研究生量子力学入学试题解答

主编：冷轩

文档主页：https://gitee.com/xuanleng/qm-exams

联动文档：量子力学笔记，https://xuanleng.me/qm

联动文档：Notes on Life English，https://gitee.com/xuanleng/nle/releases

时间：July 11, 2020

技术支持：科研中的技能技巧，https://github.com/xuanleng/SiSR/releases

这页是背面

献给那些在我困难的时候帮助过我的人们

这页是背面

目录

说明 . . . 1
参考资料 . . . 1
一些感触 . . . 1
致谢 . . . 2
更新日志 . . . 2

1 中科院历年试题详解 3
1.1 2011 . . . 3
1.2 2010 . . . 10
1.3 2009 . . . 17
1.4 2008 . . . 22
1.5 2007A . . . 27
1.6 2007B . . . 33
1.7 2006 . . . 38
1.8 2006 甲 A . . . 44
1.9 2006 甲 B . . . 49
1.10 2006 乙 A . . . 53
1.11 2006 乙 B . . . 57
1.12 2005 . . . 61
1.13 2004 . . . 66
1.14 2001 理论型 . . . 69

2 四川大学历年试题详解 73
2.1 2010 试题 . . . 73
2.2 2009 试题 . . . 75
2.3 2010 解答 . . . 77
2.4 2009 解答 . . . 82

3 曾谨言《量子力学》卷 I 练习详解 85
3.1 量子力学的诞生 . . . 85
3.2 波函数与 Schrödinger 方程 . . . 86
3.3 一维定态问题 . . . 92
3.4 力学量用算符表达 . . . 97
3.5 力学量随时间的演化与对称性 . . . 104
3.6 中心力场 . . . 104
3.7 粒子在电磁场中的运动 . . . 106

3.8 表象变换与量子力学的矩阵形式 106
3.9 自旋 106
3.10 力学量本征值的代数解法 117
3.11 束缚定态微扰论 120
3.12 量子跃迁 120
3.13 散射理论 120
3.14 其他近似方法 120

说明

- 大部分都是自己解过的，难免有误，欢迎批评指正！
- 为了把问题说清楚，解得有些复杂，考试不必这样。
- 文档又下角的“返回”键有些阅读器不支持，一般用 Adobe 阅读器打开有效！
- 生成本文档用的操作系统是 Ubuntu，软件是 TEX 2011、TEXworks。
- 本文档是双页模式。所以有空白页，方便打印看。
- 这份文档里还有很多问题和错误，因为现在空余时间不多，故先发布给大家。欢迎交流学习！

参考资料

- 1990-2010 量子力学试题及参考答案集-中国科学院（使用版）–Schrödinger's Kitten
  主要试题来源，及参考，感谢无私奉献！
- 陈鄂生量子力学习题与解答
  是“量子力学基础教程”（陈鄂生，山东大学出版社，2007）的配套书。绝版了一段时间，现在出了新版的，收录了很多大学研究生入学考试的题目。是主要试题来源，及参考！
- 物理学大题典（卷 6 量子力学）/张永德主编.--北京：科学出版社；合肥：中国科学技术大学出版社，2005
  内容丰富！前身是，美国物理试题与解答 量子力学第六卷，这个早就绝版了，不必苦苦寻找这个了，看《题典》就行了。
- 量子力学习题精选与剖析（第三版）/钱伯初，曾谨言著.–3 版. 北京：科学出版社，2008
  简称《曾题集》
- 量子力学学习指导 /张鹏飞，阮图南，朱栋培，吴强编著.--合肥：中国科学技术大学出版社，2008.4（2009.8 重印）
  简称《指导》
- 量子力学 卷 I/曾谨言 著.—4 版. --北京：科学出版社，2007
  简称《曾书》

一些感触

- 曾书和曾题集是出题宝典，各个旮旯都要清楚，最经典的例子就是 2009 年第三题。
- 数学形式（或表述、符号）也重要
  数学上选好何种形式对问题的简化也是挺重要的。好的数学形式，能突出问题的重点，在繁杂的数学公式中，能提供好的思路。所以证明过程中，在步骤上应以突出重点与思路为主，其他的旁支的结论可以另外证明后，直接引用。例如，在位力定

理的证明过程中，$\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2]\rangle,\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},V(r)]\rangle$，这种步骤中小证明应该单独拿出。另一个比较鲜明的例子见：2006 年甲 B 第二题。就符号而言，狄拉克符号堪称经典。

致谢

- 感谢 Clerk Ma，是他在我的 LaTeX 的使用上提供了许多帮助！
- 感谢 Schrödinger's Kitten 无私发布其文档，他的文档是本文档的重要来源、参考、动力！
- 感谢 Dirac chen 提供他自己的 11 年解答！
- 感谢 Ubuntu，TeX 2011，TeX works；没有这些自由开源项目，本文档也是很难实施的。

更新日志

https://gitee.com/xuanleng/qm-exams/graph/master

第一章 中科院历年试题详解

1.1 2011

一、

（1）氢原子基态的能量为 $-13.6V$，那么第一激发态的氢原子电离能为：()

$$A.13.6eV \qquad B.3.9eV \qquad C.7.8eV \qquad D.2.5eV$$

（2）普朗克常数 h 的数值为：()

$A.1.05\times10^{-34} \qquad B.6.63\times10^{-34} \qquad C.1.05\times10^{-34}JS \qquad D.6.63\times10^{-34}JS$

（3）A、B 为厄米算符，那么下列各选项为厄米算符的是：()

$$A.\frac{1}{2}(BA-AB) \quad B.\frac{i}{2}(BA-AB) \quad C.AB+iBA \quad D.\frac{i}{2}(BA+AB)$$

（4）对于中心力场，下列各式正确的是: ()

$$A.\int_0^\infty \mu(r)r^2dr=1 \qquad B.\int_0^\infty \mu(r)4\pi r^2dr=1$$
$$C.\int_0^\infty R_l(r)r^2dr=1 \qquad D.\int_0^\infty R_l(r)4\pi r^2dr=1$$

其中：$\mu r=R_l(r)r$

（5）经典力学中有 $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}=-\vec{p}\times r$，那么在量子力学中 $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}=-\vec{p}\times r$ 是否也成立。请说明理由。

（6）在 $(\vec{S}^2,S_z)$ 的共同的本征态中，写出 S_x,S_y 的矩阵表示，并说明是否可以找到这样的一个表象，使得 S_x,S_y,S_z 在该表象中的矩阵表示均为实矩阵，说明理由。

（7）写出氢原子、一维简谐振子、一维无限深势阱的能级，并用示意图表示。

（8）两个非全同粒子处于态 $\psi(x_1,x_2)$，求出一个粒子处于 p_1',p_1'' 之间，另一个粒子处于 x_2',x_2'' 之间的几率。

二、已知 $\hat{p}_r=\frac{1}{2}(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r})$

（1）$\hat{p}_r$ 是否为厄米算符，为什么？（2）写出 $\hat{p}_r$ 的算符表示。（3）求出 $[\hat{r},\hat{p}_r]=?$

三、（$30'$）有一质量为 m 的粒子在半径为 R 的圆周上运动，现加一微扰：

$$H'=V(\varphi)=\begin{cases}V_1, & -\alpha<\varphi<0;\\ V_2, & 0<\varphi<\alpha;\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

其中 $\alpha<\pi$，求对最低两能级的一级修正。

四、（$30'$）一粒子在一维无限深方势阱 $(0<x<a)$ 中运动，时间 $t=0$ 时处在基态。此时加入一个高为 V_0，宽为 $b(b\ll a)$，中心在 $\frac{a}{2}$ 的方势垒微扰。求 $t_0(t_0>0)$ 时撤去微扰，体系处于前三个激发态的概率。

五、在 (l^2,l_z) 的共同表象中，粒子处于 Y_{20} 态，求 L_x 的可能值及相应的几率。

2011 解答

一、

（1）氢原子基态的能量为 $-13.6V$，那么第一激发态的氢原子电离能为：B

$$A.13.6eV \qquad B.3.9eV \qquad C.7.8eV \qquad D.2.5eV$$

析：氢原子能级公式的形式 $-\frac{1}{n^2}\cdot$ 常数，还是好记的，也就是说第一激发态为基态的 $\frac{1}{4}$，即选 B。氢原子完整的能级公式为：$E_n = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}$，其中 $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$。

（2）普朗克常数 h 的数值为：D

$$A.1.05\times 10^{-34} \qquad B.6.63\times 10^{-34} \qquad C.1.05\times 10^{-34}JS \qquad D.6.63\times 10^{-34}JS$$

（3）A、B 为厄米算符，那么下列各选项为厄米算符的是：B

$$A.\frac{1}{2}(BA-AB) \quad B.\frac{i}{2}(BA-AB) \quad C.AB+iBA \quad D.\frac{i}{2}(BA+AB)$$

析：各个选项分别取厄米 † 看看就知道了。$A^\dagger = \frac{1}{2}(AB-BA) \quad B^\dagger = -\frac{i}{2}(AB-BA) \quad C^\dagger = BA-iAB \quad D^\dagger = \frac{i}{2}(BA+AB)$，选 B。

（4）对于中心力场，下列各式正确的是:C

$$A. \int_0^\infty \mu(r)r^2dr = 1 \qquad B. \int_0^\infty \mu(r)4\pi r^2dr = 1$$
$$C. \int_0^\infty R_l(r)r^2dr = 1 \qquad D. \int_0^\infty R_l(r)4\pi r^2dr = 1$$

其中：$\mu r = R_l(r)r$

析:?? 有些问题，先放着。

（5）经典力学中有 $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = -\vec{p}\times r$，那么在量子力学中 $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = -\vec{p}\times r$ 是否也成立。请说明理由。

答：是。

$$\begin{aligned}\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} &= (x\vec{i}+y\vec{j}+z\vec{k})\times(p_x\vec{i}+p_y\vec{j}+p_z\vec{k}) = (yp_z-zp_y)\vec{i}+(zp_x-xp_z)\vec{j}+(xp_y-yp_x)\vec{k} \\ &= L_x\vec{i}+L_y\vec{j}+L_z\vec{k}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{p}\times\vec{r} &= (p_x\vec{i}+p_y\vec{j}+p_z\vec{k})\times(x\vec{i}+y\vec{j}+z\vec{k}) = p_xy\vec{k}-p_xz\vec{j}-p_yx\vec{k}+p_yz\vec{i}+p_zx\vec{j}-p_zy\vec{i} \\ &= (p_yz-p_zy)\vec{i}+(p_zx-p_xz)\vec{j}+(p_xy-p_yx)\vec{k} = -\vec{r}\times\vec{p}\end{aligned}$$

（6）在 $(\vec{S}^2, S_z)$ 的共同的本征态中，写出 S_x, S_y 的矩阵表示，并说明是否可以找到这样的一个表象，使得 S_x, S_y, S_z 在该表象中的矩阵表示均为实矩阵，说明理由。

答：

1、在 $(\vec{S}^2, S_z)$ 的共同本征态中，S_x, S_y 的矩阵表示为 [1]：

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$

2、因为 $\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i$，当 S_x, S_y, S_z 均为实矩阵时，$\sigma_x\sigma_y\sigma_z \neq i$ 与 $\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i$ 矛盾，

[1] 就是考察泡利矩阵

故不存在一个表象使得 S_x, S_y, S_z 在该表象中的矩阵表示均为实矩阵。[2]

（7）写出氢原子、一维简谐振子、一维无限深势阱的能级，并用示意图表示。

答：

氢原子：$E_n = -\dfrac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}(a = \dfrac{\hbar^2}{me^2})$，一维简谐振子：$E_n = (n+\dfrac{1}{2})\hbar\omega$，一维无限深势阱：$E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，图暂略！

（8）两个非全同粒子处于态 $\psi(x_1, x_2)$，求出一个粒子处于 p_1', p_1'' 之间，另一个粒子处于 x_2', x_2'' 之间的几率。

答：

[3] 在动量 p_1', p_1'' 之间的几率，应在动量表象下考量，$\psi(x_1, x_2)$ 在 p_1 动量表象下的形式为：

$$\langle p_1|\psi(x_1, x_2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x_1, x_2)e^{-\frac{ix_1p}{\hbar}}dx_1$$

波函数的平方才是几率密度，而且是归一化的波函数，一个粒子处于 p_1', p_1'' 之间，另一个粒子处于 x_2', x_2'' 之间的几率为：

$$\frac{\int_{p_1'}^{p_1''}\int_{x_2'}^{x_2''}\left|\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x_1, x_2)e^{-\frac{ix_1p}{\hbar}}dx_1\right|^2 dp_1dx_2}{\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi(x_1, x_2)\right|^2 dx_1dx_2}$$

二、已知 $\hat{p}_r = \frac{1}{2}(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r})$

（1）$\hat{p}_r$ 是否为厄米算符，为什么？（2）写出 $\hat{p}_r$ 的算符表示。（3）求出 $[\hat{r}, \hat{p}_r] =$?

答：（1）

$$\hat{p}_r^\dagger = \frac{1}{2}(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r})^\dagger = \frac{1}{2}(\vec{p}^\dagger\cdot\frac{\vec{r}^\dagger}{r} + \frac{\vec{r}^\dagger}{r}\cdot\vec{p}^\dagger) = \frac{1}{2}(\frac{\vec{r}^\dagger}{r}\cdot\vec{p}^\dagger + \vec{p}^\dagger\cdot\frac{\vec{r}^\dagger}{r})$$

又 $\vec{p}^\dagger = \vec{p}, \vec{r}^\dagger = \vec{r}$，所以 $\vec{p}_r^\dagger = \vec{p}_r$，$\hat{p}_r$ 是厄米算符。

（2）

$$\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}\psi = -i\hbar\vec{e}_r\cdot\nabla\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial r}$$

$$\begin{aligned}\vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\psi &= -i\hbar\nabla\cdot(\frac{\psi}{r}\vec{r}) = -i\hbar(\frac{\psi}{r}\nabla\cdot\vec{r} + \vec{r}\cdot\nabla\frac{\psi}{r}) = -i\hbar(\frac{3\psi}{r} + \vec{r}\cdot\frac{r\nabla\psi - \psi\nabla r}{r^2}) \\ &= -i\hbar[\frac{3\psi}{r} + \vec{r}(\frac{\nabla\psi}{r} - \frac{\vec{r}}{r^3}\psi)] = -i\hbar(\frac{3\psi}{r} + \frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{\psi}{r}) = -i\hbar(\frac{2\psi}{r} + \frac{\partial\psi}{\partial r})\end{aligned}$$

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p} + \vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r}) = -i\hbar(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r})$$

（3）

$$[r, p_r] = rp_r - p_rr$$

$$rp_r\psi = -i\hbar r(\frac{\psi}{r} + \frac{\partial\psi}{\partial r}) = -i\hbar(\psi + r\frac{\partial\psi}{\partial r}),\quad p_rr\psi = -i\hbar(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r})(r\psi) = -i\hbar(\psi + \psi + r\frac{\partial\psi}{r})$$

$$[r, p_r] = i\hbar$$

[2]实矩阵意味着什么呢？有什么物理意义？实在没想到很好的回答，只能用这个顶顶，感觉没回答在点上，请知道的告知我！

[3]非全同粒子，各顾各，之间没联系

三、(30′) 有一质量为 m 的粒子在半径为 R 的圆周上运动，现加一微扰:

$$H' = V(\varphi) = \begin{cases} V_1, & -\alpha < \varphi < 0; \\ V_2, & 0 < \varphi < \alpha; \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

其中 $\alpha < \pi$，求对最低两能级的一级修正。

解:

$$H\psi = E\psi \qquad [\frac{p^2}{2m} + V]\psi = E\psi \qquad [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]\psi = E\psi$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

未受微扰时，R,θ 为常数，有:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d^2}{d\varphi^2}\psi = E\psi$$

令 $I = mr^2, k^2 = \frac{2IE}{\hbar^2}$ 有，$\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} + k^2\psi = 0$，解得: $\psi = Ae^{ik\varphi} + Be^{-ik\varphi}$，由边界条件 $\psi(\varphi_0) = \psi(\varphi_0 + 2\pi)$ [任意角度与加上 2π 处的波函数相同，转了一圈回到原位置当然相同。]，有:

$$Ae^{ik\varphi_0} + Be^{ik\varphi_0} = Ae^{ik\varphi_0}e^{ik2\pi} + Be^{-ik\varphi)}e^{-ik2\pi} \Longrightarrow Ae^{ik\varphi_0}(1-e^{ik2\pi}) + Be^{-ik\varphi_0}(1-e^{-ik2\pi}) = 0$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} A = 0 \\ k = 0, \pm1, \pm2, \cdots \end{cases} \text{或} \begin{cases} B = 0 \\ k = 0, \pm1, \pm2, \cdots \end{cases}$$

$$\text{即:} \ \psi = Ae^{ik\varphi}, k = 0, \pm1, \pm2, \cdots \text{或} \psi = Be^{-ik\varphi}, k = 0, \pm1, \pm2, \cdots$$

当 k 取正负时，这两组解是相同的，故解表示为:

$$\psi = Ae^{ik\varphi}, k = 0, \pm1, \pm2, \cdots$$

归一化:

$$\int_0^{2\pi} \psi^*\psi\varphi = 1 \quad A^2 2\pi = 1 \quad A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \qquad \psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\varphi}, \quad E_k = \frac{k^2\hbar^2}{2I} \qquad k = 0, \pm1, \pm2, \cdots$$

$$E_0' = \langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle = \frac{V_1}{2\pi}\int_{-\alpha}^0 d\varphi + \frac{V_2}{2\pi}\int_0^\alpha d\varphi = \frac{V_1\alpha}{2\pi} + \frac{V_2\alpha}{2\pi} = \frac{\alpha(V_1+V_2)}{2\pi}$$

E_1 有简并，有:

$$H_{11} = \langle\psi_1|H'|\psi_1\rangle = \frac{V_1}{2\pi}\int_{-\alpha}^0 e^{-i\varphi}e^{i\varphi}d\varphi + \frac{V_2}{2\pi}\int_0^\alpha e^{-i\varphi}e^{i\varphi}d\varphi = \frac{\alpha(V_1+V_2)}{2\pi}$$

$$H_{1,-1} = \langle\psi_1|H'|\psi_{-1}\rangle = \frac{V_1}{2\pi}\int_{-\alpha}^0 e^{-i\varphi}e^{-i\varphi}d\varphi + \frac{V_2}{2\pi}\int_0^\alpha e^{-i\varphi}e^{-i\varphi}d\varphi$$

有些问题，先放着。???????????????

四、(30′) 一粒子在一维无限深方势阱 $(0 < x < a)$ 中运动，时间 $t = 0$ 时处在基态。此时加入一个高为 V_0，宽为 $b(b \ll a)$，中心在 $\frac{a}{2}$ 的方势垒微扰。求 $t_0(t_0 > 0)$ 时撤去微扰，体系处于前三个激发态的概率。

解: 无微扰时，波函数、能级为: $\psi_n^0 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$，$E_n^0 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$

t_0 撤去微扰时，体系处于前三个激发态的概率为：跃迁到第一激发态 ψ_2 的概率、跃迁到第二激发态 ψ_3 的概率、跃迁到第三激发态 ψ_4 的概率之和，即：

$$|a_2(t_0)|^2 + |a_3(t_0)|^2 + |a_4(t_0)|^2$$

$$a_m = \frac{1}{\hbar}\int_0^{t_0} H'_{m1}e^{i\omega_{m1}t}dt, \quad a_2 = \frac{1}{\hbar}\int_0^{t_0} H'_{21}e^{i\omega_{21}t}dt, \quad a_3 = \frac{1}{\hbar}\int_0^{t_0} H'_{31}e^{i\omega_{31}t}dt, \quad a_4 = \frac{1}{\hbar}\int_0^{t_0} H'_{41}e^{i\omega_{41}t}dt$$

其中 $\omega_{m1} = \frac{E_m - E_1}{\hbar}, E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, E_2 = \frac{4\pi^2}{2\mu a^2}, E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, E_4 = \frac{16\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, \omega_{21} = \frac{3\pi^2\hbar}{2\mu a^2}, \omega_{31} = \frac{4\pi^2\hbar}{\mu a^2}, \omega_{41} = \frac{15\pi^2\hbar}{2\mu a^2}$。

$$H'_{m1} = \langle\psi_m|H'|\psi_1\rangle = \frac{2V_0}{a}\int_{\frac{a-b}{a}}^{\frac{a+b}{2}} \sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{\pi x}{a}dx = \frac{V_0}{a}\int_{\frac{a-b}{a}}^{\frac{a+b}{2}}\left[\cos(m-1)\frac{\pi}{a}x - \cos(m+1)\frac{\pi}{a}x\right]dx$$

利了用积化和差公式：$\sin\alpha\sin\beta = -\frac{1}{2}(\cos(\alpha+\beta) - \cos(\alpha-\beta))$。又由于 $b \ll a$，对积分近似，一维积分就是求面积，将这个积分近似为微小矩形的面积，宽为：$\frac{a+b}{2} - \frac{a-b}{2} = b$，高为 $\cos(m-1)\frac{\pi}{a}a - \cos(m+1)\frac{\pi}{a}a = \cos(\frac{m\pi}{2}+\frac{\pi}{2}) - \cos(\frac{m\pi}{2}-\frac{\pi}{2})$，有[4]：

$$H'_{m1} = \frac{V_0 b}{a}\left[\cos(\frac{m\pi}{2}+\frac{\pi}{2}) - \cos(\frac{m\pi}{2}-\frac{\pi}{2})\right]$$

利用三角公式：$\cos(\alpha\pm\beta) = \cos\alpha\cos\beta \mp \sin\alpha\sin\beta$，有：

$$\cos(\frac{m\pi}{2}+\frac{\pi}{2}) = \cos\frac{m\pi}{2}\cos\frac{\pi}{2} - \sin\frac{m\pi}{2}\sin\frac{\pi}{2} = -\sin\frac{m\pi}{2}$$
$$\cos(\frac{m\pi}{2}-\frac{\pi}{2}) = \cos\frac{m\pi}{2}\cos\frac{\pi}{2} + \sin\frac{m\pi}{2}\sin\frac{\pi}{2} = \sin\frac{m\pi}{2}$$

$$H'_{m1} = -\frac{2V_0 b\sin\frac{m\pi}{2}}{a}$$

$$a_m(t_0) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^{t_0}(-\frac{2V_0 b\sin\frac{m\pi}{2}}{a})e^{i\omega_{m1}t}dt = -\frac{2V_0 b\sin\frac{m\pi}{2}}{i\hbar a}\int_0^{t_0} e^{i\omega_{m1}t}dt = \frac{2V_0 b\sin\frac{m\pi}{2}}{a\hbar\omega_{m1}}e^{i\omega_{m1}t_0}$$

$$a_2(t_0) = a_4(t_0) = 0$$
$$a_3(t_0) = \frac{2V_0 b}{a\hbar}\cdot\frac{\mu a^2}{4\pi^2\hbar}e^{i\omega_{m1}t_0}$$

于是 t_0 撤去微扰，体系处于前三个激发态的概率为：

$$P = |a_3(t_0)|^2 = (\frac{abv_0\mu}{2\pi^2\hbar^2})^2 = \frac{a^2b^2V_0^2\mu^2}{4\pi^4\hbar^4}$$

五、在 (l^2, l_z) 的共同表象中，粒子处于 Y_{20} 态，求 L_x 的可能值及相应的几率。

方法一：对于 Y_{lm}, Y_{20}，利用 $m = 0, l_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}, l_z Y_{20} = 0$，这个特点。

设 (l^2, l_x) 的共同本证态为 $|lm\rangle_x$，将 Y_{20} 或表示为 $|20\rangle_z$ 用 (l^2, l_x) 的共同本征态表示[5]：

$$|20\rangle_z = \sum_{m=-2}^{2} C_m|2m\rangle_x$$

对于升降算符求 (l^2, l_z) 共同本征态过程，可以看出，对 $(l^2, l_x), (l^2, l_y)$ 而言也是相同的，

[4]要对“微小”两个字敏感，对于所谓的“微小”情况，就要想到相关的近似，如积分可以直接看成矩形求面积，还有泰勒展开之类。

[5]中心思路：波函数可由一组正交归一的本征函数系表示，即本题中，用 l_x 的本征函数表示 Y_{20}，各本征态前的系数的平方，表示测得各本征态对应本征值的概率。

只不过遵从轮换性质。在 (l^2,l_z) 表象下：$l_+=l_x+il_y,l_-=l_x-il_y$；在 (l^2,l_x) 表象下：$l_+=l_y+il_z,l_-=l_y-il_z,l_z=\frac{1}{2i}(l_+-l_-)$。利用 $l_\pm|lm\rangle=\hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}|jm\pm 1\rangle$，有：

$$\begin{aligned}l_\pm|2m\rangle_x&=\hbar\sqrt{(2\pm m)(3\pm m)}|2,m\pm 1\rangle_x=\hbar\sqrt{6\pm 2m\mp 3m+m^2}|2,m\pm 1\rangle_x\\&=\hbar\sqrt{6-m(m\pm 1)}|2,m\pm 1\rangle_x\end{aligned}$$

无论处于何种表象中，本征态的本征值不变。$|20\rangle$ 是 (l^2,l_z) 表象 l_z 中的本征态，故 $l_z|20\rangle=0$。由 $l_z=\frac{1}{2i}(l_+-l_-)$，有：

$$l_z|20\rangle=\frac{1}{2i}(l_+-l_-)\sum_{m=-2}^{2}C_m|2m\rangle_x$$

且 $l_-|2,-2\rangle_x=0,l_+|2,2\rangle=0$，即：

$$\begin{aligned}0=&\,l_+C_{-2}|2,-2\rangle_x+l_+C_{-1}|2,-1\rangle_x+l_+C_0|2,0\rangle_x+l_+C_1|2,1\rangle_x+l_+C_2|2,2\rangle_x-l_-C_{-2}|2,-2\rangle_x\\&-l_-C_{-1}|2,-1\rangle_x-l_-C_0|2,0\rangle_x-l_-C_1|2,1\rangle_x-l_-C_2|2,2\rangle_x\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}0=&\,2\hbar C_{-2}|2,-2\rangle_x+\sqrt{6}\hbar C_{-1}|2,-1\rangle_x+\sqrt{6}\hbar C_0|2,0\rangle_x+2\hbar C_1|2,1\rangle_x-2\hbar C_{-1}|2,-1\rangle_x\\&-\sqrt{6}\hbar C_0|2,0\rangle_x-\sqrt{6}\hbar C_1|2,1\rangle_x-2\hbar C_2|2,2\rangle_x\end{aligned}$$

$$0=(2C_{-2}-\sqrt{6}C_0)|2,-1\rangle_x+(\sqrt{6}C_{-1}-\sqrt{6}C_1)|2,0\rangle_x+(\sqrt{6}C_0-2C_2)|2,1\rangle_x+2C_1|2,2\rangle_x-2C_{-1}|2,-2\rangle_x$$

系数需为 0 才满足等式及归一化条件 $\sum_{m=-2}^{2}|C_m|^2=1$，有：

$$\begin{cases}C_1=C_{-1}=0\\2C_{-2}-\sqrt{6}C_0=0\\\sqrt{6}C_0-2C_2=0\\|C_0|^2+|C_2|^2+|C_{-2}|^2=1\end{cases}\implies|C_0|^2=\frac{1}{4},|C_{-2}|^2=|C_2|^2=\frac{3}{8}$$

即：l_x 的可能测值为：$2\hbar,-2\hbar,0$，概率分别为：$\frac{3}{8},\frac{3}{8},\frac{1}{4}$。

方法二：见曾书 p333~p337

$\langle jm+1|j_x|jm\rangle=\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$，$l=2$ 时，

$$l_x=\begin{vmatrix}0&\hbar&0&0&0\\\hbar&0&\frac{\sqrt{6}}{2}\hbar&0&0\\0&\frac{\sqrt{6}}{2}\hbar&0&\frac{\sqrt{6}}{2}\hbar&0\\0&0&\frac{\sqrt{6}}{2}\hbar&0&\hbar\\0&0&0&\hbar&0\end{vmatrix}$$

由此可求得 l_x 的各本征态，将 Y_{20} 用求得的本征态展开，

$$Y_{20}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$$

方法三：见曾题集 p214，6.60

1.2 2010

一、

（1）设 $\hat{A},\hat{B}$ 与 Pauli 算符对易，证明：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$

（2）试将 $(\hat{I}+\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y)^{\frac{1}{2}}$ 表示成 $\hat{I},\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$ 的线性叠加，$\hat{I}$ 为单位算符。

二、设一维谐振子的初态为 $\psi(x,0)=\cos\frac{\theta}{2}\varphi_0(x)+\sin\frac{\theta}{2}\varphi_1(x)$，即基态与第一激发态的叠加，其中 θ 为实参数：

（1）求 t 时刻的波函数 $\psi(x,t)$；

（2）求 t 时刻粒子处于基态及第一激发态的概率；

（3）求 t 时刻粒子的势能算符 $\hat{V}=\frac{m\omega^2}{2}x^2$ 的平均值；

（4）求演化成 $-\psi(x,t)$ 所需的最短时间 t_{min}。

三、设基态氢原子处于弱电场中，微扰哈密顿量为：

$$\hat{H}=\begin{cases}0, & t\leqslant 0\\ \lambda z e^{-\frac{t}{T}}, & t>0\end{cases}\text{其中}\lambda,T\text{为常数}$$

（1）求很长时间后 $(t\gg T)$ 电子跃迁到激发态的概率，已知基态中 a 为玻尔半径；已知基态：

$$\psi_{100}(\vec{r})=R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{2}{a^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a}}\qquad \psi_{210}(\vec{r})=R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\frac{1}{(2a)^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{\sqrt{3}a}e^{-\frac{r}{2a}}$$

（2）基态电子跃迁到下列哪个激发态的概率等于零？简述理由。

$$(a)\psi_{200}\qquad (b)\psi_{211}\quad (c)\psi_{21,-1}\qquad (d)\psi_{210}$$

四、两个质量为 m 的粒子处于一个边长为 $a>b>c$ 的不可穿透的长盒子中，求下列条件下，该体系能量最低态的波函数（只写出空间部分）及对应能量。

（1）非全同粒子　　（2）零自旋全同粒子　　（3）自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子

五、粒子在一维无限深势阱中运动。设该体系受到 $\hat{H}=\lambda\delta(x-a)$ 的微扰作用：

（1）利用微扰理论，求第 n 能级精确到二级的近似表达式；

（2）指出所得结果的适用条件。

2010 解答

一、

（1）设 $\hat{A},\hat{B}$ 与 Pauli 算符对易，证明：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$

（2）试将 $(\hat{I}+\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y)^{\frac{1}{2}}$ 表示成 $\hat{I},\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma_z}$ 的线性叠加，$\hat{I}$ 为单位算符。

证明：

（1）$\vec{\sigma}=\sigma_x\vec{i}+\sigma_y\vec{j}+\sigma_z\vec{k}\quad \vec{\sigma}\cdot\vec{A}=\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z\quad \vec{\sigma}\cdot\vec{B}=\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zA_z$

$$
\begin{aligned}
(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})&=(\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z)(\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z)\\
&=\sigma_xA_x\sigma_xB_x+\sigma_xA_x\sigma_yB_y+\sigma_xA_x\sigma_zB_z+\sigma_yA_y\sigma_xB_x\\
&\quad+\sigma_yA_y\sigma_yB_y+\sigma_yA_y\sigma_zB_z+\sigma_zA_z\sigma_xB_x+\sigma_zA_z\sigma_yB_y+\sigma_zA_z\sigma_zB_z
\end{aligned}
$$

由 $\hat{A},\hat{B}$ 与 Pauli 算符对易和 Pauli 算符关系 $\sigma_\alpha^2=1,\sigma_\alpha\sigma_\beta=i\sigma_\gamma$，有：

$$
\begin{aligned}
(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})&=A_xB_x+i\sigma_zA_xB_y-i\sigma_yA_xB_z-i\sigma_zA_yB_x+A_yB_y+i\sigma_xA_yB_z\\
&\quad+i\sigma_yA_zB_x-i\sigma_yA_zB_y+A_zB_z\\
&=A_xB_x+A_yB_y+A_zB_y+i\sigma_x(A_yB_z-A_zB_y)+i\sigma_y(A_zB_x-A_xB_z)\\
&\quad+i\sigma_z(A_xB_y-A_yB_x)\\
&=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})
\end{aligned}
$$

（2）$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z,I$ 构成 2 阶复矩阵的完备基。说明了，任何一个 2 阶复矩阵（当然包括实矩阵）都可以由这四个矩阵表示出来[6]，有：

$$\sqrt{I+\sigma_x+i\sigma_y}=C_0I+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z$$

两边平方：

$$
\begin{aligned}
I+\sigma_x+i\sigma_y&=(C_0I+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma)(C_0I+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma)\\
&=C_0^2+C_0C_1\sigma_x+C_0C_2\sigma_y+C_0C_3\sigma_z+C_1^2+C_0C_1\sigma_x+C_1C_2\sigma_x\sigma_y+C_1C_3\sigma_x\sigma_z\\
&\quad+C_2^2+C_0C_2\sigma_y+C_1C_2\sigma_y\sigma_x+C_2C_3\sigma_y\sigma_z+C_3^2+C_0C_3\sigma_z+C_1C_3\sigma_z\sigma_x+C_2C_3\sigma_z\sigma_y
\end{aligned}
$$

由 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 间反对易关系，$\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x=0\cdots$，有：

$$I+\sigma_x+i\sigma_y=C_0^2+C_1^2+C_2^2+C_3^2+2C_0C_1\sigma_x+2C_0C_2\sigma_y+2C_0C_3\sigma_z$$

$$\Longrightarrow\begin{cases}C_0^2+C_1^2+C_2^2+C_3^2=1\\2C_0C_1=1\\2C_0C_2=i\\C_0C_3=0\end{cases}\qquad\Longrightarrow\begin{cases}C_0=1\\C_1=\frac{1}{2}\\C_2=\frac{i}{2}\\C_3=0\end{cases}$$

即：

$$\sqrt{I+\sigma_x+i\sigma_y}=1+\frac{1}{2}(\sigma_x+i\sigma_y)$$

二、设一维谐振子的初态为 $\psi(x,0)=\cos\frac{\theta}{2}\varphi_0(x)+\sin\frac{\theta}{2}\varphi_1(x)$，即基态与第一激发

[6]证明见曾题集 6.4

态的叠加，其中 θ 为实参数：

(1) 求 t 时刻的波函数 $\psi(x,t)$；

(2) 求 t 时刻粒子处于基态及第一激发态的概率；

(3) 求 t 时刻粒子的势能算符 $\hat{V}=\frac{m\omega^2}{2}x^2$ 的平均值；

(4) 求演化成 $-\psi(x,t)$ 所需的最短时间 t_{min}。

解：

(1)

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega, E_0=\frac{\hbar\omega}{2}, E_1=\frac{3\hbar\omega}{2}, \qquad \psi(x,t)=\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle e^{-\frac{i\omega t}{2}}+\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle e^{-\frac{3i\omega t}{2}}$$

(2)

t 时刻处于基态的概率：[7]

$$P_0=\left|\langle 0|\psi\rangle\right|^2=\left|\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\omega\theta}{2}}\right|^2=\cos^2\frac{\theta}{2}$$

t 时刻处于第一激发态的概率：

$$P_0=\left|\langle 0|\psi\rangle\right|^2=\left|\sin\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\omega\theta}{2}}\right|^2=\sin^2\frac{\theta}{2}$$

(3)

$$\langle V\rangle=\frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle$$

$$\langle x^2\rangle=\langle\psi|x^2|\psi\rangle=\cos^2\frac{\theta}{2}\langle 0|x^2|0\rangle+\sin^2\frac{\theta}{2}\langle 1|x^2|1\rangle+\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\omega t}\langle 0|x^2|1\rangle+\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\omega t}\langle 1|x^2|0\rangle$$

$$x=\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m\omega}}(a_++a_-) \qquad x^2=\frac{\hbar}{2m\omega}(a_+^2+a_-^2+a_+a_-+a_-a_+)$$

$$\langle 0|a_+^2|0\rangle=0, \langle 0|a_-^2|0\rangle=0, \langle 0|a_+a_-|0\rangle=0, \langle 0|a_-a_+|0\rangle=\langle 0|a_-|1\rangle=1$$

$$\langle 1|a_+^2|1\rangle=0, \langle 1|a_-^2|1\rangle=0, \langle 1|a_+a_-|1\rangle=1, \langle 1|a_-a_+|1\rangle=\sqrt{2}\langle 1|a_-|2\rangle=\sqrt{2}\sqrt{2}\langle 2|2\rangle=2$$

$$\langle 0|a_+^2|1\rangle=0, \langle 0|a_-^2|1\rangle=0, \langle 0|a_+a_-|1\rangle=0, \langle 0|a_-a_+|1\rangle=0$$

$$\langle 1|x^2|0\rangle^\dagger=\langle 0|x^2|1\rangle=0$$

即：

$$\langle x^2\rangle=\cos^2\frac{\theta}{2}\cdot\frac{\hbar}{2m\omega}+\sin^2\frac{\theta}{2}\cdot\frac{3\hbar}{2m\omega} \qquad \langle V\rangle=\frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle=\frac{\hbar\omega}{4}\cos^2\frac{\theta}{2}+\frac{3\hbar\omega}{4}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

(4) $\psi(x,t)=-\psi(x,t)$，有：

$$\begin{cases} e^{-\frac{i\omega t}{2}}=-1 \\ e^{-\frac{3i\omega t}{2}}=-1 \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} \cos\frac{\omega t}{2}-i\sin\frac{\omega t}{2}=-1 \\ \cos\frac{3\omega t}{2}-i\sin\frac{3\omega t}{2}=-1 \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} \frac{\omega t}{2}=n_1\pi \\ \frac{3\omega t}{2}=n_2\pi \end{cases} \quad n_1,n_2\text{为奇数}$$

$t=\frac{2n_1\pi}{\omega}=\frac{2n_2\pi}{3\omega}$，当 $n_1=1,n_2=3$ 时，t 为最小，$t=\frac{2\pi}{\omega}$，即：演化成 $-\psi(x,t)$ 所需的最短时间 $t_{min}=\frac{2\pi}{\omega}$。

[7]这里的绝对值应理解为取模

三、设基态氢原子处于弱电场中，微扰哈密顿量为：

$$\hat{H}=\begin{cases}0, & t\leqslant 0\\ \lambda z e^{-\frac{t}{T}}, & t>0\end{cases}\text{其中}\lambda,T\text{为常数}$$

（1）求很长时间后 $(t\gg T)$ 电子跃迁到激发态的概率，已知基态中 a 为玻尔半径；已知基态：

$$\psi_{100}(\vec{r})=R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{2}{a^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a}}\qquad \psi_{210}(\vec{r})=R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\frac{1}{(2a)^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{\sqrt{3}a}e^{-\frac{r}{2a}}$$

（2）基态电子跃迁到下列哪个激发态的概率等于零？简述理由。

$$(a)\psi_{200}\qquad (b)\psi_{211}\quad (c)\psi_{21,-1}\qquad (d)\psi_{210}$$

解：

（1）球坐标下：$\hat{H}'=\lambda z e^{-\frac{t}{T}}=\lambda e^{-\frac{t}{T}}r\cos\theta, t>0$

$$a_{mn}=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mn}e^{i\omega_{mn}t'}dt'$$

$$H'_{21}=\langle\psi_{200}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle+\langle\psi_{210}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle+\langle\psi_{211}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle+\langle\psi_{21,-1}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle$$

根据球谐函数的对称性：[8]

$$\langle\psi_{200}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle=0,\langle\psi_{211}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle=0,\langle\psi_{21,-1}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle=0$$

具体分析下：

$$\psi_{200}=R_{20}Y_{00}=\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$\psi_{210}=R_{21}Y_{10}=\frac{2}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}}\cos\theta$$

$$\psi_{211}=R_{21}Y_{11}=\frac{1}{8\sqrt{\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{21,-1}=R_{21}Y_{1,-1}=\frac{1}{8\sqrt{\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a}e^{\frac{r}{2a}}\sin\theta e^{-i\varphi}$$

$\langle\psi_{200}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle$，$\theta$ 方向：

$$\int_0^{\pi}\cos\theta\sin\theta d\theta=\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\sin 2\theta d\theta=-\frac{1}{4}\cos 2\theta\Big|_0^{\pi}=-\frac{1}{4}(1-1)=0$$

$\langle\psi_{211}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle$，$\theta$ 方向：

$$\int_0^{\pi}\sin\theta\cos\theta\sin\theta d\theta=\int_0^{\pi}\sin^2\theta d\sin\theta=\frac{1}{3}\sin^3\theta\Big|_0^{\pi}=0$$

$\langle\psi_{21,-1}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle$，$\theta$ 方向：同上。

所以基态电子跃迁到激发态 $(a)\psi_{200},(b)\psi_{211},(c)\psi_{21,-1}$ 的概率均等于零。

[8]题目只给了这两个波函数，显然其他的为 0，不然就不会问第二问了，就出题而言也不合理了。就选择定则而言，除非 $\Delta l=\pm1$、$\Delta m=\pm1\ or\ 0$，不会发生跃迁，所以本题中，只能跃迁的激发态为第一激发态，但四个第一激发态均符合。这里根据球谐函数的对称性，可是我都不清楚，知道的朋友请告诉我怎么回事。对于这里的问题我会用最原始的问题分析，但肯定属于考试答题之外了。

(2)

$$H'_{21} = \langle \psi_{210}|\hat{H}'|\psi_{100}\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \frac{1}{(2a)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}a} \cdot \lambda e^{-\frac{t}{T}} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \frac{2}{a^{\frac{3}{2}}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \cos\theta r e^{-\frac{r}{2a}} r \cos\theta e^{-\frac{r}{a}} \sin\theta r^2 d\varphi d\theta dr$$
$$= \frac{\lambda}{4\sqrt{2}\pi a^4} e^{-\frac{t}{T}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{3r}{2a}} dr$$
$$= \frac{\lambda}{4\sqrt{2}\pi a^4} e^{-\frac{t}{T}} \cdot 2\pi \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{256a^5}{81} = \frac{32\sqrt{2}\lambda a}{243} e^{-\frac{t}{T}}$$

其中:

$$\int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta d\theta = -\int_0^{\pi} \cos^2\theta d\cos\theta = -\frac{1}{3}\cos^3\theta\Big|_0^{\pi} = \frac{2}{3}$$
$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \qquad \int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{3}{2a}r} dr = \frac{4!}{(\frac{3}{2a})^5} = \frac{256a^5}{81}$$
$$a_{21} = \frac{1}{i\hbar} \frac{32\sqrt{2}\lambda a}{243} \int_0^t e^{-\frac{t'}{T}} e^{i\omega_{21}t'} dt' = \frac{1}{i\hbar} \frac{32\sqrt{2}\lambda a}{243} \frac{T}{i\omega_{21}T - 1} (e^{i\omega_{21}T} e^{-\frac{t}{T}} - 1)$$

其中:

$$\int_0^t e^{-\frac{t'}{T}} e^{i\omega_{21}t'} dt' = \int_0^t e^{\frac{i\omega_{21}T-1}{T}t'} = \frac{T}{i\omega_{21}T - 1} e^{\frac{i\omega_{21}T-1}{T}t'}\Big|_0^t = \frac{T}{i\omega_{21}T - 1}(e^{i\omega_{21}T} e^{-\frac{t}{T}} - 1)$$

当 $t \gg T$ 时，$e^{-\frac{t}{T}} \approx 0$，即:

$$a_{21} = \frac{1}{i\hbar} \frac{32\sqrt{2}\lambda a}{243} \frac{T}{1 - i\omega_{21}T}$$

跃迁概率为:

$$W_{1\to2} = |a_{21}|^2 = \frac{2 * 32^2\lambda^2 a^2}{243^2\hbar^2} \frac{T^2}{1 + \omega_{21}^2} T^2 \qquad \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \qquad E_n = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}$$

四、[9]两个质量为 m 的粒子处于一个边长为 $a > b > c$ 的不可穿透的长盒子中，求下列条件下，该体系能量最低态的波函数（只写出空间部分）及对应能量。

（1）非全同粒子　　（2）零自旋全同粒子　　（3）自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子

解：注意：只写出空间部分，否则还有自旋部分

一个粒子处于长盒子中的波函数及相应能量为 [10]:

$$\phi(x, y, z) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin\frac{n_1\pi x}{a} \sin\frac{n_2\pi x}{b} \sin\frac{n_3\pi z}{c} \qquad e_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2})$$

（1）非全同粒子基态:

$$\psi_1(r_1, r_2) = \phi_1(r_1)\phi_1(r_2) = \frac{8}{abc} \sin\frac{\pi x_1}{a} \sin\frac{\pi y_1}{b} \sin\frac{\pi z_1}{c} \sin\frac{\pi x_2}{a} \sin\frac{\pi y_2}{b} \sin\frac{\pi z_2}{c}$$
$$E_1 = e_1 + e_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{m}(\frac{2}{a^2} + \frac{2}{b^2} + \frac{2}{c^2})$$

（2）零自旋全同粒子基态，零自旋粒子可以处于同一态，与非全同粒子基态相同:

$$\psi_1(r_1, r_2) = \frac{1}{2}[\phi_1(r_1)\phi_1(r_2) + \phi_1(r_2)\phi_1(r_1)] = \phi_1(r_1)\phi_1(r_2)$$

（3）自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子基态，由于 $a > b > c$，无简并，第二低能态为 $n_1 = 2, n_2 =$

[9]同类型的题见：2007A 第四题

[10]盒子中一个粒子的波函数就是各个一维势阱波函数的叠加

$1, n_3 = 1$，有：

$$\phi_2(r) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin\frac{2\pi x}{a} \sin\frac{\pi y}{b} \sin\frac{\pi z}{c}$$

$$\psi_1(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(r_1)\phi_2(r_2) - \phi_2(r_1)\phi_1(r_2)]$$

$$E_1 = e_1 + e_2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{m}(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}) + \frac{\pi^2\hbar^2}{m}(\frac{4}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}) = \frac{\pi^2\hbar^2}{m}(\frac{6}{a^2} + \frac{2}{b^2} + \frac{2}{c^2})$$

讨论：当盒子是方盒子即 $a = b = c$ 时，自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子基态是什么情况？这时就有简并，(n_1, n_2, n_3) 有 $(1, 1, 2), (1, 2, 1), (2, 1, 1)$，具体如下：

$$\psi_1(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(r_1)\phi_2(r_2) - \phi_2(r_1)\phi_1(r_2)]$$

ϕ_2 存在简并，三重：

$$\phi_2(r) = \begin{cases} \phi_{112}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{\pi y}{a} \sin\frac{2\pi z}{a} \\ \phi_{121}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{2\pi y}{a} \sin\frac{\pi z}{a} \\ \phi_{211}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin\frac{2\pi x}{a} \sin\frac{\pi y}{a} \sin\frac{\pi z}{a} \end{cases} \qquad e_2 = \frac{6\pi^2\hbar^2}{ma^2} = \begin{cases} \frac{\pi^2\hbar^2}{m}(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{a^2} + \frac{4}{a^2}) \\ \frac{\pi^2\hbar^2}{m}(\frac{1}{a^2} + \frac{4}{a^2} + \frac{1}{a^2}) \\ \frac{\pi^2\hbar^2}{m}(\frac{4}{a^2} + \frac{1}{a^2} + \frac{1}{a^2}) \end{cases}$$

$$\psi_1(r_1, r_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(r)_1\phi_{112}(r_2) - \phi_{112}(r_1)\phi_1(r_2)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(r)_1\phi_{121}(r_2) - \phi_{121}(r_1)\phi_1(r_2)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(r)_1\phi_{211}(r_2) - \phi_{211}(r_1)\phi_1(r_2)] \end{cases} \qquad E_1 = e_1 + e_2 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

五、[11]粒子在一维无限深势阱中运动。设该体系受到 $\hat{H} = \lambda\delta(x - a)$ 的微扰作用：

（1）利用微扰理论，求第 n 能级精确到二级的近似表达式；

（2）指出所得结果的适用条件。

解：不知是题目没写清楚，还是怎么的。这个无限深势阱是怎样的也没说清楚。应该是这样：缺图。

(1)

$$\phi_n^0 = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\frac{n\pi x}{2a} \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle = \int_0^{2a} \lambda\delta(x - a)\frac{1}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{2a}dx = \frac{\lambda}{a}\sin^2\frac{n\pi}{2} = \begin{cases} 0, & n\text{为偶数} \\ \frac{\lambda}{a}, & n\text{为奇数} \end{cases}$$

$$E_n^2 = \sum_{\substack{k\neq n\\k=1}}^{n} \frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^0 - E_k^0} = \begin{cases} n\text{为偶数时：} & 0 \\ n\text{为奇数时：} & \frac{8m\lambda^2}{\pi^2\hbar^2}[\frac{1}{n^2-1} + \frac{1}{n^2-n^3} + \frac{1}{n^2-5^2} + \cdots] \end{cases}$$

[11]同类型的题见：2001 理论型第一题

其中:

$$H'_{kn}=\langle\phi_k^0|H'|\phi_n^0\rangle=\frac{\lambda}{a}\int_0^{2a}\delta(x-a)\sin\frac{k\pi x}{2a}\sin\frac{n\pi x}{2a}dx$$

$$=\frac{\lambda}{a}\sin\frac{k\pi}{2}\sin\frac{n\pi}{2}=\begin{cases}n\text{为偶数},k\neq n, & 0\\ n\text{为奇数},k\text{为奇数},k\neq n, & \frac{\lambda}{a}\\ n\text{为奇数},k\text{为偶数},k\neq n, & 0\end{cases}$$

(2)适用条件讨论:

$$\left|\frac{H'_{kn}}{E_n^0-E_k^0}\right|\ll 1\text{即:}\quad \left|\frac{\frac{\lambda}{a}}{E_n^0-E_k^0}\right|\ll 1,\text{要求 }\lambda\text{ 很小。}$$

1.3 2009

一、(30′) 已知在 (l^2, l_z) 的表象中，

$$l_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

求：

(1) l_x 的本征值和相应的本征函数；

(2) l_y 的矩阵表示。

二、已知一粒子处于一维谐振子势场中运动，势能为 $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 (k > 0)$，求：

(1) 粒子的基态本征函数 $\psi_0(x)$；

(2) 若势场突然变为 $V'(x) = kx^2$，则粒子仍然处于基态的概率。

提示：用湮灭算符 $\hat{a}_- = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}), \sqrt{2} = 1.414, \sqrt[4]{2} = 1.189$。

三、(30′) 若已知 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$，其中 $i, j = 1, 2$。设 $J_x = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1), J_y = \frac{i}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1), J_z = \frac{1}{2}(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 - \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)$，求：

(1) J_x, J_y, J_z 的关系式；

(2) $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$，试用 $\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger$ 表示 J^2。

四、(30′) 已知两种中微子的本征态为 $|V_1\rangle$ 和 $|V_2\rangle$，能量本征值为 $E = pc + \frac{m_i^2c^4}{pc}$ (其中 $i = 1, 2$)，电子中微子的本征态为 $|V_e\rangle = \cos\theta|V_1\rangle + \sin\theta|V_2\rangle$，$\mu$ 子中微子的本征态为 $|V_\mu\rangle = -\sin\theta|V_1\rangle + \cos\theta|V_2\rangle$，其中 θ 是混合角。某体系中在 $t = 0$ 时，电子中微子处于态 $|V_e\rangle$，求：

(1) t 时刻中微子所处的状态；

(2) t 时刻电子中微子处于基态的概率。

五、(30′) 设在氚核中，质子和中子的作用表示成 $V(r) = -V_0e^{-\frac{r}{a}}$，试用 $\psi = e^{-\frac{\lambda r}{2a}}$ (λ 为变数) 为试探波函数，以变分法求：

(1) 基态能量的近似值；

(2) 若 $V_0 = 32.7Mev, a = 2.16fm$，试确定 λ 的值。

2009 解答

一、（$30'$）已知在 (l^2, l_z) 的表象中，

$$l_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

求：（1）l_x 的本征值和相应的本征函数；（2）l_y 的矩阵表示。

解：

二、已知一粒子处于一维谐振子势场中运动，势能为 $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 (k > 0)$，求：（1）粒子的基态本征函数 $\psi_0(x)$；（2）若势场突然变为 $V'(x) = kx^2$，则粒子仍然处于基态的概率。提示：用湮灭算符 $\hat{a}_- = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}), \sqrt{2} = 1.414, \sqrt[4]{2} = 1.189$。

解：（1）

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0 \qquad \hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}[m\omega x + i(-i\hbar\frac{d}{dx})]\psi_0 = 0 \qquad \frac{d\psi_0}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0 = 0 \qquad \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0 \qquad \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}xdx$$

$$\ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + C \qquad \psi_0 = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

归一化：$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}}x^2 dx = |A|^2 \sqrt{\pi\hbar m\omega} \quad A = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$其中利用：$\int_0^\infty e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$

$$\psi_0 = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

（2）势场突然变为 $V'(x) = kx^2 = \frac{1}{2}(2k)x^2 = \frac{1}{2}m(\sqrt{2}\omega)^2x^2$，解的形式不改变，此时基态波函数为：

$$\psi_0'(x) = (\frac{m\sqrt{2}\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\sqrt{2}m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\langle\psi_0'(x)|\psi_0(x)\rangle = (\sqrt{2})^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\frac{\sqrt{2}m\omega}{2\hbar} + \frac{m\omega}{2\hbar})x^2}dx = (\sqrt{2})^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \cdot 2\int_0^\infty e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(\sqrt{2}+1)x^2}dx$$

$$= (\sqrt{2})^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}\frac{1}{\sqrt{2}+1}} = (\sqrt{2})^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{2}{\sqrt{2}+1}}$$

仍然处于基态的概率为：$|\langle\psi_0'(x)|\psi_0(x)\rangle|^2 = 2\sqrt[4]{2}(\sqrt{2} - 1)$。

说明：像这种突变。波函数是未来的及改变，但势场变了，本征函数系是发生了改变。这里的特殊之处在于，改变后的波函数是未改变前的基态本征函数，而且又求的是仍然处于基态的概率，容易让人搞混，当然也可以求处于激发态的概率。这里的关键是要分清哪个是波函数，哪个是本征函数。波函数可以由一组完备的本征函数系表示，如 $\psi = \sum a_n\phi_n$。ϕ_n 前的系数的平方就是测得该本征态 ϕ_n 的概率（前提已归一化），也就是处于该本征态的概率。

三、[12]（$30'$）若已知 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$，其中 $i, j = 1, 2$。设 $J_x =$

[12]抽自曾书 10.3 节，没想到简便方法，有的话请告诉我！

$\frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1), J_y=\frac{i}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1), J_z=\frac{1}{2}(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)$，求：
（1）J_x, J_y, J_z 的关系式；（2）$J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$，试用 $\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger$ 表示 J^2。

解：（1）

$$\begin{aligned}
[J_x, J_y] &= [\frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1), \frac{i}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)] = \frac{i}{4}[\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2, (\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)] + \frac{i}{4}[\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1, (\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)] \\
&= \frac{i}{4}[\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2, \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2] - \frac{i}{4}[\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1] + \frac{i}{4}[\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2] - \frac{i}{4}[\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1] \\
&= -\frac{i}{4}\hat{a}_1^\dagger[\hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1] - \frac{i}{4}[\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1]\hat{a}_2 + \frac{i}{4}\hat{a}_2^\dagger[\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2] + \frac{i}{4}[\hat{a}_2^\dagger, \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2]\hat{a}_1 \\
&= -\frac{i}{4}\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 + \frac{i}{4}\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 + \frac{i}{4}\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 - \frac{i}{4}\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 = \frac{i}{2}\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 - \frac{i}{2}\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 = i\frac{1}{2}(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1) = iJ_z
\end{aligned}$$

（2）

$$J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$$

$$\begin{aligned}
J_x^2 &= [\frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)]^2 = \frac{1}{4}[(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2)^2+\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)^2] \\
J_y^2 &= [\frac{i}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)]^2 = -\frac{1}{4}[(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2)^2-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1)^2] \\
J_z^2 &= [\frac{1}{2}(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)]^2 = \frac{1}{4}[(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)^2-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2+(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)^2] \\
J^2 &= \frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2) + \frac{1}{4}[(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)^2-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2+(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)^2] \\
&= \frac{1}{4}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2) + \frac{1}{4}[(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)^2+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2+(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)^2+\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1] \\
&= \frac{1}{4}(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2) \\
&= \frac{1}{4}[(\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger+\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger)\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+(\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger+\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger)\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2] \\
&= \frac{1}{4}(\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger+\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2) = \frac{1}{4}(2+\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2) \\
&= \frac{N}{2}(\frac{N}{2}+1) \qquad \text{其中：} N=\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2
\end{aligned}$$

其中：

$$\begin{aligned}
&\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1=\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger \qquad \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2=\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1(\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)=\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 \\
&\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2=\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger \qquad \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger-\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1=\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2(\hat{a}_1\hat{a}^\dagger-\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)=\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 \\
&(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1)^2+\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1=(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+1)\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1=\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 \\
&(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2)^2+\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2=(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2+2)\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2=\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 \\
&\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1=\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 \qquad \hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1+\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1=(\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger+\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger)\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 \\
&\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2=\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 \qquad \hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2+\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2=(\hat{a}_2\hat{a}_2^\dagger+\hat{a}_1\hat{a}_1^\dagger)\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2
\end{aligned}$$

我是没技巧，全是死算，头都晕了！！！

四、（$30'$）已知两种中微子的本征态为 $|V_1\rangle$ 和 $|V_2\rangle$，能量本征值为 $E=pc+\frac{m_i^2c^4}{pc}$（其中 $i=1,2$），电子中微子的本征态为 $|V_e\rangle=\cos\theta|V_1\rangle+\sin\theta|V_2\rangle$，$\mu$ 子中微子的本征态为 $|V_\mu\rangle=-\sin\theta|V_1\rangle+\cos\theta|V_2\rangle$，其中 θ 是混合角。某体系中在 $t=0$ 时，电子中微子处于态 $|V_e\rangle$，求：
（1）t 时刻中微子所处的状态；（2）t 时刻电子中微子处于基态的概率。

解：（1）由

$$|V_e\rangle=\cos\theta|V_1\rangle+\sin\theta|V_2\rangle \qquad |V_\mu\rangle=-\sin\theta|V_1\rangle+\cos\theta|V_2\rangle$$

有：

$$\begin{cases}\cos\theta|V_e\rangle=\cos^2\theta|V_1\rangle+\sin\theta\cos\theta|V_2\rangle\\ \sin\theta|V_\mu\rangle=-\sin^2\theta|V_1\rangle+\sin\theta\cos\theta|V_2\rangle\end{cases}\Longrightarrow |V_1\rangle=\cos\theta|V_e\rangle-\sin\theta|V_\mu\rangle$$

$$\begin{cases}\sin\theta|V_e\rangle=\sin\theta\cos\theta|V_1\rangle+\sin^2\theta|V_2\rangle\\ \cos\theta|V_\mu\rangle=-\sin\theta\cos\theta|V_1\rangle+\cos^2\theta|V_2\rangle\end{cases}\Longrightarrow |V_2\rangle=\sin\theta|V_e\rangle+\cos\theta|V_\mu\rangle$$

t 时刻中微子所处的状态为：

$$\begin{aligned}V(t)&=\cos\theta|V_1\rangle e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sin\theta|V_2\rangle e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\\&=\cos\theta[\cos\theta|V_e\rangle-\sin\theta|V_\mu\rangle]e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sin\theta[\sin\theta|V_e\rangle+\cos\theta|V_\mu\rangle]e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\\&=[\cos^2\theta e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sin^2\theta e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}]|V_e\rangle+[\sin\theta\cos\theta e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}-\sin\theta\cos\theta e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}]|V_\mu\rangle\end{aligned}$$

（2）t 时刻中微子处于电子中微子 $|V_e\rangle$ 的概率为：

$$\begin{aligned}|\langle V_e|V(t)\rangle|^2&=|\cos^2\theta e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sin^2\theta e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}|^2\\&=(\cos^2\theta e^{\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sin^2\theta e^{\frac{iE_2t}{\hbar}})(\cos^2\theta e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sin^2\theta e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}])\\&=\cos^4\theta+\cos^2\theta\sin^2\theta e^{\frac{i(E_1-E_2)t}{\hbar}}+\sin^4\theta+\cos^2\sin^2\theta e^{-\frac{i(E_1-E_2)t}{\hbar}}\\&=\cos^4\theta+\sin^4\theta+2\cos^2\theta\sin^2\theta\cos\frac{E_1-E_2}{\hbar}t\\&=1-\sin^2 2\theta\sin^2\frac{E_1-E_2}{2\hbar}t\end{aligned}$$

其中：

$$e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}=\cos\varphi+\sin\varphi+\cos\varphi-\sin\varphi=2\cos\varphi$$

$$\cos^4\theta+\sin^4\theta=(\cos^2\theta+\sin^2\theta)^2-2\sin^2\theta\cos^2\theta=1-2\sin^2\theta\cos^2\theta$$

$$\cos x=\cos^2\frac{x}{2}-\sin^2\frac{x}{2}=1-2\sin^2\frac{x}{2}\qquad \cos\frac{E_1-E_2}{\hbar}t=1-2\sin^2\frac{E_1-E_2}{2\hbar}t$$

验证下，当 $t=0$ 时，$|\langle V_e|V(t)\rangle|^2=1$ 符合题意。

电子中微子 $|V_e\rangle=\cos\theta|V_1\rangle+\sin\theta|V_2\rangle$ 处于基态 $|V_1\rangle$ 的概率为：$\cos^2\theta$，所以 t 时刻电子中微子处于基态的概率为：

$$\cos^2\theta(1-\sin^2 2\theta\sin^2\frac{E_1-E_2}{2\hbar}t)$$

评：这题计算不算复杂，但真的考查对量子力学的理解，态的理解。$t=0$ 时刻是电子中微子，到了 t 时刻就不知道是电子中微子还是 μ 中微子，先求到处于电子中微子的概率，再求电子中微子处于基态的概率。要注意的是，能量本征值是和本征态是对应的，想想定态薛定鄂方程的分离变量过程，本题中还好，但这是要体会清楚的。

五、(30') 设在氘核中，质子和中子的作用表示成 $V(r)=-V_0e^{-\frac{r}{a}}$，试用 $\psi=e^{-\frac{\lambda r}{2a}}$（$\lambda$ 为变数）为试探波函数，以变分法求：

（1）基态能量的近似值；（2）若 $V_0=32.7Mev,a=2.16fm$，试确定 λ 的值。

解：（1）先对试探波函数归一化：

$$\int\psi^*\psi d\tau=4\pi\int_0^\infty e^{-\frac{\lambda}{a}r}r^2dr=4\pi\frac{2}{(\frac{\lambda}{a})^3}=\frac{8\pi a^3}{\lambda^3}\qquad 其中：\int_0^\infty x^ne^{-ax}dx=\frac{n!}{a^{n+1}}$$

能量平均值为：$\langle H\rangle=\langle T\rangle+\langle V\rangle$

$$\langle V\rangle=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\int\psi^*(-V_0e^{-\frac{r}{a}})\psi d\tau=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\cdot(-4\pi V_0)\int_0^\infty e^{-\frac{\lambda r}{a}}e^{-\frac{r}{a}}r^2dr$$

$$=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\cdot(-4\pi V_0)\int_0^\infty e^{-\frac{\lambda+1}{a}r}r^2dr=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\cdot(-4\pi V_0)\cdot\frac{2}{(\frac{\lambda+1}{a})^3}=-\frac{\lambda^3}{(\lambda+1)^3}V_0$$

T 在球坐标下为 $T=\frac{1}{2m}(p_r^2+\frac{l^2}{r^2}),p_r^2=-\hbar^2(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})^2=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r=\cdots$，这里选用 $p_r^2=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r$。由于本题中 ψ 只含径向分量，故 l^2 对其作用为 0，有：

$$\langle T\rangle=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\int\psi^*\frac{1}{2m}(p_r^2+\frac{l^2}{r^2})\psi d\tau=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\cdot 4\pi\cdot(-\frac{\hbar^2}{2m})\int_0^\infty e^{-\frac{\lambda r}{2a}}[(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r)e^{-\frac{\lambda r}{2a}}]r^2dr$$

$$\int_0^\infty e^{-\frac{\lambda r}{2a}}[(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r)e^{-\frac{\lambda r}{2a}}]r^2dr=\int_0^\infty re^{-\frac{\lambda r}{2a}}(\frac{\partial^2}{\partial r^2})re^{-\frac{\lambda r}{2a}}dr=\int_0^\infty[\frac{\partial}{\partial r}(re^{-\frac{\lambda r}{2a}})]^2dr$$

$$=\int_0^\infty[e^{-\frac{\lambda r}{2a}}+re^{-\frac{\lambda r}{2a}}\cdot(-\frac{\lambda}{2a})]^2dr=\int_0^\infty(e^{-\frac{\lambda}{a}r}-\frac{\lambda}{a}re^{-\frac{\lambda}{a}r}+\frac{\lambda^2}{4a^2}r^2e^{-\frac{\lambda}{a}r})dr$$

$$=\frac{a}{\lambda}-\frac{\lambda}{a}(\frac{a}{\lambda})^2+\frac{\lambda^2}{4a^2}\cdot 2(\frac{a}{\lambda})^3=\frac{2a}{\lambda}$$

感觉这个技巧有些问题！跟直接算对不上号:????????????????????

$$\frac{\partial}{\partial r}(re^{-\frac{\lambda}{2a}r})=e^{-\frac{\lambda}{2a}r}+re^{-\frac{\lambda}{2a}r}\cdot(-\frac{\lambda}{2a})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}(re^{-\frac{\lambda}{2a}r})=(-\frac{\lambda}{2a})e^{-\frac{\lambda}{2a}r}+(-\frac{\lambda}{2a})e^{-\frac{\lambda}{2a}r}+(-\frac{\lambda}{2a})re^{-\frac{\lambda}{2a}r}\cdot(-\frac{\lambda}{2a})=-\frac{\lambda}{a}e^{-\frac{\lambda}{2a}r}+\frac{\lambda^2}{4a^2}re^{-\frac{\lambda}{2a}r}$$

$$re^{-\frac{\lambda}{2a}r}[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(re^{-\frac{\lambda}{2a}r})]=-\frac{\lambda}{a}re^{\frac{\lambda}{a}r}+\frac{\lambda^2}{4a^2}r^2e^{-\frac{\lambda}{a}r}$$

$$\langle T\rangle=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\cdot 4\pi\cdot(-\frac{\hbar^2}{2m})\cdot\frac{2a}{\lambda}=-\frac{\lambda^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\langle H(\lambda)\rangle=\frac{\lambda^2\hbar^2}{2ma^2}-\frac{\lambda^3}{(\lambda+1)^3}V_0\qquad\frac{d\langle H(\lambda)\rangle}{d\lambda}=\frac{\lambda\hbar^2}{ma^2}-\frac{3\lambda^2}{(\lambda+1)^4}V_0=0$$

1.4 2008

一、(30′) 写成氢原子的束缚态能级，所有量子数以及取值范围，求出其简并度。

二、(30′) 一个粒子质量为 μ，在一势能环中运动，势能

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < \varphi < \varphi_0 \\ \infty, & other \end{cases}$$

求粒子运动的本征值和本征函数。

三、(30′) 求在 $H = \begin{pmatrix} 1 & \lambda & 0 \\ \lambda & 3 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - 2 \end{pmatrix}$ 中粒子的本征值，设 $\lambda \ll 1$，利用微扰求其本征值（精确到二级近似）并与精确求解相比较。

四、(30′) 两个自旋为 $\frac{1}{2}\hbar$ 的粒子，两个粒子分别为 $\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，$\chi_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta e^{-i\omega t} \\ \sin\theta e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$，求系统处于单态和三态的概率。

五、(30′) 处在一维谐振子势基态的粒子受到微扰 $H' = \lambda x \delta(t_0)$ 作用，求跃迁到其他各激发态的总概率和仍处在基态的概率。已知：$xH_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}H_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}H_{n+1}\right]$。

2008 解答

一、(30′) 写成氢原子的束缚态能级，所有量子数以及取值范围，求出其简并度。

答：束缚态能级为：$E_n=-\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$；主量子数 n：$1,2,3,\cdots$；角量子数 l：$0,1,2,(n-1),\cdots$；磁量子数 m：$0,\pm1,\pm2,\pm l$；简并度：n^2。

二、(30′) 一个粒子质量为 μ，在一势能环中运动，势能

$$V=\begin{cases}0, & 0<\varphi<\varphi_0\\ \infty, & other\end{cases}$$

求粒子运动的本征值和本征函数。

解：

方法一

在 $2\pi>\varphi>\varphi_0$ 中，$V=\infty$，$\psi=0$。

在 $0<\varphi<\varphi_0$ 定态薛定鄂方程：

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

在势能环中运动 r,θ 为常数，与其相关的微分项都为 0 。可以认为 $\theta=\frac{\pi}{2}$，即是在 xy 平面上的圆环，因为总可以通过坐标变换得到。在弧中有：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi=E\psi\qquad\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi+k^2\psi=0\qquad 令\mu r^2=I,则k^2=\frac{2IE}{\hbar^2}$$

解得：

$$\psi(\varphi)=Ae^{ik\varphi}+Be^{-ik\varphi}$$

由边界条件，$\psi(0)=0,\psi(\varphi_0)=0$，有：

$$\begin{cases}\psi(0)=A+B=0\\ \psi(\varphi_0)=Ae^{ik\varphi_0}+Be^{-ik\varphi_0}=0\end{cases}\qquad e^{ik\varphi_0}-e^{-ik\varphi_0}=0\qquad 2i\sin k\varphi_0=0$$

$$\sin k\varphi_0=0\qquad k\varphi_0=n\pi\qquad k=\frac{n\pi}{\varphi_0}\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

$$\psi(\varphi)=Ae^{i\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}}-Ae^{-i\frac{m\pi\varphi}{\varphi_0}}=2iA\sin\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}=C\sin\frac{m\pi\varphi}{\varphi_0}$$

归一化：

$$\int_0^{\varphi_0}\psi^*\psi d\varphi=C^2\int_0^{\varphi_0}\sin^2\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}d\varphi=C^2\int_0^{\varphi_0}(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos\frac{2n\pi\varphi}{\varphi_0})d\varphi=C^2\frac{\varphi_0}{2}=1$$

$$\psi(\varphi)=\sqrt{\frac{2}{\varphi_0}}\sin\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots\qquad E=\frac{\hbar^2}{2I}k^2=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2I\varphi_0^2}$$

方法二

所谓方法二就是在解那个薛定鄂方程时，采用不同的通解形式，不同的边界条件用不同的形式，或许有利于计算。

其通解为：$\psi(\varphi)=A\sin(k\varphi+\delta)$，由边界条件，$\psi(0)=0,\psi(\varphi_0)=0$，有：

$$\begin{cases}A\sin(0+\delta)=0\\ A\sin(k\varphi_0+\delta)=0\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}\delta=0\\ k=\frac{n\pi}{\varphi_0}\end{cases}\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

这样解起来就简便些。

三、(30′) 求在 $H=\begin{pmatrix}1&\lambda&0\\ \lambda&3&0\\ 0&0&\lambda-2\end{pmatrix}$ 中粒子的本征值，设 $\lambda\ll1$，利用微扰求其本征值（精确到二级近似）并与精确求解相比较。

解：(1) 近似解

将 $H'=\begin{pmatrix}0&\lambda&0\\ \lambda&0&0\\ 0&0&\lambda\end{pmatrix}$ 视为微扰，$H^0=\begin{pmatrix}1&0&0\\ 0&3&0\\ 0&0&-2\end{pmatrix}$，有：

$E_n^1=H'_{nn}\qquad E_1^1=0\qquad E_2^1=0\qquad E_3^1=\lambda$

$$E_k^2=\sum_{n\neq k}\frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^0-E_n^0}\qquad E_1^2=\frac{|H'_{21}|^2}{E_1^0-E_2^0}+\frac{|H'_{31}|^2}{E_1^0-E_3^0}=\frac{\lambda^2}{1-3}=-\frac{\lambda^2}{2}$$

$$E_2^2=\frac{|H'_{12}|^2}{E_2^0-E_1^0}+\frac{|H'_{32}|^2}{E_2^0-E_3^0}=\frac{\lambda^2}{3-1}=\frac{\lambda^2}{2}\qquad E_3^2=\frac{|H'_{13}|^2}{E_3^0-E_1^0}+\frac{|H'_{23}|^2}{E_3^0-E_2^0}=0$$

$$E_1=E_1^0+E_1^1+E_1^2=1+0+(-\frac{\lambda}{2})=1-\frac{\lambda^2}{2}\qquad E_2=E_2^0+E_2^1+E_2^2=3+0+\frac{\lambda}{2}=3+\frac{\lambda^2}{2}$$

$$E_3=E_3^0+E_3^1+E_3^2=-2+\lambda+0=\lambda-2$$

(2) 精确解

$$\begin{vmatrix}1-E&\lambda&0\\ \lambda&3-E&0\\ 0&0&\lambda-2-E\end{vmatrix}=0$$

$$(1-E)(3-E)(\lambda-2-E)-\lambda^2(\lambda-2-E)=0\qquad E=\lambda-2$$

$$(1-E)(3-E)-\lambda^2=0\Longrightarrow E^2-4E+3-\lambda^2=0\Longrightarrow E=2+\sqrt{1+\lambda^2},2-\sqrt{1+\lambda^2}$$

(3) 近似解与精确解的比较

将 $\sqrt{1+\lambda}$ 在 0 处泰勒展开 $f(x)=f(0)+f'(0)x$，有：$\sqrt{1+\lambda}\approx1+\frac{\lambda^2}{2}$，于是：

$$E=2+\sqrt{1+\lambda^2}\approx3+\frac{\lambda^2}{2}\qquad E=2-\sqrt{1+\lambda^2}\approx1-\frac{\lambda^2}{2}$$

可见微扰第三能级近似解与精确解相同，第一、第二能级是精确解的泰勒展开。

四、(30′) 两个自旋为 $\frac{1}{2}\hbar$ 的粒子，两个粒子分别为 $\chi_1=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\chi_1=\begin{pmatrix}\cos\theta e^{-i\omega t}\\ \sin\theta e^{-i\omega t}\end{pmatrix}$，求系统处于单态和三态的概率。

解：将 χ_1,χ_2 分别表示成：

$$\chi_1=\alpha_1,\qquad\chi_2=\cos\theta e^{-i\omega t}\alpha_2+\sin\theta e^{-i\omega t}\beta_2$$

则这个双粒子系统的自旋波函数为：

$$\psi = \cos\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\alpha_2 + \sin\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\beta_2$$

处于单态 χ_{00} 的概率为：

$$\langle\chi_{00}|\psi\rangle = \sqrt{1}\sqrt{2}(\alpha_1^\dagger\beta_2^\dagger - \beta_1^\dagger\alpha_2^\dagger)(\cos\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\alpha_2 + \sin\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\beta_2) = \sqrt{1}\sqrt{2}\sin\theta e^{-i\omega t}$$

$$P_{00} = |\langle\chi_{00}|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\theta$$

处于 χ_{11} 的概率为：

$$\langle\chi_{11}|\psi\rangle = \alpha_1\alpha_2(\cos\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\alpha_2 + \sin\theta e^{-\omega t}\alpha_1\beta_2) = \cos\theta e^{-\omega t}$$

$$P_{11} = |\langle\chi_{11}|\psi\rangle|^2 = \cos^2\theta$$

处于 $\chi_{1,-1}$ 的概率为：

$$\langle\chi_{1,-1}|\psi\rangle = \beta_1\beta_2(\cos\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\alpha_2 + \sin\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\beta_2) = 0$$

$$P_{1,-1} = |\langle\chi_{1,-1}|\psi\rangle|^2 = 0$$

处于 χ_{10} 的概率为：

$$\langle\chi_{10}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2)(\cos\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\alpha_2 + \sin\theta e^{-i\omega t}\alpha_1\beta_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta e^{-i\omega t}$$

$$P_{10} = |\langle\chi_{10}|\psi|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\theta$$

于是系统处于单态的概率为：$\frac{1}{2}\sin^2\theta$，处于三态的概率为：$\cos^2\theta - \frac{1}{2}\sin^2\theta$[13]。

五、(30′) 处在一维谐振子势基态的粒子受到微扰 $H' = \lambda x\delta(t_0)$ 作用，求跃迁到其他各激发态的总概率和仍处在基态的概率。已知：$xH_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}H_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}H_{n+1}\right]$。

析：虽然是“已知”但还是想看看，它是怎么来的：

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-) \qquad \hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\hat{a}_+|n\rangle + \hat{a}_-|n\rangle)$$

$$\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}(\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle + \sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle)$$

令：$a = \frac{\mu\omega}{\hbar}$，有：$xH_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}H_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}H_{n+1}\right]$

解：

$$a_m(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mk}e^{i\omega_{mk}t'}dt' \quad (k\to m) \quad \omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar} \qquad H'_{m0} = \langle m|H'|0\rangle = \lambda\delta(t_0)\langle m|\hat{x}|0\rangle$$

由 $xH_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}H_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}H_{n+1}\right]$，有：

$$x_{mn} = \langle\psi_m|\hat{x}|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right] \qquad x_{m0} = \frac{1}{\sqrt{a}}\delta_{m,1}$$

曾疑虑，基态用不了这个公式，会有 $\delta_{m,-1}$，没有这个负能级，觉得不对。但是这是 δ 函数，既然没有，那就为 0 呀！

[13] 当然了处于三态的概率可以直接一减去处于单态的概率，不必把处于三态的概率一个个都求出来

由 x_{m0} 可以看出，只能跃迁到第一激发态，其余能级跃迁概率为 0 ，有：

$$H'_{10} = \frac{\lambda}{\sqrt{a}}\delta(t_0)$$

$$a_1(t) = \frac{1}{i\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{a}}\int_0^t \delta(t_0)e^{i\omega_{10}t'}dt' = \frac{1}{i\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{a}}e^{i\omega t_0} \qquad \omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} = \omega$$

$$|a_1(t)|^2 = -\frac{1}{i\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{a}}e^{-i\omega t_0} \cdot \frac{1}{i\hbar}\frac{\lambda}{\sqrt{a}}e^{i\omega t_0} = \frac{\lambda}{a\hbar^2}$$

于是跃迁到其他各激发态的总概率为：$\frac{\lambda}{a\hbar^2}$，仍处于基态的概率为：$1 - \frac{\lambda}{a\hbar^2}$。

1.5 2007A

一、(30′) 在一维无限深方势阱 $(0 < x < a)$ 中运动的粒子受到微扰

$$H'(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < \frac{a}{3}, \frac{2a}{3} < x < a \\ -V_1, & \frac{a}{3} < x < \frac{2a}{3} \end{cases}$$

作用。试求基态能量的一级修正。

二、(30′) 粒子在势场 $V(x)$ 中运动并处于束缚定态 $\psi_n(x)$ 中。试证明粒子所受势场的作用力的平均值为 0 。

三、(30′)

(1) 考虑自旋为 $\frac{1}{2}$ 的系统。试在 $(\hat{S}^2, \hat{S}_z)$ 表象中求算符 $A\hat{S}_y + B\hat{S}_z$ 的本征值及归一化的本征态。其中 $\hat{S}_y, \hat{S}_z$ 是自旋角动量算符，而 A, B 为实常数。

(2) 假定此系统处于以上算符的一个本征态上，求测量 $\hat{S}_y$ 得到结果为 $\frac{\hbar}{2}$ 的概率。

四、两个无相互作用的粒子置于一维无限深势阱中 $(0 < x < a)$ 中，对下列两种情况写出两粒子体系具有的两个最低总能量，相应的简并度以及上述能级对应的所有二粒子波函数。

(a) 两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的可区分粒子；

(b) 两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子。

五、(30′) 一个质量为 m 的粒子被限制在 $r = a$ 和 $r = b$ 的两个不可穿透的同心球面之间运动。不存在其它势，求粒子的基态能量和归一化波函数。

2007A 解答

一、(30′) 在一维无限深方势阱 $(0<x<a)$ 中运动的粒子受到微扰

$$H'(x)=\begin{cases}0, & 0<x<\frac{a}{3},\ \frac{2a}{3}<x<a\\ -V_1, & \frac{a}{3}<x<\frac{2a}{3}\end{cases}$$

作用。试求基态能量的一级修正。

解：缺图!!

无微扰时，波函数和本征值为：

$$\phi_n^0=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad E_n^0=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\begin{aligned}E_1^1=\langle\phi_1^0|H'|\phi_1^0\rangle&=-\frac{2}{a}V_1\int_{\frac{a}{3}}^{\frac{2a}{3}}\sin^2\frac{\pi x}{a}dx=-\frac{2V_1}{a}\left[\int_{\frac{a}{3}}^{\frac{2a}{3}}\frac{1}{2}dx-\int_{\frac{a}{3}}^{\frac{2a}{3}}\cos\frac{2\pi x}{a}dx\right]\\&=-\frac{2V_1}{a}\left[\frac{a}{6}-\frac{a}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}\Big|_{\frac{a}{3}}^{\frac{2a}{3}}\right]=-\frac{2V_1}{a}\left[\frac{a}{6}-\frac{a}{2\pi}(\sin\frac{4\pi}{3}-\sin\frac{2\pi}{3})\right]\\&=-\frac{2V_1}{a}\left[\frac{a}{6}+\frac{a}{2\pi}\right]=-V_1(\frac{1}{3}+\frac{1}{\pi})\end{aligned}$$

其中用到：$\cos 2x=\cos^2 x-\sin^2 x=1-2\sin^2 x\qquad \sin^2 x=\frac{1-\cos 2x}{2}$

基态能量的一级修正为：

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}-\frac{V_1}{3}-\frac{V_1}{\pi}$$

二、(30′) 粒子在势场 $V(x)$ 中运动并处于束缚定态 $\psi_n(x)$ 中。试证明粒子所受势场的作用力的平均值为 0 。

证：

势场作用力为：

$$F=-\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

$$F=-\frac{\partial V(x)}{\partial x}=\frac{1}{i\hbar}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}V(x))=\frac{1}{i\hbar}[p_x,V(x)]=\frac{1}{i\hbar}[p_x,H]$$

$$\begin{aligned}\langle F\rangle&=\frac{1}{i\hbar}\langle\psi_n|[p_x,H]|\psi_n\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle\psi_n|p_xH|\psi_n\rangle-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi_n|Hp_x|\psi_n\rangle\\&=\frac{1}{i\hbar}E_n\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle-\frac{1}{i\hbar}E_n\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle=0\end{aligned}$$

三、(30′)

(1) 考虑自旋为 $\frac{1}{2}$ 的系统。试在 $(\hat{S}^2,\hat{S}_z)$ 表象中求算符 $A\hat{S}_y+B\hat{S}_z$ 的本征值及归一化的本征态。其中 $\hat{S}_y,\hat{S}_z$ 是自旋角动量算符，而 A,B 为实常数。

(2) 假定此系统处于以上算符的一个本征态上，求测量 $\hat{S}_y$ 得到结果为 $\frac{\hbar}{2}$ 的概率。

解：(1) $(\hat{S}^2,\hat{S}_z)$ 表象中，$S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\qquad S_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$

$$A\hat{S}_y+B\hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix}0&-iA\\iA&0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}B&0\\0&-B\end{pmatrix}\right]=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}B&-iA\\iA&-B\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2}B&-i\frac{\hbar}{2}A\\i\frac{\hbar}{2}A&-\frac{\hbar}{2}B\end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar}{2}B-\lambda & -i\frac{\hbar}{2}A \\ i\frac{\hbar}{2}A & -\frac{\hbar}{2}B-\lambda \end{vmatrix}=0$$

$$-(\frac{\hbar}{2}B-\lambda)(\frac{\hbar}{2}B+\lambda)-(-i\frac{\hbar}{2}A)(i\frac{\hbar}{2}A)=0 \qquad -(\frac{\hbar^2}{4}B^2-\lambda^2)-\frac{\hbar^2}{4}A^2=0 \qquad \lambda^2=\frac{\hbar^2}{4}(A^2+B^2)$$

$$\lambda=\pm\frac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2}B\mp\frac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2} & -i\frac{\hbar}{2}A \\ i\frac{\hbar}{2}A & -\frac{\hbar}{2}B\mp\frac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=0$$

$$\begin{cases} a(B\mp\sqrt{A^2+B^2})-ibA=0 \\ iAa-b(B\pm\sqrt{A^2+B^2})=0 \end{cases} \qquad \begin{cases} a=1 \\ b=\frac{B\mp\sqrt{A^2+B^2}}{iA} \end{cases}$$

本征态乘以常数无所谓，改写为：$\begin{cases} a=iA \\ b=B\mp\sqrt{A^2+B^2} \end{cases}$，归一化：

$$\begin{pmatrix} -iA & B\mp\sqrt{A^2+B^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} iA \\ B\mp\sqrt{A^2+B^2} \end{pmatrix}C^2=1 \quad C^2(A^2+(B\mp\sqrt{A^2+B^2})^2)=1$$

$$C=\left[\frac{1}{A^2+(B\mp\sqrt{A^2+B^2})^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

则本征值、本征态分别为：

$$E_\pm=\pm\frac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2} \qquad |\psi_\pm\rangle=\left[\frac{1}{A^2+(B\mp\sqrt{A^2+B^2})^2}\right]^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} iA \\ B\mp\sqrt{A^2+B^2} \end{pmatrix}$$

(2) 在 $(\hat{S}^2,S_z)$ 表象下，$\hat{S}_y$ 的本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的本征态为 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$，则测量 $\hat{S}_y$ 得到结果为 $\frac{\hbar}{2}$ 的概率为：

$$P_\pm=\left|\langle S_y=\frac{\hbar}{2}|\psi_\pm\rangle\right|^2=\frac{1}{2}\frac{1}{A^2+(B\mp\sqrt{A^2+B^2})}\left|\begin{pmatrix} 1 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} iA \\ B\mp\sqrt{A^2+B^2} \end{pmatrix}\right|^2$$
$$=\frac{1}{2}\frac{[A-(B\mp\sqrt{A^2+B^2})]^2}{A^2+(B\mp\sqrt{A^2+B^2})}$$

评：方法挺简单，就是计算搞得太复杂。

四、[14]两个无相互作用的粒子置于一维无限深势阱中 $(0<x<a)$ 中，对下列两种情况写出两粒子体系具有的两个最低总能量，相应的简并度以及上述能级对应的所有二粒子波函数。

(a) 两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的可区分粒子；

(b) 两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子。

解：

[14]同类型题见：2010 第四题

一个粒子处于该一维无限深势阱时，波函数与能量为：

$$\phi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad e_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma}$$

（a）两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的可区分粒子：

（1）基态：

$$\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)\alpha_1\alpha_2\qquad\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)\alpha_1\beta_2\qquad\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)\beta_1\beta_2\qquad\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)\beta_1\alpha_2$$

能量为：$E_1=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$，简并度为：4。

（2）第一激发态：

$$\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\alpha_1\alpha_2\qquad\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\alpha_1\beta_2\qquad\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\beta_2\beta_2\qquad\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\beta_1\beta_2$$

$$\phi_2(x_1)\phi_1(x_2)\alpha_1\alpha_2\qquad\phi_2(x_1)\phi_1(x_2)\alpha_1\beta_2\qquad\phi_2(x_1)\phi_1(x_2)\beta_2\beta_2\qquad\phi_2(x_1)\phi_1(x_2)\beta_1\beta_2$$

能量为：$E_2=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\dfrac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\dfrac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，简并度为：8 。

（b）两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子，无简并：

（1）基态：

$$\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_1\beta_2-\alpha_2\beta_1]$$

能量为：$E_1=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$，无简并。

（2）第一激发态：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)-\phi_2(x_1)\phi_1(x_2)]\cdot\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2]\\ \alpha_1\alpha_2\\ \beta_1\beta_2\end{cases}$$

能量为：$E_2=\dfrac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，简并的为 3。

讨论：

1、第一问的解答用的是角动量非耦合表象，选用的自旋力学量完全集是 (S_{1z},S_{2z})，各本征态分别是：$\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2,\alpha_1\beta_2,\beta_1\alpha_2$。还可以用角动量耦合表象，选用的自旋力学量完全集是 (S^2,S_z)，各本征态分别是：

$$|00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2]$$

$$|1s\rangle=\begin{cases}\alpha_1\alpha_2\\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2]\\ \beta_1\beta_2\end{cases}$$

其中 s 取值分别为：$0,\pm1$。于是第一问还可以写成：

（a）两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的可区分粒子，波函数不必对称化：

（1）基态：

$$\phi_1(x)\phi_1(x_2)|00\rangle\qquad\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)|1s\rangle\qquad(s=0,\pm1)$$

能量为：$E_1=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$，简并度为：4。

（2）第一激发态：

$$\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)|00\rangle \quad \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)|1s\rangle \quad \phi_2(x_1)\phi_1(x_2)|00\rangle \quad \phi_2(x_1)\phi_1(x_2)|1s\rangle \quad (s=0,\pm1)$$

能量为：$E_2=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\dfrac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\dfrac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，简并度为：8 。
2、对于第二问，是自旋为 $\frac{1}{2}$ 的全同粒子，不能用非耦合表象，我想是要满足对称性吧。对称空间波函数配反对称自旋波函数，反对称空间波函数配对称自旋波函数。反对称就是减号的那个。

五、（$30'$）一个质量为 m 的粒子被限制在 $r=a$ 和 $r=b$ 的两个不可穿透的同心球面之间运动。不存在其它势，求粒子的基态能量和归一化波函数。

解：球坐标下定态薛定鄂方程

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}+V(r)\right]\psi=E\psi$$

在 $a<r<b$ 之外，$\psi=0$。
在 $a<r<b$ 中，$V(r)=0$，定态薛定鄂方程为：

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}\right]\psi=E\psi$$

将 $\psi=R_n(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 代人：

$$Y_{lm}\frac{\hat{p}_r^2}{2m}R_n(r)+R_n(r)\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}Y_{lm}=R_nY_{lm}E \qquad \left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R_n(r)=R_n(r)E$$

$\hat{p}_2^2=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r$，对于基态 $l=0$，有：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}rR_n(r)=R_n(r)E$$

设 $R_1(r)=\frac{\mu(r)}{r}$，有：

$$\frac{d^2\mu}{dr^2}+k^2\mu=0 \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

其解为：

$$\mu(r)=A\sin(kr+\delta) \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad a\leqslant r\leqslant b$$

由边界条件 $\mu(a)=\mu(b)=0$，有：

$$\begin{cases}\sin(ka+\delta)=0\\ \sin(kb+\delta)=0\end{cases} \qquad \begin{cases}\delta=-ka\\ k=\dfrac{n\pi}{b-a}\end{cases} \qquad n=1,2,3\cdots$$

$$\mu(r)=A\sin\left[\frac{n\pi}{b-a}(r-a)\right]$$

归一化：

$$\int_a^b A^2\sin^2\frac{n\pi}{b-a}(r-a)dr=1 \quad A^2\int_a^b\frac{1}{2}[1-\cos\frac{2n\pi}{b-n}(r-a)]dr=1 \quad A^2\frac{1}{2}r\Big|_a^b=1 \quad A=\sqrt{\frac{2}{b-a}}$$

其中用到：$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x = 1 - 2\sin^2 x \qquad \sin^2 x = \frac{1}{2}(1-\cos 2x)$

$$\mu(r) = \sqrt{\frac{2}{b-a}}\sin\left[\frac{n\pi}{b-a}(r-a)\right] \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(b-a)^2}$$

由 $R_1(r) = \frac{\mu(r)}{r}, \psi_{100} = R_1(r)Y_{00}(\theta,\varphi), Y_{00}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$，有：

$$\psi_{100}(r) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{1}{2\pi(b-a)}}\dfrac{1}{r}\sin\left[\dfrac{n\pi}{b-a}(r-a)\right], & a < r < b \\ 0, & 0 < r \leqslant a, r \geqslant b \end{cases} \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(b-a)^2} \quad n = 1, 2, 3 \cdots$$

1.6 2007B

一、(30′) 考虑一维阶梯势 $V(x)=\begin{cases}V_0, & x>0(V_0>0)\\ 0, & x<0\end{cases}$，设粒子从右边向左边入射，试求反射系数和透射系数。

二、(30′) 电子处于沿 $+z$ 方向、大小为 B 的均匀磁场中。设 $t=0$ 时刻电子自旋沿 $+y$ 方向。

(1) 试求 $t=0$ 时电子自旋波函数;

(2) 试分别求 $t>0$ 时，电子自旋沿 $+x,+y,+z$ 方向的概率。

四、(30′) 设系统哈密顿算符为 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\vec{r})$，粒子处于归一化的束缚定态 ψ_n 中。试证明 Virial 定理:

$$\langle\psi_n|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi_n\rangle=\frac{1}{2}\langle\psi_n|\vec{r}\cdot\nabla V(\vec{r})|\psi_n\rangle$$

五、(30′) 一维谐振子系统哈密顿量为 $\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，设受到微扰 $H'=-\lambda\hat{p}_x^4$ 的作用。试求对等 n 个谐振子能级的一级微扰修正。

(已知矩阵元 $\langle n'|\hat{x}|n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}+\sqrt{n}\delta_{n',n_1}))$

2007B 解答

一、(30′) 考虑一维阶梯势 $V(x)=\begin{cases}V_0, & x>0(V_0>0)\\ 0, & x<0\end{cases}$，设粒子从右边向左边入射，试求反射系数和透射系数。

解: 缺图

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

当 $x>0$，设 $E>V_0$，解为：$\psi_1=e^{-ik_1x}+Be^{ik_1x}$， $k_1^2=\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$（有透射，也有反射，有向右，向左的波）

当 $x<0$，解为：$\psi_2=Ce^{-ik_2x},k_2^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$（只有向左的波）

反射系数：$R=|B|^2$，透射系数：$T=1-|B|^2$；

由波函数及波函数的一阶导数在 $x=0$ 处的连续条件得：

$\psi_1(0)=\psi_2(0) \qquad 1+B=C \qquad -k_2-k_2B=-k_2C$

$\psi_1'(0)=\psi_2'(0) \quad \psi_1'=-ik_1e^{-ik_1x}+Bik_1e^{ik_1x} \quad \psi_2'=-ik_2Ce^{-ik_2x} \quad -k_1+k_1B=-k_2C$

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

反射系数为：

$$R=\left|\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right|^2=\left|\frac{\sqrt{E-V_0}-\sqrt{E}}{\sqrt{E-V_0}+\sqrt{E}}\right|^2=\frac{V_0^2}{\sqrt{E-V_0}+\sqrt{E}^4}$$

透射系数为：

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

二、(30′) 电子处于沿 $+z$ 方向、大小为 B 的均匀磁场中。设 $t=0$ 时刻电子自旋沿 $+y$ 方向。

(1) 试求 $t=0$ 时电子自旋波函数；

(2) 试分别求 $t>0$ 时，电子自旋沿 $+x,+y,+z$ 方向的概率。

解：(1)

电子的内禀磁矩（与自旋 $\vec{S}$ 相应的磁矩）为：$\vec{\mu}_s=-\frac{e\hbar}{2\mu c}\vec{\sigma}=-\frac{e}{\mu c}\vec{s}$，内禀磁矩的值 (Bohr 磁子) 为 $\mu_B=\frac{e\hbar}{2\mu c}$；电子在磁场中的哈密顿量（电子内禀磁矩与外磁场 $\vec{B}$ 的相互作用能）为：$H=-\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}$。在本题中，磁场沿 $+z$ 方向，于是 H 为：

$$H=\mu_BB=\frac{e\hbar B}{2mc}\sigma_z=\omega\hbar\sigma_z \quad \omega=\frac{eB}{2mc}\text{称为 Lamor 频率}$$

可见在 s_z 表象下，H 的本征值和本征态分别为：

$$\omega\hbar,\quad \alpha; \qquad -\omega\hbar,\quad \beta$$

在 $t=0$ 时刻电子沿 $+y$ 方向，即电子波函数为算符 σ_y 本征值为 $+1$ 的本征函数，在 s_z

表象下为：

$$\psi(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$$

如不记得，可以简单推到，如下：

$$\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}-ib\\ia\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\Longrightarrow\begin{cases}-ib=a\\ia=b\end{cases}\quad\begin{cases}a=1\\b=i\end{cases}$$

然后归一化就 OK。

将 $\psi(0)$ 用 H 的本征函数系表示，有：

$$\psi(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\frac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\alpha+\frac{i}{\sqrt{2}}\beta$$

则 $\psi(t)$ 为：

$$\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\alpha e^{i\omega t}$$

四、(30′) 设系统哈密顿算符为 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\vec{r})$，粒子处于归一化的束缚定态 ψ_n 中。试证明 Virial 定理：

$$\langle\psi_n|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi_n\rangle=\frac{1}{2}\langle\psi_n|\vec{r}\cdot\nabla V(\vec{r})|\psi_n\rangle$$

证明：位力定理的证明属于基本的必须掌握内容

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle\qquad\frac{d\langle\vec{r}\cdot\vec{p}\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},H]\rangle$$

在束缚态下，$\dfrac{d\langle\vec{r}\cdot\vec{p}\rangle}{dt}=0$，即：$\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},H]\rangle=0$

$\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},H]\rangle=\dfrac{1}{2m}\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2]\rangle+\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},V(r)]\rangle$

$[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2]=[xp_x+yp_y+zp_z,p^2]=[xp_x,p^2]+[yp_y,p^2]+[zp_y,p^2]=[x,p_x^2]p_x+[y,p_y^2]p_y+[z,p_z^2]p_z$

$[x,p_x^2]=p_x[x,p_x]+[x,p_x]p_x=2i\hbar p_x$　　同理：$[y,p_y^2]=2i\hbar p_y$，　$[z,p_z^2]=2i\hbar p_z$

$[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2]=2i\hbar p^2$

$[\vec{r}\cdot\vec{p},V(r)]=[xp_x+yp_y+zp_z,V(r)]=x[p_x,V(r)]+y[p_y,V(r)]+z[p_y,V(r)]$

$[p_x,V(r)]\psi=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}(V(r)\psi)+i\hbar V(r)\dfrac{\partial}{\partial x}\psi=-i\hbar\psi\dfrac{\partial}{\partial x}V(r)-i\hbar V(r)\dfrac{\partial\psi}{\partial x}=-i\hbar\psi\dfrac{\partial}{\partial x}V(r)$

$[p_x,V(r)]=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}V(r)$，　同理：$[p_y,V(r)]=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y}V(r)$，　$[p_z,V(r)]=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}V(r)$

$[\vec{r}\cdot\vec{p},V(r)]=\vec{r}\cdot(-i\hbar\nabla V(r))=-i\hbar\vec{r}\cdot\nabla V(r)$

$$\frac{1}{2m}\cdot 2i\hbar\langle p^2\rangle-i\hbar\langle\vec{r}\cdot\nabla V(\vec{r})\rangle=0$$

即：

$$\langle\psi_n|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi_n\rangle=\frac{1}{2}\langle\psi_n|\vec{r}\cdot\nabla V(\vec{r})|\psi_n\rangle$$

五、(30′) 一维谐振子系统哈密顿量为 $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$，设受到微扰 $H' = -\lambda \hat{p}_x^4$ 的作用。试求对等 n 个谐振子能级的一级微扰修正。
(已知矩阵元 $\langle n'|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n_1})$)

解:

方法一:

$$H' = -\lambda p_x^4 = -\lambda(p_x^2)^2 = -\lambda[2m(H^0 - V)]^2 = -4\lambda m^2({H^0}^2 + V^2 - H^0 V - V H^0)$$

由位力定理

$$2\langle T\rangle = \langle x\cdot\frac{\partial}{\partial x}V(x)\rangle = \langle x\cdot\frac{1}{2}m\omega^2 x\cdot 2\rangle = 2\langle V\rangle \qquad \langle T\rangle = \langle V\rangle = \frac{E_n}{2} \qquad V|n\rangle = \frac{E_n}{2}|n\rangle$$

$$\langle n|{H^0}^2|n\rangle = E_n^2 \qquad \langle n|H^0 V|n\rangle = \frac{E_n^2}{2} \qquad \langle n|V H^0|n\rangle = \frac{E_n^2}{2}$$

$$\begin{aligned}\langle n|H'|n\rangle &= -4\lambda^2\langle V^2\rangle = -4\lambda m^2\cdot\frac{1}{4}m^2\omega^4\langle x^4\rangle = -\lambda m^4\omega^4\cdot\frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}(2n^2+2n+1)\\ &= -\frac{3}{4}\lambda m^2\omega^2\hbar^2(2n^2+2n+1)\end{aligned}$$

其中

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \qquad \hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+) \qquad \langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(1+2n)$$

$$\begin{aligned}\hat{x}^4 &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}(a_+^2 + a_-^2 + 1 + 2a_+a_-)(a_+^2 + a_-^2 + 1 + 2a_+a_-)\\ &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}(\hat{a}_+^4 + \hat{a}_+^2\hat{a}_-^2 + \hat{a}_+^2 + 2\hat{a}_+^2\hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-^2\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^4 + \hat{a}_-^2 + 2\hat{a}_-^2\hat{a}_+\hat{a}_-\\ &\quad + \hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2 + 1 + 2\hat{a}_+\hat{a}_- + 2\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+^2 + 2\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_-^2 + 2\hat{a}_+\hat{a}_- + 4\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+\hat{a}_-)\\ \langle\hat{x}^4\rangle &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}(\langle\hat{a}_+^2\hat{a}_-^2\rangle + \langle\hat{a}_-^2\hat{a}_+^2\rangle + 1 + 4\langle\hat{a}_+\hat{a}_-\rangle + 4\langle\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+\hat{a}_-\rangle)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_+^2\hat{a}_-^2|n\rangle &= \hat{a}_+^2\hat{a}_-\sqrt{n}|n-1\rangle = \hat{a}_+^2\sqrt{n}\sqrt{n-1}|n_2\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-1}a_+|n-1\rangle\\ &= \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-1}\sqrt{n}|n\rangle = n(n-1)|n\rangle\\ \hat{a}_-^2 a_+^2|n\rangle &= \hat{a}_-^2\hat{a}_+\sqrt{n+1}|n+1\rangle = a_-^2\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}|n+2\rangle = \hat{a}_-\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+2}|n+1\rangle\\ &= \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+2}\sqrt{n+1}|n\rangle = (n+1)(n+2)|n\rangle\\ \langle x^4\rangle &= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}[n(n-1) + (n+1)(n+2) + 1 + 4n + 4n^2] = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}(6n^2+6n+3)\\ &= \frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}(2n^2+2n+1)\end{aligned}$$

方法二:

改写 H':

$$\begin{aligned}H' &= -\lambda p_x^4 = -\lambda(p_x^2)^2 = -\lambda[2m\hat{H}^0 - m^2\omega^2 x^2]^2\\ &= -\lambda(4m^2{\hat{H}^0}{}^2 + m^4\omega^4 x^4 - 2m^3\omega^2\hat{H}^0 x^2 - 2m^3\omega^2 x^2\hat{H}^0)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\langle H'\rangle &= -\lambda[4m^2\omega^2\hbar^2(n+\frac{1}{2})^2+\frac{3}{4}m^2\omega^2\hbar^2(2n^2+2n+1)-m^2\omega^2\hbar^2(n+\frac{1}{2})(1+2n)\\
&\quad -m^2\omega^2\hbar^2(n+\frac{1}{2})(1+2n)]\\
&= -\lambda[m^2\omega^2\hbar^2(1+2n)^2+\frac{3}{4}m^2\omega^2\hbar^2(2n^2+2n+1)-m^2\omega^2\hbar^2(1+2n)^2]\\
&= -\frac{3}{4}\lambda m^2\omega^2\hbar^2(2n^2+2n+1)
\end{aligned}
$$

方法二显然比较复杂，所以思想深度很重要!

1.7 2006

一、一个质量为 μ 的粒子被限制在 $-a \leqslant x \leqslant a$ 内运动，$t=0$ 时处于基态。现势阱突然向两边对称地扩展一倍，即在 $-2a \leqslant x \leqslant 2a$ 内运动。问：

（1）$t=t_0(>0)$ 时粒子处于新系统基态的几率；（2）$t=t_0$ 时粒子能量的平均值。

二、一维谐振子的哈密顿量为 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$。在坐标表象中，它的能量本征函数为：

$$\psi_n(x)=N_ne^{\frac{-a^2x^2}{2}}H_n(ax) \qquad a=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

试在动量表象中求出它的能量本征值和相应的本征函数。

三、电子处于自旋 $\vec{S}$ 在方向 $n=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$ 上投影 $\vec{S}\cdot\vec{n}$ 的本征态，本征值为 $\frac{\hbar}{2}$。

（1）求出相应的本征函数；

（2）若在上面的态中，自旋的 x 分量和 y 分量有相等的均方差，请求出方向角 θ,φ。

四、自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子处于磁场 $\vec{B}$ 中，该粒子绕磁场进动的角频率记为 $\omega=-r\vec{B}$。设 $t=0$ 时粒子处于自旋朝下态 $|\psi(0)\rangle=|-\rangle$，求 t 时刻粒子仍处于该态的几率。

五、在谐振子的哈密顿量 $\hat{H}_0=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$ 上加上 x^3 的微扰项 $H'=\lambda x^3$，求能量的二级修正。

六、有一量子力学体系，哈密顿量 $\hat{H}$ 的本征值与本征矢分别为 E_n 与 $|n\rangle$，$\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle$。设 $\hat{F}$ 为任一算符 $\hat{F}=\hat{F}(x,\hat{p})$，试证明：

$$\langle k|[F^+,[H,F]]|k\rangle=\sum_n(E_n-E_k)(|\langle n|\hat{F}|k\rangle|^2+|\langle k|\hat{F}|n\rangle|^2)$$

2006 解答

一、一个质量为 μ 的粒子被限制在 $-a \leqslant x \leqslant a$ 内运动，$t=0$ 时处于基态。现势阱突然向两边对称地扩展一倍，即在 $-2a \leqslant x \leqslant 2a$ 内运动。问：

（1）$t=t_0(>0)$ 时粒子处于新系统基态的几率；（2）$t=t_0$ 时粒子能量的平均值。

解：

（1）未扩展前，本征函数为：

$$\begin{cases} \varphi'(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}(n\text{为偶}), & -a<x<a \\ \varphi'(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}(n\text{为奇}), & -a<x<a \\ \varphi'(x)=0, & x<-a,x>a \end{cases} \qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

基态：$\psi(x,0)=\varphi_1'(x)=\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\dfrac{\pi x}{2a}$，扩展后本征函数为：

$$\begin{cases} \varphi(x)=\frac{1}{\sqrt{2a}}\sin\frac{n\pi x}{4a}(n\text{为偶}), & -2a\leqslant x<2a \\ \varphi(x)=\frac{1}{\sqrt{2a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}(n\text{为奇}), & -2a<x<2a \\ \varphi(x)=0, & x<-2a,x>2a \end{cases}$$

$$\begin{aligned} C_1=\langle\varphi(x)|\psi(x,0)\rangle&=\frac{1}{a\sqrt{2}}\int_{-a}^{a}\cos\frac{\pi x}{4a}\cos\frac{\pi x}{2a}dx=\frac{1}{a\sqrt{2}}\int_{-a}^{a}(1-\sin^2\frac{\pi x}{4a})\cos\frac{\pi x}{4a}dx \\ &=\frac{1}{a\sqrt{2}}\cdot\frac{4a}{\pi}\int_{-a}^{a}(1-\sin^2\frac{\pi x}{4a})d\sin\frac{\pi x}{4a}=\frac{1}{a\sqrt{2}}\cdot\frac{4a}{\pi}(\sin\frac{\pi x}{4a}-\frac{1}{3}\sin^3\frac{\pi x}{4a})\Big|_{-a}^{a}=0 \end{aligned}$$

注：积分范围是按本征函数来的，即范围是 $-2a<x<2a$，但是波函数 $\psi(x,0)$ 在 $x<-a,x>a$ 处为 0，所以积分范围成了 $-a$ 到 a。

故处于新系统基态的概率为：$P=|C_1|^2=0$。

（2）

$$\begin{aligned} \langle H\rangle=\int\psi^*H\psi dx&=\frac{1}{a}\int_{-a}^{a}\cos\frac{\pi x}{2a}(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2})\cos\frac{\pi x}{2a}dx=\frac{1}{a}\cdot(-\frac{\hbar^2}{2m})\cdot(-\frac{\pi}{2a})\int_{-a}^{a}\cos^2\frac{\pi x}{2a}d\frac{\pi x}{2a} \\ &=\frac{1}{a}\cdot(-\frac{\hbar^2}{2m})\cdot(-\frac{\pi}{2a})\left[\frac{1}{2}\frac{\pi x}{2a}+\frac{1}{4}\sin\frac{\pi x}{a}\right]\Big|_{-a}^{a}=\frac{1}{a}\cdot(-\frac{\hbar^2}{2m})\cdot(-\frac{\pi}{2a})\cdot\frac{\pi}{2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \end{aligned}$$

其中：

$$(\cos\frac{\pi x}{2a})'=-\frac{\pi}{2a}\sin\frac{\pi x}{2a} \qquad (\cos\frac{\pi x}{2a})''=-(\frac{\pi}{2a})^2\cos\frac{\pi x}{2a}$$

$$\int\cos^2\theta dx=\frac{1}{2}\int(\cos\theta+1)d\theta=\frac{1}{2}\theta+\frac{1}{4}\int\cos 2\theta=\frac{1}{2}\theta+\frac{1}{4}\sin 2\theta$$

可以看出 $t=t_0$ 时粒子能量的平均值与未扩展前基态能量相同，这是符合物理特性的，突然扩展，态还未来得及改变，只是所处系统能量本征函数系变了。

二、一维谐振子的哈密顿量为 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$。在坐标表象中，它的能量本征函数为：

$$\psi_n(x)=N_ne^{\frac{-a^2x^2}{2}}H_n(ax) \qquad a=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

试在动量表象中求出它的能量本征值和相应的本征函数。

解：P 表象下：

$$\hat{x}=i\hbar\frac{d}{dp}\qquad \hat{H}=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2\mu}\omega^2(-\hbar^2\frac{d^2}{dp^2})$$

定态薛定鄂方程为：

$$(-\frac{\hbar^2}{2}\mu\omega^2\frac{d^2}{dp^2}+\frac{p^2}{2\mu})\varphi(p)=E\varphi(p)$$

两边除以，$\mu^2\omega^2$，有：

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dp^2}+\frac{p^2}{2\mu^3\omega^2})\varphi(p)=\frac{E}{\mu^2\omega^2}\varphi(p)$$

令 $\omega_0=\frac{1}{\mu^2\omega},\lambda=\frac{E}{\mu^2\omega^2}$，有：

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dp^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2p^2)\varphi(p)=\lambda\varphi(p)$$

其形式与 x 表象下，定态薛定鄂方程相同，故其解为：

$$\varphi(p)=Ne^{-\frac{a_0^2x^2}{2}}H_n(a_0x)\qquad a_0=\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}=\sqrt{\frac{\mu}{\hbar}\cdot\frac{1}{\mu^2\omega}}=\sqrt{\frac{1}{\hbar\mu\omega}}$$

$$\lambda=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0\Longrightarrow(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{\mu^2\omega}=\frac{E}{\mu^2\omega^2}\qquad E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

从这也可以看出，无论处于何种表象，算符的本征值是不会变的。

三、电子处于自旋 $\vec{S}$ 在方向 $n=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$ 上投影 $\vec{S}\cdot\vec{n}$ 的本征态，本征值为 $\frac{\hbar}{2}$。

（1）求出相应的本征函数；

（2）若在上面的态中，自旋的 x 分量和 y 分量有相等的均方差，请求出方向角 θ,φ。

解：

（1）要求本征函数应先知道算符是啥！

$$\vec{S}\cdot\vec{n}=\sin\theta\cos\varphi S_x+\sin\theta\sin\varphi S_y+\cos\theta S_z=\frac{\hbar}{2}(\sin\theta\cos\varphi\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\sigma_y+\cos\theta\sigma_z)$$

$$=\frac{\hbar}{2}\left[\sin\theta\cos\varphi\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}+\sin\theta\sin\varphi\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}+\cos\theta\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right]$$

$$=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta&\sin\theta\cos\varphi-i\sin\theta\sin\varphi\\\sin\theta\cos\varphi+i\sin\theta\sin\varphi&-\cos\theta\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta&\sin\theta e^{-i\varphi}\\\sin\theta e^{i\varphi}&-\cos\theta\end{pmatrix}$$

本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的本征方程为：$\vec{S}\cdot\vec{n}\psi=\frac{\hbar}{2}\psi$，设 $\psi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，有：

$$\begin{pmatrix}\cos\theta-1&\sin\theta e^{-i\varphi}\\\sin\theta e^{i\varphi}&-\cos\theta-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&b\end{pmatrix}=0\qquad\begin{cases}a(\cos\theta-1)+b\sin\theta e^{-i\varphi}=0\\a\sin\theta e^{i\varphi}-b(\cos\theta+1)=0\end{cases}$$

$$a=\frac{\sin\theta e^{-i\varphi}}{1-\cos\theta}b=\frac{2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}}{2\sin^2\frac{\theta}{2}}b=\frac{\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}}{\sin\frac{\theta}{2}}b\qquad\frac{a}{b}=\frac{\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}}{\sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}}\qquad\psi=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\\sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

（2）求均方差的形式为：$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - (\langle x\rangle)^2$

$$\langle S_x\rangle = \langle\psi|S_x|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi})$$

$$= \frac{\hbar}{4}\sin\theta(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\varphi$$

其中：$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi \qquad e^{-i\varphi} = \cos\varphi - i\sin\varphi$

$$S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\langle S_x^2\rangle = \langle\psi|S_x^2|\psi\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}(\cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}) = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$(\Delta S_x)^2 = \langle S_x^2\rangle - \langle S_x\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{4}\sin^2\theta\cos^2\varphi$$

$$\langle S_y\rangle = \langle\psi|S_y|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\frac{\hbar}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}i\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}} & -i\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(i\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} - i\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi})$$

$$= \frac{\hbar}{2}i\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}(e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}) = \frac{\hbar}{4}\sin\theta i(-2i\sin\varphi) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\varphi$$

力学量算符的平均值一定为实数，所以无论过程怎么怪异，结果定为实数。

$$S_y^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = S_x^2$$

这是当然的，$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$

$$\langle S_y^2\rangle = \langle S_x^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \qquad (\Delta S_y)^2 = (\frac{\hbar^2}{4} - \frac{\hbar^2}{4}\sin^2\theta\sin^2\varphi)$$

由 $(\Delta S_x)^2 = (\Delta S_y)^2$，有：

$$\sin^2\theta\cos^2\varphi = \sin^2\theta\sin^2\varphi$$

当 $\theta = 0, \pi$ 时，φ 取任意值；当 $\theta \neq 0, \pi$ 时，φ 取 $\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}$。

四、自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子处于磁场 $\vec{B}$ 中，该粒子绕磁场进动的角频率记为 $\omega = -r\vec{B}$。设 $t = 0$ 时粒子处于自旋朝下态 $|\psi(0)\rangle = |-\rangle$，求 t 时刻粒子仍处于该态的几率。

五、在谐振子的哈密顿量 $\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$ 上加上 x^3 的微扰项 $H' = \lambda x^3$，求能量的二级修正。

解：

$$E_n^1 = H'_{nn} \qquad E_n^2 = \sum \frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^0 - E_k^0} \qquad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a_+ + a_-)(a_+ + a_-) = \frac{\hbar}{2m\omega}(a_+^2 + a_-^2 + a_+a_- + a_-a_+)$$

$$\begin{aligned}
\hat{x}^3 &= \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-)(a_+^2 + a_-^2 + a_+a_- + a_-a_+) \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+^3 + a_+a_-^2 + a_+^2a_- + a_+a_-a_+ + a_-a_+^2 + a_-^3 + a_-a_+a_- + a_-^2a_+)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_n^1 &= H'_{nn} = \langle n|\hat{x}^3|n\rangle = 0 \\
\langle n+3|a_+^3|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n+3|a_+^2|n+1\rangle = \sqrt{(n+1)(n+2)}\langle n+3|a_+|n+2\rangle \\
&= \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \\
\langle n-1|a_+a_-^2|n\rangle &= \sqrt{n}\langle n-1|a_+a_-|n-1\rangle = \sqrt{n(n-1)}\langle n-1|a_+|n-2\rangle = (n-1)\sqrt{n} \\
\langle n+1|a_+^2a_-|n\rangle &= \sqrt{n}\langle n+1|a_+^2|n-1\rangle = n\langle n+1|a_+|n\rangle = n\sqrt{n+1} \\
\langle n+1|a_+a_-a_+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n+1|a_+a_-|n+1\rangle = (n+1)\langle n+1|a_+|n\rangle = (n+1)\sqrt{n+1} \\
\langle n+1|a_-a_+^2|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n+1|a_-a_+|n+1\rangle = \sqrt{(n+1)(n+2)}\langle n+1|a_-|n+2\rangle \\
&= (n+2)\sqrt{n+1} \\
\langle n-3|a_-^3|n\rangle &= \sqrt{n}\langle n-3|a_-^2|n-1\rangle = \sqrt{n(n-1)}\langle n-3|a_-|n-2\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)} \\
\langle n-1|a_-a_+a_-|n\rangle &= \sqrt{n}\langle n-1|a_-a_+|n-1\rangle = n\langle n-1|a_-|n\rangle = n\sqrt{n} \\
\langle n-1|a_-^2a_+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n-1|a_-^2|n+1\rangle = (n+1)\langle n-1|a_-|n\rangle = (n+1)\sqrt{n} \\
E_n^2 &= \frac{|H'_{n-1,n}|^2}{E_n^0 - E_{n-1}^0} + \frac{|H'_{n+1,n}|^2}{E_n^0 - E_{n+1}^0} + \frac{|H'_{n-3,n}|^2}{E_n^0 - E_{n-3}^0} + \frac{|H'_{n+3,n}|^2}{E_n^0 - E_{n+3}}
\end{aligned}$$

$$E_n^0 - E_{n-1}^0 = \hbar\omega \quad E_n^0 - E_{n+1}^0 = -\hbar\omega \quad E_n^0 - E_{n-3}^0 = 3\hbar\omega \quad E_n^0 - E_{n+3}^0 = -3\hbar\omega$$

$$\begin{aligned}
H'_{n-1,n} &= \langle n-1|H'|n\rangle = (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}\lambda[(n-1)\sqrt{n} + n\sqrt{n} + (n+1)\sqrt{n}] = 3(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}\lambda n^{\frac{3}{2}} \\
H'_{n+1,n} &= \langle n+1|H'|n\rangle = \lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}[n\sqrt{n+1} + (n+1)\sqrt{n+1} + (n+2)\sqrt{n+1}] \\
&= 3\lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}(n+1)^{\frac{3}{2}} \\
H'_{n-3,n} &= \langle n-3|H'|n\rangle = \lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}\sqrt{n(n-1)(n-2)} \\
H'_{n+3,n} &= \langle n+3|H'|n\rangle = \lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_n^2 &= \frac{9\lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^3 n^3}{\hbar\omega} - \frac{9\lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^3(n+1)^3}{\hbar\omega} + \frac{\lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^3 n(n-1)(n-2)}{3\hbar\omega} - \frac{\lambda(\frac{\hbar}{2m\omega})^3(n+1)(n+2)(n+3)}{3\hbar\omega} \\
&= \frac{\lambda\hbar 62}{8m^3\omega^4}(-29n^2 - 27n - 27)
\end{aligned}$$

能量的二级修正为：

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega + \frac{\lambda\hbar 62}{8m^3\omega^4}(-29n^2 - 27n - 27)$$

六、有一量子力学体系，哈密顿量 $\hat{H}$ 的本征值与本征矢分别为 E_n 与 $|n\rangle$，$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$。设 $\hat{F}$ 为任一算符 $\hat{F} = \hat{F}(x, \hat{p})$，试证明：

$$\langle k|[F^+, [H, F]]|k\rangle = \sum_n (E_n - E_k)(|\langle n|\hat{F}|k\rangle|^2 + |\langle k|\hat{F}|n\rangle|^2)$$

证明：

$$[H, F] = HF - FH$$

$$[F^+, [H, F]] = F^+HF - F^+FH - HFF^+ + FHF^+$$

$$\langle k|F^+HF|k\rangle = \langle k|F^+H\sum_n |n\rangle\langle n|F|k\rangle = \sum_n E_n\langle k|F^+|n\rangle\langle n|F|k\rangle$$

$$\langle k|FHF^+|k\rangle = \langle k|FH\sum_n |n\rangle\langle n|F^+|k\rangle = \sum_n E_n\langle k|F|n\rangle\langle n|F^+|k\rangle$$

$$\langle k|F^+FH|k\rangle = \langle k|F^+\sum_n |n\rangle\langle n|FH|K\rangle = \sum_n E_k\langle k|F^+|n\rangle\langle n|F|K\rangle$$

$$\langle k|HFF^+|k\rangle = \langle k|HF\sum_n |n\rangle\langle n|F^+|k\rangle = \sum_n E_k\langle k|F|n\rangle\langle n|F^+|k\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle k|[F^+, [H, F]]|k\rangle &= \sum_n (E_n - E_k)\langle K|F^+|n\rangle\langle n|F|K\rangle + \sum_n (E_n - E_k)\langle k|F|n\rangle\langle n|F^+|k\rangle \\ &= \sum_n (E_n - E_k)(\langle k|F^+|n\rangle\langle n|F|k\rangle + \langle k|F|n\rangle\langle n|F^+|k\rangle) \\ &= \sum_n (E_n - E_k)(|\langle n|F|k\rangle|^2 + |\langle k|F|n\rangle|^2)\end{aligned}$$

1.8 2006 甲 A

一、$(30')$两个线性算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 满足下列关系：$\hat{A}^2 = 0, \quad \hat{A}\hat{A}^\dagger + \hat{A}^\dagger\hat{A} = 1, \quad \hat{B} = \hat{A}^\dagger\hat{A}$。

(1) 求证 $\hat{B}^2 = \hat{B}$；

(2) 求在 $\hat{B}$ 表象中 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的表达式。

二、$(30')$ 粒子在势场 $V(x) = A|x|^n \quad (-\infty < x < \infty, A > 0)$ 中运动，试用不确定度关系估算基态能量。

三、$(30')$ 设体系的哈密顿量 $\hat{H}$ 从依赖于某一参量 λ，又设体系处于某一束缚定态，其能量和本征函数分别记为 E_n 和 $\psi_n(r)$。

(1) 证明费曼——海尔曼定理：

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \int \psi_n^*(\vec{r}) \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n(\vec{r}) d\vec{r}$$

(2) 利用费曼——海尔曼定理，求氢原子各束缚态的平均动能。

(提示：氢原子能级公式 $E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$)

四、$(30')$ 粒子在二维无限深方势阱中运动，$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < a \\ \infty, & \text{其他} \end{cases}$。加上微扰 $H' = \lambda xy$ 后，求基态和第一激发态能级的一级微扰修正。

五、$(30')$ 设粒子所处的外场均匀但与时间有关。即 $V = V(t)$，与坐标 $\vec{r}$ 无关。试将体系的含时薛定鄂方程分离变量，求方程解 $\psi(\vec{r}, t)$ 的一般形式，并取 $V(t) = V_0 \cos(\omega t)$，以一维情况为例说明 $V(t)$ 的影响是什么。

2006 甲 A 解答

一、(30′)两个线性算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 满足下列关系：$\hat{A}^2=0,\quad \hat{A}\hat{A}^\dagger+\hat{A}^\dagger\hat{A}=1,\quad \hat{B}=\hat{A}^\dagger\hat{A}$。

(1) 求证 $\hat{B}^2=\hat{B}$;

(2) 求在 $\hat{B}$ 表象中 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的表达式。

证：

(1)

$$\hat{B}^2=\hat{A}^\dagger\hat{A}\hat{A}^\dagger\hat{A}=\hat{A}^\dagger(1-\hat{A}^\dagger\hat{A})\hat{A}=\hat{A}^\dagger(\hat{A}-\hat{A}^\dagger\hat{A}^2)=\hat{A}^\dagger\hat{A}=\hat{B}\qquad(\hat{A}^2=0)$$

(2) 充分利用好上下条件，第一问就是第二问的条件，也提供了第二问的思路。这是出题人为降低难度故意设的吧。

$\hat{B}^2=\hat{B},\quad \hat{B}^2-\hat{B}=0$，设 $\hat{B}|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$，$\lambda^2-\lambda=0,\quad \lambda=0,\quad \lambda=1$，有：

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

线性代数的内容，是这样吗？觉得有些问题。$\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$ 是等效的??????

设 $\hat{A}=\begin{pmatrix}a&c\\b&d\end{pmatrix}$，

$$\hat{A}^\dagger\hat{A}=\begin{pmatrix}a^*&c^*\\b^*&d^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&c\\b&d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a^*a+b^*b&a^*c+b^*d\\c^*a+d^*b&c^*c+d^*d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}\qquad a=0,b=0$$

$$\hat{A}^2=0\qquad\begin{pmatrix}0&c\\0&d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&c\\0&d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&cd\\0&d^2\end{pmatrix}=0\qquad \text{又}c^*c+d^*d=1$$

$$d=0\quad c^*c=1\quad A=\begin{pmatrix}0&e^{i\varphi}\\0&0\end{pmatrix}$$

二、(30′) 粒子在势场 $V(x)=A|x|^n\quad(-\infty<x<\infty,A>0)$ 中运动，试用不确定度关系估算基态能量。

解：

$$E\approx\frac{(\Delta p)^2}{2m}+A(\Delta x)^n\approx\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{(\Delta x)^2}+A(\Delta x)^n\qquad\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{2}$$

E 是关于 Δx 的函数，要算基态能量就是要找到 E 的最小值(极小值)。于是：$\frac{\partial E}{\partial\Delta x}=0$，求出 Δx。

$$\frac{\partial E}{\partial\Delta x}=-2\cdot\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{(\Delta x)^3}+An(\Delta x)^{n-1}=0\qquad An(\Delta x)^{n+2}=\frac{\hbar^2}{4m}$$

$$\Delta x=\left(\frac{\hbar^2}{4mAn}\right)^{\frac{1}{n+2}}\qquad\text{或}(\Delta x)^{n+2}=\frac{\hbar^2}{4mAn}$$

$$E \approx \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)^{-\frac{2}{n+2}} + A\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)^{\frac{n}{n+2}} = \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)^{-\frac{2}{n+2}} + A\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)^{-\frac{2}{n+2}}$$
$$= \left(\frac{\hbar^2}{8m} + \frac{\hbar^2}{4mn}\right)\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)^{-\frac{2}{n+2}} = \frac{n+2}{2}\left(\frac{\hbar^2}{4mn}\right)\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)^{-\frac{2}{n+2}} = \frac{n+2}{2}A\left(\frac{\hbar^2}{4mnA}\right)^{\frac{n}{n+2}}$$
$$= \frac{n+2}{2}\left(\frac{\hbar^2}{4mn}\frac{A^{\frac{n+2}{n}}}{A}\right)^{\frac{n}{n+2}} = \frac{n+2}{2}\left(\frac{\hbar^2 A^{\frac{2}{n}}}{4mn}\right)^{\frac{n}{n+2}}$$

感觉这题很无聊，想必是在某个问题讨论的某篇论文里抽取的！

三、(30′) 设体系的哈密顿量 $\hat{H}$ 从依赖于某一参量 λ，又设体系处于某一束缚定态，其能量和本征函数分别记为 E_n 和 $\psi_n(r)$。

(1) 证明费曼——海尔曼定理：

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \int \psi_n^*(\vec{r})\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\psi_n(\vec{r})d\vec{r}$$

(2) 利用费曼——海尔曼定理，求氢原子各束缚态的平均动能。

(提示：氢原子能级公式 $E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$)

证：

(1)

一般表示：

能量本征方程为，$\hat{H}\psi_n(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r})$，两边对 λ 求导：

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\psi_n + \hat{H}\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}\psi_n + E_n\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}$$

两边左乘 ψ_n^* 并全空间积分为：

$$\int \psi_n^*\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\psi_n d\vec{r} + \int \psi_n^*\hat{H}\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}d\vec{r} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}\int \psi_n^*\psi_n d\vec{r} + E_n\int \psi_n^*\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}d\vec{r}$$

由 $\int \psi_n^*\psi_n = 1$，$\int \psi^*\hat{H}\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}d\vec{r} = \int(\hat{H}\psi_n)^*\frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}d\vec{r} = E_n\int \psi_n^*\frac{\partial \psi_n^*}{\partial \lambda}d\vec{r}$，有：

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \int \psi_n^*\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}\psi_n d\vec{r}$$

狄拉克表示：

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}|n\rangle$$

能量本征方程为，$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$，两边对 λ 求导：

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}|n\rangle + \hat{H}\frac{\partial}{\partial \lambda}|n\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}|n\rangle + E_n\frac{\partial}{\partial \lambda}|n\rangle$$

两边左乘 $\langle n|$ 为：

$$\langle n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}|n\rangle + \langle n|\hat{H}\frac{\partial}{\partial \lambda}|n\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}\langle n|n\rangle + E_n\langle n|\frac{\partial}{\partial \lambda}|n\rangle$$

由 $\langle n|n\rangle = 1, \langle n|\hat{H} = E_n\langle n|$，有：

$$\langle n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}|n\rangle + E_n\langle n|\frac{\partial}{\partial \lambda}|n\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} + E_n\langle n|\frac{\partial}{\partial \lambda}|n\rangle$$

即：

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}|n\rangle$$

看到狄拉克符号的好处吧，简洁明了。这也是形式突出重点，突出思路的经典一例。

（2）

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})$$

取 $\hbar$ 为参量：

$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}=\langle n|\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hbar}|n\rangle=\langle n|-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2|n\rangle=\frac{2}{\hbar}\langle n|-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla|n\rangle=\frac{2}{\hbar}\langle T\rangle_n$$

又 $E_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$， $\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}=\frac{\mu e^4}{\hbar^3}\cdot\frac{1}{n^2}$，有：

$$\frac{2}{\hbar}\langle T\rangle_n=\frac{\mu e^4}{\hbar^3}\cdot\frac{1}{n^2}\qquad \langle T\rangle_n=\frac{\mu e^4}{2\hbar}\cdot\frac{1}{n^2}=-E_n$$

四、(30′) 粒子在二维无限深方势阱中运动，$V=\begin{cases}0, & 0<x<a,0<y<a\\ \infty, & 其他\end{cases}$。加上微扰 $H'=\lambda xy$ 后，求基态和第一激发态能级的一级微扰修正。

解：

$$\psi_n^0=\frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi x}{a}\qquad E_n^0=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2)$$

$$\psi_1^0=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}\qquad E_1^0=\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

$$E_1^1=\langle\psi_1^0|H'|\psi_1^0\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{\pi y}{a}dy=\frac{4\lambda}{a^2}\cdot\frac{a^2}{4}\cdot\frac{a^2}{4}=\frac{\lambda a^2}{4}$$

ψ_2^0 有简并，$n_1=1,n_2=2$ 或 $n_1=2,n_1=1$，即：

$$\phi_1=\psi_{21}^0=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}\quad 或\quad \phi_2=\psi_{22}^0=\frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}\qquad E_2^0=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

微扰矩阵元为：

$$H'_{11}=H'_{22}=\langle\phi_1|H'|\phi_1\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{2\pi y}{a}dy$$

$$H'_{21}=H'_{12}=\langle\phi_1|H'|\phi_2\rangle=\frac{4\lambda}{a}\int_0^a x\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}dy=\frac{2^8\lambda a^2}{3^4\pi^4}=B$$

$$\begin{vmatrix}A-E' & B\\ B & A-E'\end{vmatrix}=0$$

$$E_{21}^1=A-B=(\frac{1}{4}-\frac{2^8}{3^4\pi^4})\lambda a^2\qquad E_{22}^1=A+B=(\frac{1}{4}+\frac{2^8}{3^4\pi^4})\lambda a^2$$

????????????? 未完???

五、(30′) 设粒子所处的外场均匀但与时间有关。即 $V=V(t)$，与坐标 $\vec{r}$ 无关。试将体系的含时薛定鄂方程分离变量，求方程解 $\psi(\vec{r},t)$ 的一般形式，并取 $V(t)=V_0\cos(\omega t)$，以一维情况为例说明 $V(t)$ 的影响是什么。

解：

薛定鄂方程为：

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

将 $\psi(\vec{r},t)$ 分离变量，$\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\psi(t)$，有：

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

左右两边除以 $\psi(\vec{r})\psi(t)$ 得：

$$i\hbar\frac{\psi'(t)}{\psi(t)}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}+V(t)\qquad i\hbar\frac{\psi'(t)}{\psi(t)}-V(t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(\vec{r})}{\psi\vec{r}}$$

$\vec{r},t$ 是彼此无关的变量，而等式要成立，说明各自相关的式子的值为共同的常数，令为 a，有：

$$i\hbar\frac{\psi'(t)}{\psi(t)}-V(t)=a\qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(\vec{r})}{\psi(r)}=a$$

对于 $i\hbar\frac{\psi'(t)}{\psi(t)}-V(t)=a$，有：

$$i\hbar\frac{\psi'(t)}{\psi(t)}=a+V(t)\quad i\hbar\ln\psi(t)=\int(a+V(t))dt\quad i\hbar\ln\psi(t)=at+\int V(t)dt$$

$$\ln\psi(t)=\frac{at+\int V(t)dt}{i\hbar}\qquad \psi(t)=e^{-\frac{i(at+\int V(t)dt)}{\hbar}}=e^{-\frac{iat}{\hbar}-\frac{i\int V(t)dt}{\hbar}}$$

对于 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}=a$，有：

$$\psi''(x)+\frac{2ma}{\hbar^2}\psi(x)=0\qquad 令k^2=\frac{2ma}{\hbar}$$

??????????????? 这个过程的思路与求定态薛定鄂方程的思路是一样的。

1.9 2006 甲 B

一、(30′) 已知谐振子处于第 n 个定态中，试导出算符 $\hat{x}, \hat{p}, (\hat{x})^2, (\hat{p})^2$ 的平均值及不确定度 $\Delta x, \Delta p$，并求出 $\Delta x \cdot \Delta p$ 值。

二、(30′) 设 $\hat{\mu}$ 为幺正算符，若存在两个厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 使 $\hat{\mu} = \hat{A} + i\hat{B}$。试证：

(1) $\hat{A}^2 + \hat{B}^2 = 1$，且 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$；

(2) 进一步再证明 $\hat{\mu}$ 可表示成 $\hat{\mu} = e^{i\hat{H}}$，$\hat{H}$ 为厄米算符。

三、(30′) 一个质量为 m 的粒子被限制在 $0 \leqslant x \leqslant a$ 的一维无穷深势阱中。初始时刻其归一化波函数为 $\psi(x,0) = \sqrt{\frac{8}{5a}}(1 + \cos\frac{\pi x}{a})\sin\frac{\pi x}{a}$，求：

(1) $t > 0$ 时粒子的状态波函数；

(2) 在 $t = 0$ 与 $t > 0$ 时在势阱的左半部发现粒子的概率是多少?

四、(30′) 粒子在一维无限深方势阱中运动，受到微扰 $H' = \frac{V_0}{a}(a - |2x - a|)$ 的作用。求第 n 个能级的一级近似，并分析所的结果的适用条件。

五、一个质量为 m 的粒子被限制在 $r = a$ 和 $r = b$ 的两个不可穿透的同心球面之间运动, 不存在其它势。求粒子的基态能量和归一化的波函数。

2006 甲 B 解答

一、(30′)已知谐振子处于第 n 个定态中，试导出算符 $\hat{x}, \hat{p}, (\hat{x})^2, (\hat{p})^2$ 的平均值及不确定度 $\Delta x, \Delta p$，并求出 $\Delta x \cdot \Delta p$ 值。

解：

谐振子的定态为对称本征态，$\langle \hat{x} \rangle = 0, \langle \hat{p} \rangle = 0$。由位力定理，$2\langle V \rangle = 2\langle T \rangle = E_n$，有：

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2}) \qquad \langle p^2 \rangle = (n+\frac{1}{2})m\omega\hbar$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})} \qquad \Delta p = \sqrt{(n+\frac{1}{2})m\omega\hbar}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

二、(30′)设 $\hat{\mu}$ 为幺正算符，若存在两个厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 使 $\hat{\mu} = \hat{A} + i\hat{B}$。试证：

(1) $\hat{A}^2 + \hat{B}^2 = 1$，且 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$；

(2) 进一步再证明 $\hat{\mu}$ 可表示成 $\hat{\mu} = e^{i\hat{H}}$，$\hat{H}$ 为厄米算符。

解：

(1) 幺正算符满足：$S^\dagger S = SS^\dagger = 1$，有：

$$\mu^\dagger \mu = (\hat{A} - i\hat{B})(\hat{A} + i\hat{B}) = \hat{A}^2 + i\hat{A}\hat{B} - i\hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 = 1$$

$$\mu\mu^\dagger = (\hat{A} + i\hat{B})(\hat{A} - i\hat{B}) = \hat{A}^2 - i\hat{A}\hat{B} + i\hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 = 1$$

两式相减，有：

$$2i\hat{A}\hat{B} - 2i\hat{B}\hat{A} = 0 \qquad \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \qquad [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \qquad \hat{A}^2 + \hat{B}^2 = 1$$

另一种表述来的更明显，所以要主要数学表述，突出重点：

$$\mu^\dagger \mu = (\hat{A} - i\hat{B})(\hat{A} + i\hat{B}) = \hat{A}^2 + i\hat{A}\hat{B} - i\hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 + i[\hat{A}, \hat{B}] = 1$$

$$\mu\mu^\dagger = (\hat{A} + i\hat{B})(\hat{A} - i\hat{B}) = \hat{A}^2 - i\hat{A}\hat{B} + i\hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 = \hat{A}^2 + \hat{B}^2 - i[\hat{A}, \hat{B}] = 1$$

是不是一目了然！

(2)

算符是类似微分样的“作用”，我不知道指数形式 $e^{i\hat{H}}$ 的算符有什么物理意义？

由 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0, \hat{A}, \hat{B}$ 为厄米算符，知：$\hat{A}, \hat{B}$ 存在共同本征函数 ϕ_n。设 $\hat{A}\phi_n = a_n\phi_n$，$\quad B\phi_n = b_n\phi_n$，又 $\hat{A}^2 + \hat{B}^2 = 1$，有：

$$\hat{A}^2\phi_n + \hat{B}^2\phi_n = \phi_n \qquad a_n^2 + b_n^2 = 1$$

令 $a_n = \cos\chi_n \qquad b_n = \sin\chi_n$，有：

$$\hat{\mu}\phi_n = (\hat{A} + i\hat{B})\phi_n = (\cos\xi_n + i\sin\xi_n)\phi_n = e^{i\xi_n}\phi_n$$

若定义厄米算符 $\hat{H}$ 使 $\hat{H}\psi_n = \xi_n\psi$，则必有 $\hat{\mu} = e^{i\hat{H}}$ 为幺正算符。

曾题集 p91,4.21 没看懂?????? $\hat{H}$ 为一种类似 $\frac{d}{dx}$ 微分的作用，这作用跑到 $e^{i\hat{H}}$ 中，用起来怎么用呢？

三、(30′)一个质量为 m 的粒子被限制在 $0 \leqslant x \leqslant a$ 的一维无穷深势阱中。初始时

刻其归一化波函数为 $\psi(x,0)=\sqrt{\frac{8}{5a}}(1+\cos\frac{\pi x}{a})\sin\frac{\pi x}{a}$，求：

（1）$t>0$ 时粒子的状态波函数；

（2）在 $t=0$ 与 $t>0$ 时在势阱的左半部发现粒子的概率是多少？

解：用该系统的本征函数表示 $\psi(x,0)$，一般都要这样处理，便于问题的讨论，而且直观。

该无限深势阱的本函数及本征值为：

$$\phi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\begin{aligned}\psi(x,0)&=\sqrt{\frac{8}{5a}}(1+\cos\frac{\pi x}{a})\sin\frac{\pi x}{a}=\sqrt{\frac{8}{5a}}(\sin\frac{\pi x}{a}+\cos\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi x}{a})\\&=\sqrt{\frac{4}{5}}\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}+\sqrt{\frac{8}{5a}}\frac{1}{2}\sin\frac{2\pi x}{a}=\sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1+\sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2\end{aligned}$$

（1）

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1e^{\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2e^{\frac{iE_2t}{\hbar}}\qquad 其中：E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\quad E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

（2）

在 $t=0$ 时刻，

$$\rho(0)=|\psi(x,0)|^2=(\sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1+\sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2)^2=\frac{4}{5}\phi_1^2+\frac{1}{5}\phi_2^2+\frac{4}{5}\phi_1\phi_2$$

左半部发现粒子概率为：

$$\begin{aligned}P(0)&=\int_0^{\frac{a}{2}}\rho(0)dx=\frac{4}{5}\cdot\frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2(\frac{\pi x}{a})dx+\frac{1}{5}\cdot\frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2(\frac{2\pi x}{a})dx+\frac{4}{5}\cdot\frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}dx\\&=\frac{4}{5}\cdot\frac{2}{a}\cdot\frac{a}{4}+\frac{1}{5}\cdot\frac{2}{a}\cdot\frac{a}{4}+\frac{4}{5}\cdot\frac{2}{a}\cdot\frac{2a}{3\pi}=\frac{1}{2}+\frac{16}{15\pi}\end{aligned}$$

其中：

$$\int\sin^2 nx dx=\int\frac{1-\cos 2nx}{2}dx=\frac{1}{2}x-\frac{1}{4n}\sin 2nx$$

$$\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2(\frac{\pi}{a}x)dx=\frac{1}{2}x\Big|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{1}{4}\cdot\frac{a}{\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}\Big|_0^{\frac{a}{2}}=\frac{a}{4}$$

$$\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2(\frac{2\pi}{a}x)dx=\frac{1}{2}x\Big|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{1}{4}\cdot\frac{a}{2\pi}\sin\frac{4\pi x}{a}\Big|_0^{\frac{a}{2}}=\frac{a}{4}$$

$$\int\sin nx\sin 2nxdx=2\int\sin^2 nx\cos nxdx=\frac{2}{n}\int\sin^2 nxd\sin nx=\frac{2}{3n}\sin^3 nx$$

$$\int_0^{\frac{a}{2}}\sin\frac{\pi}{a}x\sin\frac{2\pi x}{a}dx=\frac{2}{3}\cdot\frac{a}{\pi}\sin^3\frac{\pi x}{a}\Big|_0^{\frac{a}{2}}=\frac{2a}{3\pi}$$

在 $t>0$ 时刻，

$$\begin{aligned}\rho(t)&=|\psi(x,t)|^2=\psi^*(x,t)\psi(x,t)=(\sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}})(\sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1e^{\frac{iE_1t}{\hbar}}+\sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2e^{i\frac{E_2t}{\hbar}})\\&=\frac{4}{5}\phi_1^2+\frac{1}{5}\phi_2^2+\frac{4}{5}\phi_1\phi_2\cos\frac{t}{\hbar}(E_2-E_1)\end{aligned}$$

左半部发现粒子的概率为：

$$P(t)=\int_0^{\frac{a}{2}}\rho(t)=\frac{1}{2}+\frac{16}{15\pi}\cos\frac{3\pi^2\hbar t}{2ma^2}\qquad 其中：E_2-E_1=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}-\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

计算可以直接用 $t=0$ 时刻的结论。

四、(30′) 粒子在一维无限深方势阱中运动，受到微扰 $H'=\frac{V_0}{a}(a-|2x-a|)$ 的作用。求第 n 个能级的一级近似，并分析所的结果的适用条件。

解：缺图

当 $2x-a>0$，即：$x>\frac{a}{2}$ 时，$H'=\frac{V_0}{a}(a-2x+a)=-\frac{2V_0}{a}x+2V_0$；

当 $2x-a<0$，即：$x<\frac{a}{2}$ 时，$H'=\frac{V_0}{a}(a+2x-a)=\frac{2V_0}{a}x$；

当 $2x-a=0$，即：$x=\frac{a}{2}$ 时，$H'=V_0$。

$$\phi_n^0=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad E_n^0=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$E_n^1=\langle\phi_n^0|H'|\phi_n^0\rangle=\frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}}(-\frac{2V_0}{a}x+2V_0)\sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx+\frac{2}{a}\int_{\frac{a}{2}}^{a}\frac{2V_0}{a}x\sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx$$

$$=-\frac{4V_0}{a^2}\int_0^{\frac{a}{2}}x\sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx+\frac{4V_0}{a^2}\int_{\frac{a}{2}}^{a}x\sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx+\frac{4V_0}{a}\int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx$$

$$=\begin{cases}-\frac{4V_0}{a^2}(\frac{a^2}{16}+\frac{a^2}{4n^2\pi^2})+\frac{4V_0}{a^2}(\frac{3a^2}{16}-\frac{a^2}{4n^2\pi^2})+V_0, & n\text{为奇}\\ -\frac{4V_0}{a^2}\cdot\frac{a^2}{16}+\frac{4V_0}{a^2}\cdot\frac{3a^2}{16}+V_0, & n\text{为偶}\end{cases}=\begin{cases}\frac{3V_0}{2}-\frac{2V_0}{n^2\pi^2}, & n\text{为奇}\\ \frac{3V_0}{2}, & n\text{为偶}\end{cases}$$

其中

$$\int\sin^2 px dx=\frac{1}{2}x-\frac{1}{4p}\sin 2px\qquad \int_0^{\frac{a}{2}}\sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx=\frac{1}{2}x\Big|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{1}{4}\cdot\frac{a}{n\pi}\sin\frac{2n\pi}{a}x\Big|_0^{\frac{a}{2}}=\frac{a}{4}$$

$$\int x\sin^2 px dx=\frac{x^2}{4}-\frac{x}{4p}\sin 2px-\frac{1}{8p^2}\cos 2px$$

$$\int_0^{\frac{a}{2}}x\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx=\frac{x^2}{4}\Big|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{x}{4}\cdot\frac{a}{n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\Big|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{1}{8}(\frac{a}{n\pi})^2\cos\frac{2n\pi x}{a}\Big|_0^{\frac{a}{2}}=\begin{cases}\frac{a^2}{16}+\frac{a^2}{4n^2\pi^2}, & n\text{为奇数}\\ \frac{a^2}{16}, & n\text{为偶数}\end{cases}$$

$$\int_{\frac{a}{2}}^{a}x\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx=\frac{x^2}{4}\Big|_{\frac{a}{2}}^{a}-\frac{x}{4}\cdot\frac{a}{n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\Big|_{\frac{a}{2}}^{a}-\frac{1}{8}(\frac{a}{n\pi})^2\cos\frac{2n\pi x}{a}\Big|_{\frac{a}{2}}^{a}$$

$$=\frac{3a^2}{16}-\frac{1}{8}(\frac{a}{n\pi})^2(\cos 2n\pi-\cos n\pi)=\begin{cases}\frac{3a^2}{16}-\frac{a^2}{4n^2\pi^2}, & n\text{为奇}\\ \frac{3a^2}{16}, & n\text{为偶}\end{cases}$$

$$E_n=E_n^0+E_n^1=\begin{cases}\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}-\frac{2V_0}{n^2\pi^2}+\frac{3V_0}{2}, & n\text{为奇}\\ \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\frac{3V_0}{2}, & n\text{为偶}\end{cases}$$

适用条件，$\left|\frac{H'_{mn}}{E_n^0-E_m^0}\right|\ll 1$，即：$V_0\ll 0$。

五、一个质量为 m 的粒子被限制在 $r=a$ 和 $r=b$ 的两个不可穿透的同心球面之间运动，不存在其它势。求粒子的基态能量和归一化的波函数。

与2007 年 A 第五题相同。

1.10 2006 乙 A

一、（$30'$）粒子以能量 E 入射方势垒，$V(x)=\begin{cases}V_0>0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0,x>0\end{cases}$。设能量 $E>V_0$，求透射系数 T。

二、（$30'$）自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子置于势场 $V(x)$ 中，$V(x)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x<a\\ \infty, & x<0,x>a\end{cases}$。设粒子所处状态为 $\psi(x,s_z)=\sqrt{\frac{5}{18}}\varphi_3(x)\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}+\sqrt{\frac{2}{9}}\varphi_5(x)\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$，其中 $\varphi_n(x)$ 为系统空间部分的第 n 个能量本征函数（已归一化）。求能量的可测值及相应的取值概率。

三、用不确定度关系估算一维谐振子的基态能量。

四、（$30'$）各向同性的三维谐振子哈密顿算符为 $\hat{H}^0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{m\omega^2}{2}r^2$。加上微扰 $\hat{H}'=\lambda(xy+yz+zx)$ 后，求第一激发态的一级能量修正。

五、（$30'$）自旋为 $\frac{1}{2}$，磁矩为 μ，电荷为零的粒子置于磁场中。$t=0$ 是磁场为 $\vec{B}_0=(0,0,B_0)$，粒子处于 $\hat{\sigma}_z$ 的本征值为 -1 的本征态 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$。设在 $t>0$ 时，再加上弱磁场 $\vec{B}_1=(B_1,0,0)$，求 $t>0$ 时的波函数，以及测到自旋反转的概率。

2006 乙 A 解答

一、[15]（30′）粒子以能量 E 入射方势垒，$V(x)=\begin{cases}V_0>0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0,x>0\end{cases}$。设能量 $E>V_0$，求透射系数 T。

解：完完全全教材内容，见曾书 P74，3.3.1 。

二、[16]（30′）自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子置于势场 $V(x)$ 中，$V(x)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x<a\\ \infty, & x<0,x>a\end{cases}$。设粒子所处状态为 $\psi(x,s_z)=\sqrt{\frac{5}{18}}\varphi_3(x)\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}+\sqrt{\frac{2}{9}}\varphi_5(x)\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$，其中 $\varphi_n(x)$ 为系统空间部分的第 n 个能量本征函数（已归一化）。求能量的可测值及相应的取值概率。

解：改写 $\psi(x,s_z)$ 为：

$$\begin{aligned}\psi(x,s_z)&=\sqrt{\frac{5}{18}}\varphi_3(x)\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}+\sqrt{\frac{2}{9}}\varphi_5(x)\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}\\&=\sqrt{\frac{5}{18}}\varphi_3(x)\alpha-i\sqrt{\frac{5}{18}}\varphi_3(x)\beta+\sqrt{\frac{2}{9}}\varphi_5(x)\alpha+i\sqrt{\frac{2}{9}}\varphi_5(x)\beta\end{aligned}$$

该势场能量本征值为：$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$；能量的可测值及相应的概率分别为：

$$\begin{array}{ll}E_3 & |\langle\varphi_3\alpha|\psi\rangle|^2+|\langle\varphi_3\beta|\psi\rangle|^2=\dfrac{5}{18}+\dfrac{5}{18}=\dfrac{5}{9}\\ E_5 & |\langle\varphi_5\alpha|\psi\rangle|^2+|\langle\varphi_5\beta|\psi\rangle|^2=\dfrac{2}{9}+\dfrac{2}{9}=\dfrac{4}{9}\end{array}$$

三、用不确定度关系估算一维谐振子的基态能量。

解：

$$\langle x\rangle=\langle p\rangle=0\qquad(\Delta x)^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\langle x^2\rangle\qquad(\Delta p)^2=\langle p^2\rangle$$

不确定关系：$\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$，有：

$$\langle E\rangle=\frac{\langle p^2\rangle}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle=\frac{(\Delta p)^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2\geqslant2\sqrt{\frac{(\Delta p)^2}{2m}\cdot\frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2}=\omega\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar\omega}{2}$$

即：基态能量为 $\frac{\hbar\omega}{2}$。

四、（30′）各向同性的三维谐振子哈密顿算符为 $\hat{H}^0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{m\omega^2}{2}r^2$。加上微扰 $\hat{H}'=\lambda(xy+yz+zx)$ 后，求第一激发态的一级能量修正。

五、（30′）自旋为 $\frac{1}{2}$，磁矩为 μ，电荷为零的粒子置于磁场中。$t=0$ 是磁场为 $\vec{B}_0=(0,0,B_0)$，粒子处于 $\hat{\sigma}_z$ 的本征值为 -1 的本征态 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$。设在 $t>0$ 时，再加上弱磁场 $\vec{B}_1=(B_1,0,0)$，求 $t>0$ 时的波函数，以及测到自旋反转的概率。

方法一（精确求解）：

[15]同类型题见：2006 乙 B 第一题

[16]同类型题见：2006 乙 B 第三题

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = -\mu B_0 \sigma_z - \mu B_1 \sigma_x = \begin{pmatrix} -\mu B_0 & 0 \\ 0 & \mu B_0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \mu B_1 \\ \mu B_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mu B_0 & -\mu B_1 \\ -\mu B_1 & \mu B_0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} -\mu B_0 - \lambda & -\mu B_1 \\ -\mu B_1 & \mu B_0 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\mu^2 B_1^2 - (-\mu B_0 - \lambda)(\mu B_0 - \lambda) = 0 \qquad \mu^2 B_1^2 + \mu^2 B_0^2 - \lambda^2 = 0 \qquad \lambda = \pm \mu \sqrt{B_1^2 + B_0^2}$$

$$\begin{pmatrix} -\mu B_0 \mp \mu \sqrt{B_0^2 + B_1^2} & -\mu B_1 \\ -\mu B_1 & \mu B_0 \mp \mu \sqrt{B_0^2 + B_1^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} -B_0 \mp \sqrt{B_0^2 + B_1^2} & -B_1 \\ -B_1 & B_0 \mp \sqrt{B_0^2 + B_1^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{cases} -(B_0 \mp \sqrt{B_0^2 + B_1^2})a - B_1 b = 0 \\ -B_1 a + (B_0 \mp \sqrt{B_0^2 + B_1^2})b = 0 \end{cases} \qquad a = \frac{B_1}{-B_0 \mp \sqrt{B_0^2 + B_1^2}} b$$

当 $\lambda = \mu\sqrt{B_0^2 + B_1^2}$ 时，b 取 $B_0 + \sqrt{B_0^2 + B_1^2}$，则本征态为：$\begin{pmatrix} -B_1 \\ B_0 + \sqrt{B_0^2 + B_1^2} \end{pmatrix}$（未归一化）；当 $\lambda = -\mu\sqrt{B_0^2 + B_1^2}$ 时，b 取 $\sqrt{B_0^2 + B_1^2} - B_0$，则本征态为：$\begin{pmatrix} B_1 \\ \sqrt{B_0^2 + B_1^2} - B_0 \end{pmatrix}$（未归一化）。

令 $\mu B_1 = \hbar\omega_1, \mu B_0 = \hbar\omega_0, \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} = \omega, \pm\mu\sqrt{B_0^2 + B_1^2} = \mp\hbar\omega$，于是有：

$$E_1 = \hbar\omega, \quad \phi_1 = \begin{pmatrix} -\omega_1 \\ \omega + \omega_0 \end{pmatrix} = -\omega_1 \alpha + (\omega + \omega_0)\beta$$

$$E_2 = -\hbar\omega, \quad \phi_2 = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega - \omega_0 \end{pmatrix} = \omega_1 \alpha + (\omega - \omega_2)\beta$$

其中 ϕ_1, ϕ_2 未归一化。

将 $t = 0$ 时初始波函数按能量本征函数展开，得：

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\omega}(\phi_1 + \phi_2)$$

$$
\begin{aligned}
\psi(t) &= \frac{1}{2\omega}(\phi_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \phi_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}) = \frac{1}{2\omega}(\phi_1 e^{-i\omega t} + \phi_2 e^{i\omega t}) \\
&= \frac{1}{2\omega}\{[-\omega_1\alpha + (\omega+\omega_0)\beta](\cos\omega t - i\sin\omega t) + [\omega_1\alpha + (\omega-\omega_0)\beta](\cos\omega t + i\sin\omega t)\} \\
&= \frac{1}{2\omega}(2i\omega_1\alpha\sin\omega t + 2\omega\beta\cos\omega t - 2i\omega_0\beta\sin\omega t) \\
&= \frac{\omega_1}{\omega} i\sin\omega t\alpha + (\cos\omega t - i\frac{\omega_0}{\omega}\sin\omega t)\beta
\end{aligned}
$$

$\psi(t)$ 满足归一化条件。因此 $t>0$ 时刻，测到粒子自旋反转概率（处于 α 态）为：

$$
P(s_z = \frac{\hbar}{2}) = \left| i\frac{\omega_1}{\omega}\sin\omega t \right|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega^2}\sin^2\omega t
$$

在整个过程中并没有对 ϕ_1, ϕ_2 进行归一化。所以做事不要太机械，按需求来，需要归一化时，再归一化也不迟。

方法二（微扰）：

跃迁

$$
a_m(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mk} e^{i\omega_{mk}t'} dt' \qquad W_{k\to m} = |a_m(t)|^2
$$

$$
H'_{\beta\alpha} = \langle\beta| - \mu B_1 \sigma_x |\alpha\rangle = -\mu B_1 \langle\beta|\sigma_x|\rangle = -\mu B_1 = -\hbar\omega_1
$$

$$
\omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar} = \frac{E_\beta - E_\alpha}{\hbar} = \frac{-\mu B_0 - \mu B_0}{\hbar} = -\frac{2\mu B_0}{\hbar} = -2\omega_0
$$

$$
\alpha_\beta = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{\beta\alpha} e^{i\omega_{\alpha\beta}t'} dt' = -\frac{\mu B_1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{\alpha\beta}t'} dt' = -\frac{\mu B_1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{i\omega_{\alpha\beta}} e^{i\omega_{\alpha\beta}t} = -\frac{\mu B_1}{2\mu B_0} e^{i\omega_{\alpha\beta}t} = -\frac{B_1}{2B_0} e^{i\omega_{\alpha\beta}t}
$$

$$
W(s_z = \frac{\hbar}{2}) = |a_\beta|^2 = \frac{B_1^2}{4B_0^2}\cos^2(2\omega_0 t)
$$

?

1.11 2006 乙 B

一、（30′）粒子以能量 E 入射方势垒，$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0, & 0 \leqslant x \leqslant a \\ 0, & x < 0, x > 0 \end{cases}$。设能量 $E < V_0$，求透射系数 T。

二、（30′）粒子在一维对称无限深方势阱 $(-\frac{a}{2} \leqslant x \leqslant \frac{a}{2})$ 中运动。设 $t=0$ 时粒子所处状态为 $\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(x) + \varphi_2(x)]$，其中 $\varphi_n(x)$ 为系统第 n 个能量本征态。求 $t > 0$ 时的以下量：

（1）概率密度 $|\psi(x,t)|^2$；

（2）能量的可取值及相应的概率。

三、（30′）设氢原子所处状态为 $\psi(r, \theta, \phi, S_z) = \begin{cases} \frac{1}{2} R_{21}(r) Y_{11}(\theta, \phi) \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \phi) \end{cases}$。

（1）求轨道角动量 z 分量 $\hat{L}_z$ 和自旋角动量 z 分量 $\hat{S}_z$ 的平均值；

（2）求总磁矩 $\vec{M} = -\frac{e}{2\mu}\vec{L} - \frac{e}{\mu}\vec{S}$ 的 z 分量的平均值。

四、对于一维谐振子的基态，求坐标和动量的不确定度的乘积 $\Delta x \cdot \Delta p$。

五、（30′）两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 非全同粒子，自旋间相互作用为 $\hat{H} = J\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$，其中 $\vec{s}_1$ 和 $\vec{s}_2$ 分别为粒子 1 和粒子 2 的自旋算符。设 $t=0$ 时粒子 1 的自旋沿 z 轴正方向，粒子 2 的自旋沿 z 轴负方向。求 $t > 0$ 时，测到粒子 2 的自旋仍处于 z 轴负方向的概率。

2006 乙 B 解答

一、[17]（30′）粒子以能量 E 入射方势垒，$V(x)=\begin{cases}V_0>0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0,x>0\end{cases}$。设能量 $E<V_0$，求透射系数 T。

解：完完全全教材内容，见曾书 P74，3.3.1 。

二、（30′）粒子在一维对称无限深方势阱 $(-\frac{a}{2}\leqslant x\leqslant\frac{a}{2})$ 中运动。设 $t=0$ 时粒子所处状态为 $\psi(x,t=0)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(x)+\varphi_2(x)]$，其中 $\varphi_n(x)$ 为系统第 n 个能量本征态。求 $t>0$ 时的以下量：

（1）概率密度 $|\psi(x,t)|^2$；

（2）能量的可取值及相应的概率。

解：

（1）对于该无限深势阱 $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$。

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1(x)e^{\frac{iE_1t}{\hbar}}+\varphi_2(x)e^{\frac{iE_2t}{\hbar}}\right]$$

$$\begin{aligned}\rho(x,t)=|\psi(x,t)|^2=\psi^*(x,t)\psi(x,t)&=\frac{1}{2}\left[\varphi_1(x)e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+\varphi_2(x)e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\right]\left[\varphi_1(x)e^{\frac{iE_1t}{\hbar}}+\varphi_2(x)e^{\frac{iE_2t}{\hbar}}\right]\\&=\frac{1}{2}\left[|\varphi_1(x)|^2+|\varphi_2(x)|^2+\varphi_1(x)\varphi_2(x)e^{-\frac{it}{\hbar}(E_1-E_2)}+\varphi_1(x)\varphi_2(x)e^{\frac{it}{\hbar}(E_1-E_2)}\right]\\&=\frac{1}{2}\left[|\varphi_1(x)|^2+|\varphi_2(x)|^2+\varphi_1(x)\varphi_2(x)\cos[-\frac{t}{\hbar}(E_1-E_2)]+\varphi_1(x)\varphi_2(x)\cos[\frac{t}{\hbar}(E_1-E_2)]\right]\\&=\frac{1}{2}\left[|\varphi_1(x)|^2+|\varphi_2(x)|^2+2\varphi_1(x)\varphi_2(x)\cos\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar}\right]\end{aligned}$$

其中：$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2},E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$。

（2）能量的可能取值为：

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\qquad \text{概率为：}|\langle\varphi_1|\psi(x,t)\rangle|^2=(\frac{1}{\sqrt{2}})^2=\frac{1}{2}$$

$$E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\qquad \text{概率为：}|\langle\varphi_2|\psi(x,t)\rangle|^2=(\frac{1}{\sqrt{2}})^2=\frac{1}{2}$$

三、[18]（30′）设氢原子所处状态为 $\psi(r,\theta,\phi,S_z)=\begin{cases}\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\phi)\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\phi)\end{cases}$。

（1）求轨道角动量 z 分量 $\hat{L}_z$ 和自旋角动量 z 分量 $\hat{S}_z$ 的平均值；

（2）求总磁矩 $\vec{M}=-\frac{e}{2\mu}\vec{L}-\frac{e}{\mu}\vec{S}$ 的 z 分量的平均值。

解：问题的不同表述会给问题的解决带来便利的。要注意“表述”！

改下 ψ 的表述，

$$\psi=\frac{1}{2}R_{11}Y_{11}\alpha-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}Y_{10}\beta\qquad \text{其中：}\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

[17]同类型题见：2006 乙 A 第一题

[18]同类型题见：2006 乙 A 第二题

(1)

$\hat{L}_z$ 的可取值为：$\hbar, 0$；相应的概率为 $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}$；平均值为：$\frac{\hbar}{4}$。

$\hat{S}_z$ 的可取值为：$\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$；相应的概率为 $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}$；平均值为：$-\frac{\hbar}{4}$。

概率和取值都可以直接看出来，所以直接写了。

(2)

$$M_z = -\frac{e}{2\mu}\hat{L}_z - \frac{e}{\mu}\hat{S}_z \qquad 平均值为：-\frac{e}{2\mu}\cdot\frac{\hbar}{4} - \frac{e}{\mu}\cdot(-\frac{\hbar}{4}) = \frac{e\hbar}{8\mu}$$

四、对于一维谐振子的基态，求坐标和动量的不确定度的乘积 $\Delta x\cdot\Delta p$。

解：这属于基本内容了。

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$$

$$\langle x\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle 0|\hat{a}_+|0\rangle + \langle 0|\hat{a}_-|0\rangle) = 0 \qquad \langle p\rangle = 0$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+) = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2 + 2\hat{a}_+\hat{a}_- + 1)$$

$$\hat{p}^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2 - \hat{a}_+\hat{a}_- - \hat{a}_-\hat{a}_+) = -\frac{\hbar m\omega}{2}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2 - 2\hat{a}_+\hat{a}_- - 1)$$

其中：$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{a}_-\hat{a}_+ - \hat{a}_+\hat{a}_- = 1 \qquad \hat{a}_-\hat{a}_+ = 1 + \hat{a}_+\hat{a}_-$

$$\langle\hat{x}^2\rangle = \langle 0|\hat{x}^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(\langle 0|\hat{a}_+^2|0\rangle + \langle 0|\hat{a}_-^2|0\rangle + 2\langle 0|\hat{a}_+\hat{a}_-|0\rangle + \langle 0|0\rangle) = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle = \langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2}(\langle 0|\hat{a}_+^2|0\rangle + \langle 0|\hat{a}_-^2|0\rangle - 2\langle 0|\hat{a}_+\hat{a}_-|0\rangle - \langle 0|0\rangle) = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{a}\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \qquad \Delta x = \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \qquad \Delta x\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

五、(30′) 两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 非全同粒子，自旋间相互作用为 $\hat{H} = J\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2$，其中 $\vec{s}_1$ 和 $\vec{s}_2$ 分别为粒子 1 和粒子 2 的自旋算符。设 $t=0$ 时粒子 1 的自旋沿 z 轴正方向，粒子 2 的自旋沿 z 轴负方向。求 $t>0$ 时，测到粒子 2 的自旋仍处于 z 轴负方向的概率。

析：对于这个问题。首先得知道系统的态（波函数），其次得知道系统的本征态和本征值。粒子 1 的自旋沿 z 轴正方向 α_1，粒子 2 的自旋沿 z 轴负方向 β_2，则在 $t=0$ 时系统波函数为：$\psi = \alpha_1\beta_2$。要求得系统的本征态和本征值，先得清楚系统算符，即 $\hat{H} = J\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2$。

解：

$$\hat{H} = J\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2 = \frac{J}{2}(S^2 - s_1^2 - s_2^2) \qquad 其中\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$$

$s_1^2 = s_2^2 = \frac{3\hbar^2}{4}$，$s_1^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma^2 - z) = \frac{3\hbar^2}{4}$，$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ 为二电子体系的自旋算符，S^2 的本征值和本征态分别为：

$$2\hbar^2, \quad \chi_{11} = \alpha_1\beta_2 \qquad 2\hbar^2, \quad \chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_1\beta_2 + \beta_1\beta_2]$$

$$2\hbar^2, \quad \chi_{1,-1} = \beta_1\beta_2 \qquad 0, \quad \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2]$$

于是 $\hat{H}=J\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2$ 的本征态和本征值分别为:

$$E_1=\frac{J\hbar^2}{4},\quad |\varphi_1\rangle=\chi_{11}\qquad E_2=\frac{J\hbar^2}{4},\quad |\varphi_2\rangle=\chi_{10}$$
$$E_3=\frac{J\hbar^2}{4},\quad |\varphi_3\rangle=\chi_{1,-1}\qquad E_4=-\frac{3J\hbar^2}{4},\quad |\varphi_4\rangle=\chi_{00}$$

在 $t=0$ 时刻，系统波函数为:

$$|\psi(0)\rangle=\alpha_1\beta_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_2\rangle+|\varphi_4\rangle)$$

在 t 时刻，系统波函数为:

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_2\rangle e^{-i\frac{J\hbar}{4}t}+|\varphi_4\rangle e^{i\frac{3J\hbar}{4}t})=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2e^{-i\frac{J\hbar}{4}t}+\beta_1\alpha_2e^{-i\frac{J\hbar}{4}t}+\alpha_1\beta_2e^{i\frac{3J\hbar}{4}t}-\beta_1\alpha_2e^{i\frac{3J\hbar}{4}t})$$

测到粒子 2 的自旋沿 z 轴负方向的概率为:

$$P(s_{2z}=-\frac{\hbar}{2},t)=|\langle\beta_1\beta_2|\psi(t)\rangle|^2+|\langle\alpha_1\beta_2|\psi(t)\rangle|^2=0+\frac{1}{2}\left|e^{-i\frac{J\hbar t}{4}}+e^{i\frac{3J\hbar t}{4}}\right|^2=\cos^2\frac{J\hbar t}{2}$$

其中:

$$\begin{aligned}\left|e^{-i\frac{J\hbar t}{4}}+e^{i\frac{3J\hbar t}{4}}\right|^2&=(e^{i\frac{J\hbar t}{4}}+e^{-i\frac{3J\hbar t}{4}})(e^{-i\frac{J\hbar t}{4}}+e^{i\frac{3J\hbar t}{4}})=(1+e^{iJ\hbar t}+e^{-iJ\hbar t}+1)=2+2\cos J\hbar t\\&=2\cos^2\frac{J\hbar t}{2}\end{aligned}$$

1.12 2005

一、（$20'$）1800 个电子经 $1000V$ 电势差加速后从 $x=-\infty$ 处射向势阶 $V(x)=\begin{cases}V_0, & x<0\\ 0, & x>0\end{cases}$，其中 $V_0=750V$。试问在 $x=\infty$ 处能观察到多少个电子？如果势阶翻转一下，即电子射向势阶 $V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0, & x>0\end{cases}$，则结果如何？

二、（$20'$）质量为 m，电荷为 q 的粒子在三维各向同性谐振子势 $V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$ 中运动，同时受到一个沿 x 方向的均匀常电场 $\vec{E}=E_0\vec{i}$ 作用。求粒子的能量本征值和第一激发态的简并度。此时轨道角动量是否守恒？如回答是，则请写出此守恒力学量的表达式。

三、（$40'$）一个质量为 m 的粒子在下面的无限深方势阱中运动。$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0, x>a\\ 0, & a>x>0\end{cases}$ 开始时 $(t=0)$，系统处于状态，$\psi(x)=A\sin\frac{\pi x}{2a}\cos^3\frac{\pi x}{2a}$，其中 A 为常数。请求出 t 时刻系统：（1）处于基态的几率；（2）能量平均值；（3）动量平均值；（4）动量的均方差根（不确定度）。

四、（$30'$）两个具有相同质量 m 和频率 ω 的谐振子，哈密顿量为

$$H^0=\frac{1}{2m}(p_1^2+p_2^2)+\frac{1}{2}m\omega^2((x_1-a)^2+(x_2+a)^2)$$

（$\pm a$ 为两个谐振子的平衡位置），受到微扰作用 $H'=\lambda m\omega^2(x_1-x_2)^2, |\lambda|\ll 1$，试求该体系的能级。

五、（$30'$）已知氢原子基态波函数为：$\psi_{100}=\frac{1}{(\pi a_0^3)^{\frac{1}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}}$，试对坐标 x 及动量 p_x，求：$\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x^2\rangle}, \Delta p=\sqrt{\langle p_x^2\rangle-\langle p_x\rangle^2}$，由此验证不确定关系。

2005 解答

一、（20′）1800 个电子经 1000V 电势差加速后从 $x=-\infty$ 处射向势阶 $V(x)=\begin{cases}V_0, & x<0\\ 0, & x>0\end{cases}$，其中 $V_0=750V$。试问在 $x=\infty$ 处能观察到多少个电子？如果势阶翻转一下，即电子射向势阶 $V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0, & x>0\end{cases}$，则结果如何？

解：

（1）缺图！

$$x<0,\qquad \psi_1=e^{ik_1x}+Be^{-ik_1x},\qquad k_1^2=\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2},\qquad E=1000V,V_0=750V$$

$$x>0,\qquad \psi_2=Ce^{ik_2x},\qquad k_2^2=\frac{2mE}{\hbar^2}=4k_1^2,\quad k_2=2k_1$$

$\psi_1(0)=\psi_2(0)\qquad 1+B=C$

$\psi_1'(0)=\psi_2'(0)\qquad \psi_1'(x)=ik_1e^{ik_1x}-ik_1Be^{-ik_1x},\quad \psi_2'(x)=ik_2Ce^{ik_2x}\qquad ik_1-ik_2B=ik_2C$

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

透射系数为：

$$T=1-|B|^2=1-\left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2=1-\frac{k_1^2+k_2^2-2k_1k_2}{k_1^2+k_2^2+2k_1k_2}=1-\frac{k_1^2+4k_1^2-2k_1\cdot 2k_1}{k_1^2+4k_1^2+2k_1\cdot 2k_1}=1-\frac{1}{9}=\frac{8}{9}$$

在 $x=\infty$ 处能观察到：$1800\times\frac{8}{9}=1600$ 个。

（2）缺图！

$$x<0,\qquad \psi_1=e^{ik_1x}+Be^{-ik_1x},\qquad k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}=4k_2^2$$

$$x>0,\qquad \psi_2=Ce^{ik_2x},\qquad k_2^2=\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

透射系数：$T=1-|B|^2=1-\frac{1}{9}=\frac{8}{9}$；在 $x=\infty$ 处能观察到，$1800\times\frac{8}{9}=1600$ 个。

没变化。很好理解。看两头，一入一出，中间受势阶“一样”。

二、（20′）质量为 m，电荷为 q 的粒子在三维各向同性谐振子势 $V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$ 中运动，同时受到一个沿 x 方向的均匀常电场 $\vec{E}=E_0\vec{i}$ 作用。求粒子的能量本征值和第一激发态的简并度。此时轨道角动量是否守恒？如回答是，则请写出此守恒力学量的表达式。

解：

（1）

$$E_y=(n_y+\frac{1}{2})\hbar\omega\qquad E_z=(n_z+\frac{1}{2})\hbar\omega\qquad x\text{方向：}V=Eqx=-E_0ex$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-E_0ex\right]\psi=E\psi$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2-E_0ex=\frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2-\frac{2E_0e}{m\omega^2}x\right)=\frac{1}{2}m\omega^2\left[\left(x-\frac{E_0e}{m\omega}\right)^2-\frac{E_0^2e^2}{m^2\omega^4}\right]$$
$$=\frac{1}{2}m\omega^2\left(x-\frac{E_0e}{m\omega^2}\right)^2-\frac{E_0^2e^2}{2m\omega^2}$$
$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(x-\frac{E_0e}{m\omega^2}\right)^2\right]\psi=\left(E+\frac{E_0^2e^2}{2m\omega^2}\right)\psi$$
$$E_x+\frac{E_0^2e^2}{2m\omega^2}=(n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega \qquad E_x=(n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega-\frac{E_0^2e^2}{2m\omega^2}$$
$$E_n=E_x+E_y+E_z=(n_x+\frac{3}{2})\hbar\omega-\frac{E_0^2e^2}{2m\omega^2} \qquad n=n_x+n_y+n_z$$

$n=2$ 时，简并度为 3，$(n_xn_yn_z)=(011),(101),(110)$，简并度为：$\frac{(n+1)(n+2)}{2}$。

（2）
$$[\vec{l},H]=[\vec{l},\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r})-E_0ex]=\frac{1}{2m}[\vec{l},p^2]+[\vec{l},V(\vec{r})]-E_0e[\vec{l},x]$$
$$[\vec{l},p^2]=0 \qquad [\vec{l},V(\vec{r})]=0$$
$$[\vec{l},x]=[l_x,x]\vec{i}+[l_y,x]\vec{j}+[l_z,x]\vec{k}=-i\hbar z\vec{j}+i\hbar y\vec{k}$$
$$[\vec{l},H]\neq 0$$

此时轨道角动量不守恒。

但在平移后的坐标系 $x'y'z'$ 中，$\hat{l}'_x,\hat{l}'_y,\hat{l}'_z$ 都是守恒量，它们的表达式为：
$$\hat{l}'_x=-i\hbar(y'\frac{\partial}{\partial z'}-z'\frac{\partial}{\partial y'})=\hat{l}_x$$
$$\hat{l}'_y=-i\hbar(z'\frac{\partial}{\partial x'}-x'\frac{\partial}{\partial z'})=\hat{l}_y+\frac{qE_0}{m\omega^2}\hat{p}_z$$
$$\hat{l}'_z=-i\hbar(x'\frac{\partial}{\partial y'}-y'\frac{\partial}{\partial x'})=\hat{l}_z-\frac{qE_0}{m\omega^2}\hat{p}_y$$

三、(40′)一个质量为 m 的粒子在下面的无限深方势阱中运动。$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,x>a\\ 0, & a>x>0\end{cases}$ 开始时 $(t=0)$，系统处于状态，$\psi(x)=A\sin\frac{\pi x}{2a}\cos^3\frac{\pi x}{2a}$，其中 A 为常数。请求出 t 时刻系统：（1）处于基态的几率；（2）能量平均值；（3）动量平均值；（4）动量的均方差根（不确定度）。

解：

该系统的本征函数和本征值为：
$$\phi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$
用系统本征函数系表示该波函数为：
$$\psi(x)=A\sin\frac{\pi x}{2a}\cos^3\frac{\pi x}{2a}=\frac{A}{2}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{2a}=\frac{A}{4}\sin\frac{\pi x}{a}(\cos\frac{\pi x}{a}+1)$$
$$=\frac{A}{4}\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}+\frac{A}{4}\sin\frac{\pi x}{a}=\frac{A}{8}\sin\frac{2\pi x}{a}+\frac{A}{4}\sin\frac{\pi x}{a}$$
$$=\frac{A}{4}\sqrt{\frac{a}{2}}\phi_1+\frac{A}{8}\sqrt{\frac{a}{2}}\phi_2$$

其中：$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x = 2\cos^2 x - 1 \quad \cos^2 x = \frac{\cos 2x+1}{2}$，这招都用烂了！以后不提示了。

求系数 A（归一化）：

$$\langle\psi(x)|\psi(x)\rangle = \left(\frac{A}{4}\sqrt{\frac{a}{2}}\right)^2 + \left(\frac{A}{8}\sqrt{\frac{a}{2}}\right)^2 = 1 \qquad \frac{A^2}{16}\cdot\frac{a}{2} + \frac{A^2}{64}\cdot\frac{a}{2} = 1$$

归一化波函数为：

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1 + \sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2$$

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1 e^{\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2 e^{\frac{iE_2 t}{\hbar}} \qquad \text{其中：} E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, E_2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} = 4E_1$$

（1）处于基态的几率：

$$P = |\langle\phi_1|\psi(x,t)\rangle|^2 = \left|\sqrt{\frac{4}{5}}e^{\frac{iE_1 t}{\hbar}}\right|^2 = \frac{4}{5} = 80\%$$

（2）能量平均值：

$$\langle E\rangle = \frac{4}{5}E_1 + \frac{1}{5}E_2 = \frac{8}{5}E_1 \qquad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

（3）动量平均值：

求 $\langle\hat{p}\rangle$ 可以用定义或恩费斯特关系 $\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt}$。

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_0^a \psi^*(x,t)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t)dx \\
&= -i\hbar\int_0^a \left(\sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}\right)\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt{\frac{4}{5}}\phi_1 e^{\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{1}{5}}\phi_2 e^{\frac{iE_2 t}{\hbar}}\right)dx \\
&= -i\hbar\int_0^a \left(\frac{4}{5}\phi_1\frac{\partial}{\partial x}\phi_1 + \frac{2}{5}\phi_1\frac{\partial}{\partial x}\phi_2 e^{\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}} + \frac{2}{5}\phi_2\frac{\partial}{\partial x}\phi_1 e^{-\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}} + \frac{1}{5}\phi_2\frac{\partial}{\partial x}\phi_2\right)dx \\
&= -i\hbar\int_0^a \left(\frac{4}{5}\phi_1\frac{\partial}{\partial x}\phi_1 + \frac{1}{5}\phi_2\frac{\partial}{\partial x}\phi_2 + \frac{4}{5}\phi_1\frac{\partial}{\partial x}\phi_2\cos\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\right)dx \\
&= -i\hbar\cdot\frac{4}{5}\cdot\frac{8}{3a}\cos\frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}t = -i\frac{32\hbar}{15a}\cos\frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}t
\end{aligned}$$

其中：

$$\frac{\partial}{\partial x}\phi_1 = \left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right)' = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\frac{\pi}{a}\cos\frac{\pi x}{a} \qquad \frac{\partial}{\partial x}\phi_2 = \left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)' = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\frac{2\pi}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^a \phi_1\frac{\partial}{\partial x}\phi_1 dx &= \frac{2}{a}\cdot\frac{\pi}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}dx = \frac{2}{a}\cdot\frac{\pi}{a}\cdot\frac{1}{2}\int_0^a \sin\frac{2\pi x}{a}dx = \frac{2}{a}\cdot\frac{\pi}{a}\cdot\frac{1}{2}\left(-\cos\frac{2\pi x}{a}\Big|_0^a\right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

$$\int_0^a \phi_2\frac{\partial}{\partial x}\phi_2 = 0$$

$$\int_0^a \phi_1 \frac{\partial}{\partial x}\phi_2 dx = \frac{2}{a}\cdot\frac{2\pi}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}dx = \frac{2}{a}\cdot\frac{2\pi}{a}\cdot\frac{2a}{3\pi} = \frac{8}{3a}$$
$$\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}dx = \frac{a}{\pi}\cos\frac{\pi}{a}x\Big|_0^a - \frac{2a}{3\pi}\cos^3\frac{\pi}{a}x\Big|_0^a = -\frac{a}{\pi} - \frac{a}{\pi} - (-\frac{2a}{3\pi} - \frac{2a}{3\pi}) = \frac{2a}{3\pi}$$
$$\int \sin px\cos 2px dx = \int(\sin px - 2\sin^3 px)dx = \frac{1}{p}\cos px - \frac{2}{3p}\cos^3 px$$
$$\int \sin^3 px dx = -\frac{1}{p}\int(1-\cos^2 px)d\cos px = -\frac{1}{p}\cos px + \frac{1}{3p}\cos^3 px$$

$$\begin{aligned}\langle p^2\rangle &= \int_0^a \psi^*(x,t)p^2\psi(x,t)dt = \int_0^a (\hat{p}\psi(x,t))^*(\hat{p}\psi(x,t))dt \\ &= -\hbar^2\int_0^a\left[\frac{4}{5}\left(\frac{\partial}{\partial x}\phi_1\right)^2 + \frac{2}{5}\left(\frac{\partial}{\partial x}\phi_2\right)^2 + \frac{4}{5}\frac{\partial}{\partial x}\phi_1\frac{\partial}{\partial x}\phi_2\cos\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}t\right]dx \\ &=????\end{aligned}$$

????????

四、($30'$)两个具有相同质量 m 和频率 ω 的谐振子，哈密顿量为

$$H^0 = \frac{1}{2m}(p_1^2+p_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2((x_1-a)^2+(x_2+a)^2)$$

($\pm a$ 为两个谐振子的平衡位置)，受到微扰作用 $H' = \lambda m\omega^2(x_1-x_2)^2, |\lambda| \ll 1$，试求该体系的能级。

曾经的错误做法：

对 H' 进行凑数，$H' = \frac{\lambda}{2}m\omega^2[(x_1-a)-(x_2+a)+2a]^2$，令 $x_1-a=x_1', x_2+a=x_2'$，然后分别用对易关系来处理。

整个分析是要在同一个坐标系的。我这样做相当于分析粒子 1 用 1 坐标系，分析粒子 2 用 2 坐标系，引入两个坐标系完完全全看成纯粹单个粒子在谐振子中能量的相加。同一个问题中引入了两个不同的坐标系。

五、($30'$)已知氢原子基态波函数为：$\psi_{100} = \frac{1}{(\pi a_0^3)^{\frac{1}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}}$，试对坐标 x 及动量 p_x，求：$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x^2\rangle}, \Delta p = \sqrt{\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2}$，由此验证不确定关系。

见笔记。

六、($20'$)考虑自旋 $\vec{S}$ 与角动量 $\vec{L}$ 的耦合，体系的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \lambda\vec{L}\cdot\vec{S}$$

λ 是耦合常数，试证该体系的总角动量 $\vec{J} = \vec{L}+\vec{S}$ 守恒。

见笔记。

1.13 2004

一、(30′) 粒子在一维无限深方势阱 $V(x)$ 中运动，$V(x)=\begin{cases}\infty, & |x|>a\\ 0, & |x|<a\end{cases}$ 处于状态 $\psi=\phi_1+\phi_3+2\phi_4$。这里 $\phi_n, n=1,2,3,\cdots$ 是系统归一化的能量本征态。请问:

(1) 粒子具有基态能量 E_1 几率；(2) 粒子的平均能量 (用基态能量 E_1 的倍数表示)；(3) 态 ϕ_4 中的节点数 (在节点处，找到粒子的几率密度为零)；(4) 态 ϕ_3 的宇称。

二、考虑一维体系 $\hat{H}=\frac{p^2}{2\mu}+V(x),\quad V(x)=V_0x^\lambda,\quad V_0>0,\quad \lambda=2,4,6\cdots$。设 $\hat{H}$ 的本征波函数为 ψ_n。

(1) 证明动量在态 ψ_n 中的平均值为零；

(2) 求在态 ψ_n 中的动能平均值和势能平均值之间的关系。

三、设归一化的状态波函数 $|\psi\rangle$ 满足薛定鄂方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle$，定义密度算符 (矩阵) 为 $\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$。

(1) 证明任意力学量 $\hat{F}$ 在态 $|\psi\rangle$ 中的平均值可表示为 $Tr(\rho F)$；

(2) 求出 ρ 的本征值；

(3) 导出随时间演化的方程。

四、质量为 μ 的粒子在三维各向同性谐振子势为 $V(r)=\frac{kr^2}{2}=\frac{k(x^2+y^2+z^2)}{2}$ 中运动。求: (1) 第二激发态的能量; (2) 第一激发态的简并度; (3) 在基态中的不确定量 $\Delta r\cdot\Delta p$，这里 Δr 是位置矢量的均方差根

2004 解答

一、(30′) 粒子在一维无限深方势阱 $V(x)$ 中运动，$V(x)=\begin{cases}\infty, & |x|>a\\ 0, & |x|<a\end{cases}$ 处于状态 $\psi=\phi_1+\phi_3+2\phi_4$。这里 $\phi_n, n=1,2,3,\cdots$ 是系统归一化的能量本征态。请问：

(1) 粒子具有基态能量 E_1 几率；(2) 粒子的平均能量（用基态能量 E_1 的倍数表示)；(3) 态 ϕ_4 中的节点数（在节点处，找到粒子的几率密度为零)；(4) 态 ϕ_3 的宇称。

解：

将 ψ 归一化，$\langle\psi|\psi\rangle=1$，即：$A^2(1+1+4)=1 \qquad A=\frac{1}{\sqrt{6}}$，

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{6}}\phi_1+\frac{1}{\sqrt{6}}\phi_3+\frac{2}{\sqrt{6}}\phi_4$$

该系统本征函数系和本征值为：

$$\phi_n=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{n\pi}{2a}x, & n\text{为奇}\\ \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}x, & n\text{为偶}\end{cases} \qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \quad E_3=9E_1 \quad E_4=16E_1$$

(1) E_1 的几率：$P_1=|\langle\phi_1|\psi\rangle|^2=\frac{1}{6}$；

(2) 粒子的平均能量：$\langle E\rangle=\frac{1}{6}E_1+\frac{1}{6}9E_1+\frac{4}{6}16E_1=\frac{37}{3}E_1$；

(3) 态 ϕ_4 中的节点数：3 $(n-1)$；

(4) 态 ϕ_3 为偶宇称。

二、考虑一维体系 $\hat{H}=\frac{p^2}{2\mu}+V(x), \quad V(x)=V_0x^\lambda, \quad V_0>0, \quad \lambda=2,4,6\cdots$。设 $\hat{H}$ 的本征波函数为 ψ_n。

(1) 证明动量在态 ψ_n 中的平均值为零；

(2) 求在态 ψ_n 中的动能平均值和势能平均值之间的关系。

证明：

(1)

$$[x,\hat{H}]=\frac{i\hbar}{m}p_x \qquad \text{设}H|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle p_x\rangle&=\frac{m}{i\hbar}\langle\psi_n|[x,\hat{H}]|\psi_n\rangle=\frac{m}{i\hbar}\langle\psi_n|x\hat{H}-\hat{H}x|\psi_n\rangle=\frac{m}{i\hbar}\langle\psi_n|x\hat{H}|\psi_n\rangle-\frac{m}{i\hbar}\langle\psi_n|\hat{H}x|\psi_n\rangle\\&=\frac{m}{i\hbar}E_n\langle x\rangle-\frac{m}{i\hbar}E_n\langle x\rangle=0\end{aligned}$$

(2)

涉及 $\langle T\rangle,\langle V\rangle$，一看就要用位力定理，$2\langle T\rangle=\langle\vec{r}\cdot\nabla V\rangle$。

$$2\langle T\rangle=\langle x\frac{\partial}{\partial x}V\rangle=\langle x\frac{\partial}{\partial x}V_0x^\lambda\rangle=\langle xV_0\lambda x^{\lambda-1}\rangle=\langle\lambda V_0x^\lambda\rangle=\lambda\langle x\rangle$$

三、设归一化的状态波函数 $|\psi\rangle$ 满足薛定鄂方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle$，定义密度算符（矩阵）为 $\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$。

(1) 证明任意力学量 $\hat{F}$ 在态 $|\psi\rangle$ 中的平均值可表示为 $Tr(\rho F)$；

(2) 求出 ρ 的本征值；

(3) 导出随时间演化的方程。

解：取正交归一完备基 $\{|n\rangle\}$，利用完备性公式：$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$。

（1）

$$\langle F\rangle = \langle\psi|\hat{F}|\psi = \langle\psi|\hat{F}\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\hat{F}|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle = \sum \langle n|\hat{F}\rho|n\rangle = Tr(\hat{F}\rho)$$

（2）

$$\rho|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \quad \rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle| = \rho, \quad \rho^2|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \quad \lambda^2 = \lambda, \quad \lambda = 0, 1$$

（3）

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(|\psi\rangle\langle\psi|) = (i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle)\langle\psi| + |\psi\rangle(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|)$$

由薛定鄂方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ 及其共轭 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi|\hat{H}$，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho = \hat{H}|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi|\hat{H} = [\hat{H}, \rho]$$

?????????? 还不太理解！！！

四、质量为 μ 的粒子在三维各向同性谐振子势为 $V(r) = \frac{kr^2}{2} = \frac{k(x^2+y^2+z^2)}{2}$ 中运动。求：(1) 第二激发态的能量；(2) 第一激发态的简并度；(3) 在基态中的不确定量 $\Delta r \cdot \Delta p$，这里 Δr 是位置矢量的均方差根

1.14 2001 理论型

一、[19]（$20'$）一个质量为 μ 的粒子在势阱

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0, x>2a\\ A\delta(x-a), & 0<x<2a\end{cases}$$

中运动，其中 $A>0$ 为常数。求系统第三激发态的能量本征值。

[19]同类型题见：2010 年第五题

2001 理论型解答

一、[20]（$20'$）一个质量为 μ 的粒子在势阱

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,x>2a\\ A\delta(x-a), & 0<x<2a\end{cases}$$

中运动，其中 $A>0$ 为常数。求系统第三激发态的能量本征值。

方法一：

作坐标平移，$x'=x-a$，则势函数可改写为：

$$V(x')=\begin{cases}\infty, & |x'|>a\\ A\delta(x'), & |x'|<a\end{cases}$$

这是个对称位势，粒子束缚定态有确定的宇称。根据节点定理，基态无节点具有偶宇称；第一激发态有一个节点（必在 $x=0$ 点），具有奇宇称；第二激发态宇称有两个节点，具有偶宇称；第三激发态有三个节点，具有奇宇称。

奇宇称态中坐标原点 $x'=0$ 是节点，而 δ 只在原点起作用，影响不到奇宇称态。于是在此势阱中，粒子第三激发态的能级与没有 δ 势的无限深势阱中的第三激发态能级一样，即：$E_4=\dfrac{4^2\pi^2\hbar^2}{2\mu(2a)^2}=\dfrac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$。

方法二：

将 $V(x)=A\delta(x-a),0<x<a$ 视为微扰 H'。无 δ 势时，波函数和能级分别为：

$$\phi_n^0=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a},\qquad E_n^0=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

$$E_4^1=\langle\phi_4^0|H'|\phi_4^0\rangle=\frac{A}{a}\int_0^{2a}\sin^2(\frac{2\pi x}{a})\delta(x-a)dx=0$$

$$E_4^2=\sum_{k\neq n}\frac{|H'_{k4}|^2}{E_4^0-E_k^0}=0$$

$$\text{其中：}\ H'_{k4}=\langle\phi_k^0|H'|\phi_4^0\rangle=\frac{A}{a}\int_0^{2a}\sin\frac{k\pi x}{2a}\sin\frac{2\pi x}{a}\delta(x-a)dx=0$$

即微扰对第三激发态不起作用，能量为：$E_4=\dfrac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$。

方法三：先作坐标平移，再用微扰。

作坐标平移，$x'=x-a$，则势函数可改写为：

$$V(x')=\begin{cases}\infty, & |x'|>a\\ A\delta(x'), & |x'|<a\end{cases}$$

将 $V(x')=A\delta(x')$ 视为微扰，为了方便，将 x' 仍写为 x，则无微扰时，势阱的波函数、

[20]同类型题见：2010 年第五题

能级分别为：

$$\phi_n=\begin{cases}\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}, & n\text{为偶数}\rightarrow\text{奇宇称}\\ \sqrt{\frac{1}{a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}, & n\text{为奇数}\rightarrow\text{偶宇称}\end{cases}\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

一级修正：

当 n 为偶时（两态均为奇宇称，微扰算符 H' 为偶宇称），

$$H'_{nn}=E_n^1=\frac{A}{a}\int_{-a}^{a}\sin^2\frac{n\pi x}{2a}\delta(x)dx=0$$

当 n 为奇时（两态均为偶宇称，微扰算符 H' 为偶宇称），

$$E_n^1=H'_{nn}=\frac{A}{a}\int_{-a}^{a}\cos^2\frac{n\pi x}{2a}\delta(x)dx=\frac{A}{a}$$

二级修正：

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

当 n 为奇时：

k 为奇，$H'_{kn}=\frac{A}{a}\int_{-a}^{a}\cos\frac{k\pi x}{2a}\cos\frac{n\pi x}{2a}\delta(x)dx=\frac{A}{a}$。

k 为偶(一态为奇宇称,一态为偶宇称,算符为偶宇称),$H'_{kn}=\frac{A}{a}\int_{-a}^{a}\sin\frac{n\pi x}{2a}\cos\frac{n\pi x}{2a}\delta(x)dx=0$。

当 n 为偶时，$\phi_n(0)=\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi 0}{2a}=0$，$H'_{kn}=0$。

本题中，第三激发态为第四能级，故，微扰矩阵元均为 0，故微扰不起作用。判断矩阵元是否为 0 ，还可以根据对称性来判断。算符为偶宇称，两态宇称不同，矩阵元为 0; 算符为奇宇称，两态宇称相同，矩阵元为 0 。根据这个，本问题中 H' 为偶宇称，所以当 n 为奇，k 为偶时，$H'_{kn}=0$。对称性问题及见教材相关章节。

说明：方法二和方法三是从不同角度用微扰的方法来讨论问题，微扰法毕竟是近似法，比不上方法一的准确结论。

第 二 章 四川大学历年试题详解

2.1 2010 试题

四川大学

2010 年攻读硕士学位研究生入学考试试题

考试科目：量子力学

科目代码：690

适用专业：理论物理、粒子物理与原子核物理、原子与分子物理、等离子物理、凝聚态物理、光学、生物医学物理、应用电子物理、放射物理及技术

（试题共 2 页）

（答案必须写在答题纸上，写在试题上不给分）

一、简答及证明（共 50 分）

1、（10 分）沿直线运动的粒子波函数为 $\psi(x)=\dfrac{1+ix}{1+ix^2}$.

（1）请将 ψ 归一化。

（2）请问最容易发现粒子的空间位置在什么地方？为什么？

2、（10 分）原子内电子的量子态由 n,l,m_l 及 m_s 四个量子数表征。试说明：

（1）它们是什么量子数？各自确定什么物理量？

（2）当 n,l 一定时，不同的量子态数目为多少？当 n 一定时，不同的量子态数目为多少？

3、（10 分）请问角动量算符是否为线性算符或厄米算符，为什么？

4、（10 分）如果 λ 为线性算符 A 的一个本征值，请问 λ^2 是 A^2 的本征值吗？为什么？设 $f(\lambda)$ 是 λ 的多项式，请问 $f(\lambda)$ 是不是 $f(A)$ 的一个本征值，为什么？

5、（10 分）试由位置与动量的测不准关系 $\Delta p_x\Delta x\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$，导出能量和时间的测不准关系 $\Delta E\Delta t\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$。

二、计算和证明（100 分）

1、（20 分）设在 $t=0$ 时刻，氢原子处于状态：

$$|\psi_0\rangle=\frac{1}{\sqrt{10}}\left[2|100\rangle+|210\rangle\sqrt{2}|211\rangle+\sqrt{3}|21,-1>\right]$$

求：

（1）在 $|\psi_0\rangle$ 态下能量的平均值。

（2）在 $t>0$ 时，体系处于 $|lm>=|11\rangle$ 态的几率。

2、（20 分）粒子被关闭在球对称势阱

$$V(r)=\begin{cases}0 & (r\geqslant a)\\ \infty & (r>a)\end{cases}$$

中，求粒子的球对称定态波函数及能量。

3、（20 分）试证明：

（1）$(\sigma\cdot\vec{A})(\sigma\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\sigma\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$，其中 $\vec{A},\vec{B}$ 为与 Pauli 矩阵 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 对易的任意矢量。

（2）$(\sigma\cdot\vec{p})^2=\vec{p}^2,(\sigma\cdot\vec{l})^2=\vec{l}^2-\hbar\sigma\cdot\vec{l}$，其中 $\vec{p}$ 为三维动量，$\vec{l}$ 为三维角动量。

4、（20 分）一个质量为 m 的粒子在一维势阱

$$V(x)=\begin{cases}\infty & (x<-2a,x>2a)\\ 0 & (-2a<x<-a)\\ 0 & (a<x<2a)\\ V_0 & (-a<x<a)\end{cases}$$

中运动（见图）。把 V_0 当做对在无限深方势阱中运动粒子的微扰，求粒子基态能量的一级近似值。

5、（20 分）用 Born 近似法求一质量为 m 的粒子被 Coulomb 势

$$V(r)=\frac{a}{r}\qquad(a>0\text{斥力},a<0\text{引力})$$

散射时的散射截面。

2.2 2009 试题

四川大学

2009 年攻读硕士学位研究生入学考试试题

考试科目：量子力学

科目代码：690

适用专业：理论物理、粒子物理与原子核物理、原子与分子物理、等离子物理、凝聚态物理、光学、生物医学物理、应用电子物理、放射物理及技术

（试题共 2 页）

（答案必须写在答题纸上，写在试题上不给分）

一、简单（共 40 分）

1、(3 分) 在 $B = 1.25\times10^{-2}T$ 的匀强磁场中沿半径为 $R = 1.66cm$ 的圆轨道运动的 α 粒子的德布罗意波长是多少? (普朗克常量 $\hbar = 6.63\times10^{-34}J\cdot s$，基本电荷 $e = 1.60\times10^{-19}C$)

2、(5 分) 原子内电子的量子态由 n, l, m_l 及 m_s 四个量子数表征。当 n, l, m_l 一定时，不同的量子态数目是多少？当 n, l 一定时，不同的量子态数目为多少？当 n 一定时，不同的量子态数目为多少?

3、(3 分) 根据量子力学理论，氢原子中电子的动量矩在外磁场方向上的投影为 $L_z = m_l\hbar$，当角量子数 $l = 2$ 时，L_z 的可能取值为何?

4、(3 分) 有一种原子，在基态时 $n = 1$ 和 $n = 2$ 的主壳层都填满电子，$3s$ 次壳层也填满电子，而 $3p$ 壳层只填充一半。这种原子的原子序数是多少?

5、(10 分) 处于静止状态的自由电子是否能吸收光子，并把全部能量用来增加自己的动能？为什么?

6、(8 分) 根据量子力学理论，氢原子中电子的运动状态可用 n, l, m_l, m_s 四个量子数来描述。试说明它们各自确定什么物理量?

7、(8 分) 根据泡利不相容原理，在主量子数 $n = 2$ 的电子壳层上最多可能有多少个电子？试写出每个电子所具有的四个量子数 n, l, m_l, m_s 之值。

二、计算和证明（110 分）

1、(20 分) 如图，粒子在深度为 V_0，宽度为 a 的直角势阱中运动，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。

【缺图】【析】2009 年 828 量子力学第二题。曾题集 1.4 题。

2、(25 分) 完成以下证明:

(1) 设 $\vec{A},\vec{B}$ 为矢量算符，F 为标量算符，证明

$$[F,\vec{A}\cdot\vec{B}]=[F,\vec{A}]\cdot\vec{B}+\vec{A}\cdot[F,\vec{B}]$$

$$[F,\vec{A}\times\vec{B}]=[F,\vec{A}]\times\vec{B}+\vec{A}\times[F,\vec{B}]$$

(2) 以 $\vec{r},\vec{p}$ 表示位置和动量算符，$\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p}$ 为轨道角动量算符，$\hat{F}=F(\vec{r},\vec{p})$ 为由 $\vec{r},\vec{p}$ 构成的标量算符。证明

$$[\hat{F},\vec{l}]=i\hbar\vec{r}\times\frac{\partial\hat{F}}{\partial\vec{r}}-i\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial\vec{p}}\times\vec{p}$$

3、(25 分) 质量为 μ 的粒子在中心力场 $V(r)=-\dfrac{\alpha}{r^s}\qquad\alpha>0$ 中运动，证明存在束缚态的条件为 $0<s<2$，再进一步证明在 $E\sim0^-$ 附近存在无限多条束缚态能级。

4、(20 分) 一维谐振子，其能量算符为 $H_0=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$，设此谐振子受到微扰作用 $H'=\dfrac{\lambda}{2}m\omega^2x2\qquad|\lambda|\ll1$。试求各能级的微扰修正（三级近似），并和精确解比较。

5、(20 分) 质量为 μ 的粒子束被球壳 δ 势场散射，$V(r)=V_0\delta(r-a)$，在高能近似下，用玻恩近似计算散射振幅和微分截面。

2.3 2010 解答

一、简答及证明（共 50 分）

1、(10 分) 沿直线运动的粒子波函数为 $\psi(x)=\dfrac{1+ix}{1+ix^2}$。

(1) 请将 ψ 归一化。

(2) 请问最容易发现粒子的空间位置在什么地方？为什么？

【答】

(1)

$$\int_{-\infty}^{+\infty}A^2\psi^*\psi dx=\int_{-\infty}^{+\infty}A^2\frac{1-ix}{1-ix^2}\cdot\frac{1+ix}{1+ix}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}A^2\frac{1+x^2}{1+x^4}dx=2A^2\int_0^{\infty}\frac{1+x^2}{1+x^4}dx=1$$

$$\int_0^{\infty}\frac{1+x^2}{1+x^4}dx=\int_0^{\infty}\frac{\frac{1}{x^2}+1}{\frac{1}{x^2}+x^2}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d(x-\frac{1}{x})}{(x-\frac{1}{x})^2+2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dt}{t^2+2}=\frac{\sqrt{2}}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\frac{t}{\sqrt{2}}}{(\frac{t}{\sqrt{2}})^2+1}$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{2}\arctan\frac{t}{\sqrt{2}}\Big|_{+\infty}^{-\infty}=\frac{\sqrt{2}}{2}(\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{2})=\frac{\sqrt{2}\pi}{2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}A^2\psi^*\psi dx=\sqrt{2}\pi A^2=1\qquad A=\frac{1}{(\sqrt{2}\pi)^{\frac{1}{2}}}$$

即：

$$\psi(x)=\frac{1}{(\sqrt{2}\pi)^{\frac{1}{2}}}\frac{1+ix}{1+ix^2}$$

(2)

$$|\psi(x)|^2=A^2\frac{1+x^2}{1+x^4}\qquad\frac{d|\psi(x)|^2}{dx}=A^2\frac{2x(1+x^4)-(1+x^2)4x^3}{(1+x^4)^2}=A^2\frac{2x-4x^3-2x^5}{(1+x^4)^2}=0$$

即：$x^5+2x^3-x=0$，有：

$$\begin{cases}x=0\\x^4+2x^2-1=0\end{cases}$$

解 $x^4+2x^2-1=0$，得，$x^2=\sqrt{2}-1$；将 $x=0$ 代入 $|\psi(x)|^2$ 得，$|\psi(x)|^2=A^2$；将 $x^2=\sqrt{2}-1$ 代入 $|\psi(x)|^2$ 得，$|\psi(x)|^2=A^2\dfrac{\sqrt{2}}{4-2\sqrt{2}}=\dfrac{1}{2(\sqrt{2}-1)}A^2>A^2$。所以，当 $x=\pm(\sqrt{2}-1)$ 时，最容易发现粒子。

【评】这题完全考察的就是数学功底了！可以看到，即使第一问没做出来，也不影响第二问，所以考试时一定要沉着冷静，发挥好自己的能力，做出会做的。

2、(10 分) 原子内电子的量子态由 n,l,m_l 及 m_s 四个量子数表征。试说明：(1) 它们是什么量子数？各自确定什么物理量？

(2) 当 n,l 一定时，不同的量子态数目为多少？当 n 一定时，不同的量子态数目为多少？

【答】

(1) n 为主量子数，确定能量；l 为角动量量子数，确定角动量；m_l 为磁量子数，确

定角动量的取向；m_s 是自旋量子数，确定自旋的取向。

（2）当 n,l 一定时，考虑自旋，不同量子态数目为：$2(2l+1)$；当 n 一定时，考虑自旋，不同量子态数目为：$2n^2$。

3、（10 分）请问角动量算符是否为线性算符或厄米算符，为什么？

【答】

（1）是线性算符，因为这是表示力学量的算符必须满足态叠加原理的要求。

（2）是厄米算符。证明：

$$\vec{l}=l_x\vec{i}+l_y\vec{j}+l_z\vec{k} \qquad l_x=yp_z-zp_y$$

$$\begin{aligned}(\varphi,l_x\phi)&=(\varphi,(yp_z-zp_y)\phi)=(\varphi,yp_z\psi)-(\varphi,zp_y\phi)=(y\varphi,p_z\phi)-(z\varphi,p_y\phi)\\&=(p_zy\varphi,\phi)-(p_yz\varphi,\phi)=((p_zy-p_yz)\varphi,\psi)\end{aligned}$$

y 与 p_z，z 与 p_y 对易，有：

$$(\varphi,l_x\phi)=(l_x\varphi,\phi)$$

即：l_x 为厄米算符；同理有，l_y,l_z 为厄米算符；由厄米算符之和仍为厄米算符，有：$\vec{l}$是厄米算符。

【评】这题考查的是量子力学基本功。无它，记住定义，按定义来就行了。

4、（10 分）如果 λ 为线性算符 A 的一个本征值，请问 λ^2 是 A^2 的本征值吗？为什么？设 $f(\lambda)$ 是 λ 的多项式，请问 $f(\lambda)$ 是不是 $f(A)$ 的一个本征值，为什么？

【答】

（1）λ^2 是 A^2 的本征值.$A\psi=\lambda\psi$，$A^2\psi=AA\psi=A\lambda\psi=\lambda A\psi=\lambda^2\psi$。

（2）$f(\lambda)$ 是 $f(A)$ 的一个本征值。

$$a_nA^n\psi=a_nA^{n-1}\lambda\psi=a_n\lambda A^{n-1}\psi=\cdots=a_n\lambda^n\psi$$

$$F(A)\psi=\sum_n a_nA^n\psi=\sum_n a_n\lambda^n\psi=F(\lambda)\psi$$

5、（10 分）试由位置与动量的测不准关系 $\Delta p_x\Delta x\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$，导出能量和时间的测不准关系 $\Delta E\Delta t\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$。

【答】

$$E=\frac{p_x^2}{2m} \qquad \Delta E=\frac{2p_x\Delta p_x}{2m}=\frac{p\Delta p_x}{m}$$

$$\Delta t=\frac{\Delta x}{v} \qquad \Delta E\Delta t=\frac{p_x}{mv}\Delta x\Delta p_x=\Delta x\Delta p_x\geqslant\frac{\hbar}{2}$$

【评】关键是要理解好数学里的微分！

二、计算和证明（100 分）

1、（20 分）设在 $t=0$ 时刻，氢原子处于状态：

$$|\psi_0\rangle=\frac{1}{\sqrt{10}}\left[2|100\rangle+|210\rangle+\sqrt{2}|211\rangle+\sqrt{3}|21,-1\rangle\right]$$

求：

（1）在 $|\psi_0\rangle$ 态下能量的平均值。

（2）在 $t>0$ 时，体系处于 $|lm>=|11\rangle$ 态的几率。

【析】 氢原子能级公式必须得记着。

【解】

（1）氢原子能级：$E_n=-\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$

$$E_1=-\frac{e^2}{2a_0}\qquad E_2=-\frac{e^2}{8a_0}\qquad \langle\psi_0|\psi_0\rangle=\frac{4}{10}+\frac{1}{10}+\frac{2}{10}+\frac{3}{10}=1$$

即：$|\psi_0\rangle$ 已归一化。

$|\psi_0\rangle$ 态下能量平均值为：

$$\frac{4}{10}E_1+\frac{1}{10}E_2+\frac{2}{10}E_2+\frac{3}{10}E_2=-\frac{4}{10}\frac{e^2}{2a_0}-\frac{6}{10}\frac{e^2}{8a_0}=-\frac{11}{40}\frac{e^2}{a_0}$$

（2）氢原子态为定态，概率分布与时间无关。在 $t>0$ 时，体系处于 $|lm\rangle=|11\rangle$ 态的几率为：

$$|\langle n11|\psi_0\rangle|^2=\left|\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}}\right|^2=\frac{1}{5}$$

2、（20 分）粒子被关闭在球对称势阱

$$V(r)=\begin{cases}0 & (r\geqslant a)\\ \infty & (r>a)\end{cases}$$

中，求粒子的球对称定态波函数及能量。

【析】 这题很烦，我这里先只算 S 态的情况。与周世勋对应的课后习题讲解、曾谨言的书上都有详细解答。

【解】

定态 SchrÖdinger 方程：

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(r)\right]\psi=E\psi$$

球坐标下：

$$\left[\frac{p_r^2}{2m}+\frac{l^2}{2mr^2}+V(r)\right]\psi=E\psi$$

分离变量有：

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

令 $R_l=\frac{\chi_l}{r}$，有：

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

（1）首先考虑 $l=0$（S 态）的情况。此时径向方程为：

$$\chi_0''+\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))\right]\chi_0=0$$

在势阱内 $(0\leqslant r<a)$，有：

$$\chi_0''+k^2\chi_0=0 \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}(E>0)$$

由边界条件：$\chi_0(0)=0,\chi_0(a)=0$，有：

$$\chi_0=A\sin kr \qquad \sin ka=0\Longrightarrow ka=(n_r+1)\pi \qquad n_r=0,1,2,3\cdots$$

即：

$$\chi_{n_r,0}(r)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{(n_r+1)\pi r}{a} \qquad 0\leqslant r<a$$

$$E=E_{n_r,0}=\frac{\pi^2\hbar^2(n_r+1)^2}{2ma^2}, \qquad n_r=0,1,2,\cdots$$

（2）当 $l\neq 0$ 时，**【暂略】**

【评】这题就是死背吧，记住这些微分方程的解！

3、（20 分）试证明：

（1）$(\sigma\cdot\vec{A})(\sigma\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\sigma\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$，其中 $\vec{A},\vec{B}$ 为与 Pauli 矩阵 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 对易的任意矢量。

（2）$(\sigma\cdot\vec{p})^2=\vec{p}^2,(\sigma\cdot\vec{l})^2=\vec{l}^2-\hbar\sigma\cdot\vec{l}$，其中 $\vec{p}$ 为三维动量，$\vec{l}$ 为三维角动量。

【析】第一问、第二问分别是曾书自旋章，自旋算符与 Pauli 算符节，p285，练习 2、练习 3。第一问也在曾题集 6.19 题有解。

【证明】

（1）

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{A}=\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z \qquad \vec{\sigma}\cdot\vec{B}=\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z$$

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})&=(\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z)(\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z)\\&=\sigma_xA_x\sigma_xB_x+\sigma_xA_x\sigma_yB_y+\sigma_xA_x\sigma_zB_z+\sigma_yA_y\sigma_xB_x\\&+\sigma_yA_y\sigma_yB_y+\sigma_yA_y\sigma_zB_z+\sigma_zA_z\sigma_xB_x+\sigma_zA_z\sigma_yB_y+\sigma_zA_z\sigma_zB_z\\&=A_xB_x+i\sigma_zA_xB_y-i\sigma_yA_xB_z-i\sigma_zA_yB_x+A_yB_y+i\sigma_xA_yB_z\\&+i\sigma_yA_zB_x-i\sigma_yA_zB_y+A_zB_z\\&=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\sigma\cdot(\vec{A}\times\vec{B})\end{aligned}$$

（2）

由（1）有：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=p^2+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}\times\vec{p})$ 又 $\vec{p}\times\vec{p}=0$，即：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=p^2$。同理，也是利用（1），有：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=l^2+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{l}\times\vec{l})$。又 $\vec{l}\times\vec{l}=i\hbar\vec{l}$，即：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=\hat{l}^2-\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$。

4、(20 分) 一个质量为 m 的粒子在一维势阱

$$V(x)=\begin{cases}\infty & (x<-2a,x>2a)\\ 0 & (-2a<x<-a)\\ 0 & (a<x<2a)\\ V_0 & (-a<x<a)\end{cases}$$

中运动 (见图)。把 V_0 当做对在无限深方势阱中运动粒子的微扰，求粒子基态能量的一级近似值。

【析】 考试的时候，势阱 $V(x)=\begin{cases}\infty & (x<-2a,x>2a)\\ 0 & (-2a<x<2a)\end{cases}$ 的本征函数、能级，可以直接写出来。否则整个过程太烦了。求该本征函数、能级，是量子力学里最最基本的。

在势阱中，定态 Schrödinger 方程：

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

$$\psi''+k^2\psi=0 \qquad \psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$$

$$\begin{cases}\psi(-2a)=0\\ \psi(2a)=0\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}-A\sin 2ak+B\cos 2ak=0\\ A\sin 2ak+B\cos 2ak=0\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}A\sin 2ak=0\\ B\cos 2ak=0\end{cases}$$

有：

$$\begin{cases}A=0\\ \cos 2ak=0\end{cases}\Longrightarrow 2ak=n\frac{\pi}{2}(n\text{为奇})\begin{cases}B=0\\ \sin 2ak=0\end{cases}\Longrightarrow 2ak=n\frac{\pi}{2}(n\text{为偶})$$

即：

$$\psi_n^0=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2a}}\sin\frac{n\pi x}{4a} & (n\text{为偶})(-2a<x<2a)\\ \frac{1}{\sqrt{2a}}\cos\frac{n\pi x}{4a} & (n\text{为奇})(-2a<x<2a)\\ 0 & (x<-2a,x>2a)\end{cases} \qquad E_n^0=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{32a^2m}$$

【解】

将 $H'=V(x)=V_0 \quad (-a<x<a)$ 视为微扰，势阱 $V(x)=\begin{cases}\infty & (x<-2a,x>2a)\\ 0 & (-2a<x<2a)\end{cases}$

的本征函数、能级分别为：

$$\psi_n^0=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2a}}\sin\frac{n\pi x}{4a} & (n\text{为偶})(-2a<x<2a)\\ \frac{1}{\sqrt{2a}}\cos\frac{n\pi x}{4a} & (n\text{为奇})(-2a<x<2a)\\ 0 & (x<-2a,x>2a)\end{cases} \qquad E_n^0=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{32a^2m}$$

$$\psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2a}}\cos\frac{\pi x}{4a} \qquad E_1^0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{32a^2 m}$$

基态能级一级微扰项:

$$E_1^1 = \rangle\psi_1^0|H'|\psi_1^0\langle = \frac{V_0}{2a}\int_{-a}^{+a}\cos^2\frac{\pi x}{4a}dx$$

$$\cos 2y = \cos^2 y - \sin^2 y = 2\cos^2 y - 1 \qquad \cos^2 y = \frac{\cos 2y + 1}{2}$$

$$\int_{-a}^{+a}\cos^2\frac{\pi x}{4a}dx = \int_{-a}^{+a}(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cos\frac{\pi x}{2a})dx = a + \frac{1}{2}\int_{-a}^{a}\cos\frac{\pi x}{2a}dx = a + \frac{1}{2}\frac{2a}{\pi}\sin\frac{\pi x}{2a}\Big|_{-a}^{a}$$

$$= a + \frac{a}{\pi}[1-(-1)] = a + \frac{2a}{\pi}$$

即: $E_1^1 = \frac{V_0}{2a}(a+\frac{2a}{\pi}) = \frac{V_0}{2}(1+\frac{2}{\pi})$

粒子基态能量的一级近似值为:

$$E_1 = E_1^0 + E_1^1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{32a^2 m} + \frac{V_0}{2} + \frac{V_0}{\pi}$$

5、(20 分)用 Born 近似法求一质量为 m 的粒子被 Coulomb 势

$$V(r) = \frac{a}{r} \qquad (a>0\text{斥力}, a<0\text{引力})$$

散射时的散射截面。

【析】这个问题在曾谨言《量子力学》卷 I 第四版中 13.2.3 节有讲。《指导》12.7 题有详解。

【解】

把点电荷的 Coulomb 势

$$V(r) = \frac{a}{r}$$

看成 Yukawa 势

$$V(r) = \frac{ae^{-\alpha r}}{r}$$

的长程极限。

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r)r\sin qr dr = -\frac{2ma}{\hbar^2 q}\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qr dr = -\frac{2ma}{\hbar^2 q}\frac{q}{\alpha^2+q^2}$$

取极限 $\alpha\to 0$, 有:

$$f(\theta) = -\lim_{\alpha\to 0}\frac{2ma}{\hbar^2 q}\frac{q}{\alpha^2+q^2} = -\frac{2ma}{\hbar^2 w^2} = -\frac{ma}{2\hbar^2 k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

2.4 2009 解答

一、简单(共 40 分)1、(3 分)在 $B = 1.25\times 10^{-2}T$ 的匀强磁场中沿半径为 $R = 1.66cm$ 的圆轨道运动的 α 粒子的德布罗意波长是多少?(普朗克常量 $\hbar = 6.63\times 10^{-34}J\cdot s$, 基

本电荷 $e = 1.60\times10^{-19}C$）

【答】

$$Bqv = \frac{mv^2}{R} \Longrightarrow BqR = mv = p \qquad p = \frac{h}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{BqR} = \frac{6.63\times10^{-34}}{1.25\times10^{-2}\times2\times1.6\times10^{-19}\times1.66\times10^{-2}}m \approx 9.98\times10^{-12}m$$

2、(5 分) 原子内电子的量子态由 n, l, m_l 及 m_s 四个量子数表征。当 n, l, m_l 一定时，不同的量子态数目是多少？当 n, l 一定时，不同的量子态数目为多少？当 n 一定时，不同的量子态数目为多少？

【答】

考虑自旋。当 n, l, m_l 一定时，不同量子态数目为 2；当 n, l 一定时，不同量子态数目为 $2(2l+1)$；当 n 一定时，不同量子态数目为 $2n^2$。

3、（3 分）根据量子力学理论，氢原子中电子的动量矩在外磁场方向上的投影为 $L_z = m_l\hbar$，当角量子数 $l = 2$ 时，L_z 的可能取值为何？

【答】

$l = 2$ 时，m 的取值为：$0, \pm1, \pm2$，有 l_z 的可能取值为：$0, \pm\hbar, \pm2\hbar$。

4、（3 分）有一种原子，在基态时 $n = 1$ 和 $n = 2$ 的主壳层都填满电子，$3s$ 次壳层也填满电子，而 $3p$ 壳层只填充一半。这种原子的原子序数是多少？

【答】

n 取值	1	2		3		
l 取值	0^s	0^s	1^p	0^s	1^p	2^d
m_l 取值	0	0	0,1,-1	0	0,1,-1	
m_s 个数	2	2	2,2,2	2	2,2,2	

该原子为：$3S^2P^3$，原子序数为 15。

5、(10 分) 处于静止状态的自由电子是否能吸收光子，并把全部能量用来增加自己的动能？为什么？

【答】

不能，假设能。动量守恒有，$P_{电} = P_{光}$；能量守恒有，$\frac{P_{电}^2}{2m} = h\nu = \frac{hC}{\lambda} = P_{光}C$；即：$\frac{P_{电}}{2m} = C \quad P_{电} = mv_{电} \Longrightarrow v_{电} = 2C$，电子的速度为两倍光速，故不能。

6、(8 分) 根据量子力学理论，氢原子中电子的运动状态可用 n, l, m_l, m_s 四个量子数来描述。试说明它们各自确定什么物理量？

【答】

n 确定能量，l 确定角动量，m_l 确定角动量在 z 方向的取向，m_s 确定自旋取向。

7、(8 分) 根据泡利不相容原理，在主量子数 $n = 2$ 的电子壳层上最多可能有多少个电子？试写出每个电子所具有的四个量子数 n, l, m_l, m_s 之值。

【答】

最多可能有 8 个电子，分别是：

$$(2,0,0,\frac{1}{2})\quad (2,1,0,\frac{1}{2})\quad (2,1,-1,\frac{1}{2})\quad (2,1,1,\frac{1}{2})$$
$$(2,0,0,-\frac{1}{2})\quad (2,1,0,-\frac{1}{2})\quad (2,1,-1,-\frac{1}{2})\quad (2,1,1,-\frac{1}{2})$$

二、计算和证明（110 分）1、(20 分）如图，粒子在深度为 V_0，宽度为 a 的直角势阱中运动，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。

【缺图】【析】2009 年 828 量子力学第二题。曾题集 1.4 题。

2、(25 分）完成以下证明：

(1）设 $\vec{A},\vec{B}$ 为矢量算符，F 为标量算符，证明

$$[F,\vec{A}\cdot\vec{B}]=[F,\vec{A}]\cdot\vec{B}+\vec{A}\cdot[F,\vec{B}]$$
$$[F,\vec{A}\times\vec{B}]=[F,\vec{A}]\times\vec{B}+\vec{A}\times[F,\vec{B}]$$

(2）以 $\vec{r},\vec{p}$ 表示位置和动量算符，$\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p}$ 为轨道角动量算符，$\hat{F}=F(\vec{r},\vec{p})$ 为由 $\vec{r},\vec{p}$ 构成的标量算符。证明

$$[\hat{F},\vec{l}]=i\hbar\vec{r}\times\frac{\partial\hat{F}}{\partial\vec{r}}-i\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial\vec{p}}\times\vec{p}$$

【析】分别是曾题集 4.2 题和曾题集 4.3 题。

3、(25 分）质量为 μ 的粒子在中心力场 $V(r)=-\frac{\alpha}{r^s}\qquad\alpha>0$ 中运动，证明存在束缚态的条件为 $0<s<2$，再进一步证明在 $E\sim0^-$ 附近存在无限多条束缚态能级。

【析】是曾题集 5.1 题

4、(20 分）一维谐振子，其能量算符为 $H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，设此谐振子受到微扰作用 $H'=\frac{\lambda}{2}m\omega^2x2\qquad|\lambda|\ll1$。试求各能级的微扰修正（三级近似），并和精确解比较。

【析】是曾题集 11.10 题

5、(20 分）质量为 μ 的粒子束被球壳 δ 势场散射，$V(r)=V_0\delta(r-a)$，在高能近似下，用玻恩近似计算散射振幅和微分截面。

【析】是曾题集 14.2 题。

第三章 曾谨言《量子力学》卷 I 练习详解

参考书

- 量子力学 卷 I/曾谨言 著.–4 版--北京：科学出版社，2007
  以下简称《曾书》
- 量子力学学习指导 /张鹏飞，阮图南，朱栋培，吴强编著.--合肥：中国科学技术大学出版设，2008.4（2009.8 重印）
  以下简称《指导》
- 量子力学习题精选与剖析（第三版）/钱伯初，曾谨言 著.–3 版. 北京：科学出版设，2008
  以下简称《曾题集》

说明

- 为了方便查询，这里的目录与书上目录对应。
- 写得很仔细，甚至有点繁杂，主要是做到一看就明了。

3.1 量子力学的诞生

3.1.1 de Broglie 的物质波

p19

练习 1、对于非相对论粒子，动能 $E=\frac{1}{2}mv^2$，动量 $p=mv=\sqrt{2mE}$，de Broglie 波长 $\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$。对于 $m=1g$ 的宏观粒子，设 $v=1cm/s$，可以计算出 $\lambda\approx10^{-26}cm$，波长非常小（$\ll$ 原子大小 ~ $10^{-8}cm$），所以在宏观世界中很难观测到粒子的波动性。

【答】

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}=\frac{6.63\times10^{-34}}{10^{-3}\times10^{-2}}m=6.63\times10^{-29}m$$

即：$\lambda\approx10^{-26}cm$

练习 2、一个自由电子具有能量 $10eV$，求其波长。在非相对论情况下，质量为 m，能量为 E 的自由粒子，de Broglie 波长 $\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$。若 E 用 eV 为单位，对于电子 $(m=9.11\times10^{-28}g)$，有：$\lambda=\sqrt{\frac{150}{E}}$

【答】

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}=\frac{6.63\times10^{-34}}{\sqrt{2\times9.11\times10^{-31}\times1.6\times10^{-18}}}m=3.88\times10^{-9}m$$

【评】没什么，直接代公式，注意统一单位就行了！

练习 3、一个具有 5MeV 能量的 α 粒子穿过原子时，可否用经典力学来处理？设枪弹质

量为 20g，飞行速度为 1000m/s，求其 de Broglie 波长，并讨论有无必要用波动力学来处理。

练习 4、对于高速运动粒子 ($E \gg mc^2$)，$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \approx pc$，de Broglie 波长为

$$\lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar c}{E} \approx \frac{200}{E}$$

式中 E 用 MeV 为单位，λ 用 fm 为单位。设想用高能电子散射去探测原子核或核子的电荷分布的细节，对电子能量 E 有何要求？（核子大小 $\approx fm$，中等原子核的半径 ≈5fm）。

练习 5、有人提出，如果让宏观粒子的速度不断变慢（$\nu \to 0$），则 de Broglie 波长将不断变长，因而可以观测到粒子的波动性。你对此有何看法？

3.2 波函数与 Schrödinger 方程

3.2.1 波函数的统计诠释

3.2.1.1 概率波，多粒子系的波函数

P33 这几题在张永德《量子题典》上 1.16 有解

练习 1、粒子在一维无限深势阱中运动，

（1）设 $\psi(x) = A\sin\frac{\pi x}{a}$ 求归一化常数 A。

（2）设 $\psi(x) = A(x-a), A = ?$ 粒子在何处概率最大？

【解】

（1）

$$\begin{aligned}
\int_0^a \psi^2(x)dx &= \int_0^a A^2\sin^2\frac{\pi x}{a}dx & \cos 2x = 1 - 2\sin^2 x \\
&= A^2\int_0^a\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\frac{2\pi x}{a}\right)dx & \text{经典的处理方法} \\
&= A^2\left[\frac{x}{2}\Big|_0^a - \frac{a}{4\pi}\int_0^a\cos\frac{2\pi x}{a}d\frac{2\pi x}{a}\right] & \text{降次} \\
&= A^2\left[\frac{a}{2} - \frac{a}{4\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}\Big|_0^a\right] = \frac{a}{2}A^2 = 1 &
\end{aligned}$$

即：$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

（2）

$$\psi^2(x) = A^2x^2(a-x)^2 = A^2(a^2x^2 - 2ax^2 + x^4) \qquad \int_0^a \psi^2(x)dx = 1$$

$$A^2\left(\frac{a^2}{3}x^3-\frac{a}{2}x^4+\frac{1}{5}x^5\right)\Big|_0^a=1 \qquad A^2\frac{a^5}{30}=1 \qquad A=a\sqrt{30a}$$

$\psi^2(x)$ 的最大处 x 为粒子出现概率最大地方，有：

$$[\psi^2(x)]'=A^2(2a^2x-6ax^2+4x^3)=0 \qquad A^2x(2x-a)(x-a)=0$$

即：粒子在 $0,\frac{a}{2},a$ 处概率最大。

练习 2、设 $\psi(x)=Ae^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$，$\alpha$ 为实常数，求归一化常数 A。

【解】

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^2(x)dx=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx=A^2\cdot 2\int_0^{\infty}e^{-ax^2}dx$$

$$=A^2\cdot 2\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}=A^2\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}=1$$

即：$A=\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^4$

练习 3、设 $\psi(x)=e^{ikx}$，粒子的位置概率分布如何？这个波函数能否归一化？

【解】

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

即：波函数不能归一化。

其相对位置概率分布函数为：$\omega=|\psi|^2=1$，表示粒子在空间各处出现的概率相同。

练习 4、设 $\psi(x)=\delta(x)$，粒子的位置分布概率如何？这个波函数能否归一化？

【解】

在 $x=0$ 处，100%。不能归一化。

练习 5、设粒子波函数为 $\psi(x,y,z)$，求在 $(x,x+dx)$ 范围中找到粒子的概率。

【析】

这句话翻译成自己的理解是什么呢？波函数是什么？$|\psi(x)|^2$ 描述的是粒子在空间中的概率分布。$|\psi(x)|^2dxdydz$ 表示的是在体积元 $dxdydz$（立方体，长宽高）中找到粒子的概率。于是这题就成了 $[\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,y,z)|^2dydz]\cdot dx$ 就是要求对 y,z 全空间积分的值。

【解】

$$[\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,y,z)|^2dydz]\cdot dx$$

练习 6、设在球坐标系中，粒子波函数表示为 $\psi(r,\theta,\varphi)$. 试求：

（a）在球壳 $(r, r+dr)$ 中找到粒子的概率。

（b）在 (θ, φ) 方向的立体角 $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ 中找到粒子的概率。

【析】

球坐标下体积元为：$dV = r^2 dr d\cos\theta d\varphi$

【解】

（a）

$$\left[\int_0^{2\pi}\int_{-1}^{+1} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 d\varphi d\cos\theta\right] r^2 dr$$

（b）

$$\left[\int_0^{\infty} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 dr\right] \cdot \sin\theta d\theta d\varphi$$

练习 7、N 粒子系的波函数为 $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N)$，求在 $(\vec{r}_1, \vec{r}_1 + d\vec{r}_1)$ 范围中找到粒子 1 的概率（其他粒子位置不限制）。

3.2.1.2 力学量的平均值与算符的引进

p41

练习 1、对于 2.1.2 节的练习 1 ~ 4 中的粒子，求它的位置和动量的平均值。

【解】

（1）波函数 $\psi(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}$

【注：表示平均值有两种形式：一种，$\langle x\rangle$；另一种，$\bar{x}$。】

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_0^a \psi(x) x \psi^8(x) dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a} dx && \text{换元}\\
&= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} x'\sin^2 x' dx' && \text{降次 } \cos 2x' = \cos^2 x' - \sin^2 x'\\
&= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} \frac{1}{2} x'(1-\cos 2x') dx' && \sin^2 x' = \frac{1}{2}(1-\cos 2x')\\
&= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \left(\frac{1}{2}\int_0^{\pi} x' dx' - \frac{1}{2}\int_0^{\pi} x'\cos 2x' dx'\right)\\
&= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \cdot \frac{\pi^2}{4} = \frac{1}{2}a
\end{aligned}$$

$$\langle p\rangle=\int_0^a\psi(x)\hat{p}\psi^*(x)dx=\frac{2}{a}\int_0^a\sin\frac{\pi x}{a}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\sin\frac{\pi x}{a}dx$$

$$=-i\hbar\frac{2}{a}\cdot\frac{\pi}{a}\int_0^a\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}dx$$

$$=-2i\hbar\frac{\pi}{a^2}\cdot\frac{a}{4\pi}\int_0^{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}d\frac{2\pi}{a}x=0$$

【评】这就是在锻炼数学水平。用到了换元，三角函数关系。对于 $\int_0^\pi x'\cos 2x'dx'$ 从函数图像上就可以看出，积分为零；具体积下，也没关系：$\int_0^\pi x'\cos 2x'dx'=\frac{1}{2}\int_0^\pi x'd\sin 2x'=\frac{1}{2}(x'\cdot\sin 2x'|_0^\pi-\int_0^\pi\sin 2x'dx')=0$

3.2.2 Schrödinger 方程

3.2.2.1 方程的引进

p45

练习 1、设 ψ_1 与 ψ_2 是 Schrodinger 方程的两个解，证明

$$\int\psi_1^*(\vec{r},t)\psi_2(\vec{r},t)d^3x$$

与时间无关。

【证明】

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi_1^*\psi_2)=\psi_2\frac{\partial\psi_1^*}{\partial t}+\psi_1^*\frac{\partial\psi_2}{\partial t}\qquad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)]\psi$$

$$\frac{\partial\psi_1^*}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)]\psi_1^*\qquad\psi_2\frac{\partial\psi_1^*}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\frac{1}{i\hbar}V(r)\psi_2\psi_1^*$$

$$\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)]\psi_2^*\qquad\psi_1^*\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1^*\nabla^2\psi_2+\frac{1}{i\hbar}V(r)\psi_1^*\psi_2$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi_1^*\psi_2)=\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)=\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)$$

全空间积分：

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\psi_1^*\psi_2d^3x=\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)d^3x$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\oint d\vec{S}\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)$$
$$=0$$

【评】d^3x 一种体积元的表示方法吧。最后那个积分【不懂】诶！

3.2.2.2 不含时 Schrödinger 方程，能量本征值与定态

p50【注】以下几题的前提条件是：不含时 Schrodinger 方程，即定态！

练习 2、当势能 $V(\vec{r})$ 改变一个常量 C 时，即 $V(\vec{r}) \to V(\vec{r})+C$，粒子的能力本征波函数改变否？能量本征函数改变否？

【答】

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

令 $V'(\vec{r})=\vec{r}+C, E'=E+C$，有：

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

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

仍为：$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\psi=E\psi$，即：势能 $V(\vec{r})$ 改变一个常量 C 本征波函数不变，能量本征值相应的改变一个常量 C。

练习 3、设粒子势能 $V(\vec{r})$ 的极小值表示为 V_{min}，证明粒子的能量本征值

$$E>V_{min}$$

【提示】在能量本征态下，$E=\bar{T}+\bar{V}, \bar{T}\geqslant 0, \bar{V}\geqslant V_{min}$

【分析】

- $[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})]|\psi\rangle=E|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})]|\psi\rangle=\langle\psi|E|\psi\rangle=E\langle\psi|\psi\rangle \Rightarrow$ $E=\bar{T}+\bar{V}$ 严格点应是：$E_n=\bar{T}_n+\bar{V}_n$；
- $\bar{T}\geqslant 0$，动能是永远大于等于零的；
- $\bar{V}\geqslant V_{min}$，平均值大于最小值，这也好理解。

【证明】

$$E=\bar{T}+\bar{V}$$

因为，$\bar{T}\geqslant 0, \bar{V}\geqslant V_{min}$，所以

$$\bar{E}\geqslant V_{min}$$

【评】这为后来的，近似方法，变分法，提供了思路。

练习 4、设 $\psi(\vec{r},0)=c_1\psi_{E_1}(\vec{r})+c_2\psi_{E_2}(\vec{r})$，求 $\psi(\vec{r},t)$。讨论 $\rho(\vec{r},t), j(\vec{r},t)$ 以及它们随时间变化的周期 τ。

【析】定态的时间项：$e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$，其中的能量 E 一般是具体的数值，只不过表示的时候多用字母符号表示吧。

【答】

$$\psi(\vec{r},t)=c_1\psi_{E_1}(\vec{r})e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}+c_2\psi_{E_2}(\vec{r})e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}$$

【还没完!】

3.2.3 态叠加原理

3.2.3.1 量子态及其表象

p53

练习 1、平面单色波 $\psi_{p_0}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip_0x}{\hbar}}$ 所描述的态下，粒子具有确定的动量 $p=p_0$，量子力学中称之为动量本征态，动量本征值为 p_0。试在动量表现中写出此量子态。

【析】熟悉了 Dirac 符号，这个表象问题就很好解决。

【答】此量子态在动量表象中为：

$$\begin{aligned}\varphi_{p_0}(p)=\langle p|\psi_{p_0}(x)\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\psi_{p_0}(x)dx\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{ipx}{\hbar}}e^{\frac{ip_0x}{\hbar}}dx=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{i(p_0-p)\frac{x}{\hbar}}dx\\&=\frac{1}{2\pi}\int e^{i(p_0-p)\frac{x}{\hbar}}d\frac{x}{\hbar}=\delta(p_0-p)=\delta(p-p_0)\end{aligned}$$

【评】【数学】主要是要熟悉 δ 函数的一些性质。

练习 2、δ 函数 $\psi_{x_0}(x)=\delta(x-x_0)$ 描述的是粒子具有确定位置 $x=x_0$ 的量子态，称为粒子位置（坐标）本征态，位置本征值为 x_0。试在动量表象中写出此量子态。

【析】思路同上。

【答】此量子态在动量表象中为：

$$\begin{aligned}\varphi_{x_0}(p)=\langle p|\psi_{x_0}(x)\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\psi_{p_0}(x)dx\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-\frac{ipx}{\hbar}}\delta(x-x_0)dx\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{ix_0p}{\hbar}}\end{aligned}$$

练习 3、量子态在坐标表现中用 $\psi(\vec{r})$ 描述，粒子位置的平均值表示成 $\bar{\vec{r}}=\int\psi^*(\vec{r})\vec{r}\psi(\vec{r})d^3x$。试在动量表象中计算 $\bar{\vec{r}}$。

3.3 一维定态问题

3.3.1 一维定态的一般性质

p62

练习 对于三维情况，试证明定理 1 ~ 4。

3.3.2 方势阱

p66

练习 1、设粒子限制在二维无限深方势阱中运动，

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & 0<x<a,0<y<b\\ \infty & \text{其他地方}\end{cases}$$

求粒子能量允许值和相应的波函数。

【解】

（1）在势外，由于无限高位势，粒子限制在势阱中运动，$\psi(x,y)=0$。

（2）在势里 $0<x<a,0<y<b$ 的定态薛定谔方程为：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y)=E\psi(x,y)$$

使用分离变量法，令 $\psi(x,y)=\psi(x)\psi(y)$，有

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x)\psi(y)=E\psi(x)\psi(y)$$

即

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

两边除以 $\psi(x)\psi(y)$，有

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

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)}$ 与 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(y)}{\psi(y)}$ 无关，只有常数差，令 $E=E_1+E_2$，有

$$\begin{cases}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)}=E_1\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(y)}{\psi(y)}=E_2\end{cases}$$

即：

$$\begin{cases}\psi''(x)+\frac{2mE_1}{\hbar^2}\psi(x)=0\\ \psi''(y)+\frac{2mE_2}{\hbar^2}\psi(y)=0\end{cases}$$

令 $k_1^2=\frac{2mE_1}{\hbar^2},k_2^2\frac{2mE_2}{\hbar^2}\psi(y)$，有

$$\begin{cases}\psi''(x)+k_1^2\psi(x)=0 & 0<x<a\\ \psi''(y)+k_2^2\psi(y)=0 & 0<y<b\end{cases}$$

解得

$$\begin{cases}k_1a=n_1\pi, & k_1=\frac{n_1\pi}{a}\Longrightarrow E_1=\frac{n_1^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} & n_1=1,2,3\cdots\\ k_2b=n_2\pi, & k_2=\frac{n_2\pi}{b}\Longrightarrow E_2=\frac{n_2^2\pi^2\hbar^2}{2mb^2} & n_2=1,2,3\cdots\end{cases}$$

$$\begin{cases}\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_1\pi x}{a} & n_1=1,2,3\cdots\\ \psi(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_2\pi y}{b} & n_2=1,2,3\cdots\end{cases}$$

即：

$$E_{n_1,n_2}=E_1+E_2=\frac{n_1^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\frac{n_2^2\pi^2\hbar^2}{2mb^2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}(\frac{n_1^2}{a}+\frac{n_2^2}{b})$$

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y)=\frac{2}{\sqrt{ab}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{b}$$

$0<x<a,0<y<b \quad n_1=1,2,3,\cdots \quad n_2=1,2,3,\cdots$（它们彼此无关）

练习 2、设粒子限制在长方体匣子中运动，即：

$$V(x,y,z)\begin{cases}0, & 0<x<a,0<y<b,0<z<c\\ \infty & \text{其余区域}\end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征波函数。设 $a=b=c$，讨论能级的简并度。

【解】

(1) 在长方体外 $\psi(x,y,z)=0$。

(2) 在长方体内定态薛定谔方程为

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

同上分离变量，有：

$$E=\frac{n_1^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\frac{n_2^2\pi^2\hbar^2}{2mb^2}+\frac{n_3^2\pi^2\hbar^2}{2mc^2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\Big(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\Big)$$

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z)&=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_2\pi y}{b}\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\frac{n_3\pi z}{c}\\&=\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{b}\sin\frac{n_3\pi z}{c}\end{aligned}$$

$n_1,n_2,n_3=1,2,3\cdots$ （它们彼此无关）

当 $a=b=c$ 时，能量本征值为：

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$$

简并度取决于 $n_1^2+n_2^2+n_3^2=\frac{2ma^2}{\pi^2\hbar^2}E$ 的整数解 (n_1,n_2,n_3) 的个数。

例如：

- 基态：$n_1^2+n_2^2+n_3^2=3, E=\frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，$(n_1n_2n_3)=(111)$ 无简并；
- 第一激发态：$n_1^2+n_2^2+n_3^2=6, E=\frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}$，$(n_1n_2n_3)=(211),(121),(112)$ 为三重简并；
- 第二激发态：$n_1^2+n_2^2+n_3^2=9, E=\frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，$(n_1n_2n_3)=(221),(122),(212)$ 为三重简并；

练习 3、对于一维（宽度 L），二维（$a=b=L$），三维（$a=b=c=L$）无限深方势阱中的粒子，在大量子数情况下，分别讨论它们的态密度 $\rho(E)=\frac{dN}{dE}$，即单位能量范围中的态数，并讨论 $\rho(E)$ 对能量 E，参数 L，质量 m 的依赖关系。

【解】

（1）一维：$E_n=\dfrac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2}\qquad n^2=\dfrac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}$

量子态数与 n 的关系：$N=n$，有

$$N^2=\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E\qquad 2NdN=\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}dE$$

$$\frac{dN}{dE}=\frac{mL^2}{\hbar^2\pi^2}\frac{1}{N}\qquad \text{（想办法消去 }N\text{，用 }E\text{ 表示）}$$

将 $N=\dfrac{L}{\hbar\pi}\sqrt{2mE}$，代入则

$$\rho(E)=\frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}$$

（2）二维：$E=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2)\qquad n_1^2+n_2^2=\dfrac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E$

量子态数与 n_1,n_2 的关系：$N=\dfrac{1}{4}\pi r^2=\dfrac{1}{4}\pi(n_1^2+n_2^2)$，有

$$\frac{4}{\pi}N=\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E\qquad dN=\frac{L^2}{2\pi\hbar^2}mdE$$

$$\rho(E)=\frac{L^2}{2\pi\hbar^2}m\qquad \text{(不依赖于 E)}$$

（3）三维：$E=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)\qquad n_1^2+n_2^2+n_3^2=\dfrac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}E$

量子态数与 n_1,n_2,n_3 的关系，$N=\dfrac{1}{8}\cdot\dfrac{4}{3}\pi r^3=\dfrac{1}{6}\pi(n_1^2+n_2^2+n_3^2)^{\frac{3}{2}}$，有

$$\rho(E)=\frac{L^3}{4\pi^2\hbar^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}$$

【评】【不知道实际中这个问题有什么用?】本问题的关键就是找准个量子态 n 与量子态总数 N 之间的关系。以三维为例，将 n_1, n_2, n_3 视为 x, y, z 轴，就可以发现 n_1, n_2, n_3 表示的各态就是这个八分之一的正空间中的一个个整数点；于是求量子态总数变成了几何问题，变成求八分之一球中点数；一个整数点占的体积为 1，于是又变成，求这个八分之一球的体积了。

练习 4、试取一维无限深势阱的中心为坐标原点，即

$$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<\frac{a}{2}\\ \infty, & |x|>\frac{a}{2}\end{cases}$$

显然，粒子的能级不会改变，但能量本征函数表示式相应有所改变。试求之。

【略】周世勋的《量子力学教程》里讲的就是这个势。

练习 5、一维无限深势阱中的粒子，处于基态（$n=1$），

$$\psi_1(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\dfrac{\pi x}{a}, & |x|<\frac{a}{2}\\ 0, & |x|\rangle\frac{a}{2}\end{cases}$$

试讨论其动量和能量的概率分布。

【见】《指导》p55（3.4）

3.3.3 一维谐振子

p85

练习 1、利用 Hermite 多项式的递推关系『附录三，试（A3.12)』，求证

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

$$x^2\psi_n(x)=\frac{1}{2\alpha^2}[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}+(2n+1)\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}]$$

并由此证明在 ψ_n 态下，谐振子的 $\bar{x}=0, \bar{V}=\dfrac{E_n}{2}$。

【评】这里的两个证明，用 Hellmann-Feynman 定理很好证明。

练习 2、利用 Hermite 多项式的求导递推公式『附录三，式（A3.13)』，证明

$$\frac{d}{dx}\psi_n(x)=\alpha\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x)=\frac{\alpha^2}{2}[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}-(2n+1)\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}]$$

并证明在 ψ_n 态下，

$$\bar{p}=0, \qquad \bar{T}=\frac{\overline{p^2}}{2m}=\frac{E_n}{2}$$

练习 3、在 ψ_n 态下，计算 $\delta x=\sqrt{(x-\bar{x})^2}, \delta p_x=\sqrt{(p_x-\bar{p}_x)^2}, \delta x\cdot\delta p_x=?$ 与不确定关系比较。

练习 4、带电 q 的谐振子，若再受到均匀外电场 ε 的作用，

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2-q\varepsilon x$$

求能量本征值和本征函数。

【提示】谐振子平衡点由 $x=0$ 点移到 $x=x_0$ 点，$x_0=\frac{q\varepsilon}{\mu\omega_0^2}$

【解】

$$\begin{aligned}V(x)&=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2-q\varepsilon x=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2[x^2-\frac{2}{\mu\omega_0^2}q\varepsilon x+(\frac{q\varepsilon}{\mu\omega_0^2})^2-(\frac{q\varepsilon}{\mu\omega_0^2})^2]\\&=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(x-\frac{q\varepsilon}{\mu\omega_0^2})^2-\frac{1}{2}\frac{q^2\varepsilon^2}{\mu\omega_0^2}\end{aligned}$$

对于一维谐振子的定态 Schrodinger 方程：$\psi''+\frac{(V(x)-E)\hbar^2}{2m}\psi=0$，令 $V(x)=V'(x')+C, E=E'+C$，C 为常数，有：$V(x)-E=V'(x')-E'$，即解的形式没有变，有

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega-\frac{q^2\varepsilon^2}{2\mu\omega_0^2} \qquad \psi_n=\psi_n(x-x_0) \quad x_0=\frac{q\varepsilon}{\mu\omega_0^2}$$

【评】2.2.3 节练习 2

练习 5、设谐振子初态为 $\psi(x,0)=A\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{1}{\sqrt{2}})^2\psi_n(x)$，(a) 求归一化常数 A。(b) 求 $\psi(x,t)=?$

【解】

(a)

$$\begin{aligned}|\psi(x,0)|^2&=A^2(\frac{1}{\sqrt{2}})^1+A^2(\frac{1}{\sqrt{2}})^4+A^2(\frac{1}{\sqrt{2}})^6+\cdots+A^2(\frac{1}{\sqrt{2}})^{2n}\\&=A^2\frac{1}{1-(\frac{1}{\sqrt{2}})^2}=A^2\cdot 2=1\end{aligned}$$

即：$A=\frac{1}{\sqrt{2}}$

时间项：

$$\phi(t)=e^{-\frac{iEt}{\hbar}}=e^{-\frac{i(n+\frac{1}{2})\hbar\omega}{\hbar}}=e^{-i(n+\frac{1}{2}\omega t)}$$

即

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{1}{\sqrt{2}})^n\psi_n(x)e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}$$

3.4 力学量用算符表达

3.4.1 算符的一般运算规则

p123

练习 1、证明：$[\hat{p}_x,f(x)]=-ih\dfrac{\partial f}{\partial x}$

【证明】

$$\begin{aligned}[\hat{p_x},f(x)]\psi &= \hat{p_x}f(x)\psi-f(x)\hat{p_x}\psi\\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(f(x)\psi)+i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi\\ &= -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi-i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi+i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi\\ &= -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi\end{aligned}$$

练习 2、令 $\hat{l}_\pm=\hat{l}_x\pm i\hat{l}_x$，证明：$\hat{l}_z\hat{l}_\pm=\hat{l}_\pm(\hat{l}_z\pm h)$ 即 $[\hat{l}_z,\hat{l}_\pm]=\pm\hbar\hat{l}_\pm$

【证明】

$$\hat{l}_z\hat{l}_\pm=\hat{l}_z(\hat{l}_x\pm i\hat{l}_y)=\hat{l}_z\hat{l}_x\pm i\hat{l}_z\hat{l}_y$$

$$[\hat{l}_z,\hat{l}_x]=\hat{l}_z\hat{l}_x-\hat{l}_x\hat{l}_z=i\hbar\hat{l}_y \qquad [\hat{l}_y,\hat{l}_z]=\hat{l}_y\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{l}_y=i\hbar\hat{l}_x$$

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

【评】用对易式的性质，更简单，更明了！

练习 3、证明：$(1)[\hat{l}_\alpha,r^2]=0 \qquad (2)[\hat{l}_\alpha,\hat{p^2}]=0 \qquad (3)[\hat{l}_\alpha,\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}}]=0$

其中 $\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}}=x\hat{p}_x+y\hat{p}_y+z\hat{p}_z$

【证明】（1）

$$\begin{aligned}[l_x,r^2] &= l_xr^2-r^2l_x\\ &= l_x(x^2+y^2+z^2)-(x^2+y^2+z^2)l_x\\ &= [l_x,x^2]+[l_x,y^2]+[l_x,z^2]\end{aligned}$$

①

$$[l_x, x^2] = l_x x^2 - x^2 l_x = l_x xx - xxl_x$$

$$[l_x, x] = l_x x - xl_x = 0$$

$$[l_x, x^2] = xl_x x - xxl_x = x(l_x x - xl_x) = 0$$

同理

$$[l_y, y^2] = [l_z, z^2] = 0$$

②

$$[l_x, y^2] = l_x y^2 - y^2 l_x = l_x yy - yyl_x$$

$$[l_x, y] = l_x y - yl_x = i\hbar z \quad l_x yy = yl_x y + i\hbar zy$$

$$[l_x, y^2] = yl_x y + i\hbar zy - yyl_x = y(l_x y - yl_x) + i\hbar zy = 2i\hbar zy$$

同理

$$[l_x, z^2] = -2i\hbar zy$$

有

$$[l_x, r^2] = 0$$

同理

$$[l_y, r^2] = 0 \qquad [l_z, r^2] = 0$$

即

$$[l_\alpha, r^2] = 0$$

（2）**证明略**证明了你会发现，这个证明与位置平方的证明非常类似，基本上就是将 r 换成 p。

（3）

$$\begin{aligned}[\hat{l}_x, \vec{r}\cdot\vec{p}] &= [\hat{l}_x, x\hat{p}_x + y\hat{p}_y + z\hat{p}_z] \\ &= [\hat{l}_x, x\hat{p}_x] + [\hat{l}_x, y\hat{p}_y] + [\hat{l}_x, z\hat{p}_z] \\ &= x[\hat{l}_x, \hat{p}_x] + [\hat{l}_x, x]\hat{p}_x + y[\hat{l}_x, \hat{p}_y] + [\hat{l}_x, y]\hat{p}_y + z[\hat{l}_x, \hat{p}_z] + [\hat{l}_x, z]\hat{p}_z\end{aligned}$$

由 $[\hat{l}_x, \hat{p}_x] = 0; [\hat{l}_x, x] = 0; [\hat{l}_x, \hat{p}_y] = i\hbar p_z; [\hat{l}_x, y] = i\hbar z; [\hat{l}_x, \hat{p}_z] = -i\hbar p_y; [\hat{l}_x, z] = -i\hbar y$，有

$$[\hat{l}_x, \vec{r}\cdot\vec{p}] = 0 + 0 + i\hbar yp_z + i\hbar zp_y - i\hbar zp_y - i\hbar yp_z = 0$$

练习 4、证明：（1）$\hat{l}_\pm \hat{l}_\mp = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 \pm \hbar\hat{l}_z$；（2）$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hbar\hat{l}_z$。

【证明】

(1)

$$\begin{aligned}\hat{l}_{\pm}\hat{l}_{\mp} &= (\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y)(\hat{l}_x \mp i\hat{l}_y) = \hat{l}_x^2 \mp i\hat{l}_x\hat{l}_y \pm i\hat{l}_y\hat{l}_x + \hat{l}_y^2 \\ &= \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 \pm (i\hat{l}_y\hat{l}_x - i\hat{l}_x\hat{l}_y) = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 \pm [-i(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x)] \\ &= \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 \pm [-ii\hbar\hat{l}_z] = \hat{\vec{l}}^2 - \hat{l}_z^2 \pm \hbar\hat{l}_z\end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned}[\hat{l}_+, \hat{l}_-] &= \hat{l}_+\hat{l}_- - \hat{l}_-\hat{l}_+ = (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) - (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) \\ &= \hat{l}_x^2 - i\hat{l}_x\hat{l}_y + i\hat{l}_y\hat{l}_x + \hat{l}_y^2 - \hat{l}_x^2 - i\hat{l}_x\hat{l}_y + i\hat{l}_y\hat{l}_x - \hat{l}_y^2 \\ &= -i(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x) - i(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x) \\ &= -ii\hbar\hat{l}_z - ii\hbar\hat{l}_z \\ &= 2\hbar\hat{l}_z\end{aligned}$$

练习 5、证明：$[p_x^2, f(x)] = -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x$

【证明】

$$\begin{aligned}[p_x^2, f(x)]\psi &= p_x^2 f(x)\psi - f(x)p_x^2\psi \\ &= [p_x p_x, f(x)]\psi \\ &= p_x[p_x, f(x)]\psi + [p_x, f(x)]\psi \qquad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\psi) - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi \qquad \text{（利用练习 1）} \\ &= -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + (-i\hbar)^2\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\psi - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi \\ &= -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi \\ &= (-\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x)\psi\end{aligned}$$

即：

$$[p_x^2, f(x)] = -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x$$

练习 6、证明：

$$[\vec{l}, v(r)] = 0$$

$v(r)$ 是径向坐标 r 的函数。

【证明】由角动量平方算符球坐标形式 $\hat{l}^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]$ 可以看

出 $\vec{l}$ 中没有关于 r 的变量。$\vec{l}$ 算符只依赖于角变量 (θ,φ)，所以 $[\vec{l},v(r)]=0$。

【评】【这样的证明貌似有问题!】这将在证明中心力场中电子的总角动量 $\vec{J}$ 为守恒量时用到。

练习 7、证明

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\vec{l}^2}{2mr^2}$$

其中

$$\hat{p_r}=-i\hbar(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})$$

【证明】

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\begin{aligned}\hat{T}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})-\frac{\hbar^2}{2mr^2}(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})\\&=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{\vec{l}^2}{2mr^2}\end{aligned}$$

其中用到 $(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$，其证明见笔记。

【评】1、之前犯了个错误，将动能算符 $\hat{T}=\frac{\vec{p}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ 误认为是哈密顿算符 $\hat{H}=\frac{\vec{p}^2}{2m}+v(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+v(r)$2、证明也很简单，球坐标下，展开就知道了。【这是为中心力场做重要铺垫】

练习 8、设 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 之逆算符都存在，证明：$(\hat{A}\hat{B})^{-1}=\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$

【暂略】

【评】这是纯粹数学上的东西，还是存在什么物理意义??

练习 9、证明

$$e^{a\frac{d}{dx}}f(x)=f(x+a)$$

【暂略】

【评】同上，这是纯粹数学上的东西，还是存在什么物理意义??

练习 10、证明在 x 表象中 $\widetilde{\hat{p}}_x=-\hat{p}_x$

【分析】关键是要抓住转置的定义。算符 $\hat{O}$ 的转置算符 $\widetilde{\hat{O}}$ 定义为：$(\psi,\widetilde{\hat{O}}\varphi)=(\varphi^*,\hat{O}\psi^*)$。这就是证明 $\hat{p}_x$ 的转置算符为 $-\hat{p}_x$。在 x 表象中，$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$，利用书中上面的例子很好证明。

【证明】

$$(\varphi^*,\hat p_x\psi^*)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\hat p_x\psi^*dx=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*dx \qquad \text{分部积分}$$

$$=-i\hbar(\varphi\psi^*\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\varphi dx) \qquad \text{波函数在无限远处为 0}$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(-\hat p_x)\varphi dx$$

$$=(\psi,-\hat p_x\varphi)$$

即

$$\widetilde{\hat p}_x=-\hat p_x$$

练习 11、证明：$\widetilde{\hat A\hat B}=\widetilde{\hat B}\widetilde{\hat A}$ （$\hat A$ 与 $\hat B$ 是任意两个算符）

【析】这类证明都是按定义来！$(\psi,\widetilde{\hat O}\varphi)=(\varphi^*,\hat O\psi^*)$

【证明】

$$(\psi,\widetilde{\hat A\hat B}\varphi)=(\varphi^*,\hat A\hat B\psi^*)$$

$$(\psi,\widetilde{\hat B}\widetilde{\hat A}\varphi)=((\widetilde{\hat A}\varphi)^*,\hat B\psi^*)=(\hat B^*\psi,\widetilde{\hat A}\varphi)=(\varphi^*,\hat A\hat B\psi^*)$$

即 $(\psi,\widetilde{\hat A\hat B}\varphi)=(\psi,\widetilde{\hat B}\widetilde{\hat A}\varphi)$

即

$$\widetilde{\hat A\hat B}=\widetilde{\hat B}\widetilde{\hat A}$$

练习 12、证明：$\hat p_x^\dagger=\hat p_x$

【析】题意就是要证明算符 $\hat p_x$ 的厄米共轭算符为 $\hat p_x$，即它自身。如何证？还是按定义来。算符 $\hat O$ 的厄米共轭算符 $\hat O^\dagger$ 定义为：$(\psi,\hat O^\dagger\varphi)=(\hat O\psi,\varphi)$。又有，$(\psi,\hat O^\dagger\varphi)=(\hat O\psi,\varphi)=(\varphi,\hat O\psi)^*=(\varphi^*,\hat O^*\psi^*)=(\psi,\widetilde{\hat O}^*\varphi)$，即，$\hat O^\dagger=\widetilde{\hat O}^*$，即，算符 $\hat O_x$ 的厄米共轭算符 $\hat O_x$ 表示对算符 $\hat O$ 先取转置再取共轭或先取共轭再取转置。后来知道，量子力学基本假定之一：表示力学量的算符均为厄米算符。

【证明】

$$\hat p_x^\dagger=\widetilde{\hat p}_x^*=(-\hat p_x)^*=\hat p_x \qquad \text{练习 10},\widetilde{\hat p}_x=-\hat p_x$$

练习 13、证明：

（1）$(\hat A\hat B\hat C\cdots)^*=\hat A^*\hat B^*\hat C^*\cdots$；

（2）$(\hat A\hat B\hat C\cdots)^\dagger=\cdots\hat C^\dagger\hat B^\dagger\hat C^\dagger$。

【证明】

(1)

由定义，算符 $\hat{O}$ 的复共轭 $\hat{O}^*$ 是把 $\hat{O}$ 的表示式中所有复量换成其共轭复量，即有

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots)^* = \hat{A}^*\hat{B}^*\hat{C}^*\cdots$$

(2)

由练习 11，$\widetilde{\hat{A}\hat{B}} = \tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}}$，有

$$(\hat{A}\widetilde{\hat{B}\hat{C}\cdots}) = \widetilde{\hat{B}\hat{C}\cdots}\tilde{\hat{A}} = \widetilde{\hat{A}\cdots}\tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}} = \cdots\tilde{\hat{C}}\tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}}$$

由 $\hat{O}^\dagger = \tilde{\hat{O}}^*$ 及 (1)，有

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots)^\dagger = (\widetilde{\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots})^* = (\cdots\tilde{\hat{C}}\tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}})^* = \cdots\tilde{\hat{C}}^*\tilde{\hat{B}}^*\tilde{\hat{A}}^* = \cdots\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{C}^\dagger$$

练习 14、证明 $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{\vec{l}} = \vec{r}\times\hat{\vec{p}}$ 是厄米算符。

【析】按定义来，满足 $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ 或 $(\psi, \hat{O}\varphi) = (\hat{O}\psi, \varphi)$ 为厄米算符，即算符的厄米共轭算符为自身的算符。量子力学假定，表示力学量的算符为厄米算符，是物理意义对数学的内在要求。实验上可以观测的力学量当然要求平均值为实数，而在任何量子态下，厄米算符的平均值必然为实数，因此相应的算符必然要求是厄米算符。

【证明】

由练习 12 知 $\hat{p}$ 为厄米算符。

$$(\psi, \hat{T}\varphi) = (\psi, \frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi) = \frac{1}{2m}(\psi, \hat{p}\hat{p}\varphi) = \frac{1}{2m}(\hat{p}\psi, \hat{p}\varphi)$$
$$= \frac{1}{2m}(\hat{p}^2\psi, \varphi) = (\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi, \varphi) = (\hat{T}\psi, \varphi)$$

即 $\hat{T}$ 为厄米算符。

$$(\psi, \hat{l}_x\varphi) = (\psi, (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)\varphi) = y(\psi, \hat{p}_z\varphi) - z(\psi, \hat{p}_z\varphi)$$
$$= y(\hat{p}_z\psi, \varphi) - z(\hat{p}_z\psi, \varphi) = ((y\hat{p}_z - z\hat{p}_z)\psi, \varphi) = (\hat{l}_x\psi, \varphi)$$

即，$\hat{l}_x$ 为厄米算符，同理，$\hat{l}_y, \hat{l}_z$ 也为厄米算符。

由两个厄米算符之和仍为厄米算符，$\hat{\vec{l}} = \hat{l}_x\vec{i} + \hat{l}_y\vec{j} + \hat{l}_z\vec{k}$，有 $\hat{\vec{l}} = \vec{r}\times\hat{\vec{p}}$ 为厄米算符。

练习 15、

(1) 设 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 为厄米算符，则 $\dfrac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ 及 $\dfrac{1}{2i}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ 也是厄米算符。

(2) 由此证明，任何算符 $\hat{O}$ 可以分解为 $\hat{O} = \hat{O}_+ + i\hat{O}_-$，其中 $\hat{O}_+ = \dfrac{1}{2}(\hat{O} + \hat{O}^\dagger), \hat{O}_- = \dfrac{1}{2i}(\hat{O} - \hat{O}^\dagger)$ 都是厄米算符。

【证明】

(1)

$$
\begin{aligned}
(\psi,\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})\varphi)&=\frac{1}{2}(\psi,(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})\varphi)=\frac{1}{2}(\psi,\hat{A}\hat{B}\varphi)+\frac{1}{2}(\psi,\hat{B}\hat{A}\varphi)\\
&=\frac{1}{2}(\hat{A}\psi,\hat{B}\varphi)+\frac{1}{2}(\hat{B}\psi,\hat{A}\varphi)=\frac{1}{2}(\hat{B}\hat{A}\psi,\varphi)+\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B}\psi,\varphi)\\
&=(\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})\psi,\varphi)
\end{aligned}
$$

即 $\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})$ 为厄米算符，同理可证，$\frac{1}{2i}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})$ 也是厄米算符。

(2)

由 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 为厄米算符，有，$(\hat{A}\hat{B})^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger=\hat{B}\hat{A}$；

令 $\hat{O}=\hat{A}\hat{B}$，有

$\frac{1}{2}(\hat{O}+\hat{O}^\dagger),\frac{1}{2i}(\hat{O}-\hat{O}^\dagger)$ 为厄米算符；

令 $\hat{O}_+=\frac{1}{2}(\hat{O}+\hat{O}^\dagger),\hat{O}_-=\frac{1}{2i}(\hat{O}-\hat{O}^\dagger)$，有

任何算符 $\hat{O}$ 可以分解为

$$\hat{O}=\hat{O}_++i\hat{O}_-$$

练习 16、若厄米算符 $\hat{O}$ 在任何态下的平均值为 0，则 $\hat{O}=0$（零算符），即

$$\hat{O}\psi=0\qquad(\psi\text{任意})$$

练习 17、设 ψ 为归一化的波函数，F 为算符，证明

$$\overline{F^\dagger F}=(\psi,F^\dagger F\psi)\geqslant 0$$

并求等号成立的条件。

3.4.2 共同本征函数

3.4.2.1 对易力学量完全集

练习 1、对于一维自由粒子，$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 是否构成一个 CSCO?（见 4.2 节，例 3）。$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}_x^2$ 可否选为一个 CSCO?（见 4.2 节，例 4.）

定义空间反射算符 $\hat{p},\hat{p}\psi(x)=\psi(-x)$。显然，$\hat{p}^2\psi(x)=p\psi(-x)=\psi(x)$，所以 $\hat{p}^2=1$。因而 $\hat{p}$ 的本征值为 ±1，相应的本征态分别称为偶宇称态和奇宇称态。对于一维自由粒子，可否取 $(\hat{H},\hat{p})$ 为一个 CSCO? 如果可以，试写出其共同本征态。

练习 2、对于平面转子，可否选 $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 为一个 CSCO？（见 4.2 节，例 1）. 可否选 $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2I}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ 为一个 CSCO？ 可否选 $(\hat{H}, \hat{p}_\varphi)$ 为一个 CSCO？ 这里 $\hat{p}_\varphi$ 是在 xy 平面中对 x 轴的镜像反射算符，$\hat{p}_\varphi\psi(\varphi) = \psi(-\varphi)$，或 $\hat{p}_\varphi\psi(x, y) = \psi(x, -y)$。可以证明 $\hat{p}_\varphi$ 的本征值为 ± 1。

练习 3、对于三维自由粒子，$\hat{H} = \dfrac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)$，$\hat{H}$ 是否构成一个 CSCO?$(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ 是否构成一个 CSCO？ $\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z$ 可否选为一个 CSCO？
（见 4.3.2 节）。(x, y, z) 可否选为一个 CSCO? 如果可以，写出它们的共同本征态。$(x, y, \hat{p}_z)$ 可否选为一个 CSCO？ 如果可以，写出它们的共同本征态。

3.5 力学量随时间的演化与对称性

3.6 中心力场

3.6.1 中心力场中粒子运动的一般性质

3.6.1.1 二体问题

练习 1、证明下列关系式：

1）相对动量

$$\vec{p} = m\dot{\vec{r}} = \frac{1}{M}(m_2\vec{p}_1 - m_2\vec{p}_2)$$

2）总动量

$$\vec{P} = M\dot{\vec{R}} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

3）总角动量

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 = \vec{R} \times \vec{P} + \vec{r} \times \vec{p}$$

4）总动能

$$T = \frac{\dot{\vec{p}}_1}{2m_1} + \frac{\dot{\vec{p}}_2}{2m_2} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu}$$

反之，

$$\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{\mu}{m_1}\vec{r}, \qquad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{\mu}{m_2}\vec{r}$$

$$\vec{p}_1 = \frac{\mu}{m_2}\vec{P} - \vec{p}, \qquad \vec{p}_2 = \frac{\mu}{m_1}\vec{P} - \vec{p}$$

练习 2、试求总动量 $\vec{P}=\vec{p}_1+\vec{p}_2$ 及总角动量 $\vec{L}=\vec{l}_1+\vec{l}_2$ 在 $\vec{R},\vec{r}$ 表象中的算符表示。

$$\vec{P}=-i\hbar\nabla_R,\qquad \vec{L}=\vec{R}\times\vec{P}+\vec{r}\times\vec{p},\qquad \vec{p}=-i\hbar\nabla$$

3.6.2 Hellmann-Feynman 定理

3.6.2.1 HF 定理在中心力场问题中的应用

练习、试作尺度变换 $\vec{r}'=\sqrt{\mu}\vec{r}$ 来证明上述定理。

3.6.3 二维中心力场

3.6.3.1 二维无限深圆方势阱

练习、二维无限深方势阱

$$V(x,y)=\begin{cases}0, & 0<x,y<a\\ \infty, & \text{其他区域}\end{cases}$$

粒子能级为

$$E_{n_xn_y}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$$

$$n^2=n_x^2+n_y^2,\qquad n_x,n_y=1,2,3,\cdots$$

波函数为

$$\psi_{n_xn_y}(x,y)=\frac{2}{a}\sin(\frac{n_x\pi}{a}x)\sin(\frac{n_y\pi}{a}y)$$

试分析能级的简并度（见表 6.4）。能级简并度可否大于一般二维中心势？如何理解其对称性？

3.6.4 一维氢原子

练习、对于一维对称幂函数势阱

$$V(x)=-k|x|^\nu\qquad(\nu<0)$$

$x=0$ 是奇点，试求基态能级。

【提示】分别讨论 $\nu\leqslant-1$ 和 $\nu\geqslant-1$ 两种情况。

3.7 粒子在电磁场中的运动

3.8 表象变换与量子力学的矩阵形式

3.8.1 力学量（算符）的矩阵表示与表象变换

练习 1、根据谐振子的能量表象中 x 的矩阵，用矩阵乘法求出 x^2 的矩阵。

练习 2、设粒子处于宽度为 a 的无限深方势阱中，求能量表象中粒子的坐标及动量的矩阵表示。

3.8.2 Dirac 符号

练习 1、利用表象变换，从 $x_{x'x''}=\langle x'|x|x''\rangle = x'\delta(x'-x'')$ 计算 $x_{p'p''}$

练习 2、设粒子的 Hamilton 量 $H=\frac{p^2}{2m}+V(x), V(x)$ 可以对 x 做 Taylor 展开，证明

$$H_{x'x''}=\langle x'|H|x''\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\delta(x'-x'')+V(x')\delta(x'-x'')$$

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

3.9 自旋

3.9.1 电子自旋

3.9.1.1 自旋算符与 Pauli 矩阵

p285

练习 1、证明 $\sigma_x\sigma_y\sigma_z=i$。

【证明】

由 $\sigma_x\sigma_y=i\sigma_z$ 右乘 σ_z，有：

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z=i\sigma_z^2$$

由 $\sigma_z^2=1$，有：

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z=i$$

练习 2、证明

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$$

其中 $\vec{A}$ 和 $\vec{B}$ 是与 $\vec{\delta}$ 对易的任何两个矢量算符。

【证明】

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{A}=\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z \qquad \vec{\sigma}\cdot\vec{B}=\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z$$

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})&=(\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z)(\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z)\\&=\sigma_xA_x\sigma_xB_x+\sigma_xA_x\sigma_yB_y+\sigma_xA_x\sigma_zB_z+\sigma_yA_y\sigma_xB_x\\&+\sigma_yA_y\sigma_yB_y+\sigma_yA_y\sigma_zB_z+\sigma_zA_z\sigma_xB_x+\sigma_zA_z\sigma_yB_y\\&+\sigma_zA_z\sigma_zB_z\\&=A_xB_x+i\sigma_zA_xB_y-i\sigma_yA_xB_z-i\sigma_zA_yB_x+A_yB_y+i\sigma_xA_yB_z\\&+i\sigma_yA_zB_x-i\sigma_yA_zB_y+A_zB_z\\&=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\sigma\cdot(\vec{A}\times\vec{B})\end{aligned}$$

【评】最开始做这题的时候，想了很久，就没考虑矢量乘开来，虽然这方法很烦！

练习 3、证明

(1) $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=p^2$ $\quad\vec{p}$ 为动量算符

(2) $(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=l^2-\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$ $\quad\vec{l}$ 为轨道角动量算符

并由此证明 $\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$ 的本征值的 $l\hbar$ 和 $-(l+1)\hbar, l=0,1,2,\cdots$。

【证明】

(1)

由练习 2 有：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=p^2+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}\times\vec{p})$

又 $\vec{p}\times\vec{p}=0$，即：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=p^2$。

(2)

同理，也是利用练习 2，有 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=l^2+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{l}\times\vec{l})$

又 $\vec{l}\times\vec{l}=i\hbar\vec{l}$，即 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=\hat{l}^2-\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$。

(3)【注意】分清哪些是算符，因为表示算符的“ ˆ ”经常略去不写！

设 ψ 为 $\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$ 与 $\vec{l}$ 的共同本征函数，λ 为本征值，由 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=\hat{l}^2-\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$，有

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})(\vec{\sigma}\cdot\vec{l})\psi=\hat{l}^2\psi-\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\psi$$

由 $\hat{l}^2$ 的本征方程，$\hat{l}^2\psi=l(l+1)\hbar^2\psi$，有

$$\begin{aligned}\vec{\sigma}\cdot\vec{l}(\lambda\psi)&=l(l+1)\hbar^2\psi-\hbar\lambda\psi\\\lambda^2\psi&=l(l+1)\hbar^2\psi-\hbar\lambda\psi\end{aligned}$$

$$\lambda^2+\hbar\lambda-l(l+1)\hbar^2=0$$

解得，$\lambda=l\hbar$ 或 $l(l+1)\hbar, l=0,1,2,\cdots$

即：$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$ 的本征值的 $l\hbar$ 和 $-(l+1)\hbar, l=0,1,2,\cdots$。

练习 4、设算符 $\vec{A}$ 与 $\vec{\sigma}$ 对易，证明：

$$\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})-\vec{A}=\vec{A}-(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\vec{\sigma}=i\vec{A}\times\vec{\sigma}$$

【注意】$\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})$ 与 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma})\vec{A}$ 是不同的？猛然发现我居然没查到相关资料！

【证明】

利用练习 2 有：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})=\vec{B}\cdot\vec{A}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{B}\times\vec{A})$

利用 $\vec{\sigma}$ 与 $\vec{B}$ 对易及混合积轮换性质，有 $\vec{B}\cdot\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})=\vec{B}\cdot\vec{A}+i\vec{B}\cdot(\vec{A}\times\vec{\sigma})$

略去 $\vec{B}$，有：$\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})=\vec{A}+i\vec{A}\times\vec{\sigma}$

即：$\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})-\vec{A}=i\vec{A}\times\vec{\sigma}$

还是利用练习 2 有：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$

利用混合积轮换性质，有：$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})=\vec{A}\cdot\vec{B}+i(\vec{\sigma}\times\vec{A})\cdot\vec{B}$

略去 $\vec{B}$，有 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\vec{\sigma}=\vec{A}+i\vec{\sigma}\times\vec{A}$

利用叉乘的性质，$\vec{\sigma}\times\vec{A}=-\vec{A}\times\vec{\sigma}$，有 $\vec{A}-(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\vec{\sigma}=i\vec{A}\times\vec{\sigma}$

即，有

$$\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})-\vec{A}=\vec{A}-(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\vec{\sigma}=i\vec{A}\times\vec{\sigma}$$

练习 5、令 $\sigma_{\pm}=\frac{1}{2}(\sigma_x\pm i\sigma_y)$，证明：

$(1)\sigma_{\pm}^2=0$

$(2)[\sigma_+,\sigma_-]=\sigma_z$

$(3)[\sigma_z,\sigma_{\pm}]=\pm2\sigma_{\pm}$　　　　　　即$\sigma_z\sigma_{\pm}=\sigma_{\pm}(\sigma_z\pm2)$

【证明】

(1)

$$\begin{aligned}\sigma_{\pm}^2&=\frac{1}{4}(\sigma_x\pm i\sigma_y)(\sigma_x\pm i\sigma_y)\\&=\frac{1}{4}(\sigma_x^2\pm i\sigma_x\sigma_y\pm i\sigma_y\sigma_x-\sigma_y^2)\\&=\frac{1}{4}i(\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x)=0\end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned}
[\sigma_+, \sigma_-] &= \sigma_+\sigma_- - \sigma_-\sigma_+ \\
&= \frac{1}{4}(\sigma_x + i\sigma_y)(\sigma_x - i\sigma_y) - \frac{1}{4}(\sigma_x - i\sigma_y)(\sigma_x + i\sigma_y) \\
&= \frac{1}{4}(\sigma_x^2 - i\sigma_x\sigma_y + i\sigma_y\sigma_x + \sigma_y^2) - \frac{1}{4}(\sigma_x^2 + i\sigma_x\sigma_y - i\sigma_y\sigma_x + \sigma_y^2) \\
&= \frac{1}{4}(-i2i\sigma_z) - \frac{1}{4}(i2i\sigma_z) \\
&= \sigma_z
\end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned}
[\sigma_z, \sigma_\pm] = [\sigma_z, \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)] &= \frac{1}{2}[\sigma_z, \sigma_x \pm i\sigma_y] \\
&= \frac{1}{2}[\sigma_z, \sigma_x] \pm \frac{1}{2}i[\sigma_z, \sigma_y] = \frac{1}{2}2i\sigma_y \pm \frac{1}{2}i(-2i\sigma_x) \\
&= i\sigma_y \pm \sigma_x = \pm(\sigma_x \pm i\sigma_y) = \pm 2\sigma_\pm
\end{aligned}$$

【评】千万要注意算符是不能随便交换位置的，这在平方的时候要注意。第 3 问的证明与书本上的题有些出入，相差 2，但怎么看我也没证错啊。书上印刷有误?

练习 6、证明

$$e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{A}} = \cos A + i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{A}}{A}\sin A$$

其中 $A = |\vec{A}|, \frac{\vec{A}}{A}$ 表示 $\vec{A}$ 方向的单位矢量，$\vec{A}$ 是与 $\vec{\sigma}$ 对易的任何矢量。特别是

$$e^{i\sigma_z A} = \cos A + i\sigma_z \sin A$$

【证明】

将 $\vec{A}$ 写成 $A\vec{n}$，$\vec{n}$ 为 $\vec{A}$ 方向单位矢量 ($\vec{n} = \frac{\vec{A}}{A}$)，则:

$$e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{A}} = e^{iA\sigma_n}$$

其中 σ_n 为 $\vec{\sigma}$ 在 $\vec{n}$ 方向的投影。

特别的对于 $\sigma_n = \sigma_z$，有

$$e^{iA\sigma_z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iA\sigma_z)^n}{n!}$$

由于 $\sigma_z^2 = 1$；当 n 为偶数时，$\sigma_z^n = 1$；当 n 为奇数时，$\sigma_z^n = \sigma_z$；则

$$\begin{aligned}
e^{iA\sigma_z} &= (-1)^k\frac{(A\sigma_z)^{2k}}{(2k)!} + (-1)^k i\frac{(A\sigma_z)^{2k+1}}{(2k+1)!} \\
&= \cos A + i\sigma_z \sin A
\end{aligned}$$

由于 $\vec{\sigma}$ 沿任何指定方向的投影只能取 ±1，所以 $\sigma_n^2 = 1$，即对于 σ_n 同理，有

$$e^{iA\sigma_n} = \cos A + i\sigma_n \sin A$$

即

$$e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{A}} = \cos A + i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{A}}{A}\sin A$$

【评】1、这道题当时实在没做出来。实质上这是在考察数学，数学功底不行啊。2、这题还有两种解法，见曾题集吧。

练习 7、令 $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$，在 σ_z 表象中

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

证明：

$$\begin{aligned} \sigma_x\alpha &= \beta & \sigma_x\beta &= \alpha \\ \sigma_y\alpha &= i\beta & \sigma_y\beta &= -i\alpha \\ \sigma_+\alpha &= 0 & \sigma_+\beta &= \alpha \\ \sigma_-\alpha &= \beta & \sigma_-\beta &= 0 \end{aligned}$$

【析】这个很简单，直接算就是，没什么技术要求。首先要知道，这里的 α, β 是什么。$\alpha = \binom{1}{0}$ 是自旋 S_z 本征值为 $\frac{1}{2}$ 的本征态，$\beta = \binom{0}{1}$ 是自旋 S_z 本征值为 $-\frac{1}{2}$ 的本征态。

【证明】

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

在 σ_z 表象中

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

$$\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y) = \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right]$$

所以

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x \alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta$$

$$\sigma_x \beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha$$

$$\sigma_y \alpha = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i\beta$$

$$\sigma_y \beta = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} = -i\alpha$$

$$\sigma_+ \alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\sigma_+ \beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha$$

$$\sigma_- \alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta$$

$$\sigma_- \beta = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

练习 8、令 $P_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \sigma_z)$

（1）证明：$P_+ + P_- = 1, P_+^2 = P_+, P_-^2 = P_-, P_+P_- = P_-P_+ = 0$

（2）在 σ_z 表象中，写出 $P_\pm$ 的矩阵表示式。

（3）证明：

$$P_+ \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad P_- \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\binom{1}{0}$ 和 $\binom{0}{1}$ 分别是“自旋向上”（$S_z = \frac{1}{2}$）和“自旋向下”（$S_z = -\frac{1}{2}$）的态，所以 $P_\pm$ 分别为自旋投影算符。

【解】

（1）

$$P_+ = \frac{1}{2}(1 + \sigma_z) \qquad P_- = \frac{1}{2}(1 - \sigma_z)$$

$$P_+ = P_- = 1$$

$$P_+^2 = \frac{1}{4}(1+\sigma_z)(1+\sigma_z) = \frac{1}{4}(1+2\sigma_z+\sigma_z^2)$$

$$\sigma_z^2 = 1$$

$$P_+^2 = \frac{1}{2}(1+\sigma_z) = P_+$$

同理$P_-^2 = P_-$

$$P_+P_- = \frac{1}{4}(1+\sigma_z)(1-\sigma_z) = \frac{1}{4}(1-\sigma_z^2) = 0$$

同理$P_+P_- = 0$

$$P_+P_- = P_-P_+ = 0$$

（2）σ_z 表象中，$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$P_+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P_- = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

（3）

$$P_+\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P_-\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix} = b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

练习 9、设 $\vec{A},\vec{B},\vec{C}$ 是与 $\vec{\sigma}$ 对易的算符，证明：

$$Tr(\vec{\sigma}\cdot\vec{A}) = 0$$

$$Tr[(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})] = 2\vec{A}\cdot\vec{B}$$

$$Tr[(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})(\vec{\sigma}\cdot\vec{C})] = 2i(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C} = 2i\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C})$$

设 $\vec{A}$ 和 $\vec{B}$ 为常矢，则

$$Tre^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{A}} = 2\cos A, A = |\vec{A}|$$

$$Tr(e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{A}}e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{B}}) = 2\cos A\cos B - 2\frac{\vec{A}\cdot\vec{B}}{AB}\sin A\sin B$$

【析】Tr 为矩阵的迹，即矩阵对角线元之和。

【证明】

$$\vec{\sigma} = \sigma_x\vec{i} + \sigma_y\vec{j} + \sigma_z\vec{k} \qquad \vec{A} = A_x\vec{i} + A_y\vec{j} + A_z\vec{k}$$

$$
\begin{aligned}
\vec{\sigma}\cdot\vec{A} &= \sigma_x A_x + \sigma_y A_y + \sigma_z A_z \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} A_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} A_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} A_z \\
&= \begin{pmatrix} 0 & A_x \\ A_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -iA_y \\ iA_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_z & 0 \\ 0 & -A_z \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} A_z & A_x - iA_y \\ A_x + iA_y & -A_z \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$$Tr(\vec{\sigma}\cdot\vec{A}) = 0$$

同理，$\vec{\sigma}\cdot\vec{A} = \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{A}) = \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}$$

$$
\begin{aligned}
Tr[(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})] &= A_zB_z + (A_x - iA_y)(B_x + iB_y) + (A_x + iA_y)(B_x - iB_y) + A_zB_z \\
&= 2A_zB_z + A_xB_x + iA_xB_y - iA_yB_x + A_yB_y + A_xB_x - \\
& iA_xB_y + iA_yB_x + A_yB_y \\
&= 2(A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z) \\
&= 2(\vec{A}\cdot\vec{B})
\end{aligned}
$$

【未完!】

练习 10、证明找不到一个表象，在其中：(a) 三个 Pauli 矩阵均为实矩阵，或 (b) 二个是纯虚矩阵，而另一个为实矩阵。

练习 11、证明 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 及 I（2×2 单位矩阵）构成 2×2 矩阵的完全集，即任何 2×2 矩阵均可用它们的线性组合来表达。任何 2×2 矩阵 M 可表示成

$$M = \frac{1}{2}[(TrM)\vec{I} + Tr(M\vec{\sigma})\cdot\vec{\sigma}]$$

提示：利用 $TrI = 2, Tr\vec{\sigma} = 0.$

练习 12、设 $A\vec{\sigma} = \vec{\sigma}A$，则 A 为 0 或常数矩阵。

【析】A 肯定为二阶矩阵，因为 $A\vec{\sigma} = \vec{\sigma}A$，$\sigma$ 为二阶矩阵已经默认了 A 为二阶矩阵。这也是书上不讲，答案不讲的部分，要自己明白好好注意。

练习 13、设 $A\vec{\sigma} = -\vec{\sigma}A$，则 $A = 0$。

3.9.2 总角动量

p294

练习 1、证明

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}=\sigma_z l_z+\sigma_+ l_-+\sigma_- l_+$$

其中 $l_\pm = l_x \pm i l_y, \sigma_\pm = \dfrac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$。

【证明】

$$\begin{aligned}
\sigma_+ l_- &= \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y)(l_x - i l_y)\\
&= \frac{1}{2}(\sigma_x l_x - i\sigma_x l_y + i\sigma_y l_x + \sigma_y l_y)\\
\sigma_- l_+ &= \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y)(l_x + i l_y)\\
&= \frac{1}{2}(\sigma_x l_x + i\sigma_x l_y - i\sigma_y l_x + \sigma_y l_y)\\
\sigma_+ l_- + \sigma_- l_+ &= \sigma_x l_x + \sigma_y l_y
\end{aligned}$$

即：$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}=\sigma_z l_z+\sigma_+ l_-+\sigma_- l_+$

【评】没什么技术处理，直接算就是了。但不知道，这个有什么用？纯粹熟悉知识??

练习 2、证明

$$\sum_{m=-l}^{l}\langle lm|Q_{zz}|lm\rangle = 0$$

提示：$\sum_{m=-l}^{l} m^2 = \frac{1}{3}l(l+1)(2l+1)$

3.9.3 二电子体系的自旋态

3.9.3.1 自旋单态与三重态

p304

练习 1、证明

$$(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)^2 = 3-2(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$$

并利用此结果，求 $(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$ 的两个本征值。

【析】看样子应该展开！

【证明】

$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2=\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}$$

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)^2&=(\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z})(\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z})\\&=\sigma_{1x}^2\sigma_{2x}^2+\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{1z}\sigma_{2z}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}^2\sigma_{2y}^2\\&+\sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{1z}\sigma_{2z}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}^2\sigma_{2z}^2\end{aligned}$$

由 $\vec{\sigma}_1$ 与 $\vec{\sigma}_2$ 对易，及 $\sigma_x\sigma_y=i\sigma_z$，有：

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)^2&=3-\sigma_{1z}\sigma_{2z}-\sigma_{1y}\sigma_{2y}-\sigma_{1z}\sigma_{2z}-\sigma_{1x}\sigma_{2x}-\sigma_{1y}\sigma_{2y}-\sigma_{1x}\sigma_{2x}\\&=3-2(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)\end{aligned}$$

设 λ 为 $(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$ 的本征值，有：

$$\lambda^2=3-2\lambda$$

解得：$\lambda_1=-3\qquad\lambda_2=1$ 即：$(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$ 的两个本征值分别为：$-3,1$。

练习 2、利用 $\vec{S}^2=\frac{\hbar^2}{2}(3+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$，求 $(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$ 本征值，与上题比较，并证明：

$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S}$$

$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{00}=-3\chi_{00}$$

【析】$\vec{S}^2$ 见书上 9.4.6 式。$\vec{S}=\vec{s}_1+\vec{s}_2$ 表示两个电子自旋算符之和。

$$\vec{s}_1=\frac{\hbar}{2}\sigma_1\qquad \vec{s}_1^2=\frac{\hbar^2}{4}\vec{\sigma}_1^2=\frac{\hbar^2}{4}(\sigma_{1x}^2+\sigma_{1y}^2+\sigma_{1z}^2)=\frac{3\hbar^2}{4}$$

$$\vec{S}^2=(\vec{s}_1+\vec{s}_2)^2=\vec{s}_1^2+\vec{s}_2^2+2\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2=\frac{\hbar^2}{2}(3+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$$

【证明】

$\vec{S}^2$ 的本征值分别为：$0,2\hbar^2$，有

$$0=\frac{3\hbar^2}{2}+\lambda_1\frac{\hbar^2}{2}\qquad\lambda_1=-3$$

$$2\hbar^2=\frac{3\hbar^2}{2}+\lambda_2\frac{\hbar^2}{2}\qquad\lambda_2=1$$

与上题结果一样。由 $\vec{S}^2\chi_{1M_S}=2\hbar^2\chi_{1M_S},\vec{S}^2\chi_{00}=0$，有

$$\vec{S}^2\chi_{1M_S}=\frac{3\hbar^2}{2}\chi_{1M_S}+\frac{\hbar^2}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1M_S}$$

$$2\hbar^2\chi_{1M_S}=\frac{3\hbar^2}{2}\chi_{1M_S}+\frac{\hbar^2}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1M_S}$$

$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S}$$

$$\vec{S}^2\chi_{00}=\frac{3\hbar^2}{2}\chi_{00}+\frac{\hbar^2}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{00}$$

$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{00}=-3\chi_{00}$$

练习 3、令 $P_{12}=\frac{1}{2}(1+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$，证明：

$$P_{12}\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S}$$

$$P_{12}\chi_{00}=-\chi_{00}$$

P_{12} 有何物理意义？（自旋交换算符）。再证明（取 $\hbar=1$）

$$P_{12}^1=1, P_{12}=\vec{S}^2-1$$

【析】不用说，要用到练习 2。不知道取 $\hbar=1$，有什么意义？

【证明】

由练习 2，有

$$\begin{aligned}
P_{12}\chi_{1M_S}&=\frac{1}{2}\chi_{1M_S}+\frac{1}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_z\chi_{1M_S}\\
&=\frac{1}{2}\chi_{1M_S}+\frac{1}{2}\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S}\\
P_{12}\chi_{00}&=\frac{1}{2}\chi_{00}+\frac{1}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{00}\\
&=\frac{1}{2}\chi_{00}-\frac{3}{2}\chi_{00}=-\chi_{00}\\
P_{12}^2&=\frac{1}{4}[1+2\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2+(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)^2]\\
&=\frac{1}{4}[1+2\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2+(3-2\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)]\\
&=1\\
\vec{S}^2-1&=\frac{1}{2}(3+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)-1=\frac{1}{2}(1+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)=P_{12}
\end{aligned}$$

练习 4、令

$$P_3=\frac{1}{4}(3+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)=\frac{1}{2}(1+P_{12})$$

$$P_1=\frac{1}{4}(1-\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)=\frac{1}{2}(1-P_{12})$$

证明

$$P_3\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S},\qquad P_3\chi_{00}=0$$

$$P_1\chi_{1M_S}=0,\qquad P_1\chi_{00}=\chi_{00}$$

还可证明

$$P_3^2=P_3,\qquad P_1^2=P_1,\qquad P_3P_1=0$$

P_3 与 P_1 分别为三重态和单态的投影算符。

练习 5、令（取 $\hbar=1$）

$$S_{12}=\frac{3(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{r})(\sigma_2\vec{\cdot}\vec{r})}{r^2}-(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2),\qquad \vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$$

求证：

（1）

$$S_{12}=\frac{6(\vec{S}\cdot\vec{r})^2}{r^2}-2\vec{S}^2$$

$$S_{12}^2=6+2\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2-2S_{12}=4\vec{S}^2-2S_{12}$$

因此，S_{12} 的任何次幂均可表示为 S_{12} 与 $\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$ 的线性组合。

（2）

$$[S_{12},\vec{S}^2]=0,\qquad [S_{12},\vec{J}]=0$$

这里 $\vec{S}=\vec{s}_1+\vec{s}_2,\vec{J}=\vec{l}+\vec{S},\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p},\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2,\vec{p}=\vec{p}_1+\vec{p}_2$。

（3）求 S_{12} 的本征值。

（4）证明对空间各方向求平均后，S_{12} 的平均值为 0。

练习 6、自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的二粒子组成的体系，处于自旋单态 χ_{00}。设 $\vec{a}$ 与 $\vec{b}$ 是空间任意两个方向。粒子 1 的自旋沿 $\vec{a}$ 方向的分量 $\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a}$ 与粒子 2 的自旋沿 $\vec{b}$ 方向的分量 $\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b}$ 有确切的关联。证明：

$$\langle\chi_{00}|(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})|\chi_{00}\rangle=-(\vec{a}\cdot\vec{b})$$

【提示】利用 $P_{12}\chi_{00}=-\chi_{00}$，可得 $\langle\chi_{00}|(\vec{\sigma}_1+\vec{\sigma}_2)|\chi_{00}\rangle=0$。

因此

$$\begin{aligned}\langle\chi_{00}|(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})|\chi_{00}\rangle&=-\langle\chi_{00}|(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{b})|\chi_{00}\rangle\\&=-(\vec{a}\cdot\vec{b})-i\langle\chi_{00}|\vec{\sigma}_1|\chi_{00}\rangle\cdot(\vec{a}\times\vec{b})=-(\vec{a}\cdot\vec{b})\end{aligned}$$

3.10 力学量本征值的代数解法

3.10.1 Schrödinger 因式分解法

练习 1、证明在能量本征态 $|n\rangle$ 下，

$$\bar{x}=\bar{p}=0,\bar{x^2}=\bar{p^2}=(n+\frac{1}{2})$$

$$\Delta x\cdot\Delta p=(n+\frac{1}{2})\hbar$$

对于基态 $(n=0),\Delta x\cdot\Delta p=\frac{\hbar}{2}$

【证明】

(1)

$$\hat{x} = (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}}(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger})$$

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle, \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n-1}|n-1\rangle, \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{x}|n\rangle &= (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}}\langle n|\hat{a}^{\dagger}|n\rangle + (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}}\langle n|\hat{a}|n\rangle \\ &= (\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{1}{2}}(\sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle + \sqrt{n-1}\langle n|n-1\rangle) = 0\end{aligned}$$

$\hat{p} = i(\frac{\hbar m\omega}{2})^{\frac{1}{2}}(\hat{a}^{\dagger} - \hat{a})$ 同理：$\langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$

(2)

$$\begin{aligned}\hat{x}^2 &= [\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a})]^2 = \frac{1}{2}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^{\dagger})^2 + \hat{a}\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}^{\dagger}\hat{a}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^{\dagger})^2 + 2\hat{N} + 1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{x}^2|n\rangle &= \frac{1}{2}\langle n|\hat{a}^2|\rangle + \frac{1}{2}\langle n|(\hat{a}^{\dagger})^2|n\rangle + \frac{1}{2}\langle n|2\hat{N}|n\rangle + \langle n|n\rangle \\ &= \frac{1}{2}(\sqrt{n-1}\langle n|\hat{a}|n-1\rangle + \frac{1}{2}\sqrt{n+1}\langle n|\hat{a}^{\dagger}|n+1\rangle + 2n+1) \\ &= \frac{1}{2}(2n+1) = (n+\frac{1}{2})\end{aligned}$$

(3) 乱搞。前面无量纲。现在呢？又有量纲了。

$$(\Delta x)^2 = \bar{x^2} - (\bar{x})^2$$

练习 2、设 $H = \frac{5}{3}\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{2}{3}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^{\dagger})^2), [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$，求 H 的本征值。

【提示】 作幺正变换，$\hat{b}^{\dagger} = \lambda\hat{a}^{\dagger} + \mu\hat{a}$（$\lambda, \mu$ 为待定的实参数），要求 $[\hat{b}, \hat{b}^{\dagger}] = 1$，并使 H 化为 $H = K\hat{b}^{\dagger}\hat{b} + c$（$K, c$ 为待定常数）。

【析】 看了提示，思路还是转换到跟求谐振子本征值一样的过程，$|n\rangle$ 为 $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}$ 的本征态，n 为其本征值。关键就是数学上凑数。看你会不会凑。

【解】

按提示

$$
\begin{aligned}
[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] &= \hat{b}\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{b} \\
&= (\lambda\hat{a} + \mu\hat{a}^\dagger)(\lambda\hat{a}^\dagger + \mu\hat{a}) - (\lambda\hat{a}^\dagger + \mu\hat{a})(\lambda\hat{a} + \mu\hat{a}^\dagger) \\
&= \lambda^2\hat{a}\hat{a}^\dagger + \lambda\mu\hat{a}^2 + \mu\lambda(\hat{a}^\dagger)^2 + \mu^2\hat{a}^\dagger\hat{a} - \lambda^2\hat{a}^\dagger\hat{a} - \lambda\mu(\hat{a}^\dagger)^2 - \mu\lambda\hat{a}^2 - \mu^2\hat{a}\hat{a}^\dagger \\
&= (\lambda^2 - \mu^2)\hat{a}\hat{a}^\dagger + (\mu^2 - \lambda^2)\hat{a}^\dagger\hat{a} \\
&= (\lambda^2 - \mu^2)(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) = (\lambda^2 - \mu^2)[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \\
&= \lambda^2 - \mu^2 = 1 \\
\hat{b}\hat{b}^\dagger &= \lambda^2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \lambda\mu(\hat{a})^2 + \mu\lambda\hat{a}^2 + \mu^2\hat{a}\hat{a}^\dagger \\
H &= K\hat{b}^\dagger\hat{b} + c \\
&= K\lambda^2\hat{a}^\dagger\hat{a} + K\lambda\mu(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2) + K\mu^2\hat{a}\hat{a}^\dagger + c \\
&= (K\lambda^2 + K\mu^2)\hat{a}^\dagger\hat{a} + K\lambda\mu(\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2) + K\mu^2 + c \\
&[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1
\end{aligned}
$$

比较有

$$
\begin{cases}
K\lambda^2 + K\mu^2 = \dfrac{5}{3} \\
K\lambda\mu = \dfrac{2}{3} \\
K\mu^2 + c = 0 \\
\lambda^2 - \mu^2 = 1
\end{cases}
\Longrightarrow
\begin{cases}
\lambda = \dfrac{2}{\sqrt{3}} \\
\mu = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \\
K = 1 \\
c = -\dfrac{1}{3}
\end{cases}
$$

于是 $H = \hat{b}^\dagger\hat{b} - \dfrac{1}{3}$，本征值为：$n - \dfrac{1}{3}$

3.10.2 两个角动量的耦合，CG 系数

练习、利用式（10.4.22c）及 $\langle j_1 m_1 00 | j_3 m_3 \rangle = \delta_{j_1 j_3}\delta_{m_1 m_3}$，证明

$$\langle jmj - m|00\rangle = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$$

3.11 束缚定态微扰论

3.12 量子跃迁

3.13 散射理论

3.13.1 散射现象的一般描述

练习、考虑到概率守恒条件，在离开散射中心无穷远 ($r \to \infty$) 的球面上粒子净流出量应为 0，$\oint j_r r^2 d\Omega$。按式（13.1.19），利用公式

$$\lim_{\alpha \to \infty} e^{i\alpha x} = 2i\delta(x) \quad (x \geqslant 0)$$

可知

$$\lim_{kr \to \infty} e^{ikr(1-\cos\theta)} = \frac{2i}{kr}\delta(1-\cos\theta)$$

由此证明下列光学定理

$$\sigma_k = \int |f(\theta,\varphi)|^2 \, d\Omega = \frac{4\pi}{k} Im f(0)$$

3.14 其他近似方法