一、简答题

1. 简述量子力学的五个基本假设。

①波函数假设：微观体系的状态可以被一个波函数完全描述，从波函数可以得出体系的所有性质。波函数一般满足连续性、有限性、单值性三个条件。

②力学量算符假设：力学量用算符表示。如果在经典力学中有相应的力学量，则在量子力学中表示该力学量的算符由经典表示中将动量 $\vec{p}$ 替换为 $-i\hbar\nabla$ 得到。表示力学量的算符具有组成完全系的本征函数。

③本征值概率假设：将体系的状态波函数 ψ 用算符 $\hat{F}$ 的本征函数 ϕ_n 展开，$\hat{F}\phi_n=\lambda_n\phi_n$，$\hat{F}\phi_\lambda=\lambda\phi_\lambda$

$$\psi=\sum_n c_n\phi_n+\int c_\lambda\phi_\lambda \mathrm{d}\lambda$$

则在 ψ 态中测量力学量 F 得到结果为 λ_n 的概率为 $|c_n|^2$，得到结果在 $\lambda\sim\lambda+\mathrm{d}\lambda$ 范围内的概率是 $|c_\lambda|^2\mathrm{d}\lambda$.

④薛定谔方程假设：体系的状态波函数满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi$$

$\hat{H}$ 是体系的哈密顿算符。

⑤全同粒子假设：在全同粒子组成的体系中，两全同粒子相互调换不改变体系的状态。

2. 什么是德布罗意关系？

德布罗意关系将粒子和波联系起来，

$$\begin{cases}E=h\upsilon=\hbar\omega\\ \vec{p}=\dfrac{h}{\lambda}\vec{n}=\hbar\vec{k}\end{cases}$$

3. 什么是波函数的统计解释？

波函数在空间中某一点的振幅绝对值平方和在该点找到粒子的概率成比例。

4. 波函数的标准条件有哪些？

连续性、有限性、单值性。

5. 简述态叠加原理，它反映了什么？

如果 $\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n,\cdots$ 是体系的可能状态，那么它们的线性叠加

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

也是体系的可能状态。它反映了微观粒子的波粒二象性矛盾的统一，态叠加导致了观测结果的不确定性。

6. 什么是定态？定态波函数有哪些性质？如何判断某波函数是定态波函数？

体系状态处于某个波函数所描写的状态时，能量具有确定值，这种状态称为定态。

定态波函数的性质：①粒子在空间的概率密度分布与时间无关；②概率流密度与时间无关；③任何不显含时间的力学量的平均值、取各种可能值的概率分布与时间无关。

某波函数 ψ 为定态波函数的三个等价条件：①ψ 所描述的状态，其能量有确定值；②ψ 满足定态薛定谔方程；③$|\psi|^2$ 与时间无关。

7. 什么是隧道效应？请举例说明隧道效应的应用。

粒子在其能量 E 小于势垒高度 U_0 时，仍然会有部分粒子穿过势垒的现象称为隧道效应。扫描隧道显微镜、隧道二极管是隧道效应的重要应用。

8. 什么是厄米算符？

如果对于任意两函数 ψ 和 ϕ，算符 $\hat{F}$ 满足

$$\int\psi^*\hat{F}\phi\mathrm{d}\tau=\int\left(\hat{F}\psi\right)^*\phi\mathrm{d}\tau$$

则称 $\hat{F}$ 为厄米算符。

9. 量子力学中的力学量用什么算符表示？为什么？力学量算符在自身表象中的矩阵是什么形式？

量子力学中表示力学量的算符都是厄米算符。因为所有力学量的数值都是实数，而表示力学量的算符的本征值是这个力学量的可能值，所以表示力学量的算符的本征值必须是实数。力学量算符在自身表象中的矩阵是一个对角矩阵。

10. 什么是本征值？力学量的本征值的物理意义？

如果算符 $\hat{F}$ 作用于一个函数 ψ，结果等于 ψ 乘一个常数 λ：

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi$$

则称 λ 为 $\hat{F}$ 的本征值，ψ 是属于 λ 的本征函数，以上方程称为算符 $\hat{F}$ 的本征方程。

如果算符 $\hat{F}$ 表示力学量 F，那么当体系处于 $\hat{F}$ 的本征态 ψ 时，力学量 F 有确定值，这个值就是 $\hat{F}$ 在 ψ 态中的本征值。

11. 什么是简并、简并度？

属于算符的某一个本征值的线性无关的本征函数有若干个，这种现象称为简并。算符 $\hat{F}$ 的属于本征值 λ_n 的线性无关的本征函数有 f 个，称 $\hat{F}$ 的本征值 λ_n 是 f 度简并的。

12. 坐标、动量、角动量算符之间的对易关系？

$$\begin{cases} \left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right] = i\hbar\delta_{ij} \\ \left[\hat{x}_i, \hat{x}_j\right] = 0 \\ \left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \\ \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x \\ \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y \end{cases} \quad \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar\hat{\vec{L}} \quad \left[\hat{L}_i, \hat{L}^2\right] = 0$$

13. 算符对易的意义？

如果一组算符有共同的本征函数，且这些共同本征函数组成完全系，则这组算符中的任何一个和其余的算符对易，这个定理的逆定理也成立。在这些共同本征函数所描述的态中，这些算符所表示的力学量同时有确定值。

14. 什么是幺正变换？

由幺正矩阵所表示的变换称为幺正变换，由一个表象到另一个表象的变换是幺正变换。

15. 简述氢原子的斯塔克效应及产生原因。

氢原子在外电场作用下产生光谱线分裂，此现象称为氢原子的斯塔克效应。在外加电场中，氢原子库伦势场的对称性受到破坏，能级发生分裂，简并部分消除，跃迁光谱线出现分裂。

16. 谁提出了电子自旋的假设？表明电子有自旋的实验事实有哪些？自旋有什么特征？

乌伦贝克和哥德斯密脱提出了电子自旋假设，他们主要依据的两个实验事实是：碱金属光谱的双线结构和反常塞曼效应。自旋假设及其特征为：每个电子都具有自旋角动量 $\hat{S}$，它在空间任何方向上的投影只能是两个数值 $s_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$；每个电子具有自旋磁矩 $\vec{M}_s = -\frac{e}{m_e}\vec{S}$，其中 $-e$ 是电子电荷，m_e 是电子质量。

17. 什么是塞曼效应？

塞曼效应是指氢原子和类氢原子在外磁场中光谱线发生分裂的现象。简单塞曼效应：自旋为单态、总自旋为零的原子在强磁场作用下光谱线分裂为奇数条。反常塞曼效应：非单态、总自旋不为零的原子在弱磁场作用下，因自旋-轨道耦合不可忽略，光谱线分裂为偶数条的现象。

18. 什么是全同粒子？

属于同一类的具有完全相同的内禀属性的粒子称为全同粒子。

19. 什么是费米子？什么是玻色子？

自旋为 $\hbar$ 的半奇数倍的粒子，波函数对于两个粒子交换总是反对称的，它们遵守费米统计，称为费米子，例如电子、质子。自旋为 $\hbar$ 的整数倍的粒子，波函数对于两个粒子交换总是对称的，它们遵守玻色统计，称为玻色子，例如介子、光子。

20. 简述全同性原理和泡利不相容原理。

全同性原理：由全同粒子所组成的体系中，两全同粒子相互交换不引起物理状态的改变。描写全同粒子状态的波函数只能是对称的或反对称的，它们的对称性不随时间改变。

泡利不相容原理：不能有两个或两个以上的费米子处于同一状态。

二、证明题

1. 证明厄米算符的本征值都是实数。

设厄米算符 $\hat{F}$ 具有本征值 λ 及其本征函数 ψ，根据厄米算符的定义可得

$$\int \psi^* \hat{F}\psi \mathrm{d}\tau = \int \left(\hat{F}\psi\right)^* \psi \mathrm{d}\tau \quad \Rightarrow \quad \lambda \int \psi^* \psi \mathrm{d}\tau = \lambda^* \int \psi^* \psi \mathrm{d}\tau$$

所以 $\lambda = \lambda^*$，即 λ 为实数。

2. 证明厄米算符的属于不同本征值的本征函数相互正交。

设厄米算符 $\hat{F}$ 具有本征值 λ 及其本征函数 ψ，本征值 μ 及其本征函数 ϕ，且 $\lambda \neq \mu$。由厄米算符定义可得

$$\int \psi^* \hat{F}\phi \mathrm{d}\tau = \int \left(\hat{F}\psi\right)^* \phi \mathrm{d}\tau \quad \Rightarrow \quad \mu \int \psi^* \phi \mathrm{d}\tau = \lambda \int \psi^* \phi \mathrm{d}\tau$$

由于 $\lambda \neq \mu$，要使上式成立，只能

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

所以 ψ 与 ϕ 相互正交，即厄米算符属于不同本征值的本征函数相互正交。

3. 若 ψ_n, E_n 为 $\hat{H}$ 的归一化本征函数和本征值，λ 是出现在 $\hat{H}$ 中的任意参数，证明：$\dfrac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \int \psi_n^* \dfrac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \mathrm{d}\tau$.

因为 ψ_n, E_n 为 $\hat{H}$ 的归一化本征函数和本征值，所以

$$\int \psi_n^* \psi_n \mathrm{d}\tau = 1 \qquad \hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$

$$E_n = \int \psi_n^* E_n \psi_n \mathrm{d}\tau = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n \mathrm{d}\tau$$

当 $\hat{H}$ 中含有参数 λ，上式对 λ 求微商有

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

利用 $\hat{H}$ 的厄米算符性质，可得

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} &= \int \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \lambda} \hat{H} \psi_n \mathrm{d}\tau + \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \mathrm{d}\tau + \int \left(\hat{H}\psi_n\right)^* \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \mathrm{d}\tau \\
&= E_n \int \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \lambda} \psi_n \mathrm{d}\tau + \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \mathrm{d}\tau + E_n \int \psi_n^* \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \mathrm{d}\tau \\
&= \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \mathrm{d}\tau + E_n \frac{\partial}{\partial \lambda} \int \psi_n^* \psi_n \mathrm{d}\tau \\
&= \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n \mathrm{d}\tau
\end{aligned}$$

4. 证明两个算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 有一组共同本征函数 ϕ_n，且组成完全系，是 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 对易的充要条件。

①充分性：设 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 有一组共同本征函数 ϕ_n，即

$$\hat{F}\phi_n = \lambda_n \phi_n \qquad \hat{G}\phi_n = \mu_n \phi_n$$

因为 ϕ_n 组成完全系，所以任意函数 ψ 可以以 ϕ_n 为基展开，所以

$$\begin{aligned}
\left(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}\right)\psi &= \left(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}\right)\sum_n a_n \phi_n \\
&= \sum_n a_n \left(\hat{F}\hat{G}\phi_n - \hat{G}\hat{F}\phi_n\right) \\
&= \sum_n a_n \left(\lambda_n \mu_n \phi_n - \mu_n \lambda_n \phi_n\right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

由于 ψ 任意，所以 $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = \left[\hat{F}, \hat{G}\right] = 0$，即 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 对易。

②必要性：设 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 对易，且 $\hat{F}$ 有正交完备的本征函数系 ϕ_n ，即

$$\hat{F}\phi_n = \lambda_n \phi_n$$

因为 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 对易，所以

$$\hat{F}\left(\hat{G}\phi_n\right) = \hat{G}\left(\hat{F}\phi_n\right) = \lambda_n\left(\hat{G}\phi_n\right)$$

从而 $\hat{G}\phi_n$ 也是 $\hat{F}$ 的属于 λ_n 的本征函数，与 ϕ_n 只能相差一常数因子，设为 μ_n ，所以

$$\hat{G}\phi_n = \mu_n \phi_n$$

这样 ϕ_n 也是 $\hat{G}$ 的本征函数系，且组成完全系。若 λ_n 是简并的，则总是可以通过将简并本征函数线性叠加使 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 有相同的正交完备的本征函数系。

5. 证明算符对易关系 $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar \hat{L}_z$.

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= \left[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right] \\
&= \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right) - \left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right)\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) \\
&= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y \\
&= \left(\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z\right) - \left(\hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y\right) + \left(\hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y\right) + \left(\hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z - \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z\right)
\end{aligned}$$

因为对易算符可任意交换顺序，所以

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= \left(\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z\right) + \left(\hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y\right) \\
&= \left(\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{p}_z\right)\hat{y}\hat{p}_x + \left(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}\right)\hat{x}\hat{p}_y \\
&= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y \\
&= i\hbar\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) \\
&= i\hbar\hat{L}_z
\end{aligned}$$

另解：

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] &= \left[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right] \\
&= \left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x\right] - \left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z\right] - \left[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x\right] + \left[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z\right] \\
&= \left(\hat{z}\left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\right]\hat{p}_x\right) - \left(\hat{x}\left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_z\right] + \left[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\right]\hat{p}_z\right) - \left(\hat{z}\left[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_x\right]\hat{p}_x\right) + \left(\hat{x}\left[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_z\right] + \left[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\right]\hat{p}_z\right) \\
&= \left(\hat{z}\left(\hat{y}\left[\hat{p}_z, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{y}, \hat{p}_x\right]\hat{p}_z\right) + \left(\hat{y}\left[\hat{p}_z, \hat{z}\right] + \left[\hat{y}, \hat{z}\right]\hat{p}_z\right)\hat{p}_x\right) - \left(\hat{x}\left(\hat{y}\left[\hat{p}_z, \hat{p}_z\right] + \left[\hat{y}, \hat{p}_z\right]\hat{p}_z\right) + \left(\hat{y}\left[\hat{p}_z, \hat{x}\right] + \left[\hat{y}, \hat{x}\right]\hat{p}_z\right)\hat{p}_z\right) \\
&\quad -\left(\hat{z}\left(\hat{z}\left[\hat{p}_y, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{z}, \hat{p}_x\right]\hat{p}_y\right) + \left(\hat{z}\left[\hat{p}_y, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{z}, \hat{p}_x\right]\hat{p}_y\right)\hat{p}_x\right) + \left(\hat{x}\left(\hat{z}\left[\hat{p}_y, \hat{p}_z\right] + \left[\hat{z}, \hat{p}_z\right]\hat{p}_y\right) + \left(\hat{z}\left[\hat{p}_y, \hat{x}\right] + \left[\hat{z}, \hat{x}\right]\hat{p}_y\right)\hat{p}_z\right) \\
&= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x - 0 - 0 + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y \\
&= i\hbar\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) \\
&= i\hbar\hat{L}_z
\end{aligned}$$

6. 证明厄米算符的矩阵表示是厄米矩阵。

设 $\hat{F}$ 是一厄米算符，某力学量算符 $\hat{Q}$ 具有本征函数系 u_n ，那么 $\hat{F}$ 在 Q 表象中的矩阵元为

$$F_{mn} = \int u_m^* \hat{F} u_n \mathrm{d}\tau = \int u_n \left(\hat{F}u_m\right)^* \mathrm{d}\tau = \left(\int u_n^* \hat{F} u_m \mathrm{d}\tau\right)^* = F_{nm}^*$$

所以矩阵 F 满足

$$F = \left(F^*\right)^{\mathrm{T}} = F^\dagger$$

即 F 是厄米的。

7. 证明力学算符在其自身表象中是对角矩阵。

设力学算符$\hat{Q}$具有属于本征值Q_n的本征函数u_n，因为u_n构成完全系，所以$\hat{Q}$在Q表象中的矩阵元为

$$Q_{mn}=\int u_m^*\hat{Q}u_n\,\mathrm{d}\tau=\int u_m^*Q_n u_n\,\mathrm{d}\tau=Q_n\delta_{mn}$$

只有$m=n$的对角元不为零，所以力学算符在其自身表象中是由本征值构成的对角阵。

8. 证明幺正变换不改变算符的本征值。

设某个算符$\hat{F}$的本征矢在力学量表象$\hat{A}$中表示为a，在另一表象$\hat{B}$中表示为b，算符$\hat{F}$在$\hat{A}$中的矩阵表示为F_A，在$\hat{B}$中表示为F_B，设将本征矢从A变换到B表象的幺正矩阵为S，即$S^\dagger=S^{-1}$，$S^\dagger a=b$，$S^\dagger F_A S=F_B$。所以$\hat{F}$的本征方程满足：

$$F_A a=\lambda a\quad\Rightarrow\quad S^\dagger F_A a=\lambda S^\dagger a\quad\Rightarrow\quad S^\dagger F_A SS^\dagger a=\lambda S^\dagger a\quad\Rightarrow\quad F_B b=\lambda b$$

同一本征矢对应的本征值仍为λ，所以幺正变换不改变算符的本征值。

9. 证明泡利算符的反对易关系。

泡利算符$\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$满足对易关系：

$$\hat{\vec{\sigma}}\times\hat{\vec{\sigma}}=2i\hat{\vec{\sigma}}$$

所以可得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=2i\hat{\sigma}_z\quad\Rightarrow\quad\begin{cases}\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=2i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\\ \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x=2i\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x\end{cases}$$

两式相加，并利用$\hat{\sigma}_x^2=1$得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z+\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x=\left\{\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_z\right\}=0$$

同理可证$\left\{\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y\right\}=\left\{\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z\right\}=0$，即泡利算符满足反对易关系。

10. 证明$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$.

利用泡利算符的对易和反对易关系：

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=2i\hat{\sigma}_z\qquad\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=0$$

同时右乘$\hat{\sigma}_z$并相加，可得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z+\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z=2\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=2i\hat{\sigma}_z{}^2=2i\quad\Rightarrow\quad\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$$

11. 证明全同粒子体系波函数具有交换对称性或交换反对称性。

设交换算符$\hat{P}_{ij}$，其作用为将波函数中第i和第j个粒子交换：

$$\hat{P}_{ij}\Psi\left(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,t\right)=\Psi\left(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,t\right)$$

若Ψ为全同粒子体系波函数，则交换前后状态等价，所以Ψ应满足$\hat{P}_{ij}$的本征方程

$$\hat{P}_{ij}\Psi=\lambda\Psi$$

连续作用时，

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}\Psi=\lambda^2\Psi=\Psi\quad\Rightarrow\quad\lambda=\pm1$$

对于$\lambda=1$的函数，有$\hat{P}_{ij}\Psi=\Psi$，满足交换对称性；对于$\lambda=-1$的函数，有$\hat{P}_{ij}\Psi=\Psi$，满足交换反对称性。

三、计算题

1. 线性谐振子处于 $\psi(x)=\frac{1}{2}\psi_0(x)-\frac{\sqrt{2}}{2}\psi_2(x)+\frac{1}{2}\psi_4(x)$，其中 $\psi_n(x)$ 为线性谐振子的能量本征函数，试求能量的可能测量值及期望值。

解：线性谐振子能量本征值

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

体系处于能量 E_n 的概率为

$$|c_n|^2=\left|\int\psi_n^*\psi\,\mathrm{d}x\right|^2$$

所给状态中只有 $n=0,2,4$ 系数不为零，所以根据本征值概率假设，能量可能的测量值为

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega \qquad E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega \qquad E_4=\frac{9}{2}\hbar\omega$$

概率分别为

$$|c_0|^2=\frac{1}{4} \qquad |c_2|^2=\frac{1}{2} \qquad |c_4|^2=\frac{1}{4}$$

所以能量的期望值为

$$\bar{E}=\int\psi^*\hat{H}\psi\,\mathrm{d}x=\frac{1}{4}E_0+\frac{1}{2}E_2+\frac{1}{4}E_4=\frac{5}{2}\hbar\omega$$

2. 由下列两定态波函数计算概率流密度：（1）$\psi_1=\frac{1}{r}e^{ikr}$ （2）$\psi_2=\frac{1}{r}e^{-ikr}$.

解：（1）概率流密度

$$\begin{aligned}\vec{J}&=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_1\right)=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1\nabla\frac{1}{r}e^{-ikr}-\psi_1^*\nabla\frac{1}{r}e^{ikr}\right)\\&=\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_1\left(-\frac{1}{r^3}-\frac{ik}{r^2}\right)\vec{r}e^{-ikr}-\psi_1^*\left(-\frac{1}{r^3}+\frac{ik}{r^2}\right)\vec{r}e^{ikr}\right]\\&=\frac{i\hbar}{2m}\left[\left(-\frac{1}{r^4}-\frac{ik}{r^3}\right)\vec{r}-\left(-\frac{1}{r^4}+\frac{ik}{r^3}\right)\vec{r}\right]\\&=\frac{i\hbar}{2m}\left(-\frac{2ik}{r^3}\vec{r}\right)\\&=\frac{\hbar k}{mr^3}\vec{r}\end{aligned}$$

（2）概率流密度

$$\begin{aligned}\vec{J}&=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_1\right)=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_1\nabla\frac{1}{r}e^{ikr}-\psi_1^*\nabla\frac{1}{r}e^{-ikr}\right)\\&=\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_1\left(-\frac{1}{r^3}+\frac{ik}{r^2}\right)\vec{r}e^{ikr}-\psi_1^*\left(-\frac{1}{r^3}-\frac{ik}{r^2}\right)\vec{r}e^{-ikr}\right]\\&=\frac{i\hbar}{2m}\left[\left(-\frac{1}{r^4}+\frac{ik}{r^3}\right)\vec{r}-\left(-\frac{1}{r^4}-\frac{ik}{r^3}\right)\vec{r}\right]\\&=\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{2ik}{r^3}\vec{r}\right)\\&=-\frac{\hbar k}{mr^3}\vec{r}\end{aligned}$$

*注：梯度公式 $\nabla\frac{1}{r}=-\frac{\vec{r}}{r^3}$ $\qquad \nabla e^{ikr}=\frac{ik}{r}\vec{r}e^{ikr}$

3. 一粒子在一维势场

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

中运动，求粒子的能级和对应的波函数。

解：粒子的定态薛定谔方程

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

在 $x<0$ 和 $x>a$ 区域，$U=\infty$，故 $\psi(x)=0$.在 $0\le x<a$ 区域，定态薛定谔方程为

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

其通解为

$$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

由波函数的连续性条件，可得

$$\psi(0)=0 \quad\Rightarrow\quad B=0$$

$$\psi(a)=0 \quad\Rightarrow\quad A\ne 0,\sin ka=0 \quad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}=\frac{n\pi}{a},n=1,2,\cdots$$

所以能级为

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

波函数的系数根据归一化得出

$$\int\psi^*\psi\mathrm{d}x=A^2\int_0^a\sin^2\frac{n\pi}{a}x\mathrm{d}x=1 \quad\Rightarrow\quad A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

所以能级 E_n 的波函数为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

4. 求一维谐振子处在第一激发态时概率最大的位置。

解：一维谐振子第一激发态波函数

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_1(\alpha x)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}2\alpha x \qquad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

粒子分布的概率密度函数

$$w(x)=\psi_1^*\psi_1=\frac{2\alpha^2x^2}{\sqrt{\pi}}e^{-\alpha^2x^2}$$

概率极值位置

$$\frac{\partial w(x)}{\partial x}=\frac{4\alpha^2x}{\sqrt{\pi}}\left(1-\alpha^2x^2\right)e^{-\alpha^2x^2}=0 \quad\Rightarrow\quad x=0,x=\pm\frac{1}{\alpha}$$

求二阶导以验证极值：

$$\frac{\partial^2w(x)}{\partial x^2}=\frac{4\alpha^2}{\sqrt{\pi}}\left(1-5\alpha^2x^2+2\alpha^4x^4\right)e^{-\alpha^2x^2}$$

$$\left.\frac{\partial^2w(x)}{\partial x^2}\right|_{x=0}=\frac{4\alpha^2}{\sqrt{\pi}}>0 \qquad \left.\frac{\partial^2w(x)}{\partial x^2}\right|_{x=\pm\frac{1}{\alpha}}=-\frac{8\alpha^2}{\sqrt{\pi}}e^{-1}<0$$

所以 $x=\pm\dfrac{1}{\alpha}$ 是概率极大值点，在该处概率最大。

5. 一维线性谐振子处在基态$\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{i}{2}\omega t\right)$，求：

（1）势能的期望值$\overline{U}=\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}$；

（2）动能的期望值$\overline{T}=\frac{\overline{p^2}}{2m}$；

（3）动量的概率分布函数.

解：（1）势能的期望值

$$
\begin{aligned}
\overline{U}&=\int\psi^*\hat{U}\psi\mathrm{d}x=\frac{m\omega^2\alpha}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}+\frac{i}{2}\omega t\right)\hat{x}^2\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{i}{2}\omega t\right)\mathrm{d}x\\
&=\frac{m\omega^2\alpha}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x\\
&=\frac{m\omega^2\alpha}{2\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}\\
&=\frac{1}{4}\hbar\omega
\end{aligned}
$$

（2）动能期望值

$$
\begin{aligned}
\overline{T}&=\int\psi^*\hat{T}\psi\mathrm{d}x=\frac{\alpha}{2m\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}+\frac{i}{2}\omega t\right)\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{i}{2}\omega t\right)\mathrm{d}x\\
&=\frac{\alpha^3\hbar^2}{2m\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(1-\alpha^2x^2\right)e^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x\\
&=\frac{\alpha^3\hbar^2}{2m\sqrt{\pi}}\cdot\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}-\frac{\alpha^2}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}\right)\\
&=\frac{1}{4}\hbar\omega
\end{aligned}
$$

（3）动量表象波函数为

$$
\begin{aligned}
c(p)&=\int\psi_p^*\psi\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\int\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{i}{2}\omega t\right)\mathrm{d}x\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{i}{2}\omega t}\int\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{i}{\hbar}px\right)\mathrm{d}x\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{i}{2}\omega t}\int\exp\left(-\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}x+\frac{ip}{\sqrt{2}\hbar\alpha}\right)^2-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}\right)\mathrm{d}x\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}-\frac{i}{2}\omega t}\frac{\sqrt{2\pi}}{\alpha}\\
&=\frac{1}{\sqrt{\alpha\hbar\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}-\frac{i}{2}\omega t}
\end{aligned}
$$

所以动量的概率分布函数为

$$
w(p)=c^*(p)c(p)=\frac{1}{\sqrt{\pi}\alpha\hbar}e^{-\frac{p^2}{\alpha^2\hbar^2}}
$$

*注：$\int_0^{\infty}e^{-ax^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$，$\int_0^{\infty}x^{2n}e^{-ax^2}\mathrm{d}x=\frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}}$

6. **氢原子处在基态** $\psi\left(r,\theta,\varphi\right)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$ **，求：**

（1）r 的期望值；（2）势能 $-\dfrac{e_s^2}{r}$ **的期望值；（3）最可几半径；（4）动能的期望值；（5）动量的概率分布函数。**

解：（1）r 的期望值

$$\bar{r}=\int\psi^*\hat{r}\psi\,\mathrm{d}\tau=\frac{1}{\pi a_0^3}\int e^{-\frac{2r}{a_0}}r^3\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty r^3e^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r=\frac{4}{a_0^3}\cdot\frac{3}{8}a_0^4=\frac{3}{2}a_0$$

（2）势能的期望值

$$\bar{V}=\int\psi^*\left(-\frac{e_s^2}{r}\right)\psi\,\mathrm{d}\tau=-\frac{e_s^2}{\pi a_0^3}\int re^{-\frac{2r}{a_0}}\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=-\frac{4e_s^2}{a_0^3}\int re^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r=-\frac{4e_s^2}{a_0^3}\cdot\frac{a_0^2}{4}=-\frac{e_s^2}{a_0}$$

（3）最可几半径，先求径向概率密度函数

$$w_r\left(r\right)=\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\psi^*\psi r^2\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\frac{4}{a_0^3}r^2e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

有限处的概率极值

$$\frac{\mathrm{d}w_r\left(r\right)}{\mathrm{d}r}=\frac{4}{a_0^3}\left(2r-\frac{2}{a_0}r^2\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}=0\quad\Rightarrow\quad r=a_0$$

所以最可几半径为 a_0 .

（4）动能的期望值

$$\bar{T}=\int\psi^*\hat{T}\psi\,\mathrm{d}\tau=\frac{1}{\pi a_0^3}\int e^{-\frac{r}{a_0}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2e^{-\frac{r}{a_0}}\right)r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=-\frac{2\hbar^2}{ma_0^3}\left(-\frac{1}{a_0}\right)\int_0^\infty\left(2r-\frac{r^2}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r=\frac{2\hbar^2}{ma_0^4}\frac{a_0^2}{4}=\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$$

（5）动量表象波函数为

$$\begin{aligned}c\left(p\right)&=\int\psi_p^*\psi\,\mathrm{d}\tau=\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{\frac{3}{2}}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^{2\pi}\int_0^\pi\int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\
&=\frac{2\pi}{\sqrt{8\pi^3\hbar^3\pi a_0^3}}\int_0^\pi\int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\\
&=\frac{2\pi}{\sqrt{8\pi^3\hbar^3\pi a_0^3}}\int_0^\infty\frac{\hbar}{ipr}\left(e^{\frac{i}{\hbar}pr}-e^{-\frac{i}{\hbar}pr}\right)r^2e^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}r\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3a_0^3}}\frac{2\hbar}{p}\int_0^\infty re^{-\frac{r}{a_0}}\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3a_0^3}}\frac{2\hbar}{p}\frac{2\dfrac{p}{a_0\hbar}}{\left(\dfrac{1}{a_0^2}+\dfrac{p^2}{\hbar^2}\right)^2}\\
&=\frac{\hbar\left(2a_0\hbar\right)^{3/2}}{\pi\left(\hbar^2+p^2a_0^2\right)^2}\end{aligned}$$

所以动量的概率分布函数为

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

7. 设氢原子处于状态

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{1,0}(\theta,\varphi)-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{1,-1}(\theta,\varphi)$$

求氢原子能量、角动量平方及角动量 z 分量的可能值，这些可能值出现的概率和这些力学量的期望值。

解：因为$\psi_{nlm}=R_{nl}Y_{lm}$是$\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_z$的共同本征函数，相应的本征值为

$$E_n=-\frac{m_e e_s^4}{2\hbar^2 n^2}\qquad L^2=l(l+1)\hbar^2\qquad L_z=m\hbar$$

所以在其共同本征表象下，ψ 在 $R_{21}Y_{1,0}$ 分量为$\frac{1}{2}$，在 $R_{21}Y_{1,-1}$ 分量为$-\frac{\sqrt{3}}{2}$，所以由本征值概率假设：

①能量：

可能值：$E_2=-\dfrac{m_e e_s^4}{8\hbar^2}$

概率：$\left(\dfrac{1}{2}\right)^2+\left(-\dfrac{\sqrt{3}}{2}\right)^2=1$

期望：$\bar{E}=E_2\cdot 1=-\dfrac{m_e e_s^4}{8\hbar^2}$

②角动量平方：

可能值：$L_1^2=2\hbar^2$

概率：$\left(\dfrac{1}{2}\right)^2+\left(-\dfrac{\sqrt{3}}{2}\right)^2=1$

期望：$\overline{L^2}=L_1^2\cdot 1=2\hbar^2$

③角动量 z 分量：

可能值：$L_{z,0}=0,L_{z,-1}=-\hbar$

概率：$w_0=\left(\dfrac{1}{2}\right)^2=\dfrac{1}{4},w_{-1}=\left(\dfrac{\sqrt{3}}{2}\right)^2=\dfrac{3}{4}$

期望：$\bar{L}_z=L_{z,0}\cdot\dfrac{1}{2}+L_{z,-1}\cdot\dfrac{3}{4}=-\dfrac{3}{4}\hbar$

8. 一粒子在硬壁球形空腔中运动，势能为

$$U(r)=\begin{cases}\infty & r\ge a\\ 0 & r<a\end{cases}$$

求角动量为 0 的情况下，粒子的能级和定态波函数。

解：粒子的定态薛定谔方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U\right)\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi)$$

在 $r\ge a$ 的区域，$U=\infty$，所以必有 $\psi=0$.在 $r<a$ 的区域，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi)$$

角动量为 0 时，ψ 球对称，所以上式简化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi(r)=E\psi(r)$$

记 $u(r)=rE\psi,\psi=\dfrac{u}{rE}$，代入得

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{u}{r}=\frac{Eu}{r}\quad\Rightarrow\quad\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+Eu=0$$

其通解为

$$u=A\sin kr+B\cos kr\quad\Rightarrow\quad\psi=\frac{A}{r}\sin kr+\frac{B}{r}\cos kr\qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

根据波函数有限性和连续性条件，

$$\psi(0)=\text{有限值}\quad\Rightarrow\quad B=0$$

$$\psi(a)=0\quad\Rightarrow\quad A\ne 0,k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=\frac{n\pi}{a},n=1,2,\cdots$$

所以粒子的能级为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

再根据归一化波函数条件确定常数 A 值：

$$\int\psi^*\psi\,\mathrm{d}\tau=A^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{a}\frac{1}{r^2}\sin^2\frac{n\pi r}{a}r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi=1\quad\Rightarrow\quad A=\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$$

所以粒子的波函数为

$$\psi_n=\frac{1}{r\sqrt{2\pi a}}\sin\frac{n\pi}{a}r$$

9. 粒子处于一维无限深势阱的基态：$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x$，$0<x<a$.求该态在动量和能量表象中的表示。

解：①在动量表象中的表示：动量算符的本征函数为

$$\varphi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

所以在动量表象中表示为

$$c(p)=\langle\varphi_p|\psi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar}px}\sin\frac{\pi}{a}x\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi a}{\hbar}}\frac{1+e^{-i\frac{a}{\hbar}p}}{\pi^2-\left(\frac{a}{\hbar}p\right)^2}$$

②在能量表象中的表示：能量算符本征函数为

$$\phi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

所以在能量表象中的矢量表示为

$$c_n=\langle\phi_n|\psi_1\rangle=\frac{2}{a}\int_0^a\sin\frac{\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{a}x\mathrm{d}x=\delta_{n1}$$

所以能量表象的态矢为

$$\psi_1=\begin{bmatrix}1\\0\\\vdots\end{bmatrix}$$

10. 求在动量表象中 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_x^2$ 的矩阵元。

解：已知在坐标表象中 $\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$，而 $\hat{\vec{p}}$ 在坐标表象中的本征函数为

$$\psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

所以 L_x 在动量表象中的矩阵元为

$$(L_x)_{pp'} = \left\langle p \middle| \hat{L}_x \middle| p' \right\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \left(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y\right) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \mathrm{d}\vec{r}$$

注意到

$$y\hat{p}_z e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} = -i\hbar y \frac{\partial}{\partial z} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} = yp_z' e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} = -i\hbar p_z' \frac{\partial}{\partial p_y'} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}}$$

所以

$$\begin{aligned}(L_x)_{pp'} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \left(-i\hbar p_z' \frac{\partial}{\partial p_y'} + i\hbar p_y' \frac{\partial}{\partial p_z'}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \mathrm{d}\vec{r} \\ &= -i\hbar\left(p_z' \frac{\partial}{\partial p_y'} - p_y' \frac{\partial}{\partial p_z'}\right) \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}} \mathrm{d}\vec{r} \\ &= \left(-i\hbar p_z' \frac{\partial}{\partial p_y'} + i\hbar p_y' \frac{\partial}{\partial p_z'}\right) \delta\left(\vec{p} - \vec{p}'\right)\end{aligned}$$

同理，L_x^2 在动量表象中的矩阵元为

$$\begin{aligned}(L_x^2)_{pp'} &= \left\langle p \middle| \hat{L}_x^2 \middle| p' \right\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \left(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y\right)\left(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y\right) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \mathrm{d}\vec{r} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(-i\hbar p_z' \frac{\partial}{\partial p_y'} + i\hbar p_y' \frac{\partial}{\partial p_z'}\right)\int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \left(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y\right) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \mathrm{d}\vec{r} \\ &= \left(-i\hbar p_z' \frac{\partial}{\partial p_y'} + i\hbar p_y' \frac{\partial}{\partial p_z'}\right)^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}} \mathrm{d}\vec{r} \\ &= -\hbar^2\left(p_z' \frac{\partial}{\partial p_y'} - p_y' \frac{\partial}{\partial p_z'}\right)^2 \delta\left(\vec{p} - \vec{p}'\right)\end{aligned}$$

11. 计算 $\hat{x},\hat{p}$ 在坐标表象和动量表象中的矩阵元

解：①在坐标表象中，$\hat{x}$ 的本征函数为 $\delta\left(\vec{x}-\vec{x}'\right)$，所以 $\hat{x}$ 矩阵元为

$$x_{x'x''}=\left\langle x'\left|\hat{\vec{x}}\right|x''\right\rangle=\int\delta\left(\vec{x}-\vec{x}'\right)^{*}\vec{x}\delta\left(\vec{x}-\vec{x}''\right)\cdot\mathrm{d}\vec{x}=\vec{x}'\delta\left(\vec{x}'-\vec{x}''\right)$$

同理，$\hat{\vec{p}}$ 的矩阵元为

$$p_{x'x''}=\left\langle x'\left|\hat{\vec{p}}\right|x''\right\rangle=\int\delta\left(\vec{x}-\vec{x}'\right)^{*}\left(-i\hbar\nabla\right)\delta\left(\vec{x}-\vec{x}''\right)\cdot\mathrm{d}\vec{x}=-i\hbar\nabla_{x'}\delta\left(\vec{x}'-\vec{x}''\right)$$

②在动量表象中，$\hat{\vec{p}}$ 的本征函数为 $\psi_{p}=\left(2\pi\hbar\right)^{-\frac{3}{2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)$，所以 $\hat{\vec{x}}$ 矩阵元为

$$x_{p'p''}=\left\langle p'\left|\hat{\vec{x}}\right|p''\right\rangle=\left(2\pi\hbar\right)^{-3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}}\hat{\vec{x}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}''\cdot\vec{r}}\cdot\mathrm{d}\vec{x}$$

利用 $\hat{\vec{x}}$ 的厄米算符性质，

$$\begin{aligned}x_{p'p''}&=\left(2\pi\hbar\right)^{-3}\int\left(\hat{\vec{x}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}}\right)^{*}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}''\cdot\vec{r}}\cdot\mathrm{d}\vec{x}\\&=\left(2\pi\hbar\right)^{-3}\int\left(-i\hbar\nabla_{p'}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}}\right)^{*}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}''\cdot\vec{r}}\cdot\mathrm{d}\vec{x}\\&=i\hbar\nabla_{p'}\left(2\pi\hbar\right)^{-3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}''-\vec{p}'\right)\cdot\vec{r}}\cdot\mathrm{d}\vec{x}\\&=i\hbar\nabla_{p'}\delta\left(\vec{p}'-\vec{p}''\right)\end{aligned}$$

同理，利用 $\hat{\vec{p}}$ 的厄米算符性质，其矩阵元为

$$\begin{aligned}p_{p'p''}&=\left(2\pi\hbar\right)^{-3}\int\left(\hat{\vec{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}}\right)^{*}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}''\cdot\vec{r}}\cdot\mathrm{d}\vec{x}\\&=\vec{p}'\left(2\pi\hbar\right)^{-3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}''-\vec{p}'\right)\cdot\vec{r}}\cdot\mathrm{d}\vec{x}\\&=\vec{p}'\delta\left(\vec{p}'-\vec{p}''\right)\end{aligned}$$

12. 在 Q 表象的基矢有两个：$\{\phi_1,\phi_2\}$，算符 $\hat F$ 有如下性质：

$$\hat F\phi_1 = 3\phi_1 + 2\phi_2 \qquad \hat F\phi_2 = 2\phi_1$$

（1）求 $\hat F$ 的本征值和本征函数，并将 $\hat F$ 对角化；

（2）已知粒子状态为 $\psi = \frac{1}{2}\phi_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\phi_2$，求测量力学量 F 的可能值及相应的概率、期望值。

解：（1）首先计算 $\hat F$ 的矩阵元，

$$F_{11} = \left\langle \phi_1 \middle| \hat F \middle| \phi_1 \right\rangle = 3\langle \phi_1|\phi_1\rangle + 2\langle \phi_1|\phi_2\rangle = 3$$

$$F_{12} = \left\langle \phi_1 \middle| \hat F \middle| \phi_2 \right\rangle = 2\langle \phi_1|\phi_1\rangle = 2$$

$$F_{21} = \left\langle \phi_2 \middle| \hat F \middle| \phi_1 \right\rangle = 3\langle \phi_2|\phi_1\rangle + 2\langle \phi_2|\phi_2\rangle = 2$$

$$F_{22} = \left\langle \phi_2 \middle| \hat F \middle| \phi_2 \right\rangle = 2\langle \phi_2|\phi_1\rangle = 0$$

所以 Q 表象中 $\hat F$ 的本征方程为

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} u = \lambda u \quad , \quad u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}$$

求解本征值方程

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & 2 \\ 2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = -1, 4$$

对应本征值 $\lambda = -1$ 的本征函数：

$$\begin{cases} 2u_1 + u_2 = 0 \\ u^\dagger u = 1 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad u_{-1} = \begin{bmatrix} -\dfrac{1}{\sqrt{5}} \\ \dfrac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$$

对应本征值 $\lambda = 4$ 的本征函数：

$$\begin{cases} -u_1 + 2u_2 = 0 \\ u^\dagger u = 1 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad u_4 = \begin{bmatrix} \dfrac{2}{\sqrt{5}} \\ \dfrac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$$

所以取幺正矩阵

$$S = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

可以将 $\hat F$ 对角化：

$$F' = S^\dagger F S = \frac{1}{5} \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

（2）测量力学量 F，测得 -1 或 4 的概率分别为

$$c_{-1} = \left|\langle u_{-1}|\psi\rangle\right|^2 = \left(-\frac{1}{2\sqrt{5}} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}}\right)^2 = \frac{13-4\sqrt{3}}{20} \qquad c_4 = \left|\langle u_4|\psi\rangle\right|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{5}} + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{5}}\right)^2 = \frac{7+4\sqrt{3}}{20}$$

期望值为

$$\bar F = -1 \cdot c_{-1} + 4 \cdot c_4 = \frac{3}{4} + \sqrt{3}$$

13. 求 $\hat{x}$ 在动量表象中的形式。

解：$\hat{x}$ 在动量表象中的形式，考虑 $|\phi\rangle = \hat{x}|\varphi\rangle$，则

$$\langle p|\phi\rangle = \langle p|\hat{x}|\varphi\rangle = \int \langle p|\hat{x}|p'\rangle\langle p'|\varphi\rangle \mathrm{d}p'$$

其中

$$\begin{aligned}\langle p|\hat{x}|p'\rangle &= \int\int \langle p|x\rangle\langle x|\hat{x}|x'\rangle\langle x'|p'\rangle \mathrm{d}x\mathrm{d}x' \\ &= \int\int \langle p|x\rangle x'\langle x|x'\rangle\langle x'|p'\rangle \mathrm{d}x\mathrm{d}x' \\ &= \int\int \langle p|x\rangle x'\delta(x-x')\langle x'|p'\rangle \mathrm{d}x\mathrm{d}x' \\ &= \int \langle p|x\rangle x\langle x|p'\rangle \mathrm{d}x \\ &= \int \langle x|p\rangle^* x\langle x|p'\rangle \mathrm{d}x \\ &= \int \psi_p^* x\psi_{p'}\mathrm{d}x \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p')\end{aligned}$$

所以

$$\langle p|\phi\rangle = \langle p|\hat{x}|\varphi\rangle = \int i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p')\langle p'|\varphi\rangle \mathrm{d}p' = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle$$

所以在动量表象内，$\hat{x}$ 表示为 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p}$.

14. **已知在 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同表象中，算符 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的矩阵表示为**

$$\hat{L}_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\qquad \hat{L}_z=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{bmatrix}$$

求它们的本征值和归一化本征函数，并将两个矩阵对角化。

解：$\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的本征值方程

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\psi=\lambda_x\psi\quad,\quad \psi=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{bmatrix}\qquad \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{bmatrix}\varphi=\lambda_y\varphi\quad,\quad \varphi=\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{bmatrix}$$

分别解久期方程，可得 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的本征值：

$$\begin{vmatrix}-\lambda_x&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}&0\\\frac{\hbar}{\sqrt{2}}&-\lambda_x&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\\0&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}&-\lambda_x\end{vmatrix}=0\quad\Rightarrow\quad \lambda_{x1}=0,\lambda_{x2}=-\hbar,\lambda_{x3}=\hbar$$

$$\begin{vmatrix}-\lambda_y&\frac{-i\hbar}{\sqrt{2}}&0\\\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}&-\lambda_y&\frac{-i\hbar}{\sqrt{2}}\\0&\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}&-\lambda_y\end{vmatrix}=0\quad\Rightarrow\quad \lambda_{y1}=0,\lambda_{y2}=-\hbar,\lambda_{y3}=\hbar$$

本征值代入本征方程，可以求其本征函数：

$$\text{对应}\lambda_{x1}=0\text{可得}:\begin{cases}a_2=0\\a_1+a_3=0\\\psi^\dagger\psi=1\end{cases}\Rightarrow\quad\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-1\\0\\1\end{bmatrix}\qquad \text{对应}\lambda_{y1}=0\text{可得}:\begin{cases}b_2=0\\b_1-b_3=0\\\varphi^\dagger\varphi=1\end{cases}\Rightarrow\quad\varphi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}$$

$$\text{对应}\lambda_{x2}=-\hbar\text{可得}:\begin{cases}\sqrt{2}a_1+a_2=0\\a_2+\sqrt{2}a_3=0\\\psi^\dagger\psi=1\end{cases}\Rightarrow\quad\psi_2=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}\qquad \text{对应}\lambda_{y2}=-\hbar\text{可得}:\begin{cases}\sqrt{2}b_1-ib_2=0\\ib_2+\sqrt{2}b_3=0\\\varphi^\dagger\varphi=1\end{cases}\Rightarrow\quad\varphi_2=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}i\\\sqrt{2}\\-i\end{bmatrix}$$

$$\text{对应}\lambda_{x3}=\hbar\text{可得}:\begin{cases}-\sqrt{2}a_1+a_2=0\\a_2-\sqrt{2}a_3=0\\\psi^\dagger\psi=1\end{cases}\Rightarrow\quad\psi_3=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}\qquad \text{对应}\lambda_{x3}=\hbar\text{可得}:\begin{cases}\sqrt{2}b_1+ib_2=0\\ib_2-\sqrt{2}b_3=0\\\varphi^\dagger\varphi=1\end{cases}\Rightarrow\quad\varphi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-i\\\sqrt{2}\\i\end{bmatrix}$$

从共同表象变换到 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的两个幺正矩阵分别由各自的本征矢组成，可以将 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 对角化，

$$S_{Lx}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-1&\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\0&-1&1\\1&\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix},S_{Lx}^\dagger L_xS_{Lx}=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&-\hbar&0\\0&0&\hbar\end{bmatrix}\qquad S_{Ly}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1&\frac{i}{\sqrt{2}}&-\frac{i}{\sqrt{2}}\\0&1&1\\1&-\frac{i}{\sqrt{2}}&\frac{i}{\sqrt{2}}\end{bmatrix},S_{Ly}^\dagger L_yS_{Ly}=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&-\hbar&0\\0&0&\hbar\end{bmatrix}$$

15. 求线性谐振子的哈密顿量在动量表象中的矩阵元。

解：线性谐振子哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

动量算符的本征函数为

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

所以 $\hat{H}$ 在动量表象中的矩阵元为

$$H_{pp'}=\left\langle p\left|\hat{H}\right|p'\right\rangle=\frac{1}{2m}\left\langle p\left|\hat{p}^2\right|p'\right\rangle+\frac{1}{2}m\omega^2\left\langle p\left|\hat{x}^2\right|p'\right\rangle$$

其中，第一项

$$\left\langle p\left|\hat{p}^2\right|p'\right\rangle=\int\psi_p^*\hat{p}\hat{p}\psi_{p'}\mathrm{d}x=\int\psi_p^*\hat{p}p'\psi_{p'}\mathrm{d}x=p'^2\int\psi_p^*\psi_{p'}\mathrm{d}x=p'^2\delta(p-p')$$

第二项

$$\left\langle p\left|\hat{x}^2\right|p'\right\rangle=\int\psi_p^*xx\psi_{p'}\mathrm{d}x=\int\psi_p^*x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)\psi_{p'}\mathrm{d}x=\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)^2\int\psi_p^*\psi_{p'}\mathrm{d}x=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\delta(p-p')$$

所以 $\hat{H}$ 在动量表象中的矩阵元为

$$H_{pp'}=\left(\frac{p'^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\right)\delta(p-p')$$

16. 一电荷为 q 的线性谐振子受恒定弱电场 E 的作用，电场沿+x 方向。用微扰法求体系的定态能量和波函数。

解：体系哈密顿算符为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-qEx$$

将电势能作为微扰，

$$\hat{H}^{(0)}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\qquad \hat{H}'=-qEx$$

一维线性谐振子本征函数和本征值为

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\qquad \psi_n^{(0)}=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}n!2^n}}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi)\quad ,\quad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\xi=\alpha x$$

能量一级修正为

$$H_n^{(1)}=H'_{nn}=\int\psi_n^*\hat{H}'\psi_n\mathrm{d}x=\frac{-qE\alpha}{\sqrt{\pi}n!2^n}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}H_n^2(\alpha x)x\mathrm{d}x$$

因为被积函数是奇函数，所以积分等于零，即 $H_n^{(1)}=0$ 。

计算能量二级修正，先计算微扰矩阵元

$$H'_{mn}=\int\psi_m^{(0)*}\hat{H}'\psi_n^{(0)}\mathrm{d}x=-\frac{qE}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)}\alpha x\psi_n^{(0)}\mathrm{d}x$$

$n\geq1$时，利用一维线性谐振子波函数的递推关系

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

代入可得

$$H'_{mn}=-\frac{qE}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)}\psi_{n-1}^{(0)}\mathrm{d}x+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^{(0)}\psi_{n+1}^{(0)}\mathrm{d}x\right]=-\frac{qE}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right)$$

所以能量的二级修正项为

$$E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{\left|H_{mn}\right|^2}{E_n^{(0)}-E_m^0}=\frac{q^2E^2}{2\alpha^2}\sum_{m\neq n}\frac{n\delta_{m,n-1}+\sqrt{n}\sqrt{n+1}\delta_{m,n-1}\delta_{m,n+1}+(n+1)\delta_{m,n+1}}{\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}=\frac{q^2E^2}{2\alpha^2}\left(\frac{n}{\hbar\omega}+\frac{n+1}{-\hbar\omega}\right)=-\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

波函数的一级修正项为

$$\psi_n^{(1)}=\sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_n^{(0)}=-\frac{qE}{\sqrt{2}\alpha}\sum_{m\neq n}\frac{\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}}{(n-m)\hbar\omega}\psi_m^{(0)}=-\frac{qE}{\sqrt{2}\alpha}\left(\frac{\sqrt{n}}{\hbar\omega}\psi_{n-1}^{(0)}-\frac{\sqrt{n+1}}{\hbar\omega}\psi_{n+1}^{(0)}\right)=\frac{qE}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}-\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}\right)$$

综上，定态能量至二级修正和波函数至一级修正为

$$E_n\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

$$\psi_n\approx\psi_n^{(0)}+\frac{qE}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}-\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}\right),\text{其中}\ \psi_n^{(0)}=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}n!2^n}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_n(\alpha x),\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

以上只对于 $n\geq1$ 成立。当 $n=0$ 时，对应 $n-1$ 项波函数替换为 0。

17. 如果类氢原子的核不是点电荷，而是半径为 r_0、电荷均匀分布的小球，计算这种效应对类氢原子基态能量的一级修正。

解：此模型下，电场分布为

$$\vec{E}=\begin{cases}\dfrac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r_0^3}\vec{r} & 0<r<r_0\\ \dfrac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\vec{r} & r\geq r_0\end{cases}$$

所以电势分布为

$$U=-\int_r^{\infty}eE(r)\mathrm{d}r=\begin{cases}-\dfrac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0^3}\left(3r_0^2-r^2\right) & 0<r<r_0\\ -\dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} & r\geq r_0\end{cases}$$

只有在 $0<r<r_0$，势能与点电荷模型不同，存在微扰，微扰项为

$$H'=U-\left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=\begin{cases}\dfrac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0^3}\left(r^2+\dfrac{2r_0^3}{r}-3r_0^2\right) & 0<r<r_0\\ 0 & r\geq r_0\end{cases}$$

类氢原子基态波函数 $\psi_{100}=R_{10}Y_{00}=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2e^{-\frac{Z}{a_0}r}$，其中 a_0 是玻尔半径。所以基态能量一级修正项为

$$\begin{aligned}E^{(1)}&=\int\psi_{100}^{*}H'\psi_{100}\mathrm{d}\tau\\&=\frac{1}{4\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\cdot 4\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0^3}\int\left(r^2+\frac{2r_0^3}{r}-3r_0^2\right)e^{-\frac{2Z}{a_0}r}4\pi r^2\mathrm{d}r\\&=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\frac{Ze^2}{2\pi\varepsilon_0 r_0^3}\int_0^{r_0}\left(r^2+\frac{2r_0^3}{r}-3r_0^2\right)e^{-\frac{2Z}{a_0}r}r^2\mathrm{d}r\end{aligned}$$

因为 $r_0\ll a_0$，故 $e^{-\frac{2Z}{a_0}r}\approx 1$，所以易得

$$E^{(1)}=\frac{Z^4e^2}{10\pi\varepsilon_0 a_0^3}r_0^2$$

其中，$a_0=\dfrac{\hbar^2}{m_e e_s^2}$。综上，基态能量的一级修正为

$$E^{(1)}=\begin{cases}\dfrac{Z^4e^2}{10\pi\varepsilon_0 a_0^3}r_0^2 & 0<r<r_0\\ 0 & r>r_0\end{cases}$$

18. 转动惯量为 I，电偶极矩为 D 的空间转子处在均匀电场 ε 中。如果电场较小，用微扰法求转子基态能量的二级修正。

解：系统哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{L}^2}{2I}-\vec{D}\cdot\vec{\varepsilon}$$

将角动量平方项作为零级近似，电势能项作为微扰，

$$\hat{H}^{(0)}=\frac{\hat{L}^2}{2I}\qquad \hat{H}'=-\vec{D}\cdot\vec{\varepsilon}=-D\varepsilon\cos\theta$$

$\hat{H}^{(0)}$ 的本征值和本征函数为

$$E_l^{(0)}=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}\qquad \psi_l^{(0)}=Y_{l0}(\theta,\phi)$$

只考虑 $m=0$ 的态，则能级非简并，所以基态能量的二级修正为

$$E_0^{(2)}=\sum_{l\neq 0}\frac{|H_{l0}|^2}{E_0^{(0)}-E_l^{(0)}}$$

其中，微扰矩阵元为

$$\begin{aligned}H_{l0}&=\int\psi_l^*\hat{H}'\psi_0 r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\\&=\int Y_{l0}(-D\varepsilon\cos\theta)Y_{00}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\\&=-D\varepsilon\int Y_{l0}\frac{Y_{10}}{\sqrt{3}}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\\&=-\frac{D\varepsilon}{\sqrt{3}}\delta_{l1}\end{aligned}$$

所以

$$E_0^{(2)}=\sum_{l\neq 0}\frac{|H_{l0}|^2}{E_0^{(0)}-E_l^{(0)}}=\frac{1}{3}\sum_{l\neq 0}\frac{D^2\varepsilon^2\delta_{l1}\cdot 2I}{\hbar^2-l(l+1)\hbar^2}=-\frac{D^2\varepsilon^2 I}{3\hbar^2}$$

19. 设一体系未受微扰作用时只有两个能级：E_{01} 和 E_{02}。现在受到微扰 $\hat{H}'$ 的作用，微扰矩阵元为 $H'_{12}=H'_{21}=a$，$H'_{11}=H'_{22}=b$，都是实数。用微扰公式求能量至二级修正值。

解：能量一级修正项为

$$E_{11}=H'_{11}=b\qquad E_{12}=H'_{22}=b$$

能量二级修正项为

$$E_{21}=\frac{|H_{21}|^2}{E_{01}-E_{02}}=\frac{a^2}{E_{01}-E_{02}}\qquad E_{22}=\frac{|H_{12}|^2}{E_{02}-E_{01}}=\frac{a^2}{E_{02}-E_{01}}$$

所以能量近似至二阶为

$$E_1=E_{01}+E_{11}+E_{21}=E_{01}+b+\frac{a^2}{E_{01}-E_{02}}$$

$$E_2=E_{02}+E_{12}+E_{22}=E_{02}+b+\frac{a^2}{E_{02}-E_{01}}$$

20. 求 $\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$ 和 $\hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}$ 的本征值和本征函数。

$\hat{S}_x$ 和 $\hat{S}_y$ 的本征方程分别为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\chi_x=\lambda_x\chi_x \quad \chi_x=\begin{bmatrix}a_1\\ a_2\end{bmatrix} \qquad \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}\chi_y=\lambda_y\chi_y \quad \chi_y=\begin{bmatrix}b_1\\ b_2\end{bmatrix}$$

分别解久期方程，可得各自的本征值：

$$\begin{vmatrix}-\lambda_x & \frac{\hbar}{2}\\ \frac{\hbar}{2} & -\lambda_x\end{vmatrix}=0 \;\Rightarrow\; \lambda_x=-\frac{\hbar}{2},\frac{\hbar}{2} \qquad \begin{vmatrix}-\lambda_y & -\frac{i\hbar}{2}\\ \frac{i\hbar}{2} & -\lambda_y\end{vmatrix}=0 \;\Rightarrow\; \lambda_y=-\frac{\hbar}{2},\frac{\hbar}{2}$$

将本征值代入本征方程，求解本征函数。

对应 $\lambda_x=-\frac{\hbar}{2}$，$\hat{S}_x\chi_x=-\frac{\hbar}{2}\chi_x$，所以

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\ a_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-a_1\\ -a_2\end{bmatrix} \;\Rightarrow\; -a_1=a_2$$

利用归一化条件 $\chi_x^\dagger\chi_x=1$，可得

$$\begin{bmatrix}a_1^* & -a_1^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\ -a_1\end{bmatrix}=1 \;\Rightarrow\; a_1^*a_1=\frac{1}{2} \;\Rightarrow\; \chi_{x,-1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$$

同理，对应 $\lambda_x=\frac{\hbar}{2}$，$\hat{S}_x\chi_x=\frac{\hbar}{2}\chi_x$，可求得

$$\chi_{x,1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$$

对于 $\hat{S}_y$ 的两个本征函数 $\lambda_y=\pm\frac{\hbar}{2}$，也可用同样方法求得其本征矢

$$\lambda_y=-\frac{\hbar}{2} \;\rightarrow\; \chi_{y,-1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}i\\ 1\end{bmatrix} \qquad \lambda_y=\frac{\hbar}{2} \;\rightarrow\; \chi_{y,1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}i\\ -1\end{bmatrix}$$

21. 求自旋角动量在$\left(\cos\alpha,\cos\beta,\cos\gamma\right)$方向的投影

$$\hat{\vec{S}}=\hat{S}_x\cos\alpha+\hat{S}_y\cos\beta+\hat{S}_z\cos\gamma$$

的本征值和所属的本征函数。并说明：在这些本征态中，测量S_z有哪些可能值？这些可能值各以多大的概率出现？S_z的平均值是多少？

解：在S_z表象中，

$$\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\left(\cos\alpha\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}+\cos\beta\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}+\cos\gamma\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\right)=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}\cos\gamma&\cos\alpha-i\cos\beta\\\cos\alpha+i\cos\beta&-\cos\gamma\end{bmatrix}$$

求解久期方程，利用$\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1$，得到本征值

$$\begin{bmatrix}\frac{\hbar}{2}\cos\gamma-\lambda&\frac{\hbar}{2}\left(\cos\alpha-i\cos\beta\right)\\\frac{\hbar}{2}\left(\cos\alpha+i\cos\beta\right)&-\frac{\hbar}{2}\cos\gamma-\lambda\end{bmatrix}=0\quad\Rightarrow\quad\lambda^2-\frac{\hbar^2}{4}\left(\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma\right)=0\quad\Rightarrow\quad\lambda=\pm\frac{\hbar}{2}$$

对于本征值$\lambda=\frac{\hbar}{2}$，本征方程为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}\cos\gamma&\cos\alpha-i\cos\beta\\\cos\alpha+i\cos\beta&-\cos\gamma\end{bmatrix}\chi=\frac{\hbar}{2}\chi\quad,\quad\chi=\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}$$

要满足归一化条件$\chi^\dagger\chi=1$，由上式得

$$\begin{bmatrix}\cos\gamma-1&\cos\alpha-i\cos\beta\\\cos\alpha+i\cos\beta&-\cos\gamma-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}\quad\Rightarrow\quad a\left(\cos\alpha+i\cos\beta\right)-b\left(\cos\gamma+1\right)=0$$

$$\text{取}a=\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}},b=a\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{1+\cos\gamma}=\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2\left(1+\cos\gamma\right)}}$$

所以本征值$\lambda=\frac{\hbar}{2}$的本征矢为

$$\chi_{1/2}=\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}}\\\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2\left(1+\cos\gamma\right)}}\end{bmatrix}$$

同理可求得，本征值$\lambda=-\frac{\hbar}{2}$的本征矢为

$$\chi_{-1/2}=\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{1-\cos\gamma}{2}}\\\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2\left(1-\cos\gamma\right)}}\end{bmatrix}$$

以上是在S_z为表象，所以：

①在态$\chi_{1/2}$中，测得$S_z=\frac{\hbar}{2}$的概率为$\left|\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}}\right|^2=\frac{1+\cos\gamma}{2}$，测得$S_z=-\frac{\hbar}{2}$概率为$\left|\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2\left(1+\cos\gamma\right)}}\right|^2=\frac{1-\cos\gamma}{2}$，

期望值$\bar{S}_z=\frac{\hbar}{2}\frac{1+\cos\gamma}{2}+\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\frac{1-\cos\gamma}{2}=\frac{\hbar}{2}\cos\gamma$.

②在态$\chi_{-1/2}$中，测得$S_z=-\frac{\hbar}{2}$的概率为$\left|\sqrt{\frac{1-\cos\gamma}{2}}\right|^2=\frac{1-\cos\gamma}{2}$，测得$S_z=-\frac{\hbar}{2}$概率为$\left|\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2\left(1-\cos\gamma\right)}}\right|^2=\frac{1+\cos\gamma}{2}$，

期望值$\bar{S}_z=\frac{\hbar}{2}\frac{1-\cos\gamma}{2}+\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\frac{1+\cos\gamma}{2}=-\frac{\hbar}{2}\cos\gamma$.

22. **证明** $\chi_s^{(1)},\chi_s^{(2)},\chi_s^{(3)},\chi_A$ **组成正交归一系。**

解：

$$\begin{cases}\chi_s^{(1)}=\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\\ \chi_s^{(2)}=\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})\\ \chi_s^{(3)}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})+\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]\\ \chi_A=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})-\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]\end{cases}$$

计算得

$$\chi_s^{(1)\dagger}\chi_s^{(1)}=\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})=\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}(s_{2z})=1$$

$$\chi_s^{(1)\dagger}\chi_s^{(2)}=\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})=0$$

$$\chi_s^{(1)\dagger}\chi_s^{(3)}=\frac{1}{2}\left[\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})+\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}\left[\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}(s_{2z})+0\right]=0$$

$$\chi_s^{(1)\dagger}\chi_A=\frac{1}{2}\left[\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})-\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}\left[\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}(s_{2z})-0\right]=0$$

$$\chi_s^{(2)\dagger}\chi_s^{(1)}=\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})=0$$

$$\chi_s^{(2)\dagger}\chi_s^{(2)}=\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})=\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}(s_{2z})=1$$

$$\chi_s^{(2)\dagger}\chi_s^{(3)}=\frac{1}{2}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})+\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}\left[0+\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}(s_{2z})\right]=0$$

$$\chi_s^{(2)\dagger}\chi_A=\frac{1}{2}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})-\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}\left[0-\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}(s_{2z})\right]=0$$

$$\chi_s^{(3)\dagger}\chi_s^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})+\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})=\frac{1}{\sqrt{2}}(0+0)=0$$

$$\chi_s^{(3)\dagger}\chi_s^{(2)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})+\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})=\frac{1}{\sqrt{2}}(0+0)=0$$

$$\chi_s^{(3)\dagger}\chi_s^{(3)}=\frac{1}{2}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})+\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\left[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})+\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}(1+0+0+1)=1$$

$$\chi_s^{(3)\dagger}\chi_A=\frac{1}{2}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})+\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\left[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})-\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}(1-0+0-1)=0$$

$$\chi_A^\dagger\chi_s^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})-\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})=\frac{1}{\sqrt{2}}(0-0)=0$$

$$\chi_A^\dagger\chi_s^{(2)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})-\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})=\frac{1}{\sqrt{2}}(0+0)=0$$

$$\chi_A^\dagger\chi_s^{(3)}=\frac{1}{2}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})-\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\left[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})+\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}(1+0-0-1)=0$$

$$\chi_A^\dagger\chi_A=\frac{1}{2}\left[\chi_{-1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{1/2}^\dagger(s_{1z})-\chi_{1/2}^\dagger(s_{2z})\chi_{-1/2}^\dagger(s_{1z})\right]\left[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})-\chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})\right]=\frac{1}{2}(1-0-0+1)=1$$

所以 $\chi_s^{(1)},\chi_s^{(2)},\chi_s^{(3)},\chi_A$ 组成正交归一系。

23. 一体系由三个全同的玻色子组成，玻色子之间无相互作用。玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个？它们的波函数怎样用单粒子波函数构成？

解：设三个玻色子广义坐标为q_1,q_2,q_3，两个单粒子态为$\phi_i(q),\phi_j(q)$，玻色子系统波函数应满足交换对称。体系的可能状态有 4 种，体系波函数表示为：

$$\psi_s^{(1)}=\phi_i(q_1)\phi_i(q_2)\phi_i(q_3)$$
$$\psi_s^{(2)}=\phi_j(q_1)\phi_j(q_2)\phi_j(q_3)$$
$$\psi_s^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\phi_i(q_1)\phi_i(q_2)\phi_j(q_3)+\phi_i(q_1)\phi_j(q_2)\phi_i(q_3)+\phi_j(q_1)\phi_i(q_2)\phi_i(q_3)\right]$$
$$\psi_s^{(4)}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\phi_j(q_1)\phi_j(q_2)\phi_i(q_3)+\phi_j(q_1)\phi_i(q_2)\phi_j(q_3)+\phi_i(q_1)\phi_j(q_2)\phi_j(q_3)\right]$$

24. 设氢的状态是

$$\psi=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\end{bmatrix}$$

（1）求轨道角动量的 z 分量和自旋角动量 z 分量的期望。

（2）求总磁矩 $\vec{M}=-\frac{e}{2\mu}\vec{L}-\frac{e}{\mu}\vec{S}$ 的 z 分量的期望（用玻尔磁子表示）。

解：（1）角动量 z 分量期望

$$\bar{L}_z=\int\psi^\dagger\hat{L}_z\psi\,\mathrm{d}\tau=\int\left[\frac{1}{2}R_{21}^*(r)Y_{11}^*(\theta,\varphi)\quad-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}^*(r)Y_{10}^*(\theta,\varphi)\right]\begin{bmatrix}\hbar\cdot\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\\ 0\cdot-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\end{bmatrix}\mathrm{d}\tau$$
$$=\frac{\hbar}{4}\int\left|R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\right|^2\mathrm{d}\tau$$
$$=\frac{\hbar}{4}$$

自旋角动量 z 分量的期望

$$\bar{S}_z=\int\psi^\dagger\hat{S}_z\psi\,\mathrm{d}\tau=\frac{\hbar}{2}\int\left[\frac{1}{2}R_{21}^*(r)Y_{11}^*(\theta,\varphi)\quad-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}^*(r)Y_{10}^*(\theta,\varphi)\right]\begin{bmatrix}\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\\ \frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\end{bmatrix}\mathrm{d}\tau$$
$$=\frac{\hbar}{2}\left[\frac{1}{4}\int\left|R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\right|^2\mathrm{d}\tau-\frac{3}{4}\int\left|R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\right|^2\mathrm{d}\tau\right]$$
$$=-\frac{\hbar}{4}$$

（2）总磁矩的 z 分量的期望

$$\bar{M}_z=-\frac{e}{2\mu}\bar{L}_z-\frac{e}{\mu}\bar{S}_z=-\frac{e}{2\mu}\frac{\hbar}{4}+\frac{e}{\mu}\frac{\hbar}{4}=\frac{e\hbar}{8\mu}=\frac{1}{4}M_B$$

其中$M_B=\frac{e\hbar}{2\mu}$是玻尔磁子。

25. 设两电子在弹性中心力场中运动，每个电子的势能是$U(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$。如果电子之间的库伦势能相比$U(r)$可忽略，求当一个电子处在基态，另一个电子处在沿 x 方向运动的第一激发态时，两电子组成体系的波函数。

解：单电子定态薛定谔方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2\right)\psi(x,y,z)=E\psi$$

采用分离变量法，设

$$\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$$

代入并两边同除ψ得到

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{X}\frac{\partial^2X}{\partial x^2}+\frac{1}{Y}\frac{\partial^2Y}{\partial z^2}+\frac{1}{Z}\frac{\partial^2Z}{\partial y^2}\right)+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x^2+y^2+z^2\right)=E$$

设三个变量的项各满足

$$E=E_x+E_y+E_z$$

$$\begin{cases}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right)X=E_xX\\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2y^2\right)Y=E_yY\\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2z^2\right)Z=E_zZ\end{cases}$$

都是一维简谐振子方程，所以

$$X(x)=N_{n_x}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_{n_x}(\alpha x)\quad Y(y)=N_{n_y}e^{-\frac{\alpha^2y^2}{2}}H_{n_y}(\alpha y)\quad Z(z)=N_{n_z}e^{-\frac{\alpha^2z^2}{2}}H_{n_z}(\alpha z)\qquad \alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}},n_x,n_y,n_z=0,1,2,\cdots$$

单电子总波函数

$$\psi_{n_xn_yn_z}=N_{n_x}N_{n_y}N_{n_z}e^{-\frac{\alpha^2r^2}{2}}H_{n_x}(\alpha x)H_{n_y}(\alpha y)H_{n_z}(\alpha z)$$

处于基态的电子，波函数为

$$\psi_{000}=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\alpha^2r^2}{2}}$$

沿 x 方向第一激发态的电子，波函数为

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\alpha^2r^2}{2}}2\alpha x$$

坐标波函数可以组成一个对称和一个反对称波函数

$$\psi_S=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{000}(\vec r_1)\psi_{100}(\vec r_2)+\psi_{100}(\vec r_1)\psi_{000}(\vec r_2)\right]=\frac{\alpha^4}{\pi^{3/2}}e^{-\frac{\alpha^2}{2}\left(r_1^2+r_2^2\right)}(x_2+x_1)$$

$$\psi_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{000}(\vec r_1)\psi_{100}(\vec r_2)-\psi_{100}(\vec r_1)\psi_{000}(\vec r_2)\right]=\frac{\alpha^4}{\pi^{3/2}}e^{-\frac{\alpha^2}{2}\left(r_1^2+r_2^2\right)}(x_2-x_1)$$

而两个电子的自旋函数可以组成三个对称函数$\chi_S^{(1)},\chi_S^{(2)},\chi_S^{(3)}$和一个反对称函数$\chi_A$。电子是费米子，所以体系波函数应满足交换反对称，所以体系波函数为

$$\Psi_1=\chi_A\psi_S\quad \Psi_2=\chi_S^{(1)}\psi_A\quad \Psi_3=\chi_S^{(2)}\psi_A\quad \Psi_4=\chi_S^{(3)}\psi_A$$

其中Ψ_1是单态，Ψ_2,Ψ_3,Ψ_4具相同的总自旋量子数，是三重态。

26. 求在自旋态 $\chi_{1/2}(s_z)$ 中，$\hat{S}_x$ 和 $\hat{S}_y$ 的测不准关系 $\overline{(\Delta S_x^2)}\overline{(\Delta S_y^2)}$.

解：首先

$$\overline{(\Delta S_x^2)}\overline{(\Delta S_y^2)} = \left(\overline{S_x^2} - \overline{S_x}^2\right)\left(\overline{S_y^2} - \overline{S_y}^2\right)$$

在 S_z 表象中，

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \qquad \chi_{1/2}(s_z) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

所以

$$\overline{S}_x = \chi_{1/2}^{\dagger}\hat{S}_x\chi_{1/2} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

$$\overline{S_x^2} = \chi_{1/2}^{?\dagger}\hat{S}_x^2\chi_{1/2} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}$$

所以

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

同理可求得

$$\overline{S}_y = 0 \qquad \overline{S_y^2} = \frac{\hbar^2}{4} \qquad \overline{\Delta S_y^2} = \frac{\hbar^2}{4}$$

所以

$$\overline{(\Delta S_x^2)}\overline{(\Delta S_y^2)} = \left(\overline{S_x^2} - \overline{S_x}^2\right)\left(\overline{S_y^2} - \overline{S_y}^2\right) = \frac{\hbar^4}{16}$$

*根据公式

$$\overline{\Delta F^2}\,\overline{\Delta G^2} \geq \frac{\overline{k^2}}{4} \quad \text{其中} \quad \left[\hat{F}, \hat{G}\right] = i\hat{k}$$

可得

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hbar\hat{S}_z \quad \Rightarrow \quad \hat{k} = \hbar\hat{S}_z$$

容易得

$$\overline{k^2} = \hbar^2\chi_{1/2}^{?\dagger}(s_z)\hat{S}_z\hat{S}_z\chi_{1/2}(s_z) = \frac{\hbar^4}{4}$$

所以

$$\overline{(\Delta S_x^2)}\overline{(\Delta S_y^2)} \geq \frac{\overline{k^2}}{4} = \frac{\hbar^4}{16}$$

此式表明了普遍的不确定关系，在任意态中都成立。但题目限定了量子态，使上式刚好取等，是特殊情况，所以不可直接套用不确定关系公式。

四、重要公式

（1）黑体辐射公式

$$\rho_\upsilon \mathrm{d}\upsilon = \frac{8\pi h\upsilon^3}{c^3}\cdot\frac{1}{e^{\frac{h\upsilon}{k_BT}}-1}\mathrm{d}\upsilon$$

（2）德布罗意关系

$$\begin{cases} E = h\upsilon = \hbar\omega \\ \vec{p} = \dfrac{\hbar}{\lambda}\vec{n} = \hbar\vec{k} \end{cases}$$

（3）玻尔-索末菲量子化条件

$$\oint p\mathrm{d}q = \left(n+\frac{1}{2}\right)h$$

（4）自由粒子波函数

$$\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$$

（5）n 维自由粒子动量算符本征函数

$$\psi_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{n}{2}}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

（6）δ 函数的傅里叶展开

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi}\int e^{ik(x-x_0)}\mathrm{d}k$$

$$\delta(\vec{p}-\vec{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}}\mathrm{d}\vec{r} = \int \psi_p^*\psi_p\mathrm{d}\vec{r}$$

（7）薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$$

（8）定态薛定谔方程

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad \Psi = \psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

（9）概率流密度

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

（10）一维线性谐振子能级与波函数

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_n(\alpha x) \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

（11）厄米多项式的前三项

$$H_0 = 1 \quad H_1 = 2\xi \quad H_2 = 4\xi^2 - 2$$

（12）厄米多项式和一维线性谐振子波函数的递推公式

$$\frac{\mathrm{d}H_n(\xi)}{\mathrm{d}\xi} = 2nH_{n-1}(\xi)$$

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0$$

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

（13）宽为 a、高为 U_0 的势垒贯穿概率

$$D \approx \frac{16E\left(U_0 - E\right)}{U_0^2} e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0-E\right)}}$$

（14）$0 < x < a$ 一维无限深方势阱能级和波函数

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad \psi_n\left(x\right) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

（15）动能算符、坐标算符、动量算符、角动量算符、角动量平方算符

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad \hat{\vec{x}} = \vec{x} \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla \quad \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

（16）角动量 z 分量算符、角动量平方算符的本征值和本征函数

$$\hat{L}_z Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right) = m\hbar Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right) \qquad \hat{L}^2 Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right) = l\left(l+1\right)\hbar^2 Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right) \qquad l = 0,1,\cdots,\ m = 0,\pm1,\cdots,\pm l$$

（17）$l = 0$ 和 $l = 1$ 的球谐函数

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \quad Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}$$

（18）类氢原子波函数，前 2 个径向波函数

$$\psi = R_{nl}\left(r\right)Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right)$$

$$R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot 2e^{-\frac{Z}{a_0}r} \quad R_{20} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(2 - \frac{Z}{a_0}r\right)e^{-\frac{Z}{2a_0}r} \quad R_{21} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{Z}{a_0\sqrt{3}}re^{-\frac{Z}{2a_0}r}$$

（19）类氢原子能级

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e_s^4}{2\hbar^2 n^2} \quad n = 1,2,\cdots$$

（20）玻尔半径

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e_s^2 m_e}$$

（21）厄米算符的定义

$$\int \psi^* \hat{F}\varphi \mathrm{d}\tau = \int \left(\hat{F}\psi\right)^* \varphi \mathrm{d}\tau$$

（22）ψ 态中力学量 F 的期望值

$$\bar{F} = \left\langle \psi \middle| \hat{F} \middle| \psi \right\rangle = \int \psi^* \hat{F}\psi \mathrm{d}\tau$$

（23）坐标、动量、角动量算符的对易关系

$$\begin{cases} \left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right] = i\hbar\delta_{ij} \\ \left[\hat{x}_i, \hat{x}_j\right] = 0 \\ \left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \\ \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_s \\ \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y \end{cases}$$

$$\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar\hat{\vec{L}} \quad \left[\hat{L}_x, \hat{L}^2\right] = \left[\hat{L}_y, \hat{L}^2\right] = \left[\hat{L}_z, \hat{L}^2\right] = 0$$

（24）算符对易的运算规则

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=-\left[\hat{B},\hat{A}\right]$$

$$\left[\hat{A},\hat{A}\right]=\left[\hat{A},C\right]=0，C为常数$$

$$\left[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]$$

$$\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}$$

$$\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]=\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}$$

$$\left[\hat{A},\left[\hat{B},\hat{C}\right]\right]+\left[\hat{B},\left[\hat{C},\hat{A}\right]\right]+\left[\hat{C},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0$$

（25）不确定关系

$$\left[\hat{F},\hat{G}\right]=i\hat{k} \qquad \overline{\Delta F^2}\,\overline{\Delta G^2}\geq\frac{\bar{k}^2}{4}$$

（26）波函数 ψ 在 Q 表象中 u_n 基矢下的表示

$$|a\rangle=\sum_n|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle \qquad a_n=\langle u_n|\psi\rangle=\int u_n^*\psi\,\mathrm{d}\tau$$

（27）算符 $\hat{F}$ 在 Q 表象中 u_n 基矢下的矩阵元

$$F_{mn}=\left\langle u_m\middle|\hat{F}\middle|u_n\right\rangle=\int u_m^*\hat{F}u_n\mathrm{d}\tau$$

（28）坐标动量算符的变换关系

$$\hat{x}\hat{p}_y\psi_p=x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}xp_ye^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}p_y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}=p_y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\right)\psi_p$$

$$\hat{x}\hat{p}_y\psi_p=p_y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\right)\psi_p$$

（29）矩阵表示的力学量期望值公式

$$\bar{F}=\Phi^\dagger F\Phi$$

（30）A 表象、基矢 $\{\psi_n\}$ 到 B 表象、基矢 $\{\varphi_\beta\}$ 的幺正变换矩阵元

$$S_{n\beta}=\int\psi_n^*\varphi_\beta\mathrm{d}\tau$$

（31）算符 $\hat{F}$ 从 A 表象 F_{mn} 到 B 表象 $F'_{\alpha\beta}$ 的变换

$$F'=S^\dagger FS$$

（32）任意态矢 ψ 从 A 表象、基矢 $\{\psi_n\}$ 表示的 a，变换到 B 表象基矢 $\{\varphi_\beta\}$ 表示的 b

$$b=S^\dagger a$$

（33）已知 $\hat{F}$ 在 Q 表象、$\{u_n\}$ 基矢的矩阵形式 F，变换到 F 自身表象（对角化）的矩阵

$$S=\left[(\varphi_1)\quad(\varphi_2)\quad(\varphi_3)\quad\cdots\right]$$

$$F'=S^\dagger FS=\mathrm{diag}\left(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\cdots\right)$$

其中 φ_n 是矩阵 F 在 Q 表象的、本征值 λ_n 的本征矢。

（34）本征矢的封闭性

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = I \qquad \int |\lambda\rangle\langle\lambda| \mathrm{d}\lambda = I$$

（35）湮灭与产生算符

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right) \qquad \hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)$$

（36）湮灭与产生算符的作用

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \qquad \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

其中$|n\rangle$是线性谐振子本征函数。

（37）粒子数算符

$$\hat{N} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \qquad \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \qquad \overline{N} = \left\langle\psi\middle|\hat{N}\middle|\psi\right\rangle$$

（38）非简并微扰能级二级修正与波函数一级修正

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m\neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_{m\neq n} \frac{\left|H'_{mn}\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

（39）微扰矩阵元

$$H'_{mn} = \left\langle\psi_m^{(0)}\middle|\hat{H}'\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle = \int \psi_m^{(0)*}\hat{H}'\psi_n^{(0)}\mathrm{d}\tau$$

（40）k 重简并微扰能级一级修正项，久期方程

$$H'_{\alpha\beta} = \left\langle\varphi_\alpha\middle|\hat{H}'\middle|\varphi_\beta\right\rangle \qquad \det\left|H'_{\alpha\beta} - E_n^{(1)}\delta_{\alpha\beta}\right| = 0$$

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E_n^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1k} \\ H'_{21} & H'_{22} - E_n^{(1)} & \cdots & H'_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H'_{k1} & H'_{k2} & \cdots & H'_{kk} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

（41）电子轨道磁矩和自旋磁矩

$$\vec{M}_L = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} \qquad \vec{M}_S = -\frac{e}{m_e}\vec{S}$$

（42）电子自旋角动量算符对易关系

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

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hbar\hat{S}_z \quad \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] = i\hbar\hat{S}_x \quad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] = i\hbar\hat{S}_y$$

（43）电子自旋角动量平方算符

$$\hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} = s(s+1)\hbar^2, s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar, m_s = \pm\frac{1}{2}$$

（44）S_z 表象中 $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ 的矩阵形式

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

（45）泡利算符的定义

$$\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}} \qquad \hat{\vec{\sigma}}\times\hat{\vec{\sigma}}=2i\hat{\vec{\sigma}}$$

（46）泡利算符的性质

$$\hat{\vec{\sigma}}\times\hat{\vec{\sigma}}=2i\hat{\vec{\sigma}} \qquad \hat{\sigma}_i^2=1$$
$$\left\{\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y\right\}=\left\{\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z\right\}=\left\{\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_z\right\}=0$$
$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=i\hat{\sigma}_z \quad \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i\hat{\sigma}_x \quad \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x=i\hat{\sigma}_y$$

（47）S_z 表象中泡利算符的矩阵形式

$$\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix} \quad \hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix} \quad \hat{\sigma}_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$$

（48）两个电子的自旋函数

$$\left|s,m_s\right\rangle$$
$$\left|1,1\right\rangle=\chi_s^{(1)}=\chi_{1/2}\left(s_{1z}\right)\chi_{1/2}\left(s_{2z}\right)$$
$$\left|1,-1\right\rangle=\chi_s^{(2)}=\chi_{-1/2}\left(s_{1z}\right)\chi_{-1/2}\left(s_{2z}\right)$$
$$\left|1,0\right\rangle=\chi_s^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{1/2}\left(s_{1z}\right)\chi_{-1/2}\left(s_{2z}\right)+\chi_{-1/2}\left(s_{1z}\right)\chi_{1/2}\left(s_{2z}\right)\right]$$
$$\left|0,0\right\rangle=\chi_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_{1/2}\left(s_{1z}\right)\chi_{-1/2}\left(s_{2z}\right)-\chi_{-1/2}\left(s_{1z}\right)\chi_{1/2}\left(s_{2z}\right)\right]$$

（49）自旋分量形式的波函数 Ψ 求力学量概率和均值

$$w_n=\left|\int u_n^{\dagger}\Psi\mathrm{d}\tau\right|^2 \qquad \overline{F}=\int\Psi^{\dagger}\hat{F}\Psi\mathrm{d}\tau$$

其中若 $\hat{F}$ 与自旋无关，则以相同形式作用在两个分量上；若其本征函数 u_n 与自旋无关，则写为分量相同的二元矢量。

（50）均方偏差公式

$$\overline{\Delta F^2}=\overline{F^2}-\bar{F}^2$$

（51）玻尔半径，玻尔磁子，精细结构常数

$$a_0=\frac{\hbar^2}{e_s^2m_e} \qquad M_B=\frac{e\hbar}{2m_e} \qquad \alpha=\frac{e_s^2}{\hbar c}\approx\frac{1}{137}$$

（52）积分公式

$$\delta\left(\vec{p}-\vec{p}'\right)=\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^n}\int e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}-\vec{p}'\right)\cdot\vec{r}}\mathrm{d}\vec{r}=\int\psi_p^*\psi_p\mathrm{d}\vec{r}$$

$$\int_0^{\infty}x^ne^{-ax}\mathrm{d}x=\frac{n!}{a^{n+1}} \qquad \int_0^{\infty}e^{-ax^2}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_0^{\infty}x^{2n}e^{-ax^2}\mathrm{d}x=\frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}} \qquad \int_0^{\infty}xe^{-ax}\sin bx\mathrm{d}x=\frac{2ab}{\left(a^2+b^2\right)^2}$$

（53）球坐标下梯度算符和拉普拉斯算符

$$\nabla=\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$
$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$