

电子科技大学 2016-2017 学年第 2 学期期末考试 A 卷

考试科目: 量子力学与统计物理 考试形式: 一页纸开卷 考试日期: 2017 年 7 月 4 日

成绩构成比例: 平时 20 %, 期中 20 %, 实验 0 %, 期末 60 %

本试卷由 四 部分构成, 共 八 页。考试时长: 120 分钟 注: _____

题号	一	二	三	四	五	六	七	合计
得分								

得 分

一、填空题 (每空一分, 共 23 分)

1、 当能量为 5.0ev 的光子射向某金属表面时, 从金属表面逸出的电子最大

初动能为 1.5ev。为使该金属能产生光电效应, 入射光的最低能量必须是 3.5 ev。

2、 若电子经过 100V 电压加速, 则与之相对应的电子德布罗意波长为 0.1225 nm。

3、 设 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 分别表示粒子的两个可能运动状态, 则它们线性迭加的态

$c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$ 的几率分布为 $|c_1\psi_1|^2 + |c_2\psi_2|^2 + c_1^*c_2\psi_1^*\psi_2 + c_1c_2^*\psi_1\psi_2^*$ 。

4、 设 $C(p,t)$ 为归一化的动量表象下的波函数, 则 $|C(p,t)|^2 dp$ 的物理意义为 在
p—p+dp 范围内发现粒子的几率。

5、 $[x, \hat{p}_x] = \underline{i\hbar}$ 。

6、 算符 \hat{L}_x 和 \hat{L}_y 的对易关系为 $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$, 则 \hat{L}_x 、 \hat{L}_y 的测不准关系是

$$\overline{(\Delta\hat{L}_x)^2} \overline{(\Delta\hat{L}_y)^2} \geq \frac{\hbar^2 \overline{\hat{L}_z}^2}{4}$$

7、 在量子力学中, 微观体系的状态被一个 波函数 完全描述。

8、一粒子在一维无限深势阱中运动的状态为 $\psi(x) = \frac{\sqrt{2}}{2}\psi_1(x) - \frac{\sqrt{2}}{2}\psi_2(x)$, 其中 $\psi_1(x)$ 、

$\psi_2(x)$ 是其能量本征函数, 则 $\psi(x)$ 在能量表象中的表示是 $\begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$ 。

9、线性谐振子的能级为 $(n + 1/2)\hbar\omega, (n = 0, 1, 2, \dots)$ 。

10、 $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ 为氢原子的波函数, n, l, m 的取值范围分别为

$n = 1, 2, 3, \dots, l = 0, 1, 2, \dots, n-1, m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ 。

11、费米子所组成的全同粒子体系的波函数具有 交换反对称性。

12、对氢原子, 考虑自旋但不考虑自旋与轨道角动量的耦合时, 能级的简并度

为 $2n^2$ 。

13、氢原子的一级斯塔克效应中, 对于 $n = 2$ 的能级由原来的一个能级分裂为

三个子能级。

14、偶极跃迁中, 角量子数与磁量子数的选择定则为 $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$ 。

15、斯特恩 (Stern) — 革拉赫 (Gerlach) 实验表明电子具有 自旋 属性, 电子自旋角

动量在空间任何方向的投影只能是 $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ 。

16、 \hat{S} 为自旋算符, 则其 x 和 y 分量的对易关系为 $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = -i\hbar\hat{S}_z$ 。

17、 \hat{J}_1, \hat{J}_2 是角动量算符, $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$, 则 $[\hat{J}^2, \hat{J}_1^2]$ 等于 0。

18、玻尔兹曼分布函数 $f_B(\epsilon) = e^{-\alpha - \beta\epsilon}$ 。

19、当体系处于绝对零度时, 各粒子均处于能量最低的基态, 熵 $S_{T=0}$ 为 0。

- 20、 电子系统由费米统计来处理。
- 21、 β 的统计意义: N, V 不变时, 体系微观态随能量变化时的相对变化量。
- 22、 **能量均分定理:** 对于处在温度为 T 的平衡状态的经典系统, 粒子能量中每一个平

方项的平均值等于 $\frac{1}{2}kT$ 。

得分

二、简答题 (每题 5 分, 共 30 分)

1. Stern—Gerlach 实验证实了什么?

Stern—Gerlach 实验证明了电子自旋的存在。(5 分)

2. 力学量 \hat{G} 在自身表象中的矩阵表示有何特点?

力学量 \hat{G} 在自身表象中的矩阵是对角的 (3 分), 对角线上为 \hat{G} 的本征值。(2 分)

3. 两个对易的力学量是否一定同时确定? 为什么?

不一定, 只有在它们共同的本征态下才能同时确定。(3 分)

4. 写出电子在 \hat{S}_z 表象下的三个 Pauli 矩阵。

在 \hat{S}_z 表象下. 电子的三个泡利(Pauli)矩阵为:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2 \text{ 分})$$

(2 分) (1 分) (2 分)

5. 阐述等概率原理并写出热力学量熵和微观态数关系。

答: 系统各可能的微观态出现的几率相等 (3 分) $S = k_B \ln \Omega$ (2 分)。

6. 根据费米分布函数, 说明费米系统处于平衡态时, 各单粒子态 (能量为 ϵ)

被占据的概率都小于等于 1。

$$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/kT} + 1} \leq 1$$

(3 分) 说明 (2 分)

得 分

三、证明题 (每题 5 分, 共 15 分)

1. 证明: 若两算符有一组共同完备的本征函数系, 则两算符对易。

证: 设 \hat{F}, \hat{G} 有共同本征函数系 φ_n 构成完全系, 则有

$$\hat{F}\varphi_n = \lambda_n\varphi_n, \quad \hat{G}\varphi_n = \mu_n\varphi_n$$

λ_n, μ_n 分别是 \hat{F}, \hat{G} 本征值。所以有 $(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\varphi_n = \lambda_n\mu_n\varphi_n - \mu_n\lambda_n\varphi_n = 0$

(2 分)

设 ψ 为任意波函数, 由于 φ_n 组成完全系, $\psi = \sum_n a_n \varphi_n$ (2 分)

于是可以将 ψ 按 φ_n 展开 $(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\psi = \sum_n a_n (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\varphi_n = 0$ (2 分)。

因为 ψ 是任意波函数, 所以 $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = 0$ (1 分)

2. 设 $[\hat{G}, \hat{F}] = 0$, 证明 $\hat{F}\hat{G}$ 算符的本征值必为实数, 其中 \hat{F}, \hat{G} 均是厄米算符。

$$[\text{证明}] \quad \int \psi^* \hat{F}\hat{G}\varphi d\tau = \int (\hat{F}\psi)^* \hat{G}\varphi d\tau = \int (\hat{G}\hat{F}\psi)^* \varphi d\tau \quad (2 \text{ 分})$$

$$\because [\hat{G}\hat{F}] = 0 \quad \therefore \hat{G}\hat{F} = \hat{F}\hat{G}$$

$$\therefore \int \psi^* \hat{F}\hat{G}\varphi d\tau = \int (\hat{F}\hat{G}\psi)^* \varphi d\tau \quad (2 \text{ 分})$$

$\therefore \hat{F}\hat{G}$ 是厄米算符。因厄米算符的本征值为实数, $\therefore \hat{F}\hat{G}$ 的本征值必为实数 (1 分)

知

第 5 页

$$\begin{aligned}
\overline{p_x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip_0 x/\hbar} \psi^*(x+x_0) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) [e^{-ip_0 x/\hbar} \psi(x+x_0)] dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip_0 x/\hbar} \psi^*(x+x_0) [-p_0 e^{-ip_0 x/\hbar} \psi(x+x_0) + e^{-ip_0 x/\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x+x_0)] dx \\
&= -p_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi(x') dx' = -p_0 + p_0 = 0
\end{aligned}$$

(3 分)

2. (8分) 一全同双粒子体系服从的薛定谔方程为

$$\left[\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2} k r^2 \right] \psi(\vec{R}, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}, \vec{r}), \text{ 其中 } M = 2m \quad \mu = m/2$$

(1) 指出体系的所有守恒量 (不必证明); (2分)

(2) 求基态能量和基态波函数。 (6分)

解: (1) 体系的哈密顿量是中心力场哈密顿, 容易得知系统的守恒量为 E, L^2, L_z 。

(2分)

(2) 考虑相对运动哈密顿量

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2} k r^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (3 \text{ 分})$$

这是三维各向同性谐振子, 因此, 其基态能量和波函数为

$$E_N = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad \psi(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}}} e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 r^2} \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu \omega}{\hbar}} \quad (3 \text{ 分})$$

3. (8分) 不考虑自旋轨道耦合, 设 $t=0$ 时氢原子所处的态为:

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

(1) 求体系能量的平均值; (2分)

(2) 求任意 t 时刻波函数 $\psi(\vec{r}, t)$; 处于 $l=1, m=1$ 的态的概率, 及处在 $m_s = \frac{1}{2}$ 态的几率。(6分)

解: 不考虑自旋轨道耦合时, 氢原子定态能量和波函数为

$$E_n = \frac{a_0}{n^2} \quad \psi_{nlm m_s}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \chi_{m_s}(s_z)$$

$\psi(\vec{r}, 0)$ 已归一化, 因此有:

$$(1) \quad \bar{E} = \frac{4}{10} E_1 + \frac{6}{10} E_2 = \frac{2}{5} \frac{a_0}{1^2} + \frac{3}{5} \frac{a_0}{2^2} = \frac{11}{20} a_0 \quad (2 \text{ 分})$$

(2) 任意 t 时刻波函数

$$\psi(\vec{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{10}} \{ 2e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_{100\frac{1}{2}}(\vec{q}) + e^{-iE_2 t/\hbar} [\psi_{210\frac{1}{2}}(\vec{q}) + \sqrt{2}\psi_{211-\frac{1}{2}}(\vec{q}) + \sqrt{3}\psi_{21-1-\frac{1}{2}}(\vec{q})] \} \quad (2$$

分)

$$\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}} e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_{211-\frac{1}{2}}(\vec{q})$$

所谓处在 $l=1, m=1$ 态, 即 ,

$$\text{概率为: } \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}}\right) = \frac{1}{5}; \quad (2 \text{ 分})$$

$$\text{所谓处在 } m=0 \text{ 态, 即 } \frac{1}{\sqrt{10}}\{2e^{-iE_1t/\hbar}\psi_{100\frac{1}{2}}(\vec{q}) + e^{-iE_2t/\hbar}\psi_{210\frac{1}{2}}(\vec{q})\},$$

概率为 $1/2$ 。(2 分)

4. (8 分) 有一个二能级体系, 哈密顿量为

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & \alpha \\ \alpha & E_2 \end{pmatrix}, \text{ 其中 } E_1 \geq E_2 \gg \alpha,$$

用微扰法求能量本征值和本征态。

$$\text{解: 令 } H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \alpha & 0 \end{pmatrix}$$

由于 H_0 是对角化的, 可选作表象:

$$E_1^{(0)} = E_1; \quad \psi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_2^{(0)} = E_2; \quad \psi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

(1) 对于 $E_1 \neq E_2$, 由非简并微扰论计算公式

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_m' \frac{|H'_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \\ \psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + \dots \end{cases}$$

$$\text{得} \quad E_1^{(1)} = 0$$

$$E_1^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{\alpha^2}{E_1 - E_2}; \quad \psi_1^{(1)} = \frac{H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} = \frac{\alpha}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

同时

$$E_2^{(1)} = 0$$

$$E_2^{(2)} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{\alpha^2}{E_2 - E_1}$$

$$\psi_2^{(1)} = \frac{H'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} = \frac{\alpha}{E_2 - E_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

所以，二级近似能量和一级近似态矢为

$$E_1 + \frac{\alpha^2}{E_1 - E_2}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\alpha}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$E_2 + \frac{\alpha^2}{E_2 - E_1}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{\alpha}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

(2) 对于 $E_1 = E_2$ ，解久期方程

$$\begin{pmatrix} -E^{(1)} & \alpha \\ \alpha & -E^{(1)} \end{pmatrix} = 0$$

得能量一级修正：

$$E_1^{(1)} = \alpha; \quad E_2^{(1)} = -\alpha$$

简并完全消除，新零级近似态矢为

$$\psi_1^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$\psi_2^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

代入非简并公式，计算一级近似态矢，得

$$\psi_1^{(1)} = \frac{H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_2^{(1)} = \frac{H'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} = -\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (2 \text{ 分})$$

电子科技大学 2016-2017 学年第 2 学期期末考试 B 卷

考试科目: 量子力学与统计物理 考试形式: 一页纸开卷 考试日期: 2017 年 7 月 4 日

成绩构成比例: 平时 20 %, 期中 20 %, 实验 0 %, 期末 60 %

本试卷由 四 部分构成, 共 七 页。考试时长: 120 分钟 注: _____

题号	一	二	三	四	五	六	七	合计
得分								

得分

一、填空题 (每空 1 分, 共 23 分)

1、光电效应溢出光电子数的多少依赖于入射光的强度和频率。

2、在量子力学中, 力学量用 厄密算符 表示。

3、 $\int |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr$ 表示 在 $r \rightarrow r+dr$ 单位立体角的球壳内发现粒子的几率。

4、波函数 $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int c(p, t) \exp(\frac{i}{\hbar} px) dp$ 的傅里叶变换式是

$$c(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x, t) \exp(-\frac{i}{\hbar} px) dx \circ$$

5、如两力学量算符 \hat{A}, \hat{B} 有共同本征函数完全系, 则 $[\hat{A}, \hat{B}] =$ 0。

6、 $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] =$ ihL_x ;

7、坐标和动量的测不准关系是 $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ 或 $\overline{(\Delta \hat{x})^2} \overline{(\Delta \hat{p})^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$ 。

8、线性谐振子的能量本征函数在能量表象中的表示是
$$\begin{pmatrix} a/\sqrt{|a|^2+|b|^2} \\ b/\sqrt{|a|^2+|b|^2} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$
。

9、线性谐振子的能量本征方程是
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x)$$
。

10、 $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ 为氢原子的波函数， n, l, m 的取值范围分别为

$n = 1, 2, 3, \dots, l = 0, 1, 2, \dots, n-1, m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ 。

11、非简并定态微扰理论的适用条件是
$$\left| \frac{H'_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1$$
。

12、玻色子所组成的全同粒子体系的波函数具有 交换对称性。

13、对氢原子，不考虑电子的自旋，能级的简并度为 n^2 。

14、偶极跃迁中，角量子数与磁量子数的选择定则为 $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$ 。

15、光谱的精细结构表明电子具有 自旋 属性，电子自旋角动量在空间任何方向的

投影只能是 $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ 。

16、 \hat{S} 为自旋算符，则 \hat{S}^2 本征值 $\frac{3}{4}\hbar^2$ ， $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] =$ 0。

17、 \hat{J}_1, \hat{J}_2 是角动量算符， $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ ， $[\hat{J}_z, \hat{J}_1^2]$ 等于 0。

18、玻色分布函数 $f_{BE}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/kT} - 1}$ 。

19、熵与总微观态数目的关系为 $S = k_B \ln \Omega$ 。

20、简并气体、光子气体、声子气体和低温玻色凝聚等问题由 波色 统计处理。

21、熵的统计意义是 体系微观状态数的量度，是混乱度的度量。

得分

二、简答题（每题 5 分，共 30 分）

1. Davison-Germer 实验证实了什么？

Davison-Germer 实验明了电子的波动性。（5 分）

2. 两个不对易的算符所表示的力学量是否一定不能同时确定？举例说明。

不一定（2 分），如 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 互不对易，但在 Y_{00} 态下， $\hat{L}_x = \hat{L}_y = \hat{L}_z = 0$ （3 分）3. Pauli 算符 $\hat{\sigma}$ 是否满足角动量的定义式？将 $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$ 代入自旋角动量定义式 $\hat{S} \times \hat{S} = i\hbar \hat{S}$ （3 分）得 $\hat{\sigma} \times \hat{\sigma} = 2i\hat{\sigma} \neq i\hbar \hat{\sigma}$ ，即算符 $\hat{\sigma}$ 不满足角动量定义式。（2 分）

4. 写出德布罗意关系式及自由粒子的德布罗意波。

德布罗意关系： $E = h\nu$ ， $\lambda = h/p$ （3 分）自由粒子的德布罗意波： $\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}$ （2 分）

5. 叙述统计物理的等几率原理，说明其成立的条件。

答：系统各可能的微观态出现的几率相等（3 分）。成立的条件当孤立系处于平衡态时（2 分），

6. 根据玻色分布函数，说明玻色系统处于平衡态时，各单粒子态（能量为 ε ）被占据的概率是任意数。

$$f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} - 1} \geq 0$$

（3 分） 说明（2 分）

得 分

三、证明题（每题 5 分，共 15 分）

1. 证明 厄米算符的平均值都是实数（在任意态）

[证] 由厄米算符的定义

$$\int \psi^* \hat{F} \psi d\tau = \int (\hat{F} \psi)^* \psi d\tau$$

厄米算符 \hat{F} 的平均值（2 分）

$$\begin{aligned} \overline{F} &= \int \psi^* \hat{F} \psi d\tau \\ &= [\int \psi (\hat{F} \psi)^* d\tau]^* \\ &= [\int \psi \hat{F}^* \psi^* d\tau]^* \\ &= [\int (\hat{F} \psi)^* \psi d\tau]^* \\ &= [\int \psi^* \hat{F} \psi d\tau]^* \\ &= \overline{F}^* \end{aligned}$$

即厄米算符的平均值都是实数（3 分）

2. 证明 $i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2)$ 是厄米算符

$$i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2) = i[\hat{p}_x^2, x] = i\hat{p}_x[\hat{p}_x, x] + i[\hat{p}_x, x]\hat{p}_x = 2\hbar\hat{p}_x, \quad (3 \text{ 分})$$

因为 \hat{p}_x 是厄密算符，所以

$i(\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2)$ 是厄密算符。

（2 分）

3. 证明： $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \quad (2 \text{ 分})$$

$$= \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x] \hat{L}_y + \hat{L}_z [\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \hat{L}_z \quad (2 \text{ 分})$$

$$= -i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z - i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z$$

$$= 0 \quad (1 \text{ 分})$$

效

无

题

答

内

以

线

封

密

得分

四、计算题（每题 8 分，共 32 分）

1. 已知一维运动的粒子处于归一化态函数 $\psi(x)$ 所描述的状态时，其坐标 x 和动量 p_x 的平均值分别为 x_0 和 p_0 ，求处于 $\phi(x) = e^{ip_0x_0/\hbar}\psi(x+x_0)$ 态时，坐标 x 和动量 p_x 的平均值。

解：已知粒子在态 $\psi(x)$ 中坐标 x 和动量 p_x 的平均值分别为

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = x_0$$

$$\bar{p}_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx = p_0 \quad (3 \text{ 分})$$

现粒子处在 $\phi(x)$ 态，坐标 x 和动量 p_x 的平均值

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) x \phi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x+x_0) x \psi(x+x_0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x')(x' - x_0) \psi(x') dx' = x_0 - x_0 = 0 \end{aligned} \quad (2 \text{ 分})$$

$$\begin{aligned} \bar{p}_x &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x+x_0) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x+x_0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi(x') dx' = p_0 \end{aligned} \quad (3 \text{ 分})$$

2. 一个全同非近独立双粒子体系服从的薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}k|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

(1) 指出体系的所有守恒量 (不必证明); (3 分)

(2) 求基态能量和基态波函数。 (5 分)

解: (1) 体系的哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}k|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2$$

引入质心坐标 \vec{R} 和相对坐标 \vec{r} : $\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ (1 分)

坐标变换 $\vec{r}_1, \vec{r}_2 \Rightarrow \vec{R}, \vec{r}$ 后, 体系的哈密顿量变为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2}kr^2 \quad M = 2m \quad \mu = m/2$$

这是中心力场哈密顿, 所以容易得知系统的守恒量为 E, L^2, L_z 。(2 分)

(2) 考虑相对运动哈密顿量

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2}kr^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (2 \text{ 分})$$

这是三维各向同性谐振子, 因此, 其基态能量和波函数为

$$E_N = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad \psi(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \quad (3 \text{ 分})$$

3. 设 $t=0$ 时氢原子所处的态为:

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

(1) 求体系能量的平均值; (4 分)

(2) 求任意 t 时刻波函数 $\psi(\vec{r}, t)$; 处于 $l=1, m=1$ 的态的概率, 及处在 $m=0$ 态的几率。(4 分)

解: 不考虑自旋轨道耦合时, 氢原子定态能量和波函数为

$$E_n = \frac{a_0}{n^2} \quad \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2 \text{ 分})$$

$\psi(\vec{r}, 0)$ 已归一化, 因此有:

$$(1) \quad \bar{E} = \frac{4}{10} E_1 + \frac{6}{10} E_2 = \frac{2}{5} \frac{a_0}{1^2} + \frac{3}{5} \frac{a_0}{2^2} = \frac{11}{20} a_0 \quad (2 \text{ 分})$$

(2) 任意 t 时刻波函数

$$\psi(\vec{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{10}} \{ 2e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_{100}(\vec{q}) + e^{-iE_2 t/\hbar} [\psi_{210}(\vec{q}) + \sqrt{2}\psi_{211}(\vec{q}) + \sqrt{3}\psi_{21-1}(\vec{q})] \} \quad (2 \text{ 分})$$

所谓处在 $l=1, m=1$ 态, 即 $\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}} e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_{211}(\vec{q})$,

$$\text{概率为: } \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}} \right)^2 = \frac{1}{5};$$

所谓处在 $m=0$ 态, 即 $\frac{1}{\sqrt{10}} \{ 2e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_{100}(\vec{q}) + e^{-iE_2 t/\hbar} \psi_{210}(\vec{q}) \},$

概率为 $1/2$ 。(2 分)

4.有一个二能级体系，哈密顿量为

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & \alpha \\ \beta & E_2 \end{pmatrix}, \text{其中 } E_1 \geq E_2 \gg \alpha \geq \beta > 0,$$

用微扰法求能量一级修正和波函数一级修正。

$$\text{解: 令 } H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \beta & 0 \end{pmatrix}$$

由于 H_0 是对角化的，可选作表象：

$$E_1^{(0)} = E_1; \quad \psi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_2^{(0)} = E_2; \quad \psi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

(1) 对于 $E_1 \neq E_2$ ，由非简并微扰论计算公式

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_m' \frac{|H'_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \\ \psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_m' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + \dots \end{cases}$$

$$\text{得} \quad E_1^{(1)} = 0$$

$$\psi_1^{(1)} = \frac{H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} = \frac{\beta}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

同时

$$E_2^{(1)} = 0$$

$$\psi_2^{(1)} = \frac{H'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} = \frac{\alpha}{E_2 - E_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

(2) 对于 $E_1 = E_2$ ，解久期方程

$$\begin{pmatrix} -E^{(1)} & \alpha \\ \beta & -E^{(1)} \end{pmatrix} = 0$$

得能量一级修正：

$$E_1^{(1)} = \sqrt{\alpha\beta} ; \quad E_2^{(1)} = -\sqrt{\alpha\beta} ;$$

简并完全消除，新零级近似态矢为

$$\psi_1^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} ;$$

$$\psi_2^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2 \text{ 分})$$

代入非简并公式，计算其一级修正，得

$$\psi_1^{(1)} = \frac{H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\alpha\beta}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_2^{(1)} = \frac{H'_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_1^{(0)} = -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\alpha\beta}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} ; \quad (2 \text{ 分})$$