课堂练习

练习1：证明幺正算符的本征值$|\lambda|=1$

证明：根据幺正算符$\hat{U}$的定义，对任意态矢$|\lambda\rangle$，有$\langle\lambda|\hat{U}^{\dagger}\hat{U}|\lambda\rangle=\langle\lambda|\hat{I}\,|\lambda\rangle=\langle\lambda|\lambda\rangle$，而算符$\hat{U}$满足$\hat{U}|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle$，两边取厄米共轭，得$\langle\lambda|\hat{U}^{\dagger}=\langle\lambda|\lambda^{*}$，因此有$\langle\lambda|\hat{U}^{\dagger}\hat{U}|\lambda\rangle=|\lambda|^{2}\langle\lambda|\lambda\rangle$，从而$|\lambda|^{2}=1$，即$|\lambda|=1$（$|\lambda|$作为模长，必须满足$|\lambda|\geq 0$）

练习2：证明$\psi_k(x)$和$\psi_{k+K_m}(x)$，其中$K_m\equiv\frac{2\pi m}{a}$（m为任意整数），具有相同的平移对称性，即具有相同的平移算符本征值

证明：因为

$$\hat{D}(na)\psi_k(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\psi_k(x)$$

$$\hat{D}(na)\psi_{k+K_m}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+K_m)na}\psi_{k+K_m}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\cdot\frac{2\pi m}{a}\cdot na}\psi_{k+K_m}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\cdot\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}mn}\psi_{k+K_m}(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\psi_{k+K_m}(x)$$

所以$\psi_k(x)$和$\psi_{k+K_m}(x)$具有相同的平移算符本征值

第三章习题

3.1

3.2 可以用如下的势能体系作为化学键的最简单的模型

$$V(x)=\begin{cases}\infty & (x\leq a_1)\\ -V_0 & (a_1<x<a_2)\\ 0 & (x\geq a_2)\end{cases}$$

其中$V_0>0$。请分别在$E>0$和$E<0$的情形下求解该体系，并联系化学键的性质进行讨论。体系能够有束缚态的条件是什么？

3.3 求解如下δ势阱的本征态，该势阱的势能函数满足$V(x)=-\gamma\delta(x)\ (\gamma>0)$

解：将势能函数代入薛定谔方程得$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}-\gamma\delta(x)\psi(x)=E\psi(x)$，即
$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}[E+\gamma\delta(x)]\psi(x)$，现在分$E>0$和$E<0$的情形进行讨论。
若$E>0$，体系为非束缚态，由于在$x=0$处δ函数发散，因此此处$\psi'(x)$不连续，在邻域$U(0,\varepsilon)$上对薛定谔方程积分，得$\psi'(\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)=-\frac{2mE}{\hbar^2}\cdot 2\varepsilon-\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$，取$\varepsilon\to 0$，得
$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$，这是$x=0$处的跃变条件。

3.4 推导3.5节矩形势垒体系中，$E>V_0$时反射和投射系数

解：

3.5 计算谐振子势场中算符$\hat{x},\hat{p},\hat{x}^2,\hat{p}^2$在基态的期望值，并验证坐标和动量之间的测不准关系

解：由于湮灭和产生算符的定义为$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x}+\frac{\mathrm{i}\hat{p}}{m\omega})$，$\hat{a}^{\dagger}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x}-\frac{\mathrm{i}\hat{p}}{m\omega})$，因此有
$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^{\dagger})$，$\hat{p}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^{\dagger}-\hat{a})$，从而有

$$\hat{x}^2=\frac{\hbar}{2m\omega}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2+\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger]=\frac{\hbar}{2m\omega}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2+(\hat{N}+\hat{N}+1)]=\frac{\hbar}{2m\omega}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2+2\hat{N}+1)]$$
$$\hat{p}^2=-\frac{m\hbar\omega}{2}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2-\hat{a}^\dagger\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^\dagger]=-\frac{m\hbar\omega}{2}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2-\hat{N}-(\hat{N}+1)]=-\frac{m\hbar\omega}{2}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2-2\hat{N}-1]$$

因此

$$\begin{aligned}
\langle 0|\hat{x}|0\rangle &= \langle 0|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|0\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle 0|\hat{a}|0\rangle+\langle 0|\hat{a}^\dagger|0\rangle)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle 0|\cdot\mathbf{0}+\langle 0|\cdot|1\rangle)=0\\
\langle 0|\hat{p}|0\rangle &= \langle 0|\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})|0\rangle=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\langle 0|\hat{a}^\dagger|0\rangle-\langle 0|\hat{a}|0\rangle)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle 0|\cdot|1\rangle-\langle 0|\cdot\mathbf{0})=0\\
\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle &= \langle 0|\hat{x}|0\rangle=\langle 0|\frac{\hbar}{2m\omega}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2+2\hat{N}+1)]|0\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}[\langle 0|\hat{a}^2|0\rangle+\langle 0|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle+2\langle 0|\hat{N}|0\rangle+\langle 0|0\rangle]\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}[(\langle 0|\hat{a})\cdot(\hat{a}|0\rangle)+(\langle 0|\hat{a}^\dagger)\cdot(\hat{a}^\dagger|0\rangle)+2\langle 0|\cdot 0|0\rangle+1]=\frac{\hbar}{2m\omega}[\langle 1|\cdot\mathbf{0}+\mathbf{0}\cdot|1\rangle+1]=\frac{\hbar}{2m\omega}\\
\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle &= \langle 0|-\frac{m\hbar\omega}{2}[\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2-2\hat{N}-1]|0\rangle=-\frac{m\hbar\omega}{2}[\langle 0|\hat{a}^2|0\rangle+\langle 0|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle-2\langle 0|\hat{N}|0\rangle-\langle 0|0\rangle]\\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}[(\langle 0|\hat{a})\cdot(\hat{a}|0\rangle)+(\langle 0|\hat{a}^\dagger)\cdot(\hat{a}^\dagger|0\rangle)-2\langle 0|\cdot 0|0\rangle-1]=-\frac{m\hbar\omega}{2}[\langle 1|\cdot\mathbf{0}+\mathbf{0}\cdot|1\rangle-1]=\frac{m\hbar\omega}{2}
\end{aligned}$$

另一方面，对任意状态（无论是基态还是激发态）验证$\hat{x}$和$\hat{p}$的对易关系，得

$$\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{p}]|n\rangle &= [\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger),\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})]|n\rangle=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}[\hat{a}+\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger-\hat{a}]|n\rangle=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}([\hat{a}+\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger]-[\hat{a}+\hat{a}^\dagger,\hat{a}])|n\rangle\\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}([\hat{a},\hat{a}^\dagger]+[\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger]-[\hat{a},\hat{a}]-[\hat{a}^\dagger,\hat{a}])|n\rangle=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}[1+0-0-(-1)]|n\rangle=\mathrm{i}\hbar|n\rangle
\end{aligned}$$

因此$[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$，满足对易关系

课堂练习（续）

练习3：升降算符满足如下的对易关系：（1）$[\hat{J}^2,\hat{J}_\pm]=0$；（2）$[\hat{J}_+,\hat{J}_-]=2\hbar\hat{J}_z$；（3）$[\hat{J}_z,\hat{J}_\pm]=\pm\hat{J}_\pm$

证明：首先证明引理$[\hat{J}^2,\hat{J}_x]=[\hat{J}^2,\hat{J}_y]=[\hat{J}^2,\hat{J}_z]=0$，显然

$$\begin{aligned}
[\hat{J}^2,\hat{J}_x] &= [\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2,\hat{J}_x]=[\hat{J}_x^2,\hat{J}_x]+[\hat{J}_y^2,\hat{J}_x]+[\hat{J}_z^2,\hat{J}_x]=0+\hat{J}_y[\hat{J}_y,\hat{J}_x]+[\hat{J}_y,\hat{J}_x]\hat{J}_y+\hat{J}_z[\hat{J}_z,\hat{J}_x]+[\hat{J}_z,\hat{J}_x]\hat{J}_z\\
&= \hat{J}_y\cdot(-\hat{J}_z)+(-\hat{J}_z)\cdot\hat{J}_y+\hat{J}_z\hat{J}_y+\hat{J}_y\hat{J}_z=0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{J}^2,\hat{J}_y] &= [\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2,\hat{J}_y]=[\hat{J}_x^2,\hat{J}_y]+[\hat{J}_y^2,\hat{J}_y]+[\hat{J}_z^2,\hat{J}_y]=\hat{J}_x[\hat{J}_x,\hat{J}_y]+[\hat{J}_x,\hat{J}_y]\hat{J}_x+0+\hat{J}_z[\hat{J}_z,\hat{J}_y]+[\hat{J}_z,\hat{J}_y]\hat{J}_z\\
&= \hat{J}_x\hat{J}_z+\hat{J}_z\hat{J}_x+\hat{J}_z\cdot(-\hat{J}_x)+(-\hat{J}_x)\cdot\hat{J}_z=0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{J}^2,\hat{J}_z] &= [\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2,\hat{J}_z]=[\hat{J}_x^2,\hat{J}_x]+[\hat{J}_y^2,\hat{J}_x]+[\hat{J}_z^2,\hat{J}_x]=0+\hat{J}_y[\hat{J}_y,\hat{J}_x]+[\hat{J}_y,\hat{J}_x]\hat{J}_y+\hat{J}_z[\hat{J}_z,\hat{J}_x]+[\hat{J}_z,\hat{J}_x]\hat{J}_z\\
&= \hat{J}_y\cdot(-\hat{J}_z)+(-\hat{J}_z)\cdot\hat{J}_y+\hat{J}_z\hat{J}_y+\hat{J}_y\hat{J}_z=0
\end{aligned}$$

（1）由于$\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm\mathrm{i}\hat{J}_y$，因此$[\hat{J}^2,\hat{J}_\pm]=[\hat{J}^2,\hat{J}_x]\pm\mathrm{i}[\hat{J}^2,\hat{J}_y]=0$
（2）易知

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_+,\hat{J}_-] &= \hat{J}_+\hat{J}_--\hat{J}_-\hat{J}_+=(\hat{J}_x+\mathrm{i}\hat{J}_y)(\hat{J}_x-\mathrm{i}\hat{J}_y)-(\hat{J}_x-\mathrm{i}\hat{J}_y)(\hat{J}_x+\mathrm{i}\hat{J}_y)\\
&= (\hat{J}_x^2-\hat{J}_y^2-\mathrm{i}[\hat{J}_x,\hat{J}_y])-(\hat{J}_x^2-\hat{J}_y^2+\mathrm{i}[\hat{J}_x,\hat{J}_y])=-2\mathrm{i}[\hat{J}_x,\hat{J}_y]\\
&= -2\mathrm{i}\cdot\mathrm{i}\hbar\hat{J}_z=2\hbar\hat{J}_z
\end{aligned}$$

（3）易知

$$[\hat{J}_z,\hat{J}_\pm]=[\hat{J}_z,\hat{J}_x\pm\mathrm{i}\hat{J}_y]=[\hat{J}_z,\hat{J}_x]\pm\mathrm{i}[\hat{J}_z,\hat{J}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_y\pm\mathrm{i}(-\mathrm{i}\hbar\hat{J}_x)=\hbar(\mathrm{i}\hat{J}_y\pm\hat{J}_x)=\pm\hat{J}_\pm$$

练习4：推导$\langle jm^{'}|\hat{J}_x|jm\rangle$的表达式

解：由于$\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm \mathrm{i}\hat{J}_y$，即$\hat{J}_x=\frac{1}{2}(\hat{J}_++\hat{J}_-)$，因此

$$
\begin{aligned}
\langle jm^{'}|\hat{J}_x|jm\rangle &= \langle jm^{'}|\frac{1}{2}(\hat{J}_++\hat{J}_-)|jm\rangle = \frac{1}{2}(\langle jm^{'}|\hat{J}_+|jm\rangle+\langle jm^{'}|\hat{J}_-|jm\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\hbar\langle jm^{'}|j(m+1)\rangle+\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\hbar\langle jm^{'}|j(m-1)\rangle) \\
&= \frac{\hbar}{2}(\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\delta_{m^{'},m+1}+\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\delta_{m^{'},m-1})
\end{aligned}
$$