{d}r}=\frac{4}{a_0^3}(2-\frac{2}{a_0}r)re^{-2r/a_0}$$

由$\frac{\mathrm{d}\rho(r)}{\mathrm{d}r}=0$，可求出

$r_1=0$，$r_2=\infty$，$r_3=a_0$

由于 $r_1=0$与$r_2=\infty$时，$\rho(r)=0$，为几率最小位置，而

$$\frac{\mathrm{d}^2\rho(r)}{\mathrm{d}r^2}=\frac{4}{a_0^3}(2-\frac{8}{a_0}r+\frac{4}{a_0^2}r^2)e^{-2r/a_0}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2\rho(r)}{\mathrm{d}r^2}\right|_{r=a_0}=-\frac{8}{a_0^3}e^{-2}<0$$

即$r=a_0$时，电子出现的几率最大，或者说最可几的半径为$r=a_0$。

（**4**）由于$\hat{T}=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$，在球面坐标系下，有

$$\hat{T}=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]$$

动能的平均值

$$\bar{T}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-r/a_0}\nabla^2(e^{-r/a_0})r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-r/a_0}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(e^{-r/a_0})]r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=-\frac{4\hbar^2}{2\mu a_0^3}\left(-\frac{1}{a_0}\right)\int_0^\infty\left(2r-\frac{r^2}{a_0}\right)e^{-r/a_0}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{4\hbar^2}{2\mu a_0^4}\left(2\frac{a_0^2}{4}-\frac{a_0^2}{4}\right)=\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}$$

（**5**）波函数$\psi(r,\theta,\varphi)$的 **Fourier** 变换式为

$$\varphi(\bar{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_0^\infty\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^\infty r^2e^{-r/a_0}\mathrm{d}r\int_0^\pi e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\mathrm{d}(-\cos\theta)$$

$$=\frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^\infty r^2e^{-r/a_0}\mathrm{d}r\frac{\hbar}{ipr}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\Big|_0^\pi$$

$$=\frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{\hbar}{ip}\int_0^\infty re^{-r/a_0}(e^{\frac{i}{\hbar}pr}-e^{-\frac{i}{\hbar}pr})\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{\hbar}{ip}\left[-\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}-\frac{i}{\hbar}p\right)^2}-\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right)^2}-\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2a_0^3\hbar^3}ip\pi}\frac{4ip}{a_0\hbar\left(\frac{1}{a_0^2}+\frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2}=\frac{4}{\sqrt{2a_0^3\hbar^3}\pi a_0}\frac{a_0^4\hbar^4}{(a_0{}^2p^2+\hbar^2)^2}$$

$$=\frac{(2a_0\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a_0{}^2p^2+\hbar^2)^2}$$

由此得动量几率分布函数

$$\rho(p)=|c(p)|^2=\frac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2(a_0p^2+\hbar^2)^4}$$

注意：问题（5）的解题过程中，首先利用了三维形式的 **Fourier** 变换

$$f(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}F(\vec{k})e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})}\mathrm{d}\vec{k}\ ,\quad F(\vec{k})=\int_{-\infty}^{\infty}f(\vec{r})e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\mathrm{d}\vec{r}$$

在量子力学中，为了保持对称形式，一维 **Fourier** 变换为

$$\psi(x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p\ ,\quad \varphi(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ipx/\hbar}\mathrm{d}x$$

推广到三维形式，就是

$$\psi(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(\vec{p})e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}\vec{p}\ ,\quad \varphi(\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(\vec{r})e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}^3x$$

对氢原子，利用了其波函数的球对称性，在球面坐标系下$\varphi(\vec{p})$的具体形式就是问题（5）的第一个式子。

在推导过程中，我们同时利用了积分公式$\int_0^{\infty}x^ne^{-ax}\mathrm{d}x=\frac{n!}{a^{n+1}}$。

30. 当一个质子俘获一个μ子（带电量和电子相同）时，就形式了一个所谓的μ原子。已知质子的质量为电子的 **1800** 倍，μ子的质量为电子的 **200** 倍。求μ原子的基态与第一激发态的能量。

解：这是一个类氢原子，由于μ子的质量与质子相比不能忽略，所以，在氢原子单体问题的能级公式$E_n=-\frac{m_ee^4}{2\hbar^2n^2}$中，电子质量$m_e$应该改成折合质量$\mu$。

$$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}=\frac{1800m_e\cdot 200m_e}{1800m_e+200m_e}=180m_e$$

所以，μ原子的能级公式为

$$E_n=-\frac{180m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}=180\cdot\left(-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}\right)$$

对氢原子，$E_n=-\dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}$在$n=1$时为基态能量，$E_1=-13.6\text{eV}$。故对$\mu$原子，其基态与第一激发态的能量分别为

$$E_1=180\cdot(-13.6\text{eV})=2448\text{eV}$$

$$E_2=180\cdot\left(-\frac{13.6\text{eV}}{2^2}\right)=612\text{eV}$$

31. 设已知在$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同表象中，算符$\hat{L}_x$和$\hat{L}_y$的矩阵表示分别为

$$\mathbf{L}_x=\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}，\mathbf{L}_y=\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$$

求它们的本征值和归一化的本征函数，并将矩阵L_x和L_y对角化。

解：算符$\hat{L}_x$的本征方程为 $\dfrac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$

由此得久期方程 $\begin{vmatrix}-\lambda&\dfrac{\hbar\sqrt{2}}{2}&0\\\dfrac{\hbar\sqrt{2}}{2}&-\lambda&\dfrac{\hbar\sqrt{2}}{2}\\0&\dfrac{\hbar\sqrt{2}}{2}&-\lambda\end{vmatrix}=0$

此即$\lambda(\lambda^2-\hbar^2)=0$，解之即得 $\lambda_1=-\hbar$，$\lambda_2=0$，$\lambda_3=\hbar$

把$\lambda_1=-\hbar$代入本征方程，得方程组

$$\begin{cases} 2a+\sqrt{2}b=0 \\ 2b+\sqrt{2}(a+c)=0 \\ 2c+\sqrt{2}b=0 \end{cases}$$

解方程组，得$b=-\sqrt{2}a$，$c=a$

本征函数可表示成：$\begin{pmatrix} a \\ -\sqrt{2}a \\ a \end{pmatrix}$，由归一化条件，有

$$(a \quad -\sqrt{2}a \quad a)^*\begin{pmatrix} a \\ -\sqrt{2}a \\ a \end{pmatrix}=1$$

取a为实数，求得$a=\pm\frac{1}{2}$，取$a=\frac{1}{2}$（波函数可差一个常数因子）。

所以，$\hat{L}_x$的对应于本征值$\lambda_1=-\hbar$的正交归一本征函数为

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

用同样的方法，可求出对应于本征值$\lambda_2=0$和$\lambda_3=\hbar$的正交归一本征函数分别为

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \quad 和 \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

注释：在F表象（设基为$\{\psi_n\}$）中，态矢$|\psi\rangle$按正交归一完备基$\{\psi_n\}$展开为

$|\psi\rangle=\sum\limits_n a_n|\psi_n\rangle$；在$Q$表象（设基为$\{\varphi_m\}$）中，态矢$|\psi\rangle$按正交归一完备基$\{\varphi_m\}$展开为$|\psi\rangle=\sum\limits_m b_m|\varphi_m\rangle$，于是，有

$$|\psi\rangle=\sum_n a_n|\psi_n\rangle=\sum_m b_m|\varphi_m\rangle$$

左乘$\langle\varphi_m|$，得$b_m=\sum\limits_n a_n\langle\varphi_m|\psi_n\rangle$，写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

其中$S_{mn}=\langle\varphi_m|\psi_n\rangle$为把态矢$|\psi\rangle$从$F$表象变换到$Q$表象的变换矩阵$\mathbf{S}$的矩阵元。

把φ_m按正交归一完备基$\{\psi_n\}$展开：$|\varphi_m\rangle=\sum\limits_n c_{mn}|\psi_n\rangle$，其展开系数为

$$c_{mn}=\langle\psi_n|\varphi_m\rangle=\langle\varphi_m|\psi_n\rangle^\dagger \qquad \text{（转置共轭，或者称厄米共轭）}$$

由此可见，从F表象变换到Q表象的变换矩阵元S_{mn}，与Q表象的基矢φ_m按F表象的正交归一完备基$\{\psi_n\}$展开的展开系数之间的关系为转置共轭关系。如果我们已经知道Q表象的基矢在F表象中的矩阵表示，则可以由这些矩阵元来构造变换矩阵。

由上面的结果，从$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同表象，变换到$\hat{L}_x$表象的变换矩阵为（按对应的本征值由小到大排列）

$$\mathbf{S}=\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

由于算符在自身的表象中的表示为对角矩阵，所以，当我们把算符$\hat{L}_x$在$\hat{L}^2$

和$\hat{L}_z$的共同表象中的矩阵表示，变换到算符$\hat{L}_x$表象时，其矩阵就应该是对角化矩阵。

$$\mathbf{L}_x' = \mathbf{S}\mathbf{L}_x\mathbf{S}^\dagger = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

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

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

用同样的方法，可求出算符$\hat{L}_y$的本征值分别为 $-\hbar$，0，$\hbar$

对应的本征函数分别为 $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{i\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{i\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

从$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同表象，变换到$\hat{L}_y$表象的变换矩阵为

$$\mathbf{S}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{i\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{i\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

将矩阵$\mathbf{L}_y$对角化后，为 $\mathbf{L}'_y=\mathbf{S}\mathbf{L}_y\mathbf{S}^{\dagger}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\hbar$

32. 在S_z表象中求算符$\hat{S}_x$及$\hat{S}_y$的矩阵表达式。

解：在S_z表象中，算符$\hat{S}_z$的矩阵表示为 $\mathbf{S}_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

由$\hat{S}_x$、$\hat{S}_y$、$\hat{S}_z$之间的对易或反对易关系可知，$\hat{S}_x$和$\hat{S}_y$算符的矩阵表示也只能是2×2矩阵。设

$$\mathbf{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$$

于是，有 $\mathbf{S}_x^{\dagger}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a* & c*\\ b* & d*\end{pmatrix}$

所有的力学量算符均为厄米算符，即$\mathbf{S}_x^{\dagger}=\mathbf{S}_x$，得

$$\begin{pmatrix}a* & c*\\ b* & d*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$$

显然有$a*=a$，$d*=d$，$c=b*$，即a、d为实数，$\mathbf{S}_x$可写成

$$\mathbf{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a & b\\ b* & d\end{pmatrix}$$

把反对易关系式$\hat{S}_x\hat{S}_z+\hat{S}_z\hat{S}_x=0$用矩阵表示，即是

$$\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} a & b \\ b* & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}+\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ b* & d \end{pmatrix}=0$$

整理即得 $\begin{pmatrix} 2a & 0 \\ 0 & -2d \end{pmatrix}=0$

所以$a=d=0$，$\mathbf{S}_x$可进一步写成 $\mathbf{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & b \\ b* & 0 \end{pmatrix}$

再利用$\mathbf{S}_x^2=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$，得 $\begin{pmatrix} |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

由上式得$|b|^2=1$，即$b=e^{i\varphi}$，其中相角φ为任意实数，一般地取$\varphi=0$，得到在S_z表象中$\hat{S}_x$的矩阵表达式

$$\mathbf{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

我们可以利用同样的方法求出$\mathbf{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} & 0 \end{pmatrix}$，但是，此处相角$\varphi$就不能随意选取了，因为$\hat{S}_x$与$\hat{S}_y$之间要求满足对易关系式$[\hat{S}_x,\hat{S}_y]=i\hbar\hat{S}_z$，以及反对易关系$[\hat{S}_x,\hat{S}_y]_+=0$，$\hat{S}_x$中相角的选取影响了$\hat{S}_y$中相角的选取。由$\hat{S}_x$与$\hat{S}_y$之间的对易关系式和反对易关系式可以确定$\mathbf{S}_y$中的相角$\varphi$。一般地，由对易关系式$[\hat{S}_z,\hat{S}_x]=i\hbar\hat{S}_y$即可求出$\mathbf{S}_y$

$$\hat{\mathbf{S}}_y=\frac{1}{i\hbar}(\hat{\mathbf{S}}_z\hat{\mathbf{S}}_x-\hat{\mathbf{S}}_x\hat{\mathbf{S}}_z)$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{\hbar^2}{4}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right]$$

$$=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

33. 在S_z表象中求算符$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$及$\hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$的本征值及其对应

的本征函数。

解：在S_z表象中，设$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$的本征函数为$\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，则本征方程为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \qquad (1)$$

为了简便，令$\gamma=\frac{2}{\hbar}\lambda$，（1）式变成

$$\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\gamma\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \qquad (2)$$

（2）式对应的久期方程为$\begin{vmatrix}-\gamma & 1\\ 1 & -\gamma\end{vmatrix}=0$，解得　$\gamma=\pm1$

由此得到在S_z表象中，算符$\hat{S}_x$的本征值为　$\lambda=\frac{\hbar}{2}\gamma=\pm\frac{\hbar}{2}$

把$\gamma=1$代入（2）式，得$\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，此即　$\begin{pmatrix}b\\ a\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$

解之，得$a=b$，所以，本征函数为$\begin{pmatrix}a\\ a\end{pmatrix}$，利用归一化条件

$$(a \quad a)^*\begin{pmatrix}a\\ a\end{pmatrix}=1$$

由于本征函数可以有一个相角的不确定性，不妨设a为实数，解得

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

所以，与本征值$\lambda=\frac{\hbar}{2}$对应的本征函数为$\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$。

同理可求出与本征值$\lambda=-\frac{\hbar}{2}$对应的本征函数为$\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$。

类似地，设$\hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$的本征函数为$\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}$，则本征方程为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}=\nu\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix} \qquad (3)$$

为了简便，令$\mu=\frac{2}{\hbar}\nu$，（3）式变成

$$\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}=\mu\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix} \qquad (4)$$

（4）式对应的久期方程为$\begin{vmatrix}-\mu & -i\\ i & -\mu\end{vmatrix}=0$，解得　$\mu=\pm1$

由此得到在S_z表象中，算符$\hat{S}_y$的本征值为　$\nu=\frac{\hbar}{2}\mu=\pm\frac{\hbar}{2}$

把$\mu=1$代入（4）式，得$\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}$，此即　$\begin{pmatrix}-id\\ ic\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}$

解之，得$d=ic$，所以，本征函数为$\begin{pmatrix}c\\ ic\end{pmatrix}$，利用归一化条件

$$(c \quad ic)^*\begin{pmatrix}c\\ ic\end{pmatrix}=1$$

由于本征函数可以有一个相角的不确定性，不妨设c为实数，解得

$$c=\frac{\sqrt{2}}{2}$$

所以，与本征值$\nu=\frac{\hbar}{2}$对应的本征函数为$\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$。

同理可求出与本征值$\nu=-\frac{\hbar}{2}$对应的本征函数为$\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$。

34．　设电子在S_z表象中处于其本征自旋态$|\uparrow\rangle$，求$\hat{S}_x$和$\hat{S}_y$的不确定性关系。

解：在S_z表象中，有

$$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}，\quad \hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}，\quad |\uparrow\rangle=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\overline{S_x}=\langle\uparrow|\hat{S}_x|\uparrow\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$$

同样可求 $\overline{S_y}=\langle\uparrow|\hat{S}_y|\uparrow\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$

再利用 $S_x{}^2=S_y{}^2=\frac{\hbar^2}{4}$，可求

$$\overline{(\Delta S_x)^2}=\overline{(S_x-\overline{S_x})^2}=\overline{S_x{}^2}-\overline{S_x}^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{(\Delta S_y)^2}=\overline{(S_y-\overline{S_y})^2}=\overline{S_y{}^2}-\overline{S_y}^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

于是，$\hat{S}_x$ 和 $\hat{S}_y$ 的不确定性关系为

$$\Delta S_x\cdot\Delta S_y=\sqrt{\overline{(\Delta S_x)^2}\cdot\overline{(\Delta S_y)^2}}\geq\frac{\hbar^2}{4}$$

35. 对于一维谐振子的产生算符 $\hat{a}^+$ 和湮灭算符 $\hat{a}$，有

$$\hat{a}^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

（**1**）利用一维谐振子 **Hamilton** 算符 $\hat{H}=\left(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，求 $\hat{H}$ 的本征值；（**2**）利用 $\hat{x}=\alpha(\hat{a}^++\hat{a})$ 和 $\hat{p}=i\beta(\hat{a}^+-\hat{a})$，求 $\hat{x}|n\rangle$ 和 $\hat{p}|n\rangle$。其中 $\alpha=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}$，$\beta=\sqrt{\frac{\mu\hbar\omega}{2}}$。

解：（**1**）利用公式 $\hat{a}^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ 和 $\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle$，得

$$\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle=\hat{a}^+(\sqrt{n}\,|n-1\rangle)=\sqrt{n}\cdot\sqrt{n}\,|n\rangle=n|n\rangle$$

所以 $\hat{H}|n\rangle=\left(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$

显然，算符$\widehat{H}$的本征值为 $E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

（**2**）$\hat{x}|n\rangle = \alpha(\hat{a}^+ + \hat{a})|n\rangle = \alpha\left[\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle + \sqrt{n}\,|n-1\rangle\right]$

$$\hat{p}\,|n\rangle = i\beta(\hat{a}^+ - \hat{a})|n\rangle = i\beta\left[\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle - \sqrt{n}\,|n-1\rangle\right]$$

36． 对于角动量升降算符$\widehat{J}_+ = \widehat{J}_x + i\widehat{J}_y$和$\widehat{J}_- = \widehat{J}_x - i\widehat{J}_y$，有

$$\widehat{J}_+\,|\,j,m\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,\hbar\,|\,j,m+1\rangle$$

$$\widehat{J}_-\,|\,j,m\rangle = \sqrt{(j-m+1)(j+m)}\,\hbar\,|\,j,m-1\rangle$$

由此可见：$\widehat{J}_+\,|\,j,j\rangle = 0$，$\widehat{J}_-\,|\,j,-j\rangle = 0$。请在 **Pauli** 表象下，用自旋角动量升降算符验算之。

解：在 **Pauli** 表象下有

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

于是，得

$$\sigma_+ = \sigma_x + i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_- = \sigma_x - i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$\widehat{J}_+\,|\,j,j\rangle = 0$与$\widehat{J}_-\,|\,j,-j\rangle = 0$，在此处就分别相当于$\sigma_+|\uparrow\rangle = 0$和$\sigma_-|\downarrow\rangle = 0$。验证如下：

$$\sigma_+|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\sigma_-|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

37． 设体系未受微扰作用时只有两个非简并态能级：$E_1^{(0)}$和$E_2^{(0)}$，现在受到微扰$\widehat{H}'$的作用，微扰矩阵元为$H'_{12} = H'_{21} = a$，$H'_{11} = H'_{22} = b$。a、b

均为实数，用微扰公式求能量至二级修正。

解：能量的一级修正量为

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n | \widehat{H}' | \psi_n \rangle = H'_{nn}$$

由于 $H'_{11} = H'_{22} = b$，所以有

$$E_1^{(1)} = E_2^{(1)} = H'_{11} = H'_{22} = b$$

能量的二级修正量为

$$E_n^{(2)} = \sum_k{}' \frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

由于 $H'_{12} = H'_{21} = a$，所以有

$$E_1^{(2)} = \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}，\quad E_2^{(2)} = \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

所以，在微扰作用下当能量修正至二级时，两个能级的能量分别为

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = E_2^{(0)} + b + \frac{a^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$$