September 18, 2011

量子力学学习笔记

phileas

September 18, 2011

Contents

0.1 写在前面的话

说明

为了方便查询，目录做的尽可能详细些。为了方便看，排版比较松。内容，相应的参看书上都有，我做的最多的是丰富细节，补充出了书上省略的细节。所以名字也是叫学习笔记，只不过是将手写的笔记写成电子版而已。这样有个好处是，随着学习的不断深入，笔记的内容不断丰富，电子版的就可以随时补充，而不受纸张版面及顺序的限制。这样笔记就很灵活。

这里主要写写自己学习初等量子力学的感受，方法，及用到的学习资料。都是针对初等量子力学而言的。

感受是随处可见的，“【】”里的内容就是自己的感受。虽然里面内容很多都不重要，但我觉得表达出这些是很重要的。表达出自己学习中最直接的真实的感受，是区别千篇一律，是展示自我，这是真正自己的东西。

量子力学学习难点

一、数学。多，基本上步步都有推导；烦，看看贝塞尔方程，勒近德方程，球谐函数就知道了；杂，大学学的数学，微积分、微分方程、矢量代数、矩阵、球坐标系下的微分方程等，基本都用上了。
二、物理理解！

学习及参考资料

教材

- 量子力学 卷I/曾谨言 著.—4版. –北京：科学出版社，2007
  【主要参考教材】

- Griffiths.Introduction.to.Quantum.Mechanics.2nd.Ed
  【很适合结合曾书来看，能体会到很多新东西，并且有大量习题和详解】

- 量子力学教程/周世勋 编.-北京：高等教育出版社，1979.2（2008重印）
  【这本小黄书，绝版算了。不上不下，不清不楚，内容实在有限，讲量子力学完全不够用，仅用这本书的，干脆改讲量子物理，可量子物理也有专门的书，轮不到这了。】

- 量子力学 /苏汝铿 编著.—2版.–北京：高等教育出版社，2002.12（2006重印）
- 量子力学原理 /王正行 编著.–北京：北京大学出版社，2008.7

习题集

- D.J.Griffith Intro 2 QM(2Ed 95) PH 答案
  【前面说的配套解答】
- 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
  【网上有电子版，现在好像买不到了！内容丰富！前身是，美国物理试题与解答 量子力学第六卷，这个也早就绝版了，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
  【觉得里面的题目需要知道很多前提条件。要花功夫看。】
- 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）
  【对初学者很有用的一本习题集，步骤详细，而且透着一种学习态度。】
- 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。也绝版了，网上有电子版。收录了很多大学研究生入学考试的题目。】
- 周世勋编的“量子力学教程”学习辅导书/张宏宝.–北京：高等教育出版社，2004.11（2008重印）
  【给出了周世勋编的“量子力学教程”课后习题的答案】
- 曾谨言量子力学教程习题剖析,孙婷雅

- 量子力学习题精解（与张永德老师的书对应）/吴强，柳盛典编著.–北京：科学出版社，2003（大学物理习题精解系列）
- 量子力学典型题精讲（宋鹤山）

网络资源

- 网上流传的不知姓名的曾谨言老版量子力学课后答案。
- 量子力学讲义–季燕江
【很详细，给出了书上忽略的细节，还给出了推荐阅读的内容。感谢无私奉献！】
- 量子力学个人笔记–Realasking
【体现了他的风格，给我榜样。也是看了他的笔记，才促使我学习LaTeX，促使我写自己的学习笔记。感谢！】
- 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
【还有很多网络资源，这里只列出我用到的，感谢那些资源无私奉献的人们！】

网络视频资源

- 复旦大学-量子力学I-苏汝铿
【不清晰，勉强可看】
- 钱伯初量子力学
【没搜到，但淘宝上有卖，貌似150元，现在不知道怎么样】
- 普通物理-台湾国立交通大学
【可以到他们的学校网站上下，是开放资源项目，考虑到网络传输，他们还提供了两种质量的视频。虽说是普通物理，但讲了整个物理概貌，对整个物理把握还是很有用。】

- 《量子力学导论》台湾国立交通大学Introductory quantum mechanics
  【讲得超细致！台湾有个开发资源联盟，里面还有很多优秀的网络资源。】

- Stanford Modern Physics - Quantum Mechanics
  【也是开放资源，看英文水平了！】

学习方法——素描法

这种方法是从网络视频，普通物理-台湾国立交通大学-李威仪，那学来的。其理论依据应该可以用马克思关于真理和认识事物的相应理论。认识事物是不断反复的过程。素描的过程就是先画事物的轮廓，然后再不断丰富细节。

学习也是如此，在第一遍的时候，必然遇到很多不懂的细节，不用担心，跳过，把握整体轮廓，或许到后来就豁然开朗。跳过不是放弃问题，而是挂起。这种学习反复的过程，我在学习量子力学的过程体会的尤深。普通物理的数学、理解都比较简单，一两遍后，看起了就轻松。而看曾谨言的《量子力学》（卷一）却不一样，里面需要补充的细节太多了，内容也很宽广。所以要反复多次。

我写电子版笔记也可以说是个素描的过程。首先是内容，灵感不是在脑子里排好顺序来的，在写的过程中，可能是这点，可能是那点。所以要及时跳到相应内容下，记下来。及时记下灵感也是很重要的。否则学习的东西也是空壳。其次是LaTeX排版，边学边用的，这也不是一下子就是现在的样子。最初是写的是一个个单独的article类别文档，后来多了，再改用book类。排版也是不断修改的。

思维纠正——做题

做题是很重要的。只是我长期有思维偏见。自然界是没有答案给你的。平时做一道题无疑是一次小小的探索。把自己有的想法完全写出来，这就是思维的过程，这个很重要。

关于LaTeX的核心思想

我觉得它与Word的最大不同，应该是输入的方式了。它是靠直接“说”来代替Word中的那些不断缓慢的操作。比如：Word中改变字的颜色，是靠操作来完成的，选则相应的文字，然后去点击一些操作图标。而它

是在要改变颜色的那段直接写上“换成某某颜色”的命令。这样书写公式就很简单，它可以像我们读公式一样，直接输上去就行了。比如$\sqrt{2}$，它可以直接输类似“根号2”的命令，即：`$\sqrt{2}$`。也就是说一切操作只靠键盘就可以完成，甚至鼠标都不用点。这样是极大提高工作效率。对于那些老手来说，一路敲过去，转换出来就是漂亮的排版了。这样输公式爽多了。但要记住一堆命令。初学起来就不习惯了。

但是我觉得这还是个历史产物。以后随着技术不断先进，手写功能越来越强大，将是与手写识别相结合的情况。直接手写输入公式，就可以转换成自己想要的效果。对于一些微调又可以用命令来做。

量变引起质变—积累的重要性

积累是必要的，需要积累一定量的素材。量变引起质变嘛。那些看似偶然的发现都不是偶然，如果不是他长期从事相关的工作，才轮不到他发现。所以做什么都要踏踏实实。

最后

仍在学习中，笔记也在不断的修改，增补。当觉得比较满意的时候，我会正式发布出来，并公布所有LaTeX源码。

欢迎交流学习，我的E-mail:phileaslean@gmail.com。

0.2　数学补充

0.2.1　概率

$$\Delta j = j - \langle j \rangle$$
$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta j)^2 \rangle$$

$$\begin{aligned}\sigma^2 = \langle (\Delta j)^2 \rangle &= \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j) \\ &= \sum (j^2 - 2j\langle j \rangle + \langle j \rangle^2) P(j) \\ &= j^2 P(j) - 2\langle j \rangle \sum j P(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j) \\ &= \langle j^2 \rangle - 2\langle j \rangle\langle j \rangle + \langle j \rangle^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2\end{aligned}$$

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2}$$

因为$\sigma^2 \geq 0$，所以通常，$\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2$。当$\sigma = 0$时，$\langle j^2 \rangle = \langle j \rangle^2$ 说明分布没有偏差，各个值都相等。

对于连续的情形，设$\rho(x)$为概率密度，x处于a到b的概率为：

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x)dx$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)dx$$
$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx$$
$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx$$

0.2.2 积分

0.2.2.1 定积分的分部积分

设函数$\mu(x),\nu(x)$在区间$[a,b]$上具有连续导数$\mu'(x),\nu'(x)$，则有

$$(\mu\nu)'=\mu\nu'+\nu\mu'$$

等式两边各取由a到b的定积分，

$$\mu\nu\Big|_a^b=\int_a^b\mu\nu'dx+\int_a^b\nu\mu'dx$$

即：

$$\int_a^b\mu d\nu=\mu\nu\Big|_a^b-\int_a^b\nu d\mu$$
$$\int_a^b\mu\nu'dx=\mu\nu|_a^b-\int_a^b\nu\mu'dx$$

【注】我们习惯了$\int_a^b\mu d\nu,\int_a^b\nu d\mu$这种形式，而忽略了$\int_a^b\mu\nu'dx,\int_a^b\nu\mu'dx$这种形式。

0.2.2.2 定积分的性质

如果$f(x)$是偶函数，则：$\int_{-a}^a f(x)dx=2\int_0^a f(x)dx$
如果$f(x)$是奇函数，则：$\int_{-a}^a f(x)dx=0$

0.2.2.3 与三角函数相关的积分公式

$$\int\sin^2 axdx=\frac{1}{2}x-\frac{1}{4a}\sin 2ax \tag{1}$$
$$\int\sin^3 axdx=-\frac{1}{a}\cos ax+\frac{1}{3a}\cos^3 ax \tag{2}$$
$$\int x\sin axdx=\frac{1}{a^2}\sin ax-\frac{1}{a}x\cos ax \tag{3}$$

$$\int x\cos ax dx=\frac{1}{a^2}\cos ax+\frac{x}{a}\sin ax \tag{4}$$

$$\int x^2\sin ax dx=\frac{2x}{a^2}\sin ax+(\frac{2}{a^2}-\frac{x^2}{a})\cos ax \tag{5}$$

$$\int x^2\cos ax dx=\frac{2x}{a^2}\cos ax+(\frac{x^2}{a}-\frac{2}{a^3})\sin ax \tag{6}$$

$$\int x\sin^2 ax dx=\frac{x^2}{4}-\frac{x}{4a}\sin 2ax-\frac{1}{8a^2}\cos 2ax \tag{7}$$

$$\int x\cos^2 ax dx=\frac{x^2}{4}+\frac{x}{4a}\sin 2ax+\frac{1}{8a^2}\cos 2ax \tag{8}$$

$$\int \sin ax\sin 2ax dx=\frac{2}{3a}\sin^3 ax \tag{9}$$

$$\int \cos ax\cos 2ax dx=\frac{1}{a}\sin ax-\frac{2}{3a}\sin^3 ax \tag{10}$$

$$\int \sin ax\cos 2ax dx=\frac{1}{a}\cos ax-\frac{2}{3a}\cos^3 ax \tag{11}$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^n x dx=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\cos^n x dx=\begin{cases}\frac{(n-1)!!}{n!!} & n\text{为奇数}\\ \frac{(n-1)!!}{n!!}\frac{\pi}{2} & n\text{为偶数}\end{cases} \tag{12}$$

$$\int_0^{\infty}\frac{\sin ax}{x}dx=\frac{\pi}{2}\qquad (a>0) \tag{13}$$

$$\int_0^{\infty}\frac{\sin ax}{x}dx=-\frac{\pi}{2}\qquad (a<0) \tag{14}$$

$$\int_0^{\infty}\frac{\sin^2 ax}{x^2}dx=\frac{\pi a}{2} \tag{15}$$

0.2.2.4 详细推导

(1) $\int \sin^2 ax dx=\frac{1}{2}x-\frac{1}{4a}\sin 2ax$

【推导】【降次】

$$\cos 2y=\cos^2 y-\sin^2 y=1-2\sin^2 y\qquad \sin^2 y=\frac{1-\cos 2y}{2}$$

$$\begin{aligned}\int \sin^2 axdx &= \int \frac{1-\cos 2ax}{2}dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{2}\int \cos 2axdx \\ &= \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a}\int \cos 2axd2ax = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a}\sin 2ax\end{aligned}$$

(1) $\int \sin^3 axdx = -\frac{1}{a}\cos ax + \frac{1}{3a}\cos^3 ax$

【推导】【降次】【相比平方还更好证些！】

$$\int \sin^3 axdx = -\frac{1}{a}\int (1-\cos^2 ax)d\cos ax = -\frac{1}{a}\cos ax + \frac{1}{3a}\cos^3 ax$$

(1) $\int \sin ax \cos 2axdx = \frac{1}{a}\cos ax - \frac{2}{3a}\cos^3 ax$

【推导】【这叫啥？降元？】

$$\begin{aligned}\int \sin ax \cos 2axdx &= \int \sin ax(1-2\sin ax)dx = \int (\sin ax - 2\sin^3 ax)dx \\ &= \int \sin axdx - 2\int \sin^3 axdx = \frac{1}{a}\cos ax - \frac{2}{3a}\cos^3 ax\end{aligned}$$

(1) $\int \sin ax \sin 2axdx = \frac{2}{3a}\sin^3 ax$

【推导】【降元】

$$\int \sin ax \sin 2axdx = 2\int \sin^2 ax \cos axdx = \frac{2}{a}\int \sin^2 axd\sin ax = \frac{2}{3a}\sin^3 ax$$

(1) $\int \cos ax \cos 2axdx = \frac{1}{a}\sin ax - \frac{2}{3a}\sin^3 ax$

【推导】【降元】

$$\int \cos ax \cos 2axdx = \int \cos ax(\cos^2 ax - \sin^2 ax)dx = \int \cos ax(1-2\sin^2 ax)dx$$

$$
\begin{aligned}
&= \int \cos ax dx - 2\int \cos ax \sin^2 ax dx \\
&= \frac{1}{a}\sin ax - \frac{2}{a}\int \sin^2 ax d\sin ax \\
&= \frac{1}{a}\sin ax - \frac{2}{3a}\sin^3 ax
\end{aligned}
$$

(1) $\int x\cos ax dx = \frac{x}{a}\sin ax + \frac{1}{a^2}\cos ax$

【推导】【分部积分】

$$
\begin{aligned}
\int x\cos ax dx &= \frac{1}{a}\int x d\sin ax = \frac{1}{a}x\sin ax - \frac{1}{a}\int \sin ax dx \\
&= \frac{x}{a}\sin ax + \frac{1}{a^2}\cos ax
\end{aligned}
$$

(1) $\int x\sin^2 ax dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x}{4a}\sin 2ax - \frac{1}{8a^2}\cos 2ax$

【推导】【降次，分部积分】

$$
\begin{aligned}
\int x\sin^2 ax dx &= \int x\frac{1-\cos 2ax}{2}dx = \int (\frac{x}{2} - \frac{1}{2}x\cos 2ax)dx \\
&= \int \frac{x}{2}dx - \frac{1}{2}\int x\cos 2ax dx \\
&= \frac{x^2}{4} - \frac{x}{4a}\sin 2ax - \frac{1}{8a^2}\cos 2ax
\end{aligned}
$$

(1) $\int x\cos^2 ax dx = \frac{x^2}{4} + \frac{x}{4a}\sin 2ax + \frac{1}{8a^2}\cos 2ax$

【推导】【降次，分部积分】

$$
\int x\cos^2 ax dx = \frac{1}{2}\int x dx + \frac{1}{2}\int x\cos 2ax dx = \frac{x^2}{4} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2a}\int x d\sin 2ax\right)
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{x^2}{4} + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2a}\left(x\sin 2ax - \int \sin 2ax dx\right)\right] \\
&= \frac{x^2}{4} + \frac{x}{4a}\sin 2ax + \frac{1}{8a^2}\cos 2ax
\end{aligned}
$$

$$
\int x\sin ax\sin bx dx = -x\left[\frac{\sin(a+b)x}{2(a+b)} - \frac{\sin(a-b)x}{2(a-b)}\right] - \left[\frac{\cos(a+b)x}{2(a+b)^2} - \frac{\cos(a-b)x}{2(a-b)^2}\right]
$$

$$
\begin{aligned}
\int x\sin px\sin 2px dx &= \frac{1}{2}\left[x\frac{\sin px}{p} + \frac{\cos px}{p^2} - x\frac{\sin 3px}{3p} - \frac{\cos 3px}{9p^2}\right] \\
&= \frac{1}{2}\int(\cos px - \cos 3px)x dx \qquad \text{参见公式（2）} \\
&= \frac{1}{2}\left[x\frac{\sin px}{p} + \frac{\cos px}{p^2} - x\frac{\sin 3px}{3p} - \frac{\cos 3px}{9p^2}\right] \\
\int x\sin px\sin 2px dx &= \frac{1}{2}\int(\cos px - \cos 3px)x dx???
\end{aligned}
$$

0.2.2.5 常用积分公式

$$\int_0^{\infty} e^{-ax} dx = \frac{1}{a} \tag{16}$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \qquad \text{（n=正整数，}a>0\text{）} \tag{17}$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{18}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-ax^2} dx = 0 \qquad \text{奇函数积分} \tag{19}$$

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \tag{20}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}} \tag{21}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}} \tag{22}$$

$$\int x^n e^{ax}dx = \frac{1}{a}x^n e^{ax} - \frac{n}{a}\int x^{n-1}e^{ax}dx \qquad (n>0) \tag{23}$$

$$\int e^{ax}\sin bx dx = \frac{e^{ax}}{a^2+b^2}(a\sin bx - b\cos bx) \tag{24}$$

$$\int e^{ax}\cos bx dx = \frac{e^{ax}}{a^2+b^2}(a\cos bx + b\sin bx) \tag{25}$$

$$\int_0^\infty xe^{-ax}\sin bx dx = \frac{2ab}{(a^2+b^2)^2} \qquad (a>0) \tag{26}$$

$$\int_0^\infty xe^{-ax}\cos bx dx = \frac{a^2-b^2}{(a^2+b^2)^2} \qquad (a>0) \tag{27}$$

$$\int_0^\infty e^{-q^2x^2}\cos[p(x+r)]dx = \frac{\sqrt{\pi}}{q}e^{-\frac{p^2}{4q^2}}\cos pr \tag{28}$$

$$\int \sqrt{ax^2+c}dx = \begin{cases} \frac{x}{2}\sqrt{ax^2+c} + \frac{c}{2\sqrt{a}}\ln(\sqrt{a}x + \sqrt{ax^2+c}) & (a>0) \\ \frac{x}{2}\sqrt{ax^2+c} + \frac{c}{2\sqrt{-a}}\arcsin(\sqrt{\frac{-a}{c}}x) & (a<0) \end{cases} \tag{29}$$

$$\tag{30}$$

【注】$n!!$为二阶乘，隔一个乘一次。对于非定积分，忽略了常数C。

0.2.2.6 详细推导

(12) $\int_0^\infty e^{-ax}x^n dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$ （n=正整数，$a>0$）

【推导】

看一个特例:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-ax}x^2dx &= -\frac{1}{a}\int_0^\infty x^2 de^{-ax} = -\frac{1}{a}(x^2e^{-ax}|_0^\infty - 2\int_0^\infty e^{-ax}xdx) \\ &= \frac{2}{a}\int_0^\infty e^{-ax}xdx = \frac{2}{a}\cdot(-\frac{1}{a})\int_0^\infty xde^{-ax}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{2}{a^2}(x\cdot e^{-ax}|_0^\infty - \int_0^\infty e^{-ax}dx) = \frac{2}{a^2}\int_0^\infty e^{-ax}dx \\
&= -\frac{2}{a^3}\int_0^\infty de^{-ax} = -\frac{2}{a^3}e^{-ax}|_0^\infty = \frac{2}{a^3}
\end{aligned}
$$

0.2.3 级数

参见，川大，《高等数学》二，p328

0.2.3.1 泰勒级数

若函数$f(x)$在含有点x_0的某开区间(a,b)内有直到n+1阶导数，则当x在(a,b)内时，

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n + \cdots$$

0.2.3.2 麦克劳林级数

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n + \cdots$$

$$
\begin{aligned}
\sqrt{1+x} &= 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{2\cdot 4}x^2 + \frac{1\cdot 3}{2\cdot 4\cdot 6}x^3 - \frac{1\cdot 3\cdot 5}{2\cdot 4\cdot 6\cdot 8}x^4 + \\
&\cdots + (-1)^{n-1}\frac{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2n-3)}{2\cdot 4\cdot 6\cdots 2n}x^n + \cdots \\
e^x &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots \\
\cos x &= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + (-1)^n\frac{x^{2n}}{(2n)!} + \cdots \qquad \text{（偶）} \\
\sin x &= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{(2n+1)}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n\frac{x^{(2n+1)}}{(2n+1)!} + \cdots \qquad \text{（奇）}
\end{aligned}
$$

以上$n = 0, 1, 2, \cdots$

0.2.3.3 欧拉公式

$$e^{ix} = \cos x + i\sin x$$

推导

$$\begin{aligned}
e^{ix} &= 1 + ix + \frac{(ix)^2}{2!} + \frac{(ix)^3}{3!} + \frac{(ix)^4}{4!} + \frac{(ix)^5}{5!} + \frac{(ix)^6}{6!} + \cdots \\
&= 1 + ix - \frac{x^2}{2!} - \frac{ix^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{ix^5}{5!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots \\
&= (1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots) + i(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + i\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \frac{x^{(2n+1)}}{(2n+1)!} \\
&= \cos x + i\sin x
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sin z &= \frac{1}{2i}(e^{iz} - e^{-iz}) \\
\cos z &= \frac{1}{2}(e^{iz} + e^{-iz})
\end{aligned}$$

0.2.4 矩阵

参见任何一本线性代数的书。

矩阵A的**转置矩阵**$\tilde{A}$**（或**A^T**）:**把矩阵A的行和列互相调换。

$$A_{nm} = \tilde{A}_{mn}$$

运算规律

$$\begin{aligned}
&(1)(A^T)^T = A \\
&(2)(A+B)^T = A^T + B^T \\
&(3)(\lambda A)^T = \lambda A^T \\
&(4)(AB)^T = B^T A^T
\end{aligned}$$

矩阵A的**共轭转置矩阵**$A^\dagger$**:**将矩阵A的转置矩阵$\tilde{A}$中的每个矩阵元素用它的共轭复数代替。<这些上标都可以看成一种运算>

$$A^*_{nm} = \tilde{A}^*_{mn} = A^\dagger_{mn}$$

厄米矩阵：和它的共轭转置矩阵$A^\dagger$相等的矩阵。

$$A = A^\dagger$$

矩阵的迹（详见维基百科）

0.2.5 矢量代数

数量积：两矢量$\vec{A}$与$\vec{B}$的模和它们间的夹角的余弦的乘积，也叫点积、内积。

基本性质:
1）$\vec{A} \cdot \vec{B} = 0 \Longleftrightarrow \vec{A} = 0$,或$\vec{B} = 0$或$\vec{A} \perp \vec{B}$
2)交换律：$\vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A}$
3）分配律：$(\vec{A} + \vec{B}) \cdot \vec{C} = \vec{A} \cdot \vec{C} + \vec{B} \cdot \vec{C}$
4)$(\vec{A} \cdot \vec{B})\lambda = \vec{A} \cdot (\vec{B}\lambda) = (\lambda\vec{A}) \cdot \vec{B}$
【这几个公式不够用啊，三个以上，貌似没有结合律！】
矢量积（叉积、外积）：$\vec{C} = \vec{A} \times \vec{B}$
$|\vec{C}| = |\vec{A}| \cdot |\vec{B}| \sin(\widehat{\vec{A}, \vec{B}})$，$\widehat{\vec{A}, \vec{B}}$表示$\vec{A}$与$\vec{B}$的夹角。
$\vec{C}$垂直于$\vec{A}, \vec{B}$
$\vec{C}$的方向按“右手法则”确定。
$|\vec{A} \times \vec{B}|$的几何意义：以$\vec{A}$、$\vec{B}$为邻边的平行四边形的面积。
基本性质:
1）$\vec{A} \times \vec{A} = 0$
2）$\vec{A} \times \vec{B} = -(\vec{B} \times \vec{A})$
3）$(\lambda\vec{A}) \times \vec{B} = \lambda(\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{A} \times (\lambda\vec{B})$
4）$(\vec{A} + \vec{B}) \times \vec{C} = \vec{A} \times \vec{C} + \vec{B} \times \vec{C}$
混合积:

$$(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C} = (\vec{B} \times \vec{C}) \cdot \vec{A} = (\vec{C} \times \vec{A}) \cdot \vec{B}$$

$$= -(\vec{B}\times\vec{A})\cdot\vec{C} = -(\vec{C}\times\vec{B})\cdot\vec{A} = -(\vec{A}\times\vec{C})\cdot\vec{B}$$

$$(\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C} = \vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C})$$

【参见曾题集第四章4.1】

量子力学中矢量算符定义成:

$$\vec{A} = A_x\vec{e}_x + A_y\vec{e}_y + A_z\vec{e}_z = A_\alpha\vec{e}_\alpha \qquad \text{这是一种写法}$$
$$= A_x\vec{i} + A_y\vec{j} + A_z\vec{k} \qquad \text{这种写法常见吧}$$

其中$\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$为$x, y, z$轴方向单位矢量；$A_x$等为算符或常量；$\alpha$代表$x, y, z$分量之一，表示该项遍及$x, y, z$求和。

设$\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$为矢量算符，有:

$$\begin{aligned}
\vec{A}\cdot\vec{B} &= A_\alpha B_\alpha = A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z \\
\vec{A}\times\vec{B} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\alpha\vec{e}_\gamma = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\vec{e}_\alpha A_\alpha B_\gamma \\
&= A_xB_y\vec{e}_z + A_yB_z\vec{e}_x + A_zB_x\vec{e}_y - A_xB_z\vec{e}_y - A_yB_x\vec{e}_z - A_zB_y\vec{e}_x \\
&= A_xB_y\vec{k} + A_yB_z\vec{i} + A_zB_x\vec{j} - A_xB_z\vec{j} - A_yB_x\vec{k} - A_zB_y\vec{i}
\end{aligned}$$

其中$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$是Levi-Civita符号，是一个三阶反对称张量，定义如下:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} &= -\varepsilon_{\beta\alpha\gamma} = -\varepsilon_{\alpha\gamma\beta} \\
\varepsilon_{123} &= 1
\end{aligned}$$

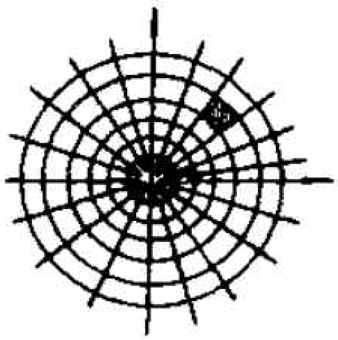
式中$\alpha, \beta, \gamma = (1, 2, 3)$
$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$对于任何两个指标对换，要改变正负号。因此，若有两个指标相同，则为0，例如$\varepsilon_{112} = \varepsilon_{121} = 0$。【知道这句话就行了！到底啥符号啊，怎么产生的，得查查？】

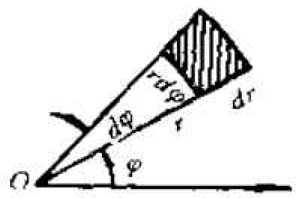
$$\begin{aligned}
&\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C}) = (\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C} \\
&[\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C})]_\alpha = \vec{A}\cdot(B_\alpha\vec{C}) - (\vec{A}\cdot\vec{B}C_\alpha) \\
&[(\vec{A}\times\vec{B})\times\vec{C}]_\alpha = \vec{A}\cdot(B_\alpha\vec{C}) - A_\alpha(\vec{B}\cdot\vec{C})
\end{aligned}$$

【这个几个不懂诶！】

0.2.6 极坐标系

直角坐标系中表示P点(x, y)，则在极坐标系中表示(r, θ)，如图:





直角坐标系变换到极坐标系为:

$$\begin{cases} x = r\cos\theta \\ y = r\sin\theta \end{cases}$$

于是直角坐标系变换到极坐标系只需将上式代入直角坐标系的表达式中化简就可以了。

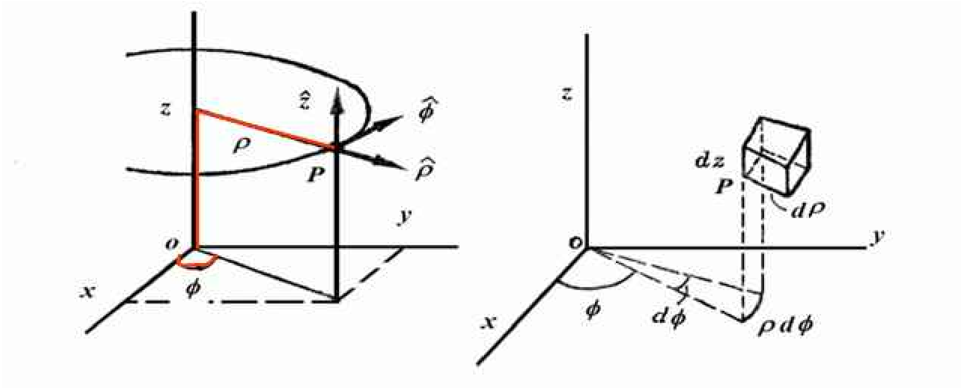
如：将$x^2 + y^2 = x \quad \left[(x - \frac{1}{2})^2 + y^2 = \frac{1}{4}\right]$变换到极坐标下，有:

$$r^2\cos^2\theta + r^2\sin^2\theta = r\cos\theta \Longrightarrow r = \cos\theta$$

极坐标系变换到直接坐标系为:

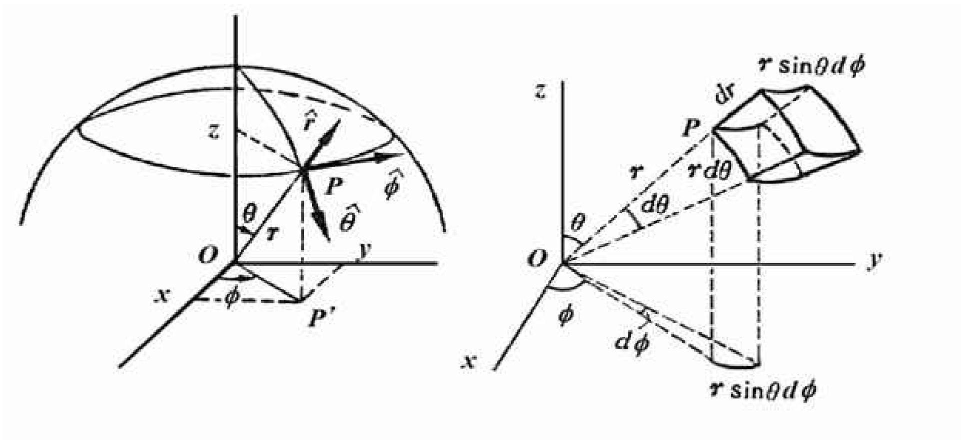
$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \theta = \arctan\dfrac{y}{x} \qquad x \neq 0 \end{cases}$$

0.2.7 柱坐标系



不详说了。很好理解。在极坐标的基础上往z方向上扩充一个dz就行了。

0.2.8 球坐标系



任一点P的坐标为：$u1 = r, u2 = \theta, u3 = \varphi$，其中：

- $\boldsymbol{r}$：P点离坐标原点O的距离，变化范围：$0 \leq r \leq \infty$;
- $\boldsymbol{\theta}$：O与P的连线与z 轴（极轴）正方向的夹角，称为极角，变化范围：$0 \leq \theta \leq \pi$（注意起始位置）；

- φ ：O与P' 的连线对x 轴正方向的夹角，其中P'是P点在xy平面的投影，φ 也称为P点的方位角，变化范围：$0 \le \varphi \le 2\pi$（也注意起始位置）；

在不同的书中，各变量的表示符号可能不同，所以用时一定要明确定义。

体积元的选取

看图，$d\theta, d\varphi, dr$；近似为立方体，$d\theta$对应的边为$d\theta \cdot r$；$d\varphi$对应的边为$\sin\theta r \cdot d\varphi$，注意这是投影到$xy$平面；$dr$对应的边为$dr$。

于是有：

$$dV = r^2 \sin\theta dr d\varphi d\theta = r^2 d\cos\theta dr d\varphi$$

立体角

立体角：球坐标面积元与距离平方成反比，$d\Omega = \dfrac{dS}{r^2}$。
球面积元：$dS = (d\theta \cdot r) \cdot (r \sin\theta \cdot d\varphi) = r^2 d\theta \sin\theta d\varphi$

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} = \sin\theta d\theta d\varphi$$

0.2.8.1 球坐标系与直角坐标系的关系

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases} \quad \begin{cases} r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} \\ \theta = \arctan(\dfrac{\sqrt{x^2+y^2}}{z}) \\ \varphi = \arctan(\dfrac{y}{x}) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \vec{e}_r &= \sin\theta\cos\varphi\vec{i} + \sin\theta\sin\varphi\vec{j} + \cos\theta\vec{k} \\ \vec{e}_\theta &= \cos\theta\cos\varphi\vec{i} + \cos\theta\sin\varphi\vec{j} - \sin\theta\vec{k} \\ \vec{e}_\varphi &= -\sin\varphi\vec{i} + \cos\varphi\vec{j} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial\vec{e}_r}{\partial\theta} = \vec{e}_\theta, \frac{\vec{e}_\theta}{\partial\theta} = -\vec{e}_r, \frac{\vec{e}_\varphi}{\partial\theta} = 0$$

$$\frac{\vec{e}_r}{\partial r} = \frac{\vec{e}_\theta}{\partial r} = \frac{\vec{e}_z}{\partial r} = 0$$
$$\frac{\vec{e}_r}{\partial \varphi} = \sin\theta \vec{e}_\varphi, \frac{\vec{e}_\theta}{\partial \varphi} = \cos\theta \vec{e}_\varphi, \frac{\partial \vec{e}_\varphi}{\partial \varphi} = -\sin\theta \vec{e}_r - \cos\theta \vec{e}_\theta$$

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

【不懂诶！】

0.2.8.2 球坐标下的三重积分

$$\iiint_\Omega f(x,y,z)dV = \iiint_{\Omega'} f(r\sin\theta\cos\varphi, r\sin\theta\sin\varphi, r\cos\theta)r^2\sin\theta dr d\varphi d\theta$$

记$F(r,\varphi,\theta) = f(r\sin\theta\cos\varphi, r\sin\theta\sin\varphi, r\cos\theta)$
若坐标原点O位于封闭曲面S所围区域Ω内，S的球坐标方程为$r = r(\varphi,\theta)$，则：

$$\iiint_\Omega f(x,y,z)dV = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\pi} \sin\varphi d\varphi \int_0^{r(\theta,\varphi)} F(r,\varphi,\theta)r^2 dr$$

【注】有时也用：

$$\int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\pi} (-1) d\cos\varphi \int_0^{r(\theta,\varphi)} F(r,\varphi,\theta)r^2 dr$$
$$= \int_0^{2\pi} d\theta \int_\pi^{0} d\cos\varphi \int_0^{r(\theta,\varphi)} F(r,\varphi,\theta)r^2 dr$$
$$\int_a^b f(x)dx = -\int_b^a f(x)dx$$

0.2.8.3 三重积分的理解

积分的理解以求和加微元来理解是方便的。三重积分，想象三维空间中（无论什么坐标系），存在一个封闭的实体，该实体就是那些积分上下限围

成的积分区域。被积函数$f(x,y,z)$为该实体中各点(x,y,z)的值。于是三重积分就变成了实体中各点(x,y,z)值的求和，近似体积微元处各点值相等，数学就表示成，$I=\sum f(x,y,z)dV$。

将$f(x,y,z)$视为实体中各点(x,y,z)的密度，则三重积分的结果就是质量了。当$f(x,y,z)$为常数1时，由$m=\rho V=V,\rho=1$，三重积分的结果就是该围成区域实体的体积了。如，球的体积公式推导。设球的半径为a，选球坐标系，坐标原点为球心，有：

$$\begin{aligned}
V &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_\pi^0 d\cos\varphi \int_0^a F(r,\varphi,\theta) r^2 dr \\
&= 4\pi \int_0^a r^2 dr \qquad F(r,\varphi,\theta)=1 \\
&= \frac{4\pi}{3} a^3
\end{aligned}$$

二重积分的理解

二重积分的理解方式与三重有些不一样，其实也可以同样去理解，只是不够直观，但在求质心之类的东西会用到。还是采用虽不一样但直观的去理解吧。将被积函数$f(x,y)$的值扩充为第三坐标z的值，而积分区域是一个面。于是二重积分的微元以面微元ds为底，被积函数值$z=f(x,y)$为高的柱形体积。

总结

被积函数可以理解为积分区域各点的权重，积分区域是“体”，则是三重积分；积分区域是“面”，则是二重积分；积分区域是“线”，则是第一类型曲线积分。当这个权重为常数1时，三重积分得到的就是积分区域“体”的体积；二重积分得到的是积分区域“面”的面积；第一类曲线积分得到的是曲线的长度。

0.2.9 哈密顿算子∇

哈密顿算子是矢量微分算子，标量和矢量与它作用是不同的。

0.2.9.1 直角坐标系下

$$\nabla=\frac{\partial}{\partial x}\vec{i}+\frac{\partial}{\partial y}\vec{j}+\frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$$

u为标量，则:

$$\nabla u=(\frac{\partial}{\partial x}\vec{i}+\frac{\partial}{\partial y}\vec{j}+\frac{\partial}{\partial z}\vec{k})u=\frac{\partial u}{\partial x}\vec{i}+\frac{\partial u}{\partial y}\vec{j}+\frac{\partial u}{\partial z}\vec{k}$$

$\vec{A}$为矢量，$\vec{A}=A_x\vec{i}+A_y\vec{j}+A_z\vec{k}$，则:

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\vec{A}&=(\frac{\partial}{\partial x}\vec{i}+\frac{\partial}{\partial y}\vec{j}+\frac{\partial}{\partial z}\vec{k})\cdot(A_x\vec{i}+A_y\vec{j}+A_z\vec{k})\\&=\frac{\partial A_x}{\partial x}+\frac{\partial A_y}{\partial y}+\frac{\partial A_z}{\partial z}\end{aligned}$$

【得到一个标量！】

$$\nabla\times\vec{A}=\begin{vmatrix}\vec{i}&\vec{j}&\vec{k}\\\frac{\partial}{\partial x}&\frac{\partial}{\partial y}&\frac{\partial}{\partial z}\\A_x&A_y&A_z\end{vmatrix}=(\frac{A_z}{\partial y}-\frac{\partial A_y}{\partial z})\vec{i}+(\frac{\partial A_x}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial x})\vec{j}+(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y})\vec{k}$$

$\nabla u=gradu$，梯度；$\nabla\cdot\vec{A}=div\vec{A}$，散度；$\nabla\times\vec{A}=rot\vec{A}$，旋度。拉普拉斯算子:

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

0.2.9.2 球坐标系下

$$\nabla=\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

u为标量，则:

$$\nabla u=\vec{e}_r\frac{\partial u}{\partial r}+\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\theta}+\vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial u}{\partial\varphi}$$

$\vec{A}$为矢量，则：

$$\nabla\cdot\vec{A}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^2A_r)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta A_\theta)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi}$$

【有些问题！】

$$\nabla\times\vec{A}=\frac{1}{r^2\sin\theta}\begin{vmatrix}\vec{e}_r & r\vec{e}_\theta & r\sin\theta\vec{e}_\varphi\\ \dfrac{\partial}{\partial r} & \dfrac{\partial}{\partial\theta} & \dfrac{\partial}{\partial\varphi}\\ A_r & rA_\theta & r\sin\theta A_\varphi\end{vmatrix}$$

0.2.10 二阶常系数齐次线性方程

$$y''+py'+qy=0$$

求解步骤：

（1）写出特征方程，$\lambda^2+p\lambda+q=0$，求出根λ_1,λ_2；

（2）分析λ_1,λ_2，然后按以下三种情况得出通解：

①当λ_1,λ_2为相异的实根，方程的通解为：$y=C_1e^{\lambda_1x}+C_2e^{\lambda_2x}$

②当$\lambda_1=\lambda_2$时，方程的通解为：$y=(C_1+C_2)e^{\lambda_1x}$

③当$\lambda=\alpha\pm ik$时，方程的通解为：$y=e^{\alpha x}(C_1\cos kx+C_2\sin kx)$

特别的，当方程为：$y''+qy=0$，即$\lambda=\pm ik$，则解有三种等价形式，为：

$$\begin{cases}y_1=A\cos kx+B\sin kx\\ y_2=Ce^{ikx}+C'e^{-ikx} & \text{注意与第一种情况区别}\\ y_3=D\sin(kx+\delta)\end{cases}$$

其中C_1,C_2,A,B,C,C',δ等均为常数。

三种解的等价性的证明：

（1）将$\sin kx=\frac{1}{2i}e^{ikx}-\frac{1}{2}e^{-ikx},\cos kx=\frac{1}{2}e^{ikx}+\frac{1}{2i}e^{-ikx}$代入$y_1$ 得：

$$\begin{aligned}y_1&=\frac{A}{2}e^{ikx}-\frac{A}{2}e^{-ikx}+\frac{B}{2i}e^{ikx}+\frac{B}{2i}e^{-ikx}\\&=(\frac{A}{2}+\frac{B}{2i})e^{ikx}+(\frac{B}{2i}-\frac{A}{2})e^{-ikx}\end{aligned}$$

$$= Ce^{ikx} + C'e^{-ikx} = y_2$$

即y_1与y_2等价。
（2）

$$\begin{aligned} y_3 &= D\sin(kx+\delta) = D\sin kx\cos\delta + D\cos kx\sin\delta \\ &= A\sin kx + B\cos kx = y_1 \end{aligned}$$

即y_1与y_3等价。
证毕。

0.2.11　几种微分作用等效性的证明

$$(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r = \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$

【证明】

$$\begin{aligned} (\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})^2\psi &= (\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})\psi \\ &= (\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})(\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\psi}{r}) \\ &= \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{\partial}{\partial r}(\frac{\psi}{r})+\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\psi}{r^2} \\ &= \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}-\frac{\psi}{r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\psi}{r^2} \\ &= (\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r})\psi \\ \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) && \text{只与}\psi\text{一阶导有关} \\ &= \frac{1}{r^2}(2r\frac{\partial}{\partial r}+r^2\frac{\partial}{\partial r^2}) && \text{与}\psi\text{无关} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) &= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\psi+r\frac{\partial\psi}{\partial r}) \\ &= \frac{1}{r}(\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\partial\psi}{\partial r}+r\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}) = \frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\psi \end{aligned}$$

$$= (\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r})\psi$$

【得证】

Chapter 1

量子力学的背景

1.1 瑞利金斯黑体辐射公式推导

来自台湾国立交通大学《量子力学导论》视频

黑体：一个能全部吸收投射在它上面的辐射而无反射的物理。（特点就是无反射，注意，自身也是有辐射的。）

黑体辐射的平衡状态：内部发射的能量等于吸收的能量，即等效于无能量的散发。
这时空腔内的电磁波均为驻波，如果不是驻波就会在金属表面振动从而带动原子振动，能量损失。

驻波：1、振动的距离为半波长的整数倍 2、有结点，两头在内壁上

假想黑体，如图：

波阵面在x，y，z上（见《光学》P_{91}），有：(注:波阵面固定，选一个观察方向。在该方向上，两波阵面间的最小距离为空间周期，其倒数即为空频。)

$$\frac{\lambda_x}{2}\cos\alpha = \frac{\lambda}{2} \qquad \frac{\cos\alpha}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_x}$$
$$\frac{\lambda_y}{2}\cos\beta = \frac{\lambda}{2} \qquad \frac{\cos\beta}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_y}$$

$$\frac{\lambda_z}{2}\cos\gamma = \frac{\lambda}{2} \qquad \frac{\cos\gamma}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_z}$$

$$n_x\lambda_x = 2a$$

$$n_y\lambda_y = 2a$$

$$n_z\lambda_z = 2a$$

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{n_x^2}{(2a)^2} + \frac{n_y^2}{(2a)^2} + \frac{n_z^2}{(2a)^2}$$

$$(\frac{2a}{\lambda})^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

最后得:

$$\lambda = \frac{2a}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}} \qquad n_x\text{，}n_y\text{，}n_z\text{为正整数}$$

黑体辐射能量分布曲线是能量密度（单位体积的能量）与波长或频率的曲线。（见《量子力学教程》周世勋）

我们现在要考虑的是在λ到$\lambda + d\lambda$内单位体积的能量是多少或者说黑体腔内能量是多少。**根据能量均分定理每个波长分到kt的能量。** 所以现在的问题归结于在λ到$\lambda + d\lambda$内有多少个波长或是求波长的个数。

前面我们看到

$$\lambda = \frac{2a}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}} \qquad n_x\text{，}n_y\text{，}n_z\text{为正整数}$$

由此看出，一组(n_x, n_y, n_z)对应着一个波长。
令

$$n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

把这个放到直角坐标系来看。就是求n到n+dn中有多少个点，即：一个$\frac{1}{8}$球壳内有多少点。
如图:

分析一个立方体，有8个点，每个立方体的顶点被8个立方体共用，也就是说一个立方体内相当于只有一个点。这样又将数点等效于求体积。即，波个数为:

$$\frac{1}{8} \cdot 4\pi n^2 \cdot dn$$

考虑到电磁波是两个互相垂直振动，要乘以2。于是为：

$$2 \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi n^2 \cdot dn$$

又：

$$\frac{c}{\nu} = \lambda = \frac{2a}{n} \qquad n = \frac{2a\nu}{c} \qquad dn = \frac{2a}{c}d\nu$$

设E_ν为能量密度，则频率$d\nu$内单位体积能量为：

$$E_\nu d\nu = \frac{2 \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi(\frac{2a\nu}{c})^2 \cdot \frac{2a}{c}d\nu}{a^3}kt = \frac{8\pi}{c^3}kt\nu^3 d\nu$$

【黑体辐射普朗克公式的推导有很多种：但本质上都是求单位体积内能量与频率的关系。也就是求：很小的频率范围内单位体积波的个数及每个波的能量，这就是物理意义！】

1.2 Compton效应（散射）

【缺图！】

x射线入射石蜡。

近似：1、在碰前电子速度很小，近似为静止；2、电子在原子中的束缚能相对于x射线中的光子能量很小，视为自由电子。

$$\begin{cases} \text{（1）能量守恒：} h\nu + mc^2 - h\nu' = E_e \\ \text{（2）动量守恒：} \vec{p} - \vec{p'} = \vec{p}e \end{cases}$$

利用相对论中能量动量关系公式：$\frac{E_e^2}{c^2} - p_e^2 = m^2c^2$，$\frac{(1)^2}{c^2} - (2)^2$，得：

$$\frac{1}{c^2}(h\nu + mc^2 - h\nu')^2 - (\vec{p} - \vec{p'} = \frac{E_e^2}{c^2} - p_e^2 = m^2c^2)$$

对于光子，$p = \frac{h\nu}{c}, p' = \frac{h\nu'}{c}$，则：

$$(p - p' + mc)^2 - (\vec{p} - \vec{p'})^2 = m^2c^2$$

$$(p - p')^2 + 2(p - p')mc + m^2c^2 - (p^2 + p'^2 - 2pp'\cos\theta) = m^2c^2$$

$$(p^2+p'^2-2pp')+2(p-p')mc-(p^2+p'62-2pp'\cos\theta)=0$$

$$-pp'+(p-p')mc+pp'\cos\theta=0$$

$$(-p-mc+p\cos\theta)p'=-pmc$$

$$p'=\frac{pmc}{mc+p(1-\cos\theta)}\qquad \frac{h}{c}\nu'=\frac{\frac{h}{c}\nu}{1+\frac{h\nu}{mc^2}(1-\cos\theta)}$$

解出:

$$\nu'=\frac{\nu}{1+\frac{h\nu}{mc^2}(1-\cos\theta)}$$

利用: $\lambda=\frac{c}{\nu},\lambda'=\frac{c}{\nu'}$,

$$\frac{1}{\nu'}=\frac{1}{\nu}[1+\frac{h\nu}{mc^2}(1-\cos\theta)]$$

$$\lambda'=\lambda+\frac{h}{mc}(1-\cos\theta)$$

令$\lambda_c=\frac{h}{mc}=2.43\times10^{-2}A$（电子的康普顿波长），则:

$$\lambda'=\lambda+\lambda_c(1-\cos\theta)$$

$$\Delta\lambda=\lambda'-\lambda=\lambda_c(1-\cos\theta)$$

1.3 光量子论及物质波

1.3.1 planck假设

planck假设:
对于一定频率ν的电磁辐射，物体只能以$h\nu$为单位吸收或发射它，h为一个普适常量（后来人们称之为Planck常量）；即，吸收或发射电磁辐射只能以“量子”方式进行，每个“量子”的能量为:

$$\varepsilon=h\nu$$

<就是说，量子的能量与其频率成正比。很像计算机世界，我们的世界我想除了时间都是不连续的。时间是连续的吗？>

1.3.2 Einstein的推广 光量子

光量子：辐射场由光量子组成，每一个光量子的能量与辐射场的频率的关系为：

$$E = h\nu$$

<可以看出这个能量是总能量，具有的能量>
根据狭义相对论以及光子以光速c运动，有：

$$E = mc^2 = pc$$

$$\Longrightarrow h\nu = pc \Longrightarrow p = \frac{h}{\frac{c}{\nu}}$$

$$\Longrightarrow p = \frac{h}{\lambda}$$

$$\begin{cases} \text{速度：单位时间内走的长度} \\ \text{频率：单位时间内周期的个数} \end{cases} \Longrightarrow \lambda = \frac{c}{\nu}$$

1.3.3 de Broglie的进一步推广 物质波

物质波（matter wave）

$$\begin{cases} \nu = \frac{E}{h} \\ \lambda = \frac{h}{p} \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} E = h\nu \\ p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \qquad (k = \frac{2\pi}{\lambda}) \end{cases}$$

1.4 玻尔原子模型及索末菲量子化条件

1.4.1 The Bohr Atom

Bohr's postulates

(1)**定态假设**

Electron in the allowed orbits does not radiate EM radiation.

(2)**频率条件**

Radiation occurs only when e^- goes from one allowed orbit of energy E_i to another lower energy E_f.The radiated frequency is

$$\nu = \frac{(E_i - E_f)}{h}$$

(3)**角动量量子化**
Electron can take only certain orbits with angular momentum

$$L = n\hbar = mvr, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

1.4.2 玻尔的氢原子

经典力学结合他的假设。
角动量量子化:

$$L = mvr = n\hbar \Longrightarrow v = n\frac{\hbar}{mr}$$

匀速圆周运动:

$$F = ma(\text{库伦力=向心力}) \Longrightarrow \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \Longrightarrow \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{m}{r}n^2\frac{\hbar^2}{m^2r^2}$$

$$\Longrightarrow r_n = n^2\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e^2m} = n^2a_0 \qquad (a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e^2m})$$

a_0为氢原子最小半径，第一玻尔半径，$a_0 = r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e^2m} \approx 0.053nm$

转动角动量量子化(Quantization of angular momentum L)同时意味了:
1、电子轨道半径的量子化(Quantization of radius r)
2、能量的量子化(Quantization of energy)（或“不连续的变化”）

$$\text{总能量=动能+势能}$$

$$E_{total} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \Longrightarrow \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \Longrightarrow E_{total} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0 n^2} \qquad (r = n^2a_0)$$

$$= -\frac{e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \qquad (a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{e^2 m})$$
$$= -\frac{E_0}{n^2} \qquad (E_0 = \frac{e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^2})$$

1.4.3 玻尔索末菲量子化条件

玻尔角动量量子化条件仅适用于圆形轨道，索末菲把玻尔量子化条件：$L = mvr = n\hbar$ 推广为：

$$\oint pdq = nh$$

注意这里是**h**。其中p，q是一对共轭的正则坐标与正则动量，闭合回路积分代表**对周期运动积分一个周期**，但有时这样做会求出很荒谬的结果。

Chapter 2

薛定谔方程

2.1 $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx$与时间无关

注意体会$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx$与时间无关的物理意义（这里用一维来说）：

波函数的统计解释告诉我们：$|\psi(x,t)|^2$是t时刻在点x找到粒子的概率密度。所以$|\psi(x,t)|^2$的全空间积分必须为1，即：$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx=1$。这很好理解，既然粒子存在于空间中，在整个空间找到它的概率当然是100%，即等于1，数学表述就是上式了。如果$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx=A$，A是常数，我们可以令$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{A}}\psi(x,t)$，因为$\psi$乘以一个常数仍是薛定谔方程的解，这就是归一化过程。总之，$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx$必须与时间无关，否则波函数统计解释就无意义了。

$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx$与时间无关，也就是说如果在$t=0$时刻波函数$\psi$是归一化的，则在之后的时间里都是归一化的。【这点在做题中很有用。】

证明：$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx$与时间无关。

【证】

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2\,dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2\,dx$$

【数学说明】【等号左边，$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2\,dx$是仅关于时间$t$ 的函数（变量x被积掉了），所以用全微分$\frac{d}{dt}$。等号右边，$|\psi(x,t)|^2$ 是关于x,t的多元函

数，所以用偏微分$\frac{\partial}{\partial x}$。】

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi$$

由薛定谔方程：$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = \dfrac{i\hbar}{2m}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \dfrac{1}{i\hbar}V\psi \\ \dfrac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\dfrac{i\hbar}{2m}\dfrac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} - \dfrac{1}{i\hbar}V\psi^* \end{cases}$$

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2 = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial psi^*}{\partial x}\psi)\Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

像通常的定积分一样，将$+\infty, -\infty$代入相减，由于里面有$\frac{\partial \psi}{\partial x}$有些别扭，但这不影响，也说明下，是指：函数$\frac{\partial \psi}{\partial x}$在$x = +\infty$ 的值，$\left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{x=+\infty}$。

2.2 $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x,t)|^2 dx$的物理意义

$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x,t)|^2 dx$的物理意义是：

多次对相同的系统测量得到位置的平均值，而不是对一个系统重复测量的平均值。因为当第一测量之后波函数就塌缩成δ的函数了，只要最够快，之后的测量仅仅是重复同样的值。

2.3 动量

$$\begin{aligned}\frac{d\langle x\rangle}{dt} &= \int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m}x(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi)|_{-\infty}^{+\infty} - \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi)\frac{\partial x}{\partial x}dx\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi)dx = -\frac{i\hbar}{2m}[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx-\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi dx] \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx-(\psi^*\psi|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx)] \\
&= -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx
\end{aligned}
$$

速度的平均值等于位置平均值的时间导数:

$$\langle v\rangle = \frac{d\langle x\rangle}{dt}$$

2.4 $\int_\infty |\psi(\vec{r})|^2 dx^3$与时间无关

薛定谔方程为**波函数归一化条件:**

$$\int_{\text{全空间}} |\psi(\vec{r})|^2 dx^3 = 1 \quad (dx^3 = dxdydz)$$

提供了必要的理论基础。

波函数$\psi(\vec{r},t)$与空间$\vec{r}$,时间t都有关,为什么归一条件对全空间积分就行了,即任一时刻归一条件是相同的?也就是说$\int_{\text{全空间}} |\psi(\vec{r})|^2 dx^3$与时间无关?是的。**证明如下:**

利用概率流守恒定律有:

$$\int_V \frac{\partial\omega}{\partial t}d\vec{r} = \frac{d}{dt}\int_V \omega d\vec{r} = -\int_V \nabla\cdot\vec{J}d\vec{r} = -\oint_S \vec{J}\cdot d\vec{S}$$

当体积$V\to\infty$,即拓广到全空间后,对于任何满足平方可积条件的波函数,当$r\to\infty$时,$\psi\to\infty$时,$\psi\to\infty$至少应比$r^{-\frac{3}{2}}$快,有:(这段没看懂)

$$\oint_S \vec{J}\cdot d\vec{S} = \frac{i\hbar}{2m}\oint_S(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)\cdot d\vec{S} = 0$$

于是有:

$$\frac{d}{dt}\int_\infty \omega d\vec{r} = \frac{d}{dt}\int_\infty |\psi|^2 d\vec{r} = 0$$

即$\int_\infty \psi^*\psi d\vec{r}$是个与t无关的常数,从而保证了归一化条件。

2.5 概率流守恒定律的推导

与牛顿方程不同，概率流守恒定律自动地包含在薛定谔方程之中。量子力学中，由于ψ的统计解释，$\omega(\vec{r},t)=\psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$代表$t$时刻在$\vec{r}$处的概率密度，由薛定谔方程出发，可导出概率流守恒定律。

（1）概率密度随时间的变化率：

$$\frac{\partial\omega(\vec{r},t)}{\partial t}=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi$$

（2）由薛定谔方程：$i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+U(\vec{r})\psi$

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\dfrac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi+\dfrac{1}{i\hbar}U(\vec{r})\psi\\ \dfrac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\dfrac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi^*-\dfrac{1}{i\hbar}U(\vec{r})\psi^*\end{cases}$$

（3）代入

$$\begin{cases}\psi^*\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\psi^*\dfrac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi+\psi^*\dfrac{1}{i\hbar}U(\vec{r})\psi\\ \dfrac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi=-\psi\dfrac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi^*-\dfrac{1}{i\hbar}U(\vec{r})\psi^*\psi\end{cases}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\omega}{\partial t}&=\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)\\&=\frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\end{aligned}$$

（4）令

$$\begin{aligned}\vec{J}&=\frac{-i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\\&=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)\end{aligned}$$

称为概率流密度。
（5）于是有：

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$$

这就是概率流守恒定律。在量子力学中，概率流守恒是波函数统计解释和薛定谔方程的推论。

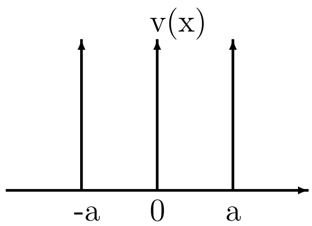
概率流守恒定律表明：在非相对论量子力学中，一般说来，粒子既不能产生，也不会湮灭。体系的总粒子数守恒。粒子必然会在全空间出现。这是个必然事件，概率为1。（很好理解！）

Chapter 3

势阱与势垒

3.1 无限深方势阱

3.1.1 一维对称无限深方势阱



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

（1）在阱外（$|x|>a$），粒子不会跑到无限深的阱外，即$\psi=0$。
（2）在阱内（$|x|<a$），$V(x)=0$，定态薛定谔方程为:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi=E\psi$$

即:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

令$k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$，有:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi+k^2\psi=0$$

这是标准的二阶常系数齐次线性方程，其解有三种等价的形式:

$$\begin{aligned}\psi&=A\cos kx+B\sin kx\\ \psi&=Ce^{ikx}+C'e^{-ikx}\\ \psi&=D\sin(kx+\delta)\end{aligned}$$

3.1.1.1 方法一

取第一种形式的解。加入物理的思维，取这种解是比较方便的，从波的观点来看，波要在这个井中运动必然是驻波，而驻波就是正弦波和余弦波的叠加（想想驻波的形状），所以取第一种形式是合适的。

$$\psi=A\cos kx+B\sin kx$$

1、利用边界条件$\psi|_{x=a}=0,\psi|_{x=-a}=0$（**这是处理问题的关键步骤**）有:

$$\begin{cases}A\sin ka+B\cos ka=0\\ -A\sin ka+B\cos ka=0\end{cases}$$

即:

$$\begin{cases}A\sin ka=0\\ B\cos ka=0\end{cases}$$

A和B不能同时为零，否则$\psi\equiv 0$，即ψ处处为零，物理上无意义，则解为:

$$(i)A=0,\cos ka=0\Longrightarrow ka=n\frac{\pi}{2},k=\frac{n\pi}{2a}\text{（n为奇数）}$$

$$(ii)B=0,\sin ka=0\Longrightarrow ka=n\frac{\pi}{2},k=\frac{n\pi}{2a}\text{（n为偶数）}$$

由$k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$有:

$$\frac{2mE}{\hbar^2}a^2=\frac{n^2\pi^2}{4}$$

即体系的能级为:

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

2、得到的波函数为:

$$\psi_n=\begin{cases}B\cos\frac{n\pi}{2a}x,\text{n为奇数}, & |x|<a\\ 0 & |x|>a\end{cases}$$

$$\psi_n=\begin{cases}A\sin\frac{n\pi}{2a}x,\text{n为偶数数}, & |x|<a\\ 0 & |x|>a\end{cases}$$

两式合并有:

$$\psi_n=\begin{cases}D\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a) & |x|<a\\ 0 & |x|>a\end{cases}$$

(可以看到这就是前面说的解的第三种形式，将其展开就很明显

$$D\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)=D\cos\frac{n\pi}{2}\sin\frac{n\pi}{2a}x+D\sin\frac{n\pi}{2}\cos\frac{n\pi}{2a}x$$

当n=奇数，有$\psi_n=D\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)=D\cos\frac{n\pi}{2a}x$;

当n=偶数，有$\psi_n=D\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)=D\sin\frac{n\pi}{2a}x$;

由此也可以看出，A=B=D，归一化可知，确实如此。)

3、归一化:

$$\begin{aligned}1=\int\psi^*\psi d\tau&=\int_{-a}^{a}D^2\sin^2\frac{n\pi}{2a}(x+a)dx\\&=D^2\int_{-a}^{a}[\frac{1}{2}x-\frac{1}{2}\cos\frac{n\pi}{a}(x+a)]dx\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&= D^2[\frac{1}{2}x\Big|_{-a}^{a} - \frac{1}{2}\frac{a}{n\pi}\sin\frac{n\pi}{a}(x+a)|_{-a}^{a}]\\&= D^2 a\end{aligned}$$

$$D = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

（由此看出，同类的归一化系数，有$A^2 \cdot \frac{1}{2}x\Big|_{下限}^{上限} = 1$）

4、**归一化后的波函数为：**

$$\psi_n = \begin{cases}\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a) & |x| < a\\ 0 & |x| > a\end{cases}$$

3.1.1.2 方法二

取第二种形式的解。看看这种形式的解，e^{ikx}是个向正方向运动的平面波，e^{-ikx}是向负方向运动的平面波，这种解的形式在势垒中更为方便。但既然是解，就仍然可以用。

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

1、同样利用边界条件$\psi|_{x=a} = 0, \psi|_{x=-a} = 0$有：

$$\begin{cases}Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0\\ Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0\end{cases}$$

第二式乘e^{ika}，有：

$$A + Be^{ik2a} = 0 \qquad A = -Be^{ik2a}$$

代入第一式有：

$$-Be^{ik3a} + Be^{-ika} = 0$$

两边乘e^{-ika}，有：

$$-e^{ik2a} + e^{-i2ka} = 0$$

$$\begin{aligned} e^{-ik2a} - e^{ik2a} &= (\cos 2ka - i\sin 2ka) - (\cos 2ka + i\sin 2ka) \\ &= -2i\sin 2ka = 0 \end{aligned}$$

即：$2ka = n\pi$时，成立；由$k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$有：

$$4\frac{2mE}{\hbar^2}a^2 = n^2\pi^2$$

即体系的能级为：

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

2、将$A = -Be^{ik2a}$代入波函数中，有：

$$\begin{aligned} \psi &= -Be^{ik2a}e^{ikx} + Be^{-ikx} \\ &= B(e^{-ikx} - e^{ik2a}e^{ikx}) \\ &= B(e^{-i\frac{n\pi}{2a}x} - e^{in\pi}e^{i\frac{n\pi}{2a}x}) \\ &= Be^{i\frac{n\pi}{2}}(e^{-i\frac{n\pi}{2a}x}e^{-i\frac{n\pi}{2}} - e^{i\frac{n\pi}{2}}e^{i\frac{n\pi}{2a}x}) \\ &= Be^{i\frac{n\pi}{2}}(e^{-i\frac{n\pi}{2a}(x+a)} - e^{i\frac{n\pi}{2a}(x+a)}) \\ &= -\frac{B}{2i}e^{i\frac{n\pi}{2}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a) \\ &= c\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a) \end{aligned}$$

归一化后的波函数为：

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

由此看出取不同解的形式的等效性，由过程可以看出，不同的思路处理问题难易不一样，对于本题，显然取第一种形式的解既直观又好解。

（3）注意这求得的只是波函数分离变量的一部分（实际上是能量本征函数），真正的波函数还应加上当初分离的时间项$e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$（详见定态薛定谔方程的推导）。

一维无限深势阱中粒子的波函数是：

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}$$

（注意这里的E_n就是前面求得的能级，具体应用时，应将$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$代进去。）
即：

$$\begin{aligned}\psi_n(x,t)&=\psi_n(x)e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\\&=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}\\&=C_1e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}x-E_nt)}+C_2e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{n\pi\hbar}{2a}+E_nt)}\end{aligned}$$

可以看出，$\psi_n(x,t)$是由两个沿相反方向传播的平面波叠加而成的驻波。

3.1.1.3 基础讨论

1、体系能量最低的态称为**基态**，高一级的就是**第一激发态**。在本势阱中，$n=1$为基态；$n=2$为第一激发态；$n=3$为第二激发态；$n=4$为第三激发态；依此类推。

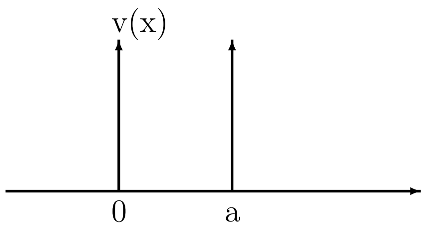
2、当n为偶数时，$\psi_n(-x)=-\psi_n(x)$，$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}x$是奇函数，称波函数具有奇宇称。当n为奇函数是，$\psi_n(-x)=\psi_n(x)$，$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{n\pi}{2a}x$是偶函数，称波函数具有偶宇称。可以证明，在一维情况下，只有在势场满足$U(x)=U(-x)$，是x的偶函数时，波函数才具有确定的宇称。【没证过！】

3、$n=1$时，基态波函数在整个$|x|<a$区间中无零点。这种零点亦称为**节点**。基态波函数无节点。当n=2时，$\psi_2(x=0)=0$，第一激发态在$|x|<a$的区间中有一个节点，余类推。可以证明，ψ_n有$(n-1)$个节点。

3.1.1.4 讨论：粒子处于基态的动量分布

见《指导》3.4，曾书p68练习5

3.1.2 非对称一维无限深方势阱



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

解:

（1）在势阱外$\psi=0$

（2）在势阱内（$0<x<a$），薛定谔方程为:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi+\frac{2mE}{\hbar^2}E\psi=0$$

令$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$，则解可表示为:

$$\psi(x)=A\sin(kx+\delta)\qquad A,\delta\text{为常数}$$

（注意这种形式解的巧妙之处，因为解个方程的人知道$\delta=0$，所以很方便）

由边界条件，连续性（波函数要：连续，有限，单值），有:

$$\begin{cases}\psi(0)=0 & \Longrightarrow A\sin\delta=0 & \longrightarrow \delta=0,A\neq0\text{（否则无意义）}\\ \psi(a)=0 & \Longrightarrow \sin ka=0 & \longrightarrow ka=n\pi,n=1,2,3,\cdots\end{cases}$$

有:

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

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

归一化：$1=A^2\frac{1}{2}x\Big|_0^a$，有

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

3.1.2.1 讨论一：计算坐标，动量的期望值$\bar{x},\bar{p}$

详见《指导》3.3

3.1.2.2 讨论二：计算坐标，动量的涨落$\Delta x,\Delta y$

详见《指导》3.3

3.1.3 二维无限深方势阱

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。（曾书p66练习1）

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:

$$\begin{cases} \psi''(x) + k_1^2\psi(x) = 0 \quad 0 < x < a \\ \psi''(y) + k_2^2\psi(y) = 0 \quad 0 < y < b \end{cases}$$

解得:

$$\begin{cases} k_1 a = n_1\pi, \quad k_1 = \frac{n_1\pi}{a} \Longrightarrow E_1 = \frac{n_1^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad n_1 = 1,2,3\cdots \\ k_2 b = n_2\pi, \quad k_2 = \frac{n_2\pi}{b} \Longrightarrow E_2 = \frac{n_2^2\pi^2\hbar^2}{2mb^2} \quad n_2 = 1,2,3\cdots \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_1\pi x}{a} \quad n_1 = 1,2,3\cdots \\ \psi(y) = \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_2\pi y}{b} \quad n_2 = 1,2,3\cdots \end{cases}$$

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）

3.1.3.1 当$a=b$时，能级的简并度

此时，能量本征值为:

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2)$$

可见简并度取决于$n_1^2 + n_2^2 = \frac{2ma^2}{\pi^2\hbar^2}E$的解$(n_1,n_2)$的个数。

3.1.3.2 个人见解

从物理来看:
a、x与y无关联，彼此独立;
b、在x维度上，x'点的概率：$\psi(x') = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_1 \pi x'}{a}$;
c、此时，在y维度上，y'的概率：$\psi(y') = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n_2 \pi y'}{b}$;
d、（可以想象在xy平面有一个十字叉叉样）于是在(x', y')的概率：$\psi(x', y') = \sqrt{\frac{4}{ab}} \sin \frac{n_1 \pi x'}{a} \sin \frac{n_2 \pi y'}{b}$;
e、所以说对于二维、三维方无限深阱，直接用对应的一维情况相乘就是了！

3.1.4 三维无限深方阱

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。（曾书p67练习2）
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:

$$E = \frac{n_1^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{n_2^2 \pi^2 \hbar^2}{2mb^2} + \frac{n_3^2 \pi^2 \hbar^2}{2mc^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \Big(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \Big)$$

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sqrt{\frac{2}{c}} \sin \frac{n_3 \pi z}{c} \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c} \\ n_1, n_2, n_3 &= 1, 2, 3 \cdots \qquad \text{（它们彼此无关）} \end{aligned}$$

3.1.4.1 当a=b=c时，能级简并度

此时能量本征值为:

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

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;

3.1.5 一维、二维、三维无限深方势阱态密度的讨论

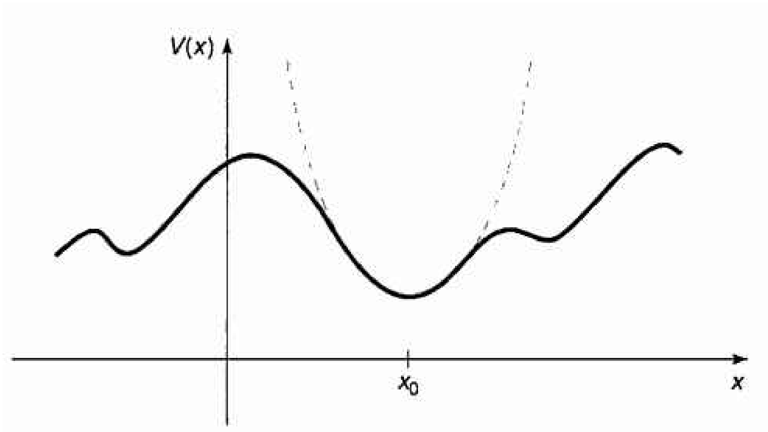
详见曾书p67练习3

3.2 有限深一维对称方势阱

略！看书！

3.3 一维谐振子

3.3.1 谐振子的重要性



在x_0处泰勒展开:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots$$

$V(x_0)$为常数，增加一个常数不改变波函数形式，已证。$V'(x_0) = 0$，因为在x_0点，$V(x_0)$是最小值。于是有:

$$V(x) \approx \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

只要振幅足够小，任何震动都可以近似为简谐振动。

3.3.2 代数解法

- algebraic method? ? 什么是algebraic method?
- 什么是事实？什么是推论？什么是引入？先不要被其名字或物理意义困扰，现在能做的是？明确用途。
- 管你叫什么名字，目的只有一个:求谐振子的本征值与本征函数
- 不要被这些晕人的名字扰晕

定态薛定谔方程：$[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V]\psi=E\psi$

谐振子的势能：$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

谐振子的哈密顿量：$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\frac{1}{2m}[\hat{p}^2+(m\omega x)^2]$

【体会下】$\nu^2+\mu^2=(\nu+i\mu)(\nu-i\mu)$，令：

$$\begin{cases}\hat{a}_-=\dfrac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega\hat{x}+i\hat{p})\\[2ex]\hat{a}_+=\dfrac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega\hat{x}-i\hat{p})\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}\hat{x}=\sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_++\hat{a}_-)\\[2ex]\hat{p}=i\sqrt{\dfrac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_+-\hat{a}_-)\end{cases}$$

$\hat{a}_-$与$\hat{a}_+$的对易关系：

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

证明：

$$\begin{aligned}[\hat{a}_-,\hat{a}_+]&=(\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}})^2[m\omega\hat{x}+i\hat{p},m\omega\hat{x}-i\hat{p}]\\&=\frac{1}{2\hbar m\omega}\{[m\omega\hat{x},m\omega\hat{x}-i\hat{p}]+[i\hat{p},m\omega\hat{x}-i\hat{p}]\}\\&=\frac{1}{2\hbar m\omega}\{m^2\omega^2[\hat{x},\hat{x}]-im\omega[\hat{x},\hat{p}]+im\omega[\hat{p},\hat{x}]-i^2[\hat{p},\hat{p}]\}\\&=\frac{1}{2\hbar m\omega}\cdot(-2im\omega)\cdot i\hbar=1\\\hat{H}&=\frac{1}{2m}[\hat{p}^2+(m\omega\hat{x})^2]\\&=\frac{1}{2m}\{-\frac{\hbar m\omega}{2}(\hat{a}_+-\hat{a}_-)^2+m^2\omega^2\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_++\hat{a}_-)^2\}\\&=\frac{\hbar\omega}{4}[(\hat{a}_+^2+\hat{a}_-^2+\hat{a}_+\hat{a}_-+\hat{a}_-\hat{a}_+)-(\hat{a}_+^2+\hat{a}_-^2-\hat{a}_+\hat{a}_--\hat{a}_-\hat{a}_+)]\\&=\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}_+\hat{a}_-+\hat{a}_-\hat{a}_+)\end{aligned}$$

由$[\hat{a}_-,\hat{a}_+]=\hat{a}_-\hat{a}_+-\hat{a}_+\hat{a}_+=1$，有：$\hat{a}_-\hat{a}_+=1+\hat{a}_+\hat{a}_-$，即：

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

令$\hat{N} = \hat{a}_+\hat{a}_-$，有：$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})$。设$|n\rangle$为$\hat{N}$的本征态（波函数）[1]，相应的本征值为$n$，即$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$；则$\hat{H}$的本征态（波函数）也为$|n\rangle$（势增加减少一个常数不改变波函数），$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(\hat{N}\frac{1}{2})|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle$，相应的本征值为$(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$。也就是说，求出$\hat{N}$的波函数、本征值，也就求出了$\hat{H}$的波函数、本征值。

$$\begin{cases} \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \\ [\hat{N}, \hat{a}_-] = [\hat{a}_+\hat{a}_-, \hat{a}_-] = \hat{a}_+[\hat{a}_-, \hat{a}_-] + [\hat{a}_+, \hat{a}_-]\hat{a}_- = -\hat{a}_- \\ [\hat{N}, \hat{a}_-]|n\rangle = -\hat{a}|n\rangle \\ [\hat{N}, \hat{a}_-]|n\rangle = \hat{N}\hat{a}_-|n\rangle - \hat{a}\hat{N}|n\rangle = \hat{N}\hat{a}_-|n\rangle - n\hat{a}_-|n\rangle \end{cases}$$
$$\Longrightarrow \hat{N}\hat{a}_-|n\rangle = (n-1)\hat{a}_-|n\rangle$$

即：$\hat{a}_-|n\rangle$也是$\hat{N}$的本征态，相应的本征值为$n-1$；有：

$$\hat{a}_-|n\rangle = 0$$

同理：

$$[\hat{N}, \hat{a}_+] = [\hat{a}_+\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{a}_+[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{a}_+$$
$$(\hat{N}\hat{a}_+ - \hat{a}_+\hat{N})|n\rangle = \hat{a}_+|n\rangle \Longrightarrow \hat{N}\hat{a}_+|n\rangle = (n+1)\hat{a}_+|n\rangle$$

即：$\hat{a}_+|n\rangle$也是$\hat{N}$的本征态，相应的本征值为$n+1$；有：

$$|n\rangle = A_n(\hat{a}_+)^n|0\rangle$$

3.3.2.1 归一化

设基态波函数$|0\rangle$已经归一化，即：$\langle 0|0\rangle = 1$。

- 本征值$n = 0$，本征态$|0\rangle$；

[1]这样的假设太牵强了，不自然。当初是怎么想到代数方法的，有没有论文在？

- 本征值$n=1$，本征态$|1\rangle = A\hat{a}_+|0\rangle$;
  归一化:

$$
\begin{aligned}
&\langle 1| = (A\hat{a}_+|0\rangle)^* = A\langle 0|\hat{a}_- \\
&\langle 1|1\rangle = A^2\langle 0|\hat{a}_-\hat{a}_+|0\rangle = 1 \\
&\text{由}[\hat{a}_-,\hat{a}_+] = \hat{a}_-\hat{a}_+ - \hat{a}_+\hat{a}_+ = 1, \hat{N} = \hat{a}_+\hat{a}_-\text{有:} \\
&\langle 0|\hat{a}_-\hat{a}_+|0\rangle = \langle 0|\hat{a}_+\hat{a}_- + 1|0\rangle = \langle 0|\hat{N}|0\rangle + \langle 0|0\rangle = 1; \langle 0|\hat{N}|0\rangle = 0, \langle 0|0\rangle = 1 \\
&A = 1, |1\rangle = \hat{a}_+|0\rangle
\end{aligned}
$$

- 本征值$n=2, |2\rangle = A\hat{a}^\dagger|1\rangle$;
  归一化:

$$
\langle 2\rangle = A^2\langle 1|\hat{a}_-\hat{a}_+|1\rangle = A^2\langle 1|\hat{N}+1|1\rangle = 2A^2 = 1 \Longrightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}}
$$

$$
|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_+\frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}_+|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_+)^2|0\rangle
$$

- 本征值$n=3$，本征态$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}_+|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}_+\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{1}}(\hat{a}_+)^3|0\rangle$

- 本征值$n=n$，本征态$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n|0\rangle$

$$
\begin{aligned}
&|n\rangle = A\hat{a}_+|n-1\rangle \\
&A^2\langle n-1|\hat{a}_-\hat{a}_+|n-1\rangle = A^2\langle n-1|\hat{N}+1|n-1\rangle \\
&= A^2[\langle n-1|\hat{N}|n-1\rangle + \langle n-1|n-1\rangle] \\
&= A^2[(n-1)+1] = A^2 n = 1 \\
&A = \frac{1}{\sqrt{n}} \\
&|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_+|n-1\rangle \Longrightarrow \hat{a}_+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle
\end{aligned}
$$

这个式子挺重要的。

3.3.2.2 求基态波函数进而求所有波函数

（1）坐标表象下

$$\hat{a}_{-}\psi_0 = 0$$

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

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x)\psi_0 = 0$$

即:

$$\frac{d\psi_0}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0 = 0$$

分离变量，有:

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}xdx$$

积分:

$$\int\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int xdx \Longrightarrow \ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + c$$

即:

$$\psi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

归一化:

$$1 = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}dx = |A|^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \qquad \int_0^{\infty}e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$A = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$$

$$\psi_0(x) = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_{+})^n\psi_0$$

（2）动量表象下

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0$$

坐标表象下$\hat{a}_-$算符:

$$\langle x|\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega x - \hbar\frac{d}{dx})\langle x|$$

动量表象下$\hat{a}_-$算符:

$$\langle p|\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega i\hbar\frac{d}{dp} + ip)\langle p|$$

$$\langle p|\hat{a}_-|0\rangle = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega i\hbar\frac{d}{dp} + ip)\langle p|0\rangle = 0$$

这时$\langle p|0\rangle$是一体的，表示动量表象下$|0\rangle$的波函数。

$$m\omega\hbar\frac{d\langle p|0\rangle}{dp} + p\langle p|0\rangle = 0$$

$$\frac{d\langle p|0\rangle}{\langle p|0\rangle} = -\frac{1}{m\omega\hbar}pdp$$

$$\ln\langle p|0\rangle = -\frac{1}{2m\omega\hbar}p^2 + C$$

$$\langle p|0\rangle = e^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}e^C = Ae^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}$$

归一化:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\langle p|0\rangle|^2dp = 1 \qquad \int_0^{\infty}e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$A^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{p^2}{m\omega\hbar}}dp = A^2\cdot 2\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{m\omega\hbar}}} = A^2\sqrt{m\omega\hbar\pi} = 1$$

$$A = \frac{1}{(m\omega\hbar\pi)^{\frac{1}{4}}}$$

$$\langle p|0\rangle = \frac{1}{(m\omega\hbar\pi)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}$$

【理解多重要，理解对同类题是一劳永逸的；理解需要长期反复的探索；表达自己的观点对理解很重要】
（3）由坐标表象变换到动量表象来对动量表象下求解进行验证

$$\langle p|0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|x\rangle\langle x|0\rangle dx$$

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \qquad \langle x|0\rangle = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\begin{aligned}\langle p|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} e^{-\frac{ip}{\hbar}x} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2-\frac{ip}{\hbar}x} dx\end{aligned}$$

由广义Gauss积分公式:

$$J_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2-\theta x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} e^{\frac{\theta^2}{4\lambda}} \qquad \lambda, \theta \in C, Re\lambda\rangle 0$$

$$\langle p|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m\omega}} e^{-\frac{p^2}{\hbar^2}\cdot\frac{2\hbar}{4m\omega}} = \frac{1}{(m\omega\hbar\pi)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}$$

3.3.3 解析的方法

【analytic method? ？】

3.3.3.1 Hamilton量

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

3.3.3.2 定态Schrodinger方程（能量本征方程）

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\Big)\psi(x) = E\psi(x)$$

即:

$$\frac{2}{\hbar\omega}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\frac{2}{\hbar\omega}\cdot(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)\psi(x)=0$$

$$\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+(\frac{2E}{\hbar\omega}-\frac{m\omega}{\hbar}x^2)\psi(x)=0$$

令

$$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\qquad\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

有

$$\frac{1}{\alpha^2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+(\lambda-\alpha^2x^2)\psi(x)=0$$

引入无量纲变量: $\xi=\alpha x$, $\xi^2=\alpha^2x^2$则

$$d\xi=\alpha dx,\quad d\xi^2=d(\alpha^2x^2)=\alpha^2dx^2$$

则方程改写为:

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi)+(\lambda-\xi^2)\psi(\xi)=0$$

3.3.3.3 能量本征值

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

3.3.3.4 波函数(本征函数)

$$\psi_n(x)=N_ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}H_n(ax)$$

其中

$$N_n=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^nn!}\right)^{\frac{1}{2}}\qquad H_n(\xi)=(-1)^ne^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$$

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

波函数的性质：

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$$

n为奇，则本征函数为奇；n为偶，则本征函数为偶。
相应最低级的几个谐振子波函数为：

$$\begin{cases} \psi_0(x) = (\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}})^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \\ \psi_1(x) = (\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}})^{\frac{1}{2}} \alpha x e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \end{cases}$$

3.3.4 基本讨论

1、谐振子能量量子化，$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega = h\nu$，与普朗克假设一致；
2、基态能不为0，$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$，称为零点能；
用不确定原理说明：

$$\overline{x} = 0, \overline{p} = 0(\text{怎么知道？}) \begin{cases} \overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - (\overline{x})^2 = \overline{x^2} \\ \overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} - (\overline{p})^2 = \overline{p^2} \end{cases}$$

由不确定关系：$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{1}{4}\hbar^2 \Longrightarrow \overline{x^2} \cdot \overline{p^2} \geq \frac{1}{4}\hbar^2 \Longrightarrow \overline{x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4\overline{p^2}}$有：

$$\begin{aligned} \overline{H} &= \overline{\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \overline{x^2} \\ &\geq \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{4\overline{p^2}} \\ &\geq 2\sqrt{\frac{\overline{p^2}}{2m} \cdot \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{4\overline{p^2}}} \qquad a^2 + b^2 \geq 2ab \\ &= 2\sqrt{\frac{\omega^2\hbar^2}{16}} = \frac{1}{2}\hbar\omega \end{aligned}$$

即不确定原理要求最小能量为$\frac{1}{2}\hbar\omega$**。**
3、略！！

3.4 一维散射（势垒贯穿）

设具有一定能量E的粒子沿x轴正方向射向势垒

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

（1）在势垒外，能量本征方程为：

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

令$k^2=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$，有：

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi+k^2\psi=0$$

它的两个线性无关的解可取为：

$$\psi\propto e^{\pm kx}$$

由于势垒的存在，在$x<0$区域中，既有入射波$\psi_{in}=Ae^{ikx}$，也有反射波e^{-ikx}；在$x>a$区域中则只有透射波e^{ikx}；
注意在本问题中，$x<0$的k_1与$x>a$的k_2相同$k_1=k_2=k$，有时候两边势是不相同的，即$k_1\neq k_2$，为了更普遍的表示这类情况，这里将两边的k区别表示来，在后面取相等。即：

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ik_1x}+Re^{-ik_1x} & x<0 \\ Se^{ik_2x} & x>a \end{cases}$$

上式中$\psi_{in}=Ae^{ik_1x}$表示入射波，入射波的波幅任意地取为$A=1$，只是为了方便（这对于反射和透射系数无影响），相当于入射粒子流密度为：

$$\begin{aligned} J&=\frac{i\hbar}{2m}(\psi_{in}\nabla\psi_{in}^*-\psi_{in}^*\nabla\psi_{in}) \\ &=\frac{i\hbar}{2m}(|A|^2e^{ik_1x}\frac{d}{dx}e^{-ik_1x}-|A|^2e^{-ik_1x}\frac{d}{dx}e^{ik_1x}) \\ &=\frac{i\hbar}{2m}|A|^2\cdot-2ik_1 \end{aligned}$$

$$= |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$$

取A=1，有：$J = \frac{\hbar k_1}{m} = \frac{p}{m} = v$

取绝对值的平方是因为系数可能是虚数！！

式中Re^{-ik_1x}和Se^{ik_2x}分别表示入射波和透射波，相应的反射流密度J_R和透射流密度J_S分别为：

$$J_R = |R|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \qquad J_S = |S|^2 \frac{\hbar k_2}{m}$$

所以：

$$\text{反射系数} = \frac{J_R}{J} = |R|^2$$

$$\text{透射系数} = \frac{J_s}{J} = |S|^2 \frac{k_2}{k_1}$$ **这是要相当注意的，**

对于透射系数用1−反射系数得了！做题务必记住这两个！

对于本问题，$k_1 = k_2 = k$所以:透射系数 $= \frac{J_s}{J} = |S|^2$。

（2）在势垒内部，暂略！！

Chapter 4

对易关系

4.1 对易式

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

对易式的性质

对易式满足的代数恒等式:

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

$[\hat{A},\hat{A}] = 0$

$[\hat{A},c] = 0$ (c为常数)

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

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

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

$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C}[\hat{A},\hat{B}]] = 0$ Jacobi恒等式

另，设$\vec{A}$、$\vec{B}$为矢量算符，F为标量算符，有:

$[F,\vec{A}\bullet\vec{B}] = F\vec{A}\bullet\vec{B} - \vec{A}\bullet\vec{B}F$

$[F,\vec{A}\times\vec{B}] = [F,\vec{A}]\times\vec{B} + \vec{A}\times[F,\vec{B}]$

最后两个恒等式的证明：[1]
(1)

$$[F,\vec{A}\bullet\vec{B}]=F\vec{A}\bullet\vec{B}-\vec{A}\bullet\vec{B}F$$
$$[F,\vec{A}]\bullet\vec{B}=F\vec{A}\bullet\vec{B}-\vec{A}F\bullet\vec{B}$$
$$\vec{A}\bullet[F,\vec{B}]=\vec{A}\bullet F\vec{B}-\vec{A}\bullet\vec{B}F$$

即：

$$[F,\vec{A}\bullet\vec{B}]=[F,\vec{A}]\bullet\vec{B}+\vec{A}\bullet[F,\vec{B}]$$

(2)同理
【得证】
【特别说明及注意】

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

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

这两个式子在碰到矢量的情况下，不能随便拆分后乱算，最好避免提出矢量。这将在位力定理的证明和自旋总角动量守恒量的证明那有明显的体会。
例如（1）：

$$[\vec{r},p^2]=\vec{p}[\vec{r},\vec{p}]+[\vec{r},\vec{p}]\vec{p}$$

这个将$[\vec{r},\vec{p}]=3i\hbar$直接代入会产生错误。
例如（2）：

$$[\vec{l},\vec{s}\cdot\vec{l}]=\vec{s}[\vec{l},\vec{l}]+[\vec{l},\vec{s}]\vec{l}$$

这样的拆分不是说不对，但将$[\vec{l},\vec{l}]=**,[\vec{l},\vec{s}]=**$代入算，**则是不对的。我想出错的来源是点乘的问题，目前体会到这！应该是点乘、叉乘，不符合结合律。这两个问题具体怎么算的，到相应的章节看就知道了。**

[1] 曾题p77,4.2

4.2 量子力学的基本对易式

坐标算符和动量算符的对易关系：

$$[x_\alpha, \hat{p}_\beta] = x_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{p}_\beta x_\alpha = ih\delta_{\alpha\beta}$$

其中$x_\alpha(\alpha = 1,2,3) \equiv (x, y, z), \hat{p}_\beta(\beta = 1,2,3) \equiv (\hat{p_x}, \hat{p_y}, \hat{p_z})$

很明显的看出，x和p_x是有关系的，所以它们不对易；x和p_y, p_z没有关系，所以它们是对易的。其他类似。经验表明涉及$r, x, y, z, p_x, p_y, p_z$的对易关系证明都要借助$\psi$。没涉及的也不是没有$\psi$，其实蕴含其中，用的都是$\psi$的偏导，所以可以不用$\psi$。

【证明】

(1)

$$[x, p_x] = xp_x - p_x x = i\hbar$$
$$p_x = -ih\frac{\partial}{\partial x}$$
$$[x, p_x]\psi = xp_x\psi - p_x x\psi$$
$$xp_x\psi = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi$$
$$p_x x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar(\psi + x\frac{\partial}{\partial x}\psi)$$
$$(xp_x - p_x x)\psi = i\hbar\psi$$

(2)

$$[x, p_y] = xp_y - p_y x = 0$$
$$p_y = -ih\frac{\partial}{\partial y}$$
$$[x, p_y]\psi = xp_y\psi - p_y x\psi$$
$$xp_y\psi = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial y}\psi$$
$$p_y x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(x\psi) = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial y}\psi$$
$$(xp_y - p_y x)\psi = 0$$

【得证】

力学量都是坐标和动量的函数，利用坐标和动量间的对易关系可以得出其他力学量之间的对易关系。所以坐标和动量的对易式称为基本对易式吧。

4.3　角动量算符的对易式

除了基本对易式这个是第一重要的对易式吧！！

粒子的角动量算符定义如下：

$$\hat{\vec{l}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$$

即：

$$\begin{aligned}
\vec{r} &= x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \\
\hat{\vec{p}} &= -i\hbar\nabla \\
&= p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{z} \\
&= -i\hbar(\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k})
\end{aligned}$$

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

$$\begin{cases}
\hat{l_x} = yp_z - zp_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\
\hat{l_y} = zp_x - xp_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\
\hat{l_z} = xp_y - yp_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})
\end{cases}$$

【记忆方法：位置动量顺序不变，x，y，z轮换】

4.3.1　角动量与位置间的对易关系

1、**角动量的各分量算符**l_x, l_y, l_z**与位置各分量**x, y, z**的对易关系**

$$[\hat{l_\alpha}, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar x_\gamma$$

其中(x, y, z)记为(x_1, x_2, x_3)，(l_x, l_y, l_z)记为(l_1, l_2, l_3)

【证明】

$$[\hat{l_x}, x] = \hat{l_x}x - x\hat{l_x}$$

$$
\begin{aligned}
&= (y\hat{p}_z x - z\hat{p}_y x) - (xy\hat{p}_z - xz\hat{p}_y) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

（对易可以交换，这在证明对易关系中尤为重要！）

$$
\begin{aligned}
[\hat{l}_x, y] &= \hat{l}_x y - y\hat{l}_x \\
&= (y\hat{p}_z y - z\hat{p}_y y) - (yy\hat{p}_z - yz\hat{p}_y) \\
&= z(y\hat{p}_y - \hat{p}_y y) \\
&= i\hbar z
\end{aligned}
$$

同理有：

$$
\begin{array}{lll}
[\hat{l}_x, x] = 0 & [\hat{l}_x, y] = i\hbar z & [\hat{l}_x, z] = -i\hbar y \\
[\hat{l}_y, x] = -i\hbar z & [\hat{l}_y, y] = 0 & [\hat{l}_y, z] = i\hbar x \\
[\hat{l}_z, x] = i\hbar y & [\hat{l}_z, y] = -i\hbar x & [\hat{l}_z, z] = 0
\end{array}
$$

【得证】

2、**角动量各分量算符l_x, l_y, l_z与动量各分量p_x, p_y, p_z的对易关系：**

$$
[\hat{l}_\alpha, p_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar p_\gamma
$$

【证明略！】

3、**角动量各分量算符l_x, l_y, l_z彼此的对易关系：**（角动量算符的基本对易式）

$$
[\hat{l}_\alpha, l_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar l_\gamma
$$

【证明】

$$
[\hat{l}_x, \hat{l}_x] = \hat{l}_x\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_x = 0
$$

$$
\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= \hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x \\
&= (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) \\
&= yp_z zp_x - yp_z xp_z - zp_y zp_x + zp_y xp_z - zp_x yp_z + zp_x zp_y + xp_z yp_z - xp_z zp_y
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= p_z z y p_x + z p_z x p_y - z p_z y p_x - p_z z x p_y \\
&= (z p_z - p_z z)(x p_y y p_x) \\
&= i\hbar \hat{l}_z
\end{aligned}
$$

又是充分利用对易可以交换！！

同理有:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z \qquad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x \qquad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_x] = [\hat{l}_y, \hat{l}_y] = [\hat{l}_z, \hat{l}_z] = 0$$

【看看这里，又一次体现出轮换的性质，为什么呢？】

【得证】

又可以表示为:

$$\vec{l} \times \vec{l} = i\hbar \vec{l}$$

【证】

$$
\begin{aligned}
\vec{l} \times \vec{l} &= (l_x \vec{i} + l_y \vec{j} + \vec{l}_z \vec{k}) \times (l_x \vec{i} + l_y \vec{j} + l_z \vec{k}) \\
&= l_x l_y \vec{k} - l_x l_y \vec{j} - l_y l_x \vec{k} + l_y l_z \vec{i} + l_z l_x \vec{j} - l_z l_y \vec{i} \\
&= (l_y l_z - l_z l_y)\vec{i} + (l_z l_y - l_x l_z)\vec{j} + (l_x l_y - l_y l_x)\vec{k} \\
&= i\hbar l_x \vec{i} + i\hbar l_y \vec{j} + i\hbar l_z \vec{k} \\
&= i\hbar \vec{l}
\end{aligned}
$$

4、角动量的各分量算符l_x, l_y, l_z与位置平方r^2的对易关系：

$$[l_\alpha, r^2] = 0$$

【证明】

$$
\begin{aligned}
[l_x, r^2] &= l_x r^2 - r^2 l_x \\
&= l_x(x^2 + y^2 + z^2) - (x^2 + y^2 + z^2) l_x \\
&= [l_x, x^2] + [l_x, y^2] + [l_x, z^2]
\end{aligned}
$$

（1）

$$[l_x, x^2] = l_x x^2 - x^2 l_x = l_x x x - x x l_x$$

$$[l_x, x] = l_x x - x l_x = 0$$

$$[l_x, x^2] = x l_x x - x x l_x = x(l_x x - x l_x) = 0$$

同理:

$$[l_y, y^2] = [l_z, z^2] = 0$$

（2）

$$[l_x, y^2] = l_x y^2 - y^2 l_x = l_x y y - y y l_x$$

$$[l_x, y] = l_x y - y l_x = i\hbar z \quad l_x y y = y l_x y + i\hbar z y$$

$$[l_x, y^2] = y l_x y + i\hbar z y - y y l_x = y(l_x y - y l_x) + i\hbar z y = 2i\hbar z y$$

同理:

$$[l_x, z^2] = -2i\hbar z y$$

有:

$$[l_x, r^2] = 0$$

同理:

$$[l_y, r^2] = 0 \qquad [l_z, r^2] = 0$$

即:

$$[l_\alpha, r^2] = 0$$

【得证】

5、**动量的各分量算符l_x, l_y, l_z与角动量平方p^2的对易关系:**

$$[l_\alpha, p^2] = 0$$

【证明略】【这为后来证明在中心力场中粒子的$\vec{l}$为守恒量打下基础。】【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。】6、**角动量各分量分量算符l_x, l_y, l_z与角动量平方算符$\hat{l^2}$的对易关系:**

$$[\hat{l_\alpha}, \hat{l^2}] = 0 \qquad (\alpha = x, y, z)$$

【证明】

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$$

$$[l_x, l^2] = l_x(l_x^2 + l_y^2 + l_z^2) - (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2)l_x$$

$$
\begin{aligned}
&= l_x^3 + l_x l_y^2 + l_x l_z^2 - l_x^3 - l_y^2 l_x - l_z^2 l_x \\
&= l_x l_y^2 + l_x l_z^2 - l_y^2 l_x - l_z^2 l_x
\end{aligned}
$$

<像这种证明，没有什么悬念，一层一层向最基本对易关系展开。一般最多展开到p_x, p_y, p_z就可以解决，否则就要借助ψ了>

$$[l_x, l_y] = l_x l_y - l_y l_x = i\hbar l_z \quad l_x l_y = i\hbar l_z + l_y l_x \quad l_x l_y^2 = i\hbar l_z l_y + l_y l_x l_y$$

$$[l_x, l_z] = l_x l_z - l_z l_x = -i\hbar l_y \quad l_x l_z = -i\hbar l_y + l_z l_x \quad l_x l_z^2 = -i\hbar l_y l_z + l_z l_x l_z$$

$$
\begin{aligned}
[l_x, l^2] &= i\hbar l_z l_y + l_y l_x l_y - i\hbar l_y l_z + l_z l_x l_z - l_y^2 l_x - l_z^2 l_x \\
&= -i\hbar(l_y l_z - l_z l_y) + l_y(l_x l_y - l_y l_x) + l_z(l_x l_z - l_z l_x) \\
&= -i\hbar i\hbar l_x + i\hbar l_y l_z - i\hbar l_z l_y \\
&= \hbar^2 l_x + i\hbar(l_y l_z - l_z l_y) \\
&= \hbar^2 l_x + i\hbar i\hbar l_x \\
&= 0
\end{aligned}
$$

充分利用了轮换的性质！
同理：

$$[l_\alpha, l^2] = 0$$

【得证】

证明的过程花了不少时间，其思路很简单，但过程复杂，一不小心错个符号就不对。思路对了也难免出错，要多复查几遍。

总结一下：

$$
\begin{aligned}
&[l_\alpha, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar x_\gamma \qquad [l_\alpha, r^2] = 0 \\
&[l_\alpha, p_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar p_\gamma \qquad [l_\alpha, p^2] = 0 \\
&[l_\alpha, l_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar l_\gamma \qquad [l_\alpha, l^2] = 0
\end{aligned}
$$

4.3.2 角动量算符球坐标下的表示

角动量各分量算符l_x, l_y, l_z与角动量平方算符$\hat{l}^2$的球坐标(r, θ, φ)表示如下：

$$\begin{cases} \hat{l}_x = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{l}_y = i\hbar(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]$$

哈密顿算子（矢量）：

$$\nabla = \vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

拉普拉斯算子(标量):

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

4.4 对易关系合集

这些对易关系，其实都是在一些推导中产生的，这里算是单独拿出来。一些书，只是把其当成练习，却不指出出处。先入为主，让人莫名奇妙。所谓的练习，都是相关理论中的片段，提取出来而已。如果了解了出处和用处，对理解岂不很好？

1、动量分量算符$\hat{p}_x$与位置函数$f(x)$的对易关系[2]:

$$[\hat{p}_x, f(x)] = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}$$

【证明】

$$\begin{aligned}[\hat{p}_x, f(x)]\psi &= \hat{p}_x f(x)\psi - f(x)\hat{p}_x\psi \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(f(x)\psi) + i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi\end{aligned}$$

[2] 曾书p124练习1

$$
\begin{aligned}
&= -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi - i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi + i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi \\
&= -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi
\end{aligned}
$$

【得证】

2、动量分量的平方算符$\hat{p_x}$与位置函数$f(x)$的对易关系[3]:

$$[p_x^2, f(x)] = -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x$$

【证明】

思路一:

$$
\begin{aligned}
[p_x^2, f(x)]\psi &= p_x^2 f(x)\psi - f(x)p_x^2\psi \\
&= -\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}(f\psi) + \hbar^2 f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \\
&= -\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}(\psi\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial\psi}{\partial x}) + \hbar^2 f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \\
&= -\hbar^2(\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} + f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}) + \hbar^2 f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \\
&= -\hbar^2\psi\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2\hbar^2\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} \\
&= [-\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})]\psi \\
&= (-\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x)\psi
\end{aligned}
$$

思路二:

$$
\begin{aligned}
[p_x^2, f(x)]\psi &= p_x^2 f(x)\psi - f(x)p_x^2\psi \\
&= [p_x p_x, f(x)]\psi \\
&= p_x[p_x, f(x)]\psi + [p_x, f(x)]\psi \qquad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \\
&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\psi) - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi \qquad \text{（利用第一个关系）} \\
&= -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + (-i\hbar)^2\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\psi - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi
\end{aligned}
$$

[3] 曾书p126练习5

$$
\begin{aligned}
&= -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi \\
&= (-\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x)\psi
\end{aligned}
$$

【得证】

这里所谓的思路一、思路二是提供比较，显然用对易关系远比定义来的方便些。

3、动量算符$\hat{\vec{p}}$、位置算符$\hat{\vec{r}}$与由$\hat{\vec{r}}$、$\hat{\vec{p}}$构成的标量算符$\hat{F} = F(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}})$的对易关系[4]：

$$[\vec{p}, F] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{r}} = -i\hbar\nabla F$$

$$[\vec{r}, F] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{p}}$$

【证明】

注意：矢量乘标量还是得到标量。

思路一:

$$
\begin{aligned}
[\vec{p}, F] &= \vec{p}F - F\vec{p} \\
&= (p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k})F - F(p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k}) \\
&= p_xF\vec{i} + p_yF\vec{j} + p_zF\vec{k} - Fp_x\vec{i} - Fp_y\vec{j} - Fp_z\vec{k} \\
&= (p_xF - Fp_x)\vec{i} + (p_yF - Fp_y)\vec{j} + (p_zF - Fp_z)\vec{k} \qquad \text{利用练习1的证明} \\
&= -i\hbar(\frac{\partial F}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial F}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial F}{\partial z}\vec{k}) = -i\hbar\nabla F \\
&= -i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{r}}
\end{aligned}
$$

思路二:

$$
\begin{aligned}
[\vec{p}, F] &= [p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k}, F] \\
&= [p_x\vec{i}, F] + [p_y\vec{j}, F] + [p_z\vec{k}, F] \qquad [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \\
&= [p_x, F]\vec{i} + [p_y, F]\vec{j} + [p_z, F]\vec{k} \qquad [\hat{A}, c] = 0 \quad (\text{c为常数}) \\
&= -i\hbar(\frac{\partial F}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial F}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial F}{\partial z}\vec{k}) \qquad (\text{利用练习1})
\end{aligned}
$$

[4] 曾题p77，4.3部分

$$= -i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{r}} = -i\hbar\nabla F$$

将x写成p表象的形式$x = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$，同理有：

$$[\vec{r}, F] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{p}}$$

【得证】

4、$\vec{l} = \vec{r}\times\hat{\vec{p}}$为轨道角动量算符，$\hat{F} = F(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$为由$\hat{\vec{r}}$、$\hat{\vec{p}}$构成的标量算符。证明[5]

$$[F, \vec{l}] = i\hbar\vec{r}\times\frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{p}}\times\vec{p}$$

【证明】

$$\begin{aligned}
[F, \vec{l}] &= [F, \vec{r}\times\vec{p}] \\
&= [F, \vec{r}]\times\vec{p} + \vec{r}\times[F, \vec{p}] \qquad \text{利用题2} \\
&= -i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{p}}\times\vec{p} + i\hbar\vec{r}\times\frac{\partial F}{\partial \vec{r}} \qquad \text{利用练习2}
\end{aligned}$$

【得证】

5、证明（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）

$$[\vec{l}, v(r)] = 0$$

$v(r)$是径向坐标r的函数[6]。

【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$(\theta, \varphi)$，所以$[\vec{l}, v(r)] = 0$。

【得证】

6、证明[7]（这是为中心力场做重要铺垫）

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{l}^2}{2mr^2}$$

[5] 曾题p77,4.3

[6] 曾书p126练习6

[7] 曾书p126练习7

其中

$$\hat{p_r} = -i\hbar(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r})$$

【证明】证明也很简单，球坐标下，展开就知道了。

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

$$\begin{aligned}\hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}) \\ &= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{l}^2}{2mr^2}\end{aligned}$$

【得证】

7[8]、设算符A和B与它们的对易式[A,B]都对易，证明

$$[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]$$

$$[A^n, B] = nA^{n-1}[A, B]$$

所以说思想境界的高低，决定了处理问题水平的高低，这种高低是层次上的高低，是真正的差距。对于对易关系的证明也正式由展开死算阶段上升到，利用对易式满足的代数恒等式处理问题。对于一些问题以前那个思路太复杂了。所以锻炼与学习，学的就是处理问题的思路。这跟对知识的理解与本质把握分不开吧。有了这两条主线，我想任何这类问题都能轻松解决吧。

【证明】

（1）

对易恒等式：$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$

$$\begin{aligned}[A, B^n] &= [A, BB^{n-1}] \\ &= B[A, B^{n-1}] + [A, B]B^{n-1} \\ &= B[A, BB^{n-2}] + [A, B]B^{n-1}\end{aligned}$$

[8]曾书p149，4.4

$$
\begin{aligned}
&= B^2[A, B^{n-2}] + B[A, B]B^{n-2} + [A, B]B^{n-1} \\
&= B^{n-1}[A, B] + B^{n-2}[A, B]B + \cdots + [A, B]B^{n-1} \quad \text{（n个）}
\end{aligned}
$$

由B与[A,B]对易，有:

$$
\begin{aligned}
[A, B^n] &= B^{n-1}[A, B] + B^{n-1}[A, B] + \cdots + B^{n-1}[A, B] \quad \text{（n个）} \\
&= nB^{n-1}[A, B]
\end{aligned}
$$

（2）

同理。

【得证】

Chapter 5

力学量随时间的演化与对称性

5.1 力学量平均值随时间的演化Ehrenfest关系

力学量A的平均值为（设$\psi(t)$已归一化）:

$$\bar{A}(t) = (\psi(t), A\psi(t))$$

有

$$\frac{d\bar{A}(t)}{dt} = (\frac{\partial\psi}{\partial t}, A\psi) + (\psi, A\frac{\psi}{\partial t}) + (\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi)$$

利用Schrodinger方程：$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$，有:

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{A}(t)}{dt} &= (\frac{H\psi}{i\hbar}, A\psi) + (\psi, A\frac{H\psi}{i\hbar}) + (\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi) \\
&= \frac{1}{-i\hbar}(\psi, HA\psi) + \frac{1}{i\hbar}(\psi, AH\psi) + (\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi) \qquad \text{H的厄米性} \\
&= \frac{1}{i\hbar}(\psi, [A, H]\psi) + (\psi, \frac{\partial A}{\partial t}\psi) \\
&= \frac{1}{i\hbar}\overline{[A, H]} + \overline{\frac{\partial A}{\partial t}}
\end{aligned}$$

如果A不显含t，即：$\dfrac{\partial A}{\partial t}=0$，则：

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[A,H]}$$

此即Ehrenfest关系。

可以看出时间偏导的平均值$\overline{\dfrac{\partial A}{\partial t}}$与平均值的时间偏导$\dfrac{d\bar{A}}{dt}$是明显不同的。而且平均值是如此重要，因为我们测得的数据可以说都是平均值（这点可以在实验中明显体会到，但因为与实验接触太少，所以体会不深）。平均值随不随时间变化于是变得很重要。

力学量A与H对易，则：$[A,H]=0$。则该力学量平均值不随时间变化，称为守恒量。可以证明（见书p155），在任意态$\psi(t)$下A的测值的概率分布也不随时间改变。（即A的波函数不随时间改变？）

5.2 位力（virial）定理

<位力定理很有用，为什么叫位力定理，位力定理是谁提出的？（有空维基）>

当体系处于定态下，关于平均值随时间的变化，有一个有用的定理，即位力定理。（曾书原话）

位力定理：

$$2\overline{T}=\overline{\vec{r}\cdot(\nabla V)}\quad 或\quad \frac{1}{m}\overline{p^2}=\overline{\vec{r}\cdot(\nabla V)}$$

证明：

设粒子处于势场$V(\vec{r})$中，Hamilton量表示为：

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r})$$

考虑$\vec{r}\cdot\vec{p}$的平均值随时间的变化，利用Ehrenfest关系：$\dfrac{d}{dt}\overline{A}=\dfrac{1}{i\hbar}\overline{[A,H]}$有：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\overline{\vec{r}\cdot\vec{p}}=\overline{[\vec{r}\cdot\vec{p},H]}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2m}\overline{[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2]} + \overline{[\vec{r}\cdot\vec{p},V(\vec{r})]} \\
&= \frac{1}{2m}\overline{2i\hbar p^2} + \overline{-i\hbar\vec{r}\cdot(\nabla V)} \\
&= i\hbar\left(\frac{1}{m}\overline{p^2} - \overline{\vec{r}\cdot(\nabla V)}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2] &= \vec{r}[\vec{p},p^2] + [\vec{r},p^2]\vec{p} \\
&= [\vec{r},p^2]\vec{p} \\
&= 2i\hbar\vec{p}\cdot\vec{p} \\
&= 2i\hbar p^2 \\
[\vec{r},p^2] &= [\vec{r},p_x^2+p_y^2+p_z^2] \\
&= [\vec{r},p_x^2] + [\vec{r},p_y^2] + [\vec{r},p_z^2] \\
&= [x,p_x^2]\vec{i} + [y,p_y^2]\vec{j} + [z,p_z^2]\vec{k} \\
&= p_x[x,p_x]\vec{i} + [x,p_x]p_x\vec{i} + p_y[y,p_y]\vec{j} + [y,p_y]p_y\vec{j} \\
&\qquad + p_z[z,p_z]\vec{k} + [z,p_z]p_z\vec{k} \\
&= 2i\hbar p_x\vec{i} + 2i\hbar p_y\vec{j} + 2i\hbar p_z\vec{k} \\
&= 2i\hbar\vec{p} \\
\text{或者另一拆分：}\ [\vec{r},p^2] &= [xi+yj+zk,p^2] \\
&= [x,p^2]\vec{i} + [y,p^2]\vec{j} + [z,p^2]\vec{k} \\
&= 2i\hbar p_x\vec{i} + 2i\hbar p_y\vec{j} + 2i\hbar p_z\vec{k} \\
&= 2i\hbar\vec{p} \\
\text{又或者：}\ [\vec{r},p^2] &= \vec{p}[\vec{r},\vec{p}] + [\vec{r},\vec{p}]\vec{p} \\
&= i\hbar\vec{p} + i\hbar\vec{p} \\
&= 2i\hbar\vec{p} \\
\vec{p}[\vec{r},\vec{p}] &= (p_xi+p_yj+p_zk)([\vec{r},p_x]i + [\vec{r},p_y]j + [\vec{r},p_z]k) \\
&= p_x[\vec{r},p_x] + p_y[\vec{r},p_y] + p_z[\vec{r},p_z] \\
&= i\hbar p_x\vec{i} + i\hbar p_y\vec{j} + i\hbar p_z\vec{k}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= i\hbar\vec{p} \\
[\vec{r}, p_x] &= [x, p_x]\vec{i} + [y, p_x]\vec{j} + [z, p_x]\vec{k} \\
&= i\hbar\vec{i}
\end{aligned}
$$

注意$\vec{p}[\vec{r},\vec{p}]$不能直接代入$[\vec{r},\vec{p}] = 3i\hbar$，这是点乘，具体我还是不是很清楚，这里就要注意了，后面的自旋的S，S^2也要注意！！

$$
\begin{aligned}
[\vec{r}\cdot\vec{p}, V(\vec{r})] &= \vec{r}[\vec{p}, V(\vec{r})] + [\vec{r}, V(\vec{r})]\vec{p} \\
&= \vec{r}[\vec{p}, V(\vec{r})] \\
[\vec{p}, V(\vec{r})]\psi &= \vec{p}V(\vec{r})\psi - V(\vec{r})\vec{p}\psi \\
&= -i\hbar\nabla[V(\vec{r})\psi] + i\hbar V(\vec{r})\nabla\psi \\
&= -i\hbar\psi\nabla V(\vec{r}) - i\hbar V(\vec{r})\nabla\psi + +i\hbar V(\vec{r})\nabla\psi \\
&= -i\hbar\psi\nabla V(\vec{r}) \\
\text{即：}\quad [\vec{p}, V(\vec{r})] &= -i\hbar\nabla V(\vec{r}) \\
[\vec{r}\cdot\vec{p}, V(\vec{r})] &= -i\hbar\vec{r}\cdot(\nabla V)
\end{aligned}
$$

对于定态，$\dfrac{d}{dt}\overline{\vec{r}\cdot\vec{p}} = 0$，有：

$$\frac{1}{m}\overline{p^2} = \overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$$

或

$$2\overline{T} = \overline{\vec{r}\cdot(\nabla V)}$$

式中$T = \frac{p^2}{2m}$为粒子动能。
得证。

5.2.1 特例

设$V(x,y,z)$是x,y,z的n次齐次函数，证明：

$$n\overline{V} = 2\overline{T}$$

并验证:
（1）谐振子势，n=2，有$\overline{V}=\overline{T}$;
（2）Coulomb势，n=-1，有$\overline{V}=-2\overline{T}$;
（3）δ势，n=-1（与Coulomb势相同），有$\overline{V}=-2\overline{T}$。
证明:
<这又在考察数学功底了>
$V(x,y,z)$是x,y,z的n次齐次函数，则有:

$$V(x,y,z)=\sum_{ijk}C_{ijk}x^iy^jz^k$$

其中$i+j+k=n, C_{ijk}$是展开系数。
由位力定理$2\overline{T}=\overline{\vec{r}\cdot(\nabla V)}$，有:

$$\begin{aligned}\vec{r}\cdot\nabla V&=x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}\\&=x\sum iC_{ijk}x^{i-1}y^jz^k+y\sum jC_{ijk}x^iy^{j-1}z^k+z\sum kC_{ijk}x^iy^jz^{k-1}\\&=(i+j+k)\sum C_{ijk}x^iy^jz^k\\&=nV\end{aligned}$$

（这个关系在数学分析中称Euler的齐次定理）
即:

$$n\overline{V}=2\overline{T}$$

得证。
（1）谐振子势（注意量子力学里讲“势”是“势能”）:

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}m(\omega_1x^2+\omega_2y^2+\omega_3z^2)$$

即: n=2，有$\overline{V}=\overline{T}$;
（2）库伦势:

$$F=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1q_2}{r^2}\qquad E=\frac{F}{q}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q}{r^2}$$

$$V=\int_r^\infty Edr=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\cdot-r^{-1}\Big|_r^\infty=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

可以看出，n=-1，有$\overline{V}=-2\overline{T}$。
实在看不出，可以代到$\vec{r}\cdot\nabla V=x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}$中算。
（3）略！！

Chapter 6

中心力场

6.1 中心力场中粒子运动的一般性质

1、在中心力场中的粒子的角动量$\vec{l}$及分量$\vec{l}_x, \vec{l}_y, \vec{l}_z$为守恒量。【证明见第5章p155例3】
2、$\vec{l}_x, \vec{l}_y, \vec{l}_z$为守恒量，而$\vec{l}_x, \vec{l}_y, \vec{l}_z$又彼此不对易，即:
①不能同时具有确定值，即，中心力场中粒子的运动不能简化为一个平面运动;
②根据5.1.3节定理p157，中心力场中的粒子的能级一般简并。
3、中心力场中粒子自由度为3，于是通常选$(\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z)$为守恒量完全集。

6.1.1 径向方程的引入

径向方程:

$$\chi_l'' + [\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}]\chi_l = 0$$

其中$R_l = \dfrac{\chi_l(r)}{r}$。
【引入】

中心力场中粒子的能量本征方程（定态Schrodinger方程）为:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)]\psi = E\psi$$

考虑中心力场中球对称性，采用球坐标系，有:

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

【这种形式在第四章p126练习7有证明，$\vec{l}^2$与$\vec{l}_z$的共同本征函数Y_{lm}也是为这里服务的。】

其解为: $\psi(r,\theta,\varphi) = R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$，分离变量:

$$[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r)]R_lY_{lm} = ER_lY_{lm}$$

$$Y_{lm}\frac{\hat{p}_r^2}{2m}R_l + \frac{R_l}{2mr^2}\hat{l}^2Y_{lm} - (E - V(r))R_lY_{lm} = 0$$

由，$\hat{l}^2$的本征方程，$\hat{l}^2Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2Y_{lm}$，有:

$$Y_{lm}\frac{\hat{p}_r^2}{2m}R_l + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R_lY_{lm} - (E - V(r))R_lY_{lm} = 0$$

略去，Y_{lm}，有:

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m}R_l + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R_l - (E - V(r))R_l = 0$$

由，$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r$，有:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - (E - V(r)) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}]R_l = 0$$

左右乘，$-\frac{2m}{\hbar^2}$，有:

$$[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}]R_l = 0$$

令$R_l=\dfrac{\chi_l(r)}{r}$，有：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\chi_l+[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}]\frac{\chi_l}{r}=0$$

即：

$$\chi_l''+[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}]\chi_l=0$$

6.1.2 讨论

1、不同的中心力场$V(r)$，决定了不同的径向波函数及能量本征值，由径向方程看出。

2、径向方程中不含磁量子数m，因此能量本征值与m无关。物理理解：由于中心力场的球对称性，粒子的能量显然与z轴的取向无关。

3、从径向方程看出：中心力场中运动的粒子能量与角量子数l有关。在给定l值的情况下，$m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm(l-1),\pm l$，共$(2l+1)$个取值。于是一般来说，中心力场中粒子的能级是$2l+1$重简并。

4、在一定的边界条件下求解径向方程，即可得出粒子能量的本征值E。

①对于非束缚态，E是连续变化的。

②对于束缚态，则能量是量子化的。这在后面求解氢原子有体现。对于束缚态，很好理解。即：粒子被束缚住，如无限深势阱中的粒子，一维谐振子，在数学上表现为波函数在无限远处为0。

5、在束缚态边界条件下，求解径向方程时，将出现径向量子数$n_r,n_r=0,1,2,\cdots$，它代表径向波函数的节点数（$r=0,\infty$不包括在内）。E依赖量子数n_r和l，但与m无关，记为$E_{n_r,l}$。在给定l的情况下，随n_r增加（径向波函数节点数增多），$E_{n_r,l}$增大，所以n_r也可以作为能级（给定l）高低的编序。与此类似，给定n_r情况下，随l增大（离心势能增大），$E_{n_r,l}$也增大。

6、光谱上习惯，把$l=0,1,2,3,\cdots$态，分别记为，$s,p,d,f,\cdots$态。

6.2 无限深球势阱

三维无限深球势阱势函数:

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

（1）定态薛定谔方程:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)]\psi=E\psi$$

变换到球坐标下:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}+V(r)]\psi=E\psi$$

分离变量: $\psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi),l=0,1,2,\cdots \quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$
径向方程:

$$[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}]R_l=0$$

变量变换: $R_l(r)=\dfrac{\chi_l(r)}{r}$
径向方程简化为:

$$\chi_l''+[\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}]\chi_l=0$$

（2）当$r<a$时，$V(r)=0$

$$\chi_l''+[\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}]\chi_l=0$$

（a）考虑最简单情形$l=0$（S波），有:

$$\chi_0''+k^2\chi_0=0 \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}>0$$

边界条件: $\chi_0(0)=0 \qquad \chi_0(a)=0$
有: $\chi_0(r)=A\sin kr \qquad ka=(n_r+1)\pi,n_r=0,1,2,\cdots$

$$E_{n_r}=\frac{\hbar^2\pi^2(n_r+1)^2}{2ma^2} \qquad n_r=0,1,2,\cdots$$

归一化，有：$A=\sqrt{\frac{2}{a}}$

（b）一般而言：$l\neq 0$。（由第四章练习7，p126）

由$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r=\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}$，有：

$$R_l''+\frac{2}{r}R_l'+[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}]R_l=0 \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}>0$$

边界条件：$R_l(r)\Big|_{r=a}=0$

变量变换：$\rho=kr, dr=\frac{d\rho}{k}$，有：

$$\frac{d^2R_l}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR_l}{d\rho}+[1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}]R_l=0 \qquad l=0,1,2,\cdots$$

是球贝塞尔方程。

6.3 氢原子的波函数

氢原子薛定谔方程是严格可解的，解得氢原子的能级和波函数，可以定量地说明氢光谱等现象（谱线的位置和强度）。

势函数：$V(r)=-\frac{e^2}{r}$

氢原子径向方程

$$\chi_l''+[\frac{2m}{\hbar^2}(E+\frac{e^2}{r})-\frac{l(l+1)}{r^2}]\chi_l=0$$

氢原子能级公式:

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}$$

其中a_0为波尔半径，$a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}=0.53\mathring{A}$；主量子数，$n$；基态氢原子结合能：$E_0=-\frac{e^2}{2a_0}=-13.6eV$；$E_n$能级简并度，$f_n=\sum_{l=0}^{n-1}2l+1=n^2$

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

nlm	n	$R_{nl}(r)$	$Y_{lm}(\theta,\varphi)$
100	1	$R_{10}(r) = (\frac{1}{a_0})^{\frac{3}{2}} 2e^{-\frac{r}{a_0}}$	$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
200	2	$R_{20}(r) = (\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}}(2-\frac{r}{a_0})e^{-\frac{r}{2a_0}}$	Y_{00}
210	2	$R_{21}(r) = (\frac{1}{2a_0})^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0\sqrt{3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$
$21,-1$	2	$R_{21}(r)$	$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}$
211	2	$R_{21}(r)$	$Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}$

6.4 Hellmann-Feynman定理

借助于HF定理可以得出关于各种力学量平均值的许多信息，而不必再利用波函数去进行繁琐的计算。

设体系的Hamilton量H中含有某参量λ，E_n为H的本征值，相应的归一化本征函数为ψ_n（n为一组完备量子数），则:

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda} = (\psi, (\frac{\partial H}{\partial\lambda})\psi_n) =< \frac{\partial H}{\partial\lambda} >_n$$

【证明】

按假设$H\psi_n = E_n\psi_n$

对参量λ取导数，有:

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

左乘ψ_n^*，取积分，得:

$$(\psi_n, \frac{\partial H}{\partial\lambda}\psi_n) + (\psi_n, H\frac{\psi_n}{\partial\lambda}) = \frac{\partial E_n}{\partial\lambda}(\psi_n,\psi_n) + E_n(\psi_n, \frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda})$$

利用H的厄米性，有:

$$(\psi_n, \frac{\partial H}{\partial\lambda}\psi_n) + E_n(\psi_n, \frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}) = \frac{\partial E_n}{\partial\lambda} + E_n(\psi_n, \frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda})$$

即:

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda} = (\psi_n, \frac{\partial H}{\partial\lambda}\psi_n) =< \frac{\partial H}{\partial\lambda} >_n$$

【得证】例1、证明一维谐振子有：$<T>_n=<V>_n=\frac{1}{2}E_n$。
【证明】
已知一维谐振子，有：

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2, H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=T+V, E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

将ω视为参数，有：$\frac{\partial H}{\partial\omega}=m\omega x^2$
利用HF定理，有：

$$<\frac{\partial H}{\partial\omega}>_n=\frac{\partial E_n}{\partial\omega}=(n+\frac{1}{2})\hbar$$

即：

$$m\omega<x^2>=(n+\frac{1}{2})\hbar$$

即：

$$<V>_n=\frac{1}{2}m\omega^2<x^2>_n=\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega=\frac{1}{2}E_n$$

又$<V>_n+<T>_n=E_n$，有：

$$<T>_n=<V>_n=\frac{1}{2}E_n$$

【得证】
例2、设有两个一维势阱，$V_1(x)\leq V_2(x)$（对所有x），在两势阱中都存在束缚能级。分别为E_{1n}和$E_{2n},(n=1,2,3\cdots)$。试证明：$E_{1n}\leq E_{2n}$。
【证明】
令$V(\lambda,x)=(1-\lambda)V_1(x)+\lambda V_2(x)$，有：

$$V(0,x)=V_1(x)\qquad V(1,x)=V_2(x)$$

$$\frac{\partial V}{\partial\lambda}=V_2(x)-V_1(x)\geq 0$$

由HF定理：$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=<\frac{\partial H}{\partial\lambda}>_n=<\frac{\partial V}{\partial\lambda}>_n\geq 0$ 即：$E_n(\lambda)$是λ的单调上升函数，
又$E_n(0)=E_{1n}\qquad E_n(1)=E_{2n}$
即：

$$E_{1n}\leq E_{2n}$$

【得证】【评】这中凑法，真是考察数学功底了，感觉我很难想到。而且感觉有些问题似的。

例3、【曾书p157特例】设$V(x,y,z)$是x,y,z的n次齐次函数，证明：

$$n\overline{V}=2\overline{T}$$

并验证:

（1）谐振子势，$n=2$，有$\overline{V}=\overline{T}$;

（2）Coulomb势，$n=-1$，有$\overline{V}=-2\overline{T}$;

（3）δ势，$n=-1$（与Coulomb势相同），有$\overline{V}=-2\overline{T}$。

【证明】$V(x,y,z)$是x,y,z的n次齐次函数，则有：

$$V(x,y,z)=\sum_{ijk}C_{ijk}x^iy^jz^k$$

其中$i+j+k=n,C_{ijk}$是展开系数。

由位力定理$2\overline{T}=\overline{\vec{r}\cdot(\nabla V)}$，有：

$$\begin{aligned}\vec{r}\cdot\nabla V&=x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}\\&=x\sum iC_{ijk}x^{i-1}y^jz^k+y\sum jC_{ijk}x^iy^{j-1}z^k+z\sum kC_{ijk}x^iy^jz^{k-1}\\&=(i+j+k)\sum C_{ijk}x^iy^jz^k\\&=nV\end{aligned}$$

（这个关系在数学分析中称Euler的齐次定理）

即:

$$n\overline{V}=2\overline{T}$$

（1）谐振子势（注意量子力学里讲“势”是“势能”）:

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}m(\omega_1x^2+\omega_2y^2+\omega_3z^2)$$

即：n=2，有$\overline{V}=\overline{T}$;

（2）库伦势:

$$F=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1q_2}{r^2}\qquad E=\frac{F}{q}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q}{r^2}$$

$$V=\int_r^{\infty}Edr=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\cdot -r^{-1}\Big|_r^{\infty}=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

可以看出，$n=-1$，有$\overline{V}=-2\overline{T}$。

实在看不出，可以代到$\vec{r}\cdot\nabla V=x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}$中算。

（3）略！！

【得证】【评】这又在考察数学功底了！

Chapter 7

矩阵力学

7.1 基本思想

主要讨论的是离散谱的情况，因为这是非常直观的。书上是将三维直角坐标系为类比引入矩阵力学的，这很形象，非常有助于理解。要讲矩阵力学先要说说Hilbert空间（希耳伯特空间）。直角坐标系x，y，z轴描述的是三维空间的话，Hilbert空间可以看成广义的直接坐标系，有n个轴，描述的是n维空间。对于n维空间是数学拓展，还是实际存在，那就不知道了。矩阵力学中将一组力学量完全集F的共同本征态，看成F空间（数学上是Hilbert空间）的正交归一的完备的单位矢量，称为**基矢**，表示为ϕ_k，即本征函数为基矢。这相当于直接坐标系各轴的单位矢量$\vec{i},\vec{j},\vec{k}$。体系任何一个量子态ψ可以展开为

$$\psi = \sum_k a_k \phi_k$$

由此可以看出波函数ψ相当于Hilbert空间的一个矢量，称为**态矢**。

态，波函数，本征函数的关系

波函数是态在具体表象中的形式，本征函数则为波函数在Hilbert空间的一个基矢。

7.2 同一量子态ψ在F表象和F'表象中的不同表示的关系：

$$S_{\alpha k} = (\phi'_\alpha, \phi_k)$$

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

简写为

$$a' = Sa$$

注意ϕ'_α是F'表象的基矢（本征函数），ϕ_k是F表象的基矢（本征函数）。同一量子态ψ在F'表象下为a'，在F表象下为a。

可以证明

$$S^\dagger S = SS^\dagger = 1$$

即变换矩阵S是一个幺正矩阵，这种变换称为幺正（unitary）变换。

7.3 算符的矩阵表示

算符$\hat{L}$在F表象中的矩阵表示为：

$$L_{jk} = (\phi_j, \hat{L}\phi_k)$$

注意在量子力学中力学量用算符表示，我为什么说这句话，因为，在自己的表象中，表示力学量的算符就是力学量（即本征值）本身（矩阵力学中，即基矢等于本征矢），没有变化。与量子态在不表象间的关系相区别，这里的基矢ϕ_j, ϕ_k来自同一表象F。写成矩阵形式，即：

$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

量子态ψ经过算符$\hat{L}$运算后变成另一个态ψ'

$$\psi' = \hat{L}\psi$$

写成矩阵形式为:

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

注意ψ'，ψ是两个不同的态。

任何一个算符$\hat{L}$在以本征矢为基矢的自身表象中是对角矩阵

证明:

$$L_{jk} = (\phi_j, \hat{L}\phi_k) = (\phi_j, \lambda_k\phi_k) = \lambda_k\delta_{jk}$$

利用本征方程$\hat{L}\phi_k = \lambda_k\phi_k$和本征态正交归一关系$(\phi_j, \phi_k) = \delta_{jk}$。

7.4 算符所处表象的变换

在F表象中（基矢ϕ_k），力学量L（算符$\hat{L}$）矩阵形式为（L_{jk}），即:

$$L_{jk} = (\phi_j, \hat{L}\phi_k)$$

则在F'表象中（基矢ϕ'_α），力学量L算符($\hat{L}$）矩阵形式为:

$$L' = SLS^\dagger$$

7.5 本征方程的矩阵形式

$$\sum_k (L_{jk} - \lambda\delta_{jk})a_k = 0$$

即:

$$\begin{pmatrix} L_{11}-\lambda & L_{12} & L_{13} & \cdots \\ L_{21} & L_{22}-\lambda & L_{23} & \cdots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33}-\lambda & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

这线性代数里，一个典型的方程，具体理论看书。要求本征值$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \cdots$以及本征对应的本征态$\{a_1^1, a_2^1, \cdots, a_k^1, \cdots\}(k = 1, 2, 3, \cdots)$（$\lambda_1$对应的本征态），$\{a_1^2, a_2^2, \cdots, a_k^2, \cdots\}(k = 1, 2, 3, \cdots)$（$\lambda_2$对应的本征态）等等（每一个本征值都对应着一组本征态）。

（1）首先保证方程有非零解，$det|\sum_k(L_{jk} - \lambda\delta_{jk})| = 0$，即：

$$\begin{vmatrix} L_{11}-\lambda & L_{12} & L_{13} & \cdots \\ L_{21} & L_{22}-\lambda & L_{23} & \cdots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33}-\lambda & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0$$

如果算符的矩阵形式L_{jk}是N维的，则可以解出N个λ（可能有重根，如为k重，也算为k个根）。**这样就求到了本征值。**

（2）接着求本征态。讲每个λ分别代入本征方程，例如将λ_1代入，则有：

$$\begin{pmatrix} L_{11}-\lambda_1 & L_{12} & L_{13} & \cdots \\ L_{21} & L_{22}-\lambda_1 & L_{23} & \cdots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33}-\lambda_1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

即：

$$\begin{cases} (L_{11}-\lambda_1)a_1 + L_{12}a_2 + L_{13}a_3 + \cdots = 0 \\ L_{21}a_1 + (L_{22}-\lambda_1)a_2 + L_{23}a_3 + \cdots = 0 \\ L_{31}a_1 + L_{32}a_2 + (L_{33}-\lambda_1)a_3 + \cdots = 0 \\ \vdots \end{cases}$$

就可以求出相应的解$a_k^j(k = 1, 2, 3, \cdots)$，表示成列矢为：

$$\begin{pmatrix} a_1^1 \\ a_2^1 \\ \vdots \end{pmatrix}, j = 1, 2, \cdots, N$$

同理可以解出：

$$\begin{pmatrix} a_1^2 \\ a_2^2 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^3 \\ a_2^3 \\ \vdots \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} a_1^j \\ a_2^j \\ \vdots \end{pmatrix} \cdots, j = 1, 2, \cdots, N$$

这就是本征值$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \cdots$对应的在F表象的本征态。

7.6 无相互作用的双粒子系统

与时间无关。

可分辨的双粒子:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2)$$

全同粒子（顾名思义，完全相同，不可分辨）:

费米子，奇数个$\frac{1}{2}$自旋，两粒子不能处于同一状态，有：电子等。

$$\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) - \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)]$$

ϕ_a, ϕ_b正交，归一。$\frac{1}{\sqrt{2}}$为归一化系数。这样写是，当$\phi_a = \phi_b$时，$\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0$符合费米子不能处于同一状态的特性。

玻色子，整数个$\frac{1}{2}$自旋，两粒子可以处于同一状态，有：光子等。

$$\psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) + \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)]$$

例：两个无相互作用的粒子处于半壁无限深势阱。讨论系统的基态与第一激发态。

一个粒子时的波函数为:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad E_n = n^2 k, \quad k = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

1、两粒子是可分辨的粒子

（1）基态：两粒子都处于基态。系统基态就是将各自基态相乘。

$$\begin{aligned}\psi_1 = \psi_{11}(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x_1\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x_2 \\ &= \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}\end{aligned}$$

$$E_1 = E_{11} = k + k = 2k$$

（2）第一激发态：出现了简并，粒子A处于基态，B处于第一激发态；或粒子A处于第一激发态，B处于基态。

$$\begin{aligned}\psi_2 = \psi_{12} = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x_2}{a} \\ &= \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{2\pi x_2}{a} \\ E_2 = E_{12} = k + 4k = 5k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_2 = \psi_{21} = \phi_2(x_1)\phi_1(x_2) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x_1}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x_2}{a} \\ &= \frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a} \\ E_2 = E_{21} = 4k + k = 5k \end{aligned}$$

2、两粒子是全同玻色子

（1）基态：与上面的可辨（非全同）粒子相同，两粒子都处于基态。

$$\psi_1 = \psi_{11} = \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a} \qquad E_1 = k + k = 2k$$

（2）第一激发态：与上面的可辨粒子不同，发生变化，即：仍有一个粒子处于基态，另一个处于第一激发态，但不知道哪个处于基态，哪个处于第一激发态。无简并。

$$\begin{aligned}\psi_2 = \psi_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_2(x_1)\phi_1(x_2)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x_2}{a} + \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x_1}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x_1}{a}] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a}[\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{2\pi x_2}{a} + \sin\frac{2\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}] \\ E_2 &= k + 4k = 5k \end{aligned}$$

两粒子是全同费米子

（1）基态：与前两者基态不同，粒子无法处于同一态，它的系统基态就是一个粒子处于基态，另一个粒子处于第一激发态。系统不存在前面

的$2k$能量。

$$\begin{aligned}\psi_1 = \psi_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_2(x_1)\phi_1(x_2)] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a}[\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{2\pi x_2}{a} - \sin\frac{2\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}] \\ E_1 &= k + 4k = 5k\end{aligned}$$

（2）第一激发态：考察不同能级，发现分别处于1、3态能量为$10k$即第一激发态；处于2、3态能量为$13k$为第二激发态；处于1、4态能量为$17k$为第三激发态。

$$\begin{aligned}\psi_2 = \psi_{13} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(x_1)\phi_3(x_2) - \phi_3(x_1)\phi_1(x_2)] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a}[\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{3\pi x_2}{a} - \sin\frac{3\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}] \\ E_1 &= k + 9k = 10k\end{aligned}$$

Chapter 8

表象变换与Dirac符号

Dirac符号果真很方便，体现出量子力学的意义。开始很不会用Dirac符号，过了很长时间体会到几点。觉得能体会到这几点，这一章要讲的都可以扔掉。举一维谐振子基态来说明（具体例子见代数法求一维谐振子基态波函数）：

- $|0\rangle$：表示“态”，没有具体的波函数，“中间的”0表示该态的特征，一般用能级的序号表示。只要能惟一区别该态，管你用什么东西，当然越简单越好。所以数字是不错的选择。
- $\langle p|0\rangle$：左边$\langle p|$表示是在动量表象下，于是$\langle p|0\rangle$就表示动量表象下的$|0\rangle$态，在具体表象下就有具体的函数形式了，即动量表象下的（本征）波函数。
- $\langle p|\hat{a}_-$：表示动量表象下的湮灭算符，实际要用时，将动量表象下$\hat{a}_-$写出来，即：$\langle p|\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega i\hbar\frac{d}{dp_x} + ip)\langle p|$
- $\langle x|0\rangle$：同理，表示坐标表象下的$|0\rangle$。需要注意的是通常情况下，我们都在坐标表象下处理，这样就容易造成先入为主。
- 表象变换

  将$\langle x|0\rangle$变换到$\langle p|0\rangle$只需在$\langle p|0\rangle$中间加入$|x\rangle\langle x|$然后积分，积掉原变量x，即：
$$\langle p|0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|x\rangle\langle x|0\rangle dx$$

其中$\langle p|x\rangle$为动量表象下x的本征态，$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$；$\langle x|0\rangle$为坐标表象下$|0\rangle$的波函数；分别将它们代入，积分即可。

8.1 波动力学中的表象变换

一、所谓的本征方程，本征函数，隐藏了一个前提，即，在A表象下（本征值在不同表象下不变）。一般讨论的都是位置x的表象下的。在A表象下，本征方程的算符B也要用该表象下的形式。在A表象下，A是变量。

例：

（1）**在x表象下**

算符x（在x表象下不变化）的本征方程为：

$$x\delta(x-x') = x'\delta(x-x')$$

其中x'为本征值（即一实数），$\delta(x-x')$为本征函数。

算符$\hat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$（在x表象下的形式）的本征方程为：

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi_{p_x'}(x) = p_x'\phi_{p_x'}(x)$$

其中p'为本征值，$\phi_{p_x'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip_x'x}{\hbar}}$为本征函数。

（2）**在p表象下**

算符$x = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}$（用在p表象下的形式）的本征方程为：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\phi_{x'}(p_x) = x'\phi_{x'}(p_x)$$

其中x'为本征值，$\phi_{x'}(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ip_xx'}$为本征函数。

算符p_x的本征方程为：

$$p_x\delta(p_x-p_x') = p_x'\delta(p_x-p_x')$$

其中p_x'为本征值，$\delta(p_x-p_x')$为本征函数。

二、态（空洞的）$\Longrightarrow$ 波函数描述（具体的$\rightarrow$ 在具体表象下）$\times\times$表象下的任意波函数可以由一组完备的本征函数展开，本征函数应用$\times\times$表象下的形式。

例:
态在x表象下的波函数为f(x)由动量p_x的本征函数展开:

$$f(x)=\int f(p_x)\phi_{p_x}(x)dp_x$$

注意这个积分，积的是谁的分。为什么是积分？因为动量p_x可以取任意值，组成连续谱，所以用积分。积分后不就是x的函数，因为这本身就是x的函数。看看通常用的分立形式

$$\psi(x)=\sum_n c_n\phi_n(x)=c_1\phi_1(x)+c_2\phi_2(x)+c_3\phi_3(x)+\cdots$$

用的是求和。其中动量p_x的本征函数$\phi_{p_x}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip_x'x}{\hbar}}$为x表象下的形式。$f(p_x)$虽说是本征函数前的系数，其实质是态在$P_x$表象下波函数。表象变换如下:
（左右两边乘以任意动量P_x本征函数的共轭$\phi^*_{p_x'}$为了表示区别用p_x'，并对x积分，这是利用正交完备归一性。）

$$\int\phi^*_{p_x'}f(x)dx=\int\phi^*_{p_x'}\int f(p_x)\phi_{p_x}(x)dp_xdx$$

你会说这么积，请想象分立的情况，进行无数个正交归一。于是:

$$\int\phi^*_{p_x'}f(x)dx=f(p_x)\delta(p-p')$$

即:

$$f(p_x')=\int\phi^*_{p_x'}f(x)dx$$

即:

$$f(p_x)=\int\phi^*_{p_x}f(x)dx$$

<积谁的分记忆方法：把原表象正交归一掉。>

8.2 Dirac符号下的表象变换

8.2.1 态的表示

前面所述的形式复杂，用的多的就是Dirac符号。本文的目的实际也是为了搞懂Dirac符号，前面是铺垫。我觉得Dirac符号标记更适合矩阵力学（这意味着将讨论矩阵力学与Dirac符号的对应）。再 嗦一句，微观粒子的运动状态（即：态）用波函数表示，而波函数是处于一定表象下的。Dirac符号描述这个态用$|\rangle$表示；对于波函数ψ描述的态，则在$|\rangle$填充一定标志物，如$|\psi\rangle$。对于本征函数描述的态，即本征态，常用本征值填充（在这可以看出态和描述其的函数是有区别的，无论是波函数还是本征函数，都是处于一定表象下的。而态是空洞的，就像标一个号以示区别一样，只不过标的是与这个态相关的东。Dirac符号就是有这个优点，可以抛开表象，直接将态进行运算。而其他波动力学，矩阵力学都要在一定的表象下。本征函数与波函数的关系在矩阵力学中有很好的讨论）。对于分立本征值，可更简单的用分立本征值对应的量子数填充，反正惟一的表示出来就行，对于连续本征值就简化不了了。例如:

1、$|x'\rangle$表示坐标x的本征函数（本征态），本征值为x'
2、$|p'\rangle$表示动量p的本征函数（本征态），本征值为p'
3、$|E_n\rangle$或$|n\rangle$表示能量的本征函数（本征态），本征值为E_n
4、$|lm\rangle$表示(l^2, l_z)的共同本征函数（本征态），本征值分别为$l(l+1)$和$m\hbar$

8.2.2 波函数或本征函数的表示

任一量子态$|\psi\rangle$在F表象中表示，即波函数，为$\langle F|\psi\rangle$，通常记为:

$$\psi(F) = \langle F|\psi\rangle$$

看看多直观，在F表象下，只需在态前加个表征表象的$\langle F|$左矢。

（1）与波动力学对应

往往产生困惑的是当这个态是本征值态的时候吧，举例，$\langle x|p'\rangle$，是啥？是，坐标表象下的动量本征态的本征函数，即$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip'x}{\hbar}}$（注意这里

加撇′的都是本征值，是实数，为了与变量区别，更是为了相应本征态的Dirac表示形式）。你会说这跟Dirac符号标积形式一样，是个标积啊。那对应到波动力学下是个怎样的积分可以积到$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip'x}{\hbar}}$。其实这是Dirac符号的表示形式，完全不用波动力学那套。你硬要对应起来，也可。这在波动力学下相当于表象变换了，即：动量表象变换到坐标表象，参考前面，$|p'\rangle$为动量本征态，用原来所处的动量表象下的形式（动量表象下的动量本征函数）$\delta(p-p')$；$\langle x|$为坐标的本征函数用动量表象下的形式的共轭$(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ipx}{\hbar}})^*$，即：

$$\langle x|p'\rangle = \int(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ipx}{\hbar}})^*\delta(p-p')dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

清楚了吗？

（2）既然用的是Dirac符号，就遵循Dirac符号的运算方式，基本抛开波动力学的那套吧！！（有时候或许还是要化为波动力学的那套吧，反正很多教科书里思维就离不开！）

在x表象中：

坐标本征态（本征值x'），即本征函数表示为：$\langle x|x'\rangle$

（在波动力学下为：$\delta(x-x')$）

动量本征态（本征值p'），即本征函数表示为：$\langle x|p'\rangle$

（在波动力学下为：$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip'x}{\hbar}}$）

在p表象中：

坐标本征态（本征值x'），即本征函数表示为：$\langle p|x'\rangle$

（在波动力学下为：$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ip'x}{\hbar}}$）

动量本征态（本征值p'），即本征函数表示为：$\langle p|p'\rangle$

（在波动力学下为：$\delta(p-p')$）

如表：

	x表象下		**p表象下**	
	Dirac符号表示	波动力学表示	Dirac符号表示	波动力学表示
坐标本征函数	$\langle x\|x'\rangle$	$\delta(x-x')$	$\langle p\|x'\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ip'x}{\hbar}}$
动量本征函数	$\langle x\|p'\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip'x}{\hbar}}$	$\langle p\|p'\rangle$	$\delta(p-p')$

8.3 Dirac符号的应用

关键利用的是:

1、本征态正交归一关系

$$\langle k|k'\rangle = \delta(k-k')$$

例如:

$$\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$$
$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$$

2、完备性

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = I \qquad \text{（单位算符）}$$

这是分立的情况，对于连续谱情况，求和换为积分，例如:

$$\int dx'|x'\rangle\langle x'| = I$$

$$\int dp'|p'\rangle\langle p'| = I$$

3、自身表象下本征方程

$$\hat{k}|k'\rangle = k'|k'\rangle$$

例:

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$$
$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle$$

4、非自身表象下的本征方程

这几条应该是Dirac符号应用的精髓吧!

8.3.1 Dirac符号下的表象变换

用Dirac符号来进行表象变换是极方便的。

例:

（a）坐标表象变到动量表象:

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \int dx' \langle p|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle \\
&= \int dx' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ix'p}{\hbar}} \psi(x') \\
&= \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ixp}{\hbar}} \psi(x)
\end{aligned}
$$

与前面的波动力学处理方式来比较看看Dirac符号变换的简便，坐标表象下的坐标本征函数变换到动量表象下的坐标本征函数为:

$$
\begin{aligned}
\phi(p) &= \langle p|x'\rangle \\
&= \int dx'' \langle p|x''\rangle\langle x''|x'\rangle \\
&= \int dx'' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ix''p}{\hbar}} \delta(x''-x') \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ix'p}{\hbar}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ixp}{\hbar}}
\end{aligned}
$$

其中区别，很明显吧！！
(b)动量表象变换到坐标表象:

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= \langle x|\psi\rangle \\
&= \int dp' \langle x|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle \\
&= \int dp' \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip'x}{\hbar}} \psi(p') \\
&= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \psi(p)
\end{aligned}
$$

题1、（指导p265题A.3）
在粒子数表象中，谐振子基态$|0\rangle$满足性质

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

其中$\hat{a}=\sqrt{\frac{2\mu\omega}{\hbar}}(\hat{x}+\frac{i}{\mu\omega}\hat{p})$，为湮灭算符。试利用次性质求出基态在动量表象中的波函数显示表示$\langle p|0\rangle$。

8.3.2 Dirac符号下算符的矩阵表示

（a）坐标表象中

对于只依赖于坐标的算符$\hat{Q}(\hat{x})$的矩阵表示:

$$\langle x|\hat{Q}(\hat{x})|x'\rangle = Q(x)\delta(x-x')$$

其中$Q(x)=Q(x_1,x_2,\cdots,x_n)$是算符$\hat{Q}(\hat{x})$在x表象下的本征值。推导见例子。

算符$\hat{Q}(\hat{x})$是只依赖于坐标的算符，在坐标表象下，本征值就是自身。对于只依赖于动量的算符$\hat{P}(\hat{p})$怎么办呢？怎么弄出本征值？记得坐标表象下的本征方程吗？将只依赖于动量的算符$\hat{P}(\hat{p})$写成坐标表象下的形式就行。（详见王正行p43）

值得注意的是$\delta(x-x')$不就是坐标x在坐标表象下的本征态的正交归一关系即$\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$吗？

例:

（1）坐标算符x的矩阵表示

$$\langle x'|\hat{x}|x''\rangle = x'\delta(x'-x'')$$

左边是Dirac符号的表示，右边是波动力学下的表示。这就是在自身表象下，算符的矩阵形式，很重要。这个结合前面的，Dirac符号的关键$\int dx'|x'\rangle\langle x'|=I$，完成了算符的矩阵表示。

推导:

很简单，利用自己表象中的本征方程，$\hat{x}|x''\rangle = x''|x''\rangle$，有

$$\begin{aligned}
\langle x'|\hat{x}|x''\rangle &= \langle x'|x''|x''\rangle \\
&= x''\langle x'|x''\rangle \qquad \text{本征值}x''\text{是实数，可以提出积分外} \\
&= x''\delta(x'-x'') \qquad \text{本征态（本征函数）正交归一关系} \\
&= x'\delta(x'-x'') \qquad \text{数学上是}\delta\text{函数的性质}x'=x''
\end{aligned}$$

物理上正交归一关系，本征态要相同，本征值也就相同。

（2）只依赖于x的势能算符$V(x)$（将其看成算符的话）的矩阵表示

$$\langle x'|V(x)|x''\rangle = V(x')\delta(x'-x'')$$

很好理解，$V(x)$在x表象下就是自身一系列的值，这样写，无非是想将其展开，表现得更像一个一个值。实际操作还不是将值一个一个代进去，或者直接用这个关于x的函数。
（3）动量算符p的矩阵表示

$$\langle x'|\hat{p}|x''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')$$

推导方法一:

$$\begin{aligned}
\langle x'|\hat{p}|x''\rangle &= \int\int dp'dp''\langle x'(|p'\rangle\langle p'|)\hat{p}(|p''\rangle\langle p''|)|x''\rangle \\
&= \int\int dp'dp''(\langle x'|p'\rangle)(\langle p'|\hat{p}|p''\rangle)(\langle p''|x''\rangle) \\
&= \int\int dp'dp''\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip'x'}{\hbar}}\bullet p'\delta(p'-p'')\bullet\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ip''x''}{\hbar}} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp'p'e^{\frac{ip'x'}{\hbar}}\int dp''\delta(p'-p'')e^{\frac{-ip''x''}{\hbar}} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp'p'e^{\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}} \qquad \text{注意}p'\text{为动量的本征值} \\
&= (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'})\int dp'\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}} \\
&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')
\end{aligned}$$

这里有五项要注意的:
1、$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle \qquad -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{ip'(x'-x')}{\hbar}} = -i\hbar\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}}\bullet\frac{ip'}{\hbar}$算符作用本征态提取本征函数，表象要一致。以此说明推导的倒数第二项;
2、积分，积谁的分;
3、谁是变量;

4、$\langle p''|x''\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ip''x''}{\hbar}}$上标是一致的;
5、积分得到δ函数需要的系数。

特别说明

这种方法实质上利用的是Dirac符号下的幺正变换和正交归一关系。幺正变换，具体看书上。这里以此为例说明下Dirac符号下幺正变换矩阵的形式是怎样的。

由F表象变换到F'表象幺正变换矩阵的定义:

$$S_{\alpha k} = (\phi'_\alpha, \phi_k)$$

其中ϕ'_α为F'表象的基矢，ϕ_k为F表象的基矢。

取具体两个矩阵元来看:

$$S_{12} = \int \phi_1'^* \phi_2 d\tau = \langle F_1'|F_2\rangle$$

$$S_{12}^\dagger = S_{21}^* = (\int \phi_2'^* \phi_1 d\tau)^* = \int \phi_1^* \phi_2' d\tau = \langle F_1|F_2'\rangle$$

即:

$$S_{\alpha k} = \langle F_\alpha'|F_k\rangle$$

$$S_{\alpha k}^\dagger = \langle F_\alpha|F_k'\rangle$$

注意F_α'与F_k'是同组基矢（同表象）中不同的基矢，F_α'与F_α是不同表象下的基矢，这四者都是不同的。

在该推导中

$$S = \langle x'|p'\rangle$$

$$S^\dagger = \langle p''|x''\rangle$$

由算符幺正表换的定义：$L' = SLS^\dagger$，有:

$$\langle x'|\hat{p}|x''\rangle = \int\int dp'dp''\langle x'|p'\rangle\langle p'|\hat{p}|p''\rangle\langle p''|x''\rangle$$

说这么多，只是要你知道这回事就够了。实际操作哪要绕这么大弯！！

推导方法二:

由量子力学基本对易关系$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$$\langle x'|[\hat{x}, \hat{p}]|x''\rangle = i\hbar\langle x'|x''\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= i\hbar\delta(x'-x'') \\
\langle x'|[\hat{x},\hat{p}]|x''\rangle &= \langle x'|\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}|x''\rangle \\
&= \langle x'|\hat{x}\hat{p}|x''\rangle - \langle x'|\hat{p}\hat{x}|x''\rangle \\
&= (\hat{x}|x'\rangle)^*\hat{p}|x''\rangle - \langle x'|\hat{p}x''|x''\rangle \\
&= (x'|x'\rangle)^*\hat{p}|x''\rangle - x''\langle x'|\hat{p}|x''\rangle \\
&= x'\langle x'|\hat{p}|x''\rangle - x''\langle x'|\hat{p}|x''\rangle \\
&= (x'-x'')\langle x'|\hat{p}|x''\rangle
\end{aligned}
$$

即：

$$(x'-x'')\langle x'|\hat{p}|x''\rangle = i\hbar\delta(x'-x'')$$

利用$\delta(x)$的性质：$\delta(-x)=\delta(x)$　　$x\frac{d}{dx}\delta x = -\delta(x)$

$$
\begin{aligned}
\langle x'|\hat{p}|x''\rangle &= i\hbar\frac{1}{(x'-x'')}\delta(x'-x'') \\
&= i\hbar\frac{1}{(x'-x'')}\bullet -(x'-x'')\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'') \\
&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'') \\
\text{或者} &= i\hbar\frac{1}{(x'-x'')}\delta(x''-x') \qquad \text{利用}\,\delta(-x)=\delta(x) \\
&= i\hbar\frac{1}{(x'-x'')}\bullet -(x''-x')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x') \\
&= i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')
\end{aligned}
$$

即：

$$\langle x'|\hat{p}|x''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')$$

$$\langle x'|\hat{p}|x''\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')$$

这两个式子，第一个式子是常见的，也是好记的；第二个式子也不差，也有重要应用。两式的不同来源于变量的选取吧。

对于$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')=i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')$也有独立的证明，即反复利用利用$\delta(x)$的性质：$\delta(-x)=\delta(x)$ $x\frac{d}{dx}\delta x=-\delta(x)$ 证明如下：

$$\begin{aligned}
-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'') &= -i\hbar\frac{1}{x'-x''}(x'-x'')\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'') \\
&= i\hbar\frac{1}{x'-x''}\delta(x'-x'') \\
&= i\hbar\frac{1}{x'-x''}\delta(x''-x') \\
&= i\hbar\frac{1}{(x'-x'')}\bullet-(x''-x')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x') \\
&= i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')
\end{aligned}$$

（4）推导

$$\hat{p}|x\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle$$

其共轭式为

$$\langle x|\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x| \qquad \textbf{记忆，理解为x表象下的p算符}$$

这个推导式值得注意的，也是常用的！！
法一：

$$\begin{aligned}
\hat{p}|x\rangle &= \hat{p}\int_{-\infty}^{+\infty}dp|p\rangle\langle p|x\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}dp\hat{p}|p\rangle\langle p|x\rangle \qquad \text{动量本征方程}\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}dpp|p\rangle\langle x|p\rangle^* \qquad \text{注意中间的p为动量的本征值了} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}dp|p\rangle p\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \qquad \langle x|p\rangle^* = (\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}})^* \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}dp|p\rangle i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial x}e^{\frac{-ipx}{\hbar}} = i\hbar\bullet e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\bullet\frac{-ip}{\hbar}
\end{aligned}$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{+\infty} dp|p\rangle\langle p|x\rangle$$ 这就是表象变换处理的过程吧!

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle$$

注意不同，不要老想着将$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 直接代入

法二:

利用

$$\langle x'|\hat{p}|x\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x'-x)$$
$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x'|x\rangle$$
$$= i\hbar\langle x'|\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle$$ 积分与求导可交换

两边乘以$\int_{-\infty}^{+\infty} dx'|x'\rangle$，利用$\int_{-\infty} +\infty dx|x\rangle\langle x| = 1$，得

$$\hat{p}|x\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle$$

（b）动量表象中

不用多说，同理。例:

1、动量算符p的矩阵表示

$$\langle p'|\hat{p}|p''\rangle = p'\delta(p'-p'')$$

2、只依赖于x的势能算符$V(x)$的矩阵表示

$$\langle p'|V(x)|p''\rangle = V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'})\delta(p'-p'')$$

3、坐标算符x的矩阵表示

$$\langle p'|\hat{x}|p''\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p'-p'')$$

8.3.3 Dirac符号下算符F表示的力学量的平均值表示

在量子态$|\psi\rangle$下，设$\langle\psi|\psi\rangle = 1$，已归一化，力学量的平均值可以如下求之。例如:

（1）势能$V(x)$和动能$T=\frac{p^2}{2m}$，在x表象中
（注意$\overline{V(x)}=\langle\psi|V|\psi\rangle$不要跟在x表象中$V(x)$的矩阵表示$\langle x'|V|x''\rangle$搞混）

$$\begin{aligned}\overline{V(x)}&=\langle\psi|V|\psi\rangle\\&=\int\int dxdx'\langle\psi|x\rangle\langle x|V|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\end{aligned}$$

其他看书！！

8.3.4 利用Dirac符号求Schrodinger方程不同表象下的表示

设粒子在势场$V(x)$中运动，$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$，则含时schrodinger方程的Dirac符号表示为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=H|\psi(t)\rangle$$

这是没有具体表象的形式。还记得波函数在具体表象下的形式$\langle F|\psi\rangle$吗?
（a）在坐标x表象中，即

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

两边都不用多说，Dirac符号的标准形式，现在就是如何将它们写成波动力学下的形式。
左边

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

右边

$$\begin{aligned}\langle x|H|\psi(t)\rangle&=\int dx'\langle x|H|x'\rangle\langle x'|\psi(t)\rangle\\&=\int dx'\langle x|(\frac{p^2}{2m}+V(x))|x'\rangle\langle x'|\psi(t)\rangle\\&=\int dx'[\frac{1}{2m}\langle x|p^2|x'\rangle+\langle x|V(x)|x'\rangle]\psi(x',t)\\&=\frac{1}{2m}\int\langle x|p^2|x'\rangle\psi(x',t)dx'+\int\langle x|V(x)|x'\rangle\psi(x',t)dx'\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\int\delta(x-x')\psi(x',t)dx'+V(x)\int\delta(x-x')\psi(x',t)dx'\end{aligned}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

这就是我们常见的一维schrodinger方程。

（b）在坐标p表象中，即

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

左边

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

右边

$$\begin{aligned}
\langle p|H|\psi(t)\rangle &= \int dp'\langle p|H|p'\rangle\langle|p'|\psi(t) \\
&= \int dp'\langle p|(\frac{p^2}{2m} + V(x))|p'\rangle\psi(p',t) \\
&= \int dp'\langle p|\frac{p^2}{2m}|p'\rangle\psi(p',t) + \int dp'\langle p|V(x)|p'\rangle\psi(p',t) \\
&= \frac{p^2}{2m}\int dp'\delta(p-p')\psi(p',t) + V(i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\int dp'\delta(p-p')\psi(p',t) \\
&= \frac{p^2}{2m}\psi(p,t) + V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\psi(p,t)
\end{aligned}$$

即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(p,t) = \frac{p^2}{2m}\psi(p,t) + V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\psi(p,t)$$

Chapter 9

自旋

9.1 自旋算符

自旋算符$\vec{S}$类似于角动量算符:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \qquad [l_x, l_y] = i\hbar l_z$$
$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x \qquad [l_y, l_z] = i\hbar l_x$$
$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y \qquad [l_z, l_x] = i\hbar l_z$$

引入Pauli算符$\vec{\sigma}$，$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$，则:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$
$$[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x$$
$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$$

即:

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

由于$\vec{S}$沿任何指定方向的投影（本征值）只能取$\pm\frac{\hbar}{2}$值，所以$\vec{\sigma}$沿任何指定方向的投影只能取± 1，即:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$$

有:

$$
\begin{aligned}
\sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \\
\sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \\
\sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y
\end{aligned}
$$

9.2　Pauli矩阵

在σ_z表象中，算符$\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$的矩阵形式为:

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

这就是著名的pauli矩阵，应用极为广泛，应记牢。
<推导过程详见，曾书p286。>

9.3　在σ_z表象中

（1）在σ_z表象中，算符$\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$的本征值和本征矢（本征态，本征函数）：

本征值	本征矢（态）	本征值	本征矢（态）
$\sigma_z = 1$	$\chi_{\frac{1}{2}(\sigma_z=1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha$	$\sigma_z = -1$	$\chi_{-\frac{1}{2}(\sigma_z=-1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta$
$\sigma_x = 1$	$\chi_{\frac{1}{2}(\sigma_x=1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\sigma_x = -1$	$\chi_{-\frac{1}{2}(\sigma_x=-1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
$\sigma_y = 1$	$\chi_{\frac{1}{2}(\sigma_y=1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$	$\sigma_y = -1$	$\chi_{-\frac{1}{2}(\sigma_y=-1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$

<推导不用多说，用本征方程算就是了>

（2）在σ_z表象中，σ_n的本征值和本征矢（态，函数）：

给定(θ,ϕ)方向单位矢量

$$\vec{n}=(n_x,n_y,n_z)=(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)$$

$\sigma_n=\vec{\theta}\bullet\vec{n}$为$\vec{\sigma}$在$\vec{n}$方向的投影。根据自旋的性质，$\sigma_n$的本征值也只有$\pm1$。由$\vec{n}$表示也可以看出，有直角坐标和球坐标两种表示方式。

本征值	本征矢（态）	本征值	本征矢（态）
$\sigma_n=1$	$\phi_1(\theta,\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}}\end{pmatrix}$	$\sigma_n=-1$	$\phi_{-1}(\theta,\varphi)=\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i\varphi}{2}}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}}\end{pmatrix}$
$\sigma_n=1$	$\phi_1(\vec{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}1+n_z\\ n_x+in_y\end{pmatrix}$	$\sigma_n=-1$	$\phi_{-1}(\vec{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}$
$\sigma_n=1$	$\phi_1(\vec{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{pmatrix}n_x-in_y\\ 1-n_z\end{pmatrix}$	$\sigma_n=-1$	$\phi_{-1}(\vec{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{pmatrix}-(1-n_z)\\ n_x+in_y\end{pmatrix}$

对于直角坐标分量表示如$n_z\neq\pm1$，二者等阶（仅有相因子的差别）。

如$\vec{n}=(0,0,1)$即$n_x=0,n_y=0,n_z=1\Rightarrow\sigma_n=\sigma_z$，取

$$\phi_1=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\phi_{-1}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

如$\vec{n}=(0,0,-1)$即$n_x=0,n_y=0,n_z=-1\Rightarrow\sigma_n=-\sigma_z$，取

$$\phi_1=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},\phi_{-1}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

<推导过程详见曾题集6.12 >

9.4 总角动量

（曾书原话）电子自旋是一种相对论效应。可以证明，中心力场$V\vec{r}$中运动的电子的相对论波动方程，在过渡到非相对论极限时，Hamilton量中将出现一项自旋耦合项（称为Thomas项）

$$\xi(r)\vec{S}\cdot\vec{L}$$

其中$\xi(r)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}$。此时Hamilton量为:

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)+\xi(r)\vec{S}\cdot\vec{L}$$

考虑自旋轨道耦合作用后，轨道角动量L及自旋角动量S都不再是守恒量:（参考季燕江）

证明:

$$\begin{aligned}
[\vec{L},H]&\propto[\vec{L},\vec{S}\cdot\vec{L}]\\
&=[L_x,\vec{S}\cdot\vec{L}]\vec{i}+[L_y,\vec{S}\cdot\vec{L}]\vec{j}+[L_z,\vec{S}\cdot\vec{L}]\vec{k}\\
&\text{只要一个分量不为零则就不是守恒量}\\
[L_z,\vec{S}\cdot\vec{L}]&=[L_z,S_xL_x]+[L_z,S_yL_y]+[L_z,S_zL_z]\\
&=S_x[L_z,L_x]+S_y[L_z,L_y]+S_z[L_z,L_z]\qquad[L_z,S_x]=0\text{，S与L对易}\\
&=i\hbar S_xL_y-i\hbar S_yL_x\neq0\\
\text{同理：}[\vec{S},H]&\propto[\vec{S},\vec{S}\cdot\vec{L}]\\
&=[S_x,\vec{S}\cdot\vec{L}]\vec{i}+[S_y,\vec{S}\cdot\vec{L}]\vec{j}+[S_z,\vec{S}\cdot\vec{L}]\vec{k}\\
[S_z,\vec{S}\cdot\vec{L}]&=[S_z,S_xL_x]+[S_z,S_yL_y]+[S_z,S_zL_z]\\
&=[S_z,S_x]L_x+[S_z,S_y]L_y+[S_z,S_z]L_z\qquad[S_z,L_x]=0\text{,S与L对易}\\
&=i\hbar S_yL_x-i\hbar S_xL_y\neq0\\
\text{同时可以看出：}&[L_z,\vec{S}\cdot\vec{L}]+[S_z,\vec{S}\cdot\vec{L}]=0\\
\text{即：}&[L_z+S_z,\vec{S}\cdot\vec{L}]=0\\
\text{同理有：}&[L_x+S_x,\vec{S}\cdot\vec{L}]=0\qquad[L_y+S_y,\vec{S}\cdot\vec{L}]=0\\
\text{即：}&[(L_x+S_x)\vec{i}+(L_y+S_y)\vec{j}+(L_z+S_z)\vec{k},\vec{S}\cdot\vec{L}]=0\\
\text{即：}&[\vec{L}+\vec{S},\vec{S}\cdot\vec{L}]=0
\end{aligned}$$

得证。

定义**总角动量算符**

$$\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$$

可以证明**总角动量$\vec{J}$为守恒量**:

证明:

$$[\vec{J},H]=\frac{1}{2m}[\vec{L}+\vec{S},p^2]+[\vec{L}+\vec{S},V(r)]+\xi(r)[\vec{L}+\vec{S},\vec{S}\cdot\vec{L}]$$

$$= \frac{1}{2m}[\vec{L}, p^2] + [\vec{L}, V(r)] + \xi(r)[\vec{L} + \vec{S}, \vec{S} \cdot \vec{L}]$$
$$= 0$$

S除了与自身有关系的，其他都对易！

$[\vec{L} + \vec{S}, \vec{S} \cdot \vec{L}] = 0$见上面

$[\vec{L}, p^2] = 0 \qquad [\vec{L}, V(r)] = 0$见角动量算符对易式的那个章节

得证。

Chapter 10

力学量本征值的代数解法

10.1 Schrödinger因式分解法

【什么是事实？什么是推论？什么是引入？先不要被其名字或物理意义困扰，现在能做的是？明确用途。】
【管你叫什么名字，目的只有一个:求谐振子的本征值与本征函数】
【不要被这些晕人的名字扰晕】
谐振子的哈密顿量：$\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$
【还是按曾书来】
令$m = \hbar = \omega = 1$
【这些东西本身就是常数，可以想象到令他们为1，不会本质上影响解的形式。官方叫法为：采用自然单位】
有：$\hat{H} = \dfrac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{x}^2)$
【不省略算符的标记还是好些。算符大多是种作用，如偏微分，如省略了，看起来就像自变量，虽然在自身表象中就是自变量。所以在未指定表象中，还是戴上帽子。】

令：【怎么令出来的，感觉这就凭空出来的，我怎么想的到？】

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \frac{d}{dx}) \\ \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - \frac{d}{dx}) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ \hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{cases}$$

【书上说这里要用到相空间（xp空间）中的旋转不变性。我怎么没看出来？】

【停一停，看下】$\hat{a}$与$\hat{a}^\dagger$的对易关系：

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

证明：

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2}[x + ip, x - ip] = \frac{1}{2}[x, x - ip] + \frac{1}{2}[ip, x - ip] \\ &= \frac{1}{2}[x, x] - \frac{i}{2}[x, p] + \frac{i}{2}[p, x] + \frac{1}{2}[p, p] \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \end{aligned}$$

【用其他字体表示】

这时

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\{[\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - a)]^2 + [\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})]^2\} \\ &= \frac{1}{4}\{(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) - (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger)\} \\ &= \frac{1}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \end{aligned}$$

由$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$，有：$\hat{a}\hat{a}^\dagger = 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}$，即：

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}$$

令$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$，有：$\hat{H} = \hat{N} + \frac{1}{2}$

【书上为什么保留$\hat{a}^\dagger\hat{a}$，而不保留$\hat{a}\hat{a}^\dagger$】

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a}$$

【这些东西是怎么想到的，怎么构造出来的。给人一种凭空产生的感觉。】
求出$\hat{N}$的本征值，也就求出了$\hat{H}$的本征值。
设$|n>$为$\hat{N}$的一个本征态，相应本征值为n。

$$\begin{cases} [\hat{N},\hat{a}]|n>=\hat{N}\hat{a}|n>-\hat{a}\hat{N}|n>=\hat{N}\hat{a}|n>-n\hat{a}|n> \\ [\hat{N},\hat{a}]|n>=-\hat{a}|n> \end{cases} \Longrightarrow \hat{N}\hat{a}|n>=(n-1)\hat{a}|n>$$

【这是常用的招数了】由此看出，$\hat{a}|n>$也是$\hat{N}$的本征态，相应的本征值为$n-1$；又$\hat{N}\hat{a}^2|n>=\hat{N}\hat{a}\hat{a}|n>$
由$[\hat{N},\hat{a}]=\hat{N}\hat{a}-\hat{a}\hat{N}=-\hat{a}$，有：$\hat{N}\hat{a}=\hat{a}\hat{N}-\hat{a}$，即：

$$\begin{aligned} \hat{N}\hat{a}^2|n> &= (\hat{a}\hat{N}-\hat{a})\hat{a}|n>=\hat{a}\hat{N}\hat{a}|n>-\hat{a}^2|n> \\ &= \hat{a}(n-1)\hat{a}|n>-\hat{a}^2|n>=(n-2)\hat{a}^2|n> \end{aligned}$$

由此看出，$\hat{a}^2|n>$也是$\hat{N}$的本征态，相应的本征值为：$n-2$。

10.1.1 归一化

设基态波函数$|0>$已经归一化，即：$<0|0>=1$。
本征值$n=0$，本征态$|0>$;
本征值$n=1$，本征态$|1>=A\hat{a}^\dagger|0>$;
归一化：$A^2<0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0>=1$；由$[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}=1,\hat{N}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$；有：

$$<0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0>=<0|\hat{a}^\dagger\hat{a}+1|0>=<0|\hat{N}|0>+<0|0>=1;<0|\hat{N}|0>=0,<0|0>=1$$

$A=1$，$|1>=\hat{a}^\dagger|0>$
本征值$n=2,|2>=A\hat{a}^\dagger|1>$

$$A^2<1|\hat{a}\hat{a}^\dagger|1>=A^2<1|\hat{N}+1|1>=2A^2=1\rightarrow A=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|2>=\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger|1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger\frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^\dagger|0>=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger)^2|0>$$

本征值$n=3$，本征态$|3>=\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^\dagger|2>=\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^\dagger\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger|1>=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{1}}(\hat{a}^\dagger)^3|0>$

本征值$n=n$，本征态$|n>=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^n|0>$
归一化推导:

$$
\begin{aligned}
|n> &= A\hat{a}^{\dagger}|n-1> \\
&A^2<n-1|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n-1>=A^2<n-1|\hat{N}+1|n-1> \\
&=A^2[<n-1|\hat{N}|n-1>+<n-1|n-1>] \\
&=A^2[(n-1)+1]=A^2n=1
\end{aligned}
$$

$$A=\frac{1}{\sqrt{n}}$$

$|n>=\frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^{\dagger}|n-1>\Longrightarrow\hat{a}^{\dagger}|n>=\sqrt{n+1}|n+1>$ 这个式子挺重要的。

Chapter 11

微扰论

多多融入自己的想法、疑惑、问题，而不是僵硬的照搬、照抄，这样才能深刻的把握它。

参考:
1、苏汝铿，《量子力学》（比起曾书觉得他讲的清楚些）
2、曾谨言，《量子力学》第四版卷一

近似法的精神:
1、从已知的较简单问题的准确解出发，近似地求较复杂一些的问题的解;
2、了解这些求解方法的近似程度，估算出近似解和准确解之间的最大偏离。

11.1 非简并定态微扰论

非简并定态微扰论，顾名思义，没有简并、与时间无关、微小扰动，即：讨论体系在受到外界与时间无关的微小扰动时，它的能级和波函数所发生的变化。

11.1.1 非简并定态微扰论运用的条件

设体系的哈密顿量(Hamilton)H不显含时间t，定态薛定谔方程（能量本征方程）为:

$$H\psi = E\psi$$

满足下述条件:

（1）H可分解为H_0和H'两部分，H_0厄米，而且H'远小于H_0:

$$H = H_0 + H'$$

$$H' \ll H_0$$

即:

1、H与H_0的差别很小，H'视为加于H_0的微扰。

2、H'远远小于H_0的严格意义将在以后详细说明。

3、H不显含t，所以无论H_0或是H'均不显含t。

（2）H_0的本征值和本征函数已经求出，即在H_0的本征方程$H_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$中，能级$E_n^{(0)}$及波函数$\psi_n^{(0)}$都已知。

微扰论的任务: 从H_0的本征值和本征函数出发，近似求出经过微扰H'后，H的本征值和本征函数。

（3）H_0的能级无简并。严格点说，是要求通过微扰论来计算它的修正的那个能级无简并。例如，要通过微扰论计算H'对H_0的第4个能级$E_4^{(0)}$的修正，就要求$E_4^{(0)}$无简并，它相应的波函数$\psi_4^{(0)}$只有一个。其他能级既可以是简并的，也可以是非简并的。

（4）H_0的能级组成分立谱。严格点说，至少必须要求通过微扰论来计算它的修正的那个能级$E_n^{(0)}$处于分立谱内，$E_n^{(0)}$是束缚态。

11.1.2 能量的各级修正

为表征微扰的近似程度，通常引进一个小参数λ，将H'写成$\lambda H'$，将H'的微小程度通过λ反映出来。即:

$$H\psi_n = E\psi_n$$
$$(H_0 + H')\psi_n = E\psi_n$$

$$(H_0 + \lambda H')\psi_n = E\psi_n \tag{1}$$

将能级E_n和波函数ψ_n按λ展开:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \tag{2}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \cdots \tag{3}$$

$E_n^{(1)}, E_n^{(2)}, \cdots, \psi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)}, \cdots$分别表示能级$E_n$和波函数$\psi_n$的一级、二级……修正。

并约定：波函数的各高级近似解与零级近似解都正交，即:

$$\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(s)} \rangle = 0 \qquad s = 1, 2, 3, \cdots$$

注意: 这是曾书中的约定，有了这个约定，计算将很轻松。但怎么看这个约定都有些牵强，很主观。目前没看到证明。但在苏汝铿的书并没有用到这个约定，更严密些。详看苏书，这里姑且用这个约定。

将(2)(3)代入(1)有:

$$(H_0 + \lambda H')(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \lambda^3 \psi_n^{(3)} + \cdots) =$$

$$(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \lambda^3 E_n^{(3)} + \cdots)(\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \lambda^3 \psi_n^{(3)} + \cdots) \tag{4}$$

比较（4）式两端λ的同次幂，得出各级方程为:

$$\begin{aligned}
&\text{零级项}\lambda^0: && H_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \\
&\text{一级项}\lambda^1: && \lambda H_0\psi_n^{(1)} + \lambda H'\psi_n^{(0)} = \lambda E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + \lambda E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} \\
&\text{二级项}\lambda^2: && \lambda^2 H_0\psi_n^{(2)} + \lambda^2 H'\psi_n^{(1)} = \lambda^2 E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + \lambda^2 E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} \\
&\text{三级项}\lambda^3: && \lambda^3 H_0\psi_n^{(3)} + \lambda^3 H'\psi_n^{(2)} = \lambda^3 E_n^{(0)}\psi_n^{(3)} + \lambda^3 E_n^{(1)}\psi_n^{(2)} + \lambda^3 E_n^{(2)}\psi_n^{(1)} + \lambda^3 E_n^{(3)}\psi_n^{0} \\
&\quad\cdots\cdots
\end{aligned}$$

【发现没有，将H'的上标看成1，头顶系数和为相应λ次数，这样写起来就有规律，很快。】

移项有:

$$\text{零级项}\lambda^0: \quad (H_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(0)} = 0 \tag{5}$$

$$
\begin{aligned}
&\text{一级项}\lambda^1: && (H_0-E_n^{(0)})\psi_n^{(1)}=(E_n^{(1)}-H')\psi_n^{(0)} && (6)\\
&\text{二级项}\lambda^2: && (H_0-E_n^{(0)})\psi_n^{(2)}=(E_n^{(1)}-H')\psi_n^{(1)}+E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} && (7)\\
&\text{三级项}\lambda^3: && (H_0-E_n^{(0)})\psi_n^{(3)}=(E_n^{(1)}-H')\psi_n^{(2)}+E_n^{(2)}\psi_n^{(1)}+E_n^{(3)}\psi_n^{(0)} && (8)\\
&\quad\cdots\cdots
\end{aligned}
$$

【这几个式子最好记住，注意其中的规律，$E_n^{()}$由低走高，$\psi_n^{()}$由高走低；如果实在记不住那就只能推了。这几个式子是求修正项的关键（核心），有了这才能求能量修正，波函数修正。】

将上面的（5）（8）式写成Dirac符号的形式为：

$$
\begin{aligned}
&(H_0-E_n^{(0)})|\psi_n^{(0)}\rangle=0\\
&(H_0-E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle=(E_n^{(1)}-H')|\psi_n^{(0)}\rangle\\
&(H_0-E_n^{(0)})|\psi_n^{(2)}\rangle=(E_n^{(1)}-H')|\psi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle\\
&(H_0-E_n^{(0)})|\psi_n^{(3)}\rangle=(E_n^{(1)}-H')|\psi_n^{(2)}\rangle+E_n^{(2)}|\psi_n^{(1)}\rangle+E_n^{(3)}|\psi_n^{(0)}\rangle
\end{aligned}
$$

（6）（8）式两边左乘$\langle\psi_n^{(0)}|$，并利用约定：$\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(s)}\rangle=0 \qquad s=1,2,3,\cdots$，以（6）式为例：

$$
\begin{aligned}
\langle\psi_n^{(0)}|(H_0-E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle&=\langle\psi_n^{(0)}|(E_n^{(1)}-H')|\psi_n^{(0)}\rangle\\
\langle\psi_n^{(0)}|H_0|\psi_n^{(1)}\rangle-\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle&=\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle-\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\psi_n^{(0)}|H_0|\psi_n^{(1)}\rangle&=(H_0|\psi_n^{(0)}\rangle)^*|\psi_n^{(1)}\rangle\\
&=(E_0|\psi_n^{(0)}\rangle)^*|\psi_n^{(1)}\rangle && \text{本征方程}H_0\psi_n^{(0)}=E_0\psi_n^{(0)}\\
&=E_0\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle && \text{角标太多看起来有点晕！}\\
&=0 && \langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(s)}\rangle=0\\
\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle&=E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle=0 && E_n^{(0)}\text{为本征值是常数}\\
\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle&=E_n^{(1)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle=E_n^{(1)}
\end{aligned}
$$

有：

$$E_n^{(1)}=\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$$

同理可以得出:

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$$
$$E_n^{(2)} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(1)}\rangle$$
$$E_n^{(3)} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(2)}\rangle$$
$$E_n^{(3)} = \langle\psi_n^{(1)}|H' - E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

对于$E_n^{(3)}$简化的形式，可以直接用微扰一级近似波函数（而不需用二级近似波函数）来计算。

证明:

式（7）两边左乘$\langle\psi_n^{(1)}|$，得:

$$\begin{aligned}\langle\psi_n^{(1)}|(H_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(2)}\rangle &= \langle\psi_n^{(1)}|(E_n^{(1)} - H')|\psi_n^{(1)}\rangle - \langle\psi_n^{(1)}|E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle \\ &= \langle\psi_n^{(1)}|(E_n^{(1)} - H')|\psi_n^{(1)}\rangle\end{aligned}$$

式（6）两边左乘$\langle\psi_n^{(2)}|$，并利用$E_n^{(3)} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(2)}\rangle$，得:

$$\begin{aligned}\langle\psi_n^{(2)}|(H_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle &= \langle\psi_n^{(2)}|(E_n^{(1)} - H')|\psi_n^{(0)}\rangle \\ &= 0 - E_n^{(3)} = -E_n^{(3)}\end{aligned}$$

利用H_0的厄米性，以上两式的左边相等，有:

$$E_n^{(3)} = \langle\psi_n^{(1)}|H' - E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

得证。

11.1.3 能量、波函数的一级近似项

由于H_0厄米，H_0的本征函数系$\{\psi_n^{(0)}\}$是正交、归一、完备、封闭系，可将一级波函数修正ψ_n^1按$\{\psi_n^{(0)}\}$系展开:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_l a_l^{(1)}|\psi_l^{(0)}\rangle \tag{9}$$

【角标太多够晕的，记着，上标数字表示修正的级数。**注意这个求和，包含了H_0所有的本征函数**】

将上式代入（6）式$(H_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - H')|\psi_n^{(0)}\rangle$有:

$$(H_0 - E_n^{(0)})\sum_l a_l^{(1)}|\psi_l^{(0)}\rangle = (E_n^{(1)} - H')|\psi_n^{(0)}\rangle$$

两边左乘$\langle\psi_k^{(0)}|$（求标积），利用H_0本征态的正交归一性，有：【这是至关重要的一步！】

$$\langle\psi_k^{(0)}|(H_0 - E_n^{(0)})\sum_l a_l^{(1)}|\psi_l^{(0)}\rangle = \langle\psi_k^{(0)}|(E_n^{(1)} - H')|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$E_k^{(0)}\sum_l a_l^{(1)}\langle\psi_k^{(0)}|\psi_l^{(0)}\rangle - E_n^{(0)}\sum_l a_l^{(1)}\langle\psi_k^{(0)}|\psi_l^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}\langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(0)} > -\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$E_k^0 a_k^{(1)} - E_n^{(0)} a_k^{(1)} = E_n^{(1)}\delta_{kn} - H'_{kn} \tag{10}$$

其中，记$H'_{kn} = \langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$【这不就是算符$H'$的矩阵元吗？】

能量一级修正$E_n^{(1)}$:

即k=n时，

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle$$

波函数一级修正$\psi_n^{(1)}$:用H_0的本征函数系表示

当$k \neq n$时，由（10）式有【这是个求H_0本征函数系的系数的过程】：

$$a_k^{(1)} = \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

由（9）式有：

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n}\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}$$

【（1）注意这个求和，包含了H_0所有的本征函数，除了k=n项，即除了第n个H_0本征函数$\psi_n^{(0)}$，这有点奇怪，不是要完全系吗？（2）注意下标的顺序！！】

11.1.4 能量二级近似项

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(1)}\rangle \\
&= \langle\psi_n^{(0)}|H'|\sum_{k\neq n}\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}|\psi_k^{(0)}\rangle \\
&= \sum_{k\neq n}\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_k^{(0)}\rangle
\end{aligned}$$

$$= \sum_{k\neq n} \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} H'_{kn}$$
$$= \sum_{k\neq n} \frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

注意这个求和，包含了H_0所有的本征函数

11.1.5 非简并定态微扰论的应用示例

例：一电荷为e的线性谐振子受到恒定弱电场ε作用，电场沿正x方向。用微扰法求体系的定态能量和波函数。

【解】

体系的哈密顿算符为：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 - e\varepsilon x$$

在弱电场情况下，最后一项很小，因此令：

$$\hat{H}^0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$$
$$\hat{H}' = -e\varepsilon x$$

$\hat{H}^0$是线性谐振子的哈密顿算符，它的本征值和本征函数已在前面求出。

本征值：

$$E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2}), n = 0, 1, 2, \cdots$$

本征函数：

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\frac{\alpha^2}{2}x^2} H_n(\alpha x)$$

（1）计算微扰对第n能级的修正：

①能量的一级修正：

$$E_n^1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{0*}(x)\hat{H}'\psi_n^0(x)dx = -N_n^2 e\varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} xH_n^2(\alpha x)e^{-\alpha^2x^2}dx = 0$$

$H_n^2(\alpha x)$一定是x的偶函数，因此上式中被积函数是x奇函数，积分等于零。

②能量的二级修正：

计算微扰矩阵元:

$$\begin{aligned}
H'_{mn} &= \int -\infty^{+\infty} \psi_m^{0*}(x)\hat{H}'\psi(x)dx \\
&= -N_m N_n e\varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} xH_m(\alpha x)H_n(\alpha x)e^{-\alpha^2 x^2}dx \\
&= -\frac{N_m N_n e\varepsilon}{\alpha^2}\int_{-\infty}^{+\infty} \xi H_m(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi
\end{aligned}$$

由厄米多项式的递推公式: $H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0$，有:

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

代人H'_{mn}，有:

$$\begin{aligned}
H'_{mn} &= -\frac{N_m N_n e\varepsilon}{\alpha^2}[\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} H_{n+1}(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi + n\int_{-\infty}^{+\infty} H_{n-1}(\xi)H_m(\xi)e^{-\xi^2}d\xi] \\
&= -\frac{e\varepsilon}{\alpha}[(\frac{n+1}{2}^{\frac{1}{2}})\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n+1}^0(x)\psi_m^0(x)dx + (\frac{n}{2})^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n-1}^0\psi_m(x)^0dx] \\
&= -e\varepsilon(\frac{\hbar}{2\mu\omega})^{\frac{1}{2}}[(n+1)^{\frac{1}{2}}\delta_{m,n+1} + n^{\frac{1}{2}}\delta_{m,n-1}]
\end{aligned}$$

最后一步是因为$\psi_n^0(x)$是$\hat{H}^0$的本征函数，它具有正交归一性。
代人能量的二级修正公式，有:

$$\begin{aligned}
E_n^2 &= \sum_{m,m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0 - E_m^0} \\
&= \frac{\hbar e^2\varepsilon^2}{2\mu\omega}\left[\frac{n+1}{E_n^0 - E_{n+1}^0} + \frac{n}{E_n^0 - E_{n-1}^0}\right] \\
&= \frac{\hbar e^2\varepsilon^2}{2\mu\omega}\left[-\frac{n+1}{\hbar\omega} + \frac{n}{\hbar\omega}\right] \\
&= -\frac{e^2\varepsilon^2}{2\mu\omega}
\end{aligned}$$

上式表明，能级移动与n无关，即与振子的状态无关。【其实前面通过变量替换证明过了。】

（2）波函数的一级修正:

$$
\begin{aligned}
\psi_n^1 &= \sum_{m,m\neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}\psi_m^0 \\
&= -e\varepsilon(\frac{\hbar}{2\mu\omega})^{\frac{1}{2}}\left[\frac{(n+1)^{\frac{1}{2}}\psi_{n+1}^0}{E_n^0 - E_{n+1}^0} + \frac{n^{\frac{1}{2}}\psi_{n-1}^0}{E_n^0 - E_{n-1}^0}\right] \\
&= e\varepsilon(\frac{1}{2\hbar\mu\omega^3})^{\frac{1}{2}}[(n+1)^{\frac{1}{2}}\psi_{n+1}^0 - n^{\frac{1}{2}}\psi_{n-1}^0]
\end{aligned}
$$

上式对$n \geq 1$成立，如果讨论基态，$n = 0$，则上式括号中只有第一项，而无第二项。

11.2 简并定态微扰论

【注意这里与前面的讨论有所不同，这里讨论的是有简并的第k能级及求该能级的一级近似项；前面零级波函数是已知的，而这里的有简并的零级波函数是未知的，还要求。】

假设H_0有n个本征值其第k个本征值$E_k^{(0)}$有f_k重简并，即：属于H_0的本征值$E_k^{(0)}$有f_k个本征函数：$\psi_{k1}^{(0)}, \psi_{k2}^{(0)}, \cdots, \psi_{k\mu}^{(0)}, \cdots, (\mu = 1, 2, \cdots, f_k)$，$H_0$的本征函数构成的完全系为：$\psi_1^{(0)}; \psi_2^{(0)}; \cdots; (\psi_{k1}^{(0)}, \psi_{k2}^{(0)}, \cdots, \psi_{kf_k}^{(0)}); \cdots; \psi_n^{(0)}$。
【注意分清各角标的意思，这里讨论的是零级近似（对H而言）的有简并的第K级（对H_0而言）。】
这时，与非简并态不同，零级波函数$\psi_k^{(0)}$还不能完全确定，但其一般形式为该级(k级)的f_k个的本征函数的线性叠加:

$$
\begin{aligned}
|\psi_k^{(0)} > &= \sum_{\mu=1}^{f_k} a_\mu |\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle \\
&= a_1\psi_{k1}^{(0)} + a_2\psi_{k2}^{(0)} + \cdots + a_\mu\psi_{k\mu}^{(0)} + \cdots + a_{f_k}\psi_{kf_k}^{(0)}
\end{aligned}
$$

这时$|\psi_k^{(1)}\rangle$则表示为:

$$
|\psi_k^{(1)}\rangle = \sum_{n=1}^{n,n\neq k} b_n|\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{\mu=1}^{f_k} c_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle
$$

$$= b_1\psi_1^{(0)} + b_2\psi_2^{(0)} + \cdots + c_1\psi_{k1}^{(0)} + c_2\psi_{k2}^{(0)} + \cdots + c_{f_k}\psi_{kf_k}^{(0)} + \cdots + b_n\psi_n^{(0)}$$

【非简并比较比较！！】
代入（6）式$(H_0 - E_k^{(0)})|\psi_k^{(1)}\rangle = (E_k^{(1)} - H')|\psi_k^{(0)}\rangle$【针对有简并的那个能级，注意能级的一致】，有：

$$(H_0 - E_k^{(0)})|\psi_k^{(1)} >= (E_k^{(1)} - H')\sum_{\mu=1}^{f_k} a_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle$$

左乘$\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|$（左乘这个的过程就是取标积），有：

$$\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|(H_0 - E_k^{(0)})|\psi_k^{(1)} >= \langle\psi_{k\nu}^{(0)}|(E_k^{(1)} - H')\sum_{\mu=1}^{f_k} a_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle$$

参考前面，利用H_0的本征函数的正交性$\langle\psi_\alpha^{(0)}|\psi_\beta^{(0)} >= \delta_{\alpha\beta}$，有：

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|H_0|\psi_k^{(1)}\rangle &= \langle\psi_{k\nu}^{(0)}|H_0|\sum_{n=1}^{n,n\neq k} b_n|\psi_n^{(0)}\rangle + \langle\psi_{k\nu}^{(0)}|H_0|\sum_{\mu=1}^{f_k} c_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)} > \\
&= 0 + c_\nu E_k^{(0)} \\
\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|E_k^{(0)}|\psi_k^{(1)}\rangle &= c_\nu E_k^{(0)} \\
\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|(H_0 - E_k^{(0)})|\psi_k^{(1)}\rangle &= 0
\end{aligned}$$

【注意与前面比较，看出其中不同！！】

$$\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|(E_k^{(1)} - H')\sum_{\mu=1}^{f_k} a_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle = 0$$

$$\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|E_k^{(1)}\sum_{\mu=1}^{f_k} a_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle - \langle\psi_{k\nu}^{(0)}|H'|\sum_{\mu=1}^{f_k} a_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle = 0$$

调换顺序，简化，有：

$$\sum_{\nu=1}^{f_k} a_\nu H'_{\nu\mu} - \sum_{\nu=1}^{f_k} a_\nu E_k^{(1)}\delta_{\nu\mu} = 0$$

即:

$$\sum_{\nu=1}^{f_k}(H'_{\nu\mu}-E_k^{(1)}\delta_{\nu\mu})a_\nu=0$$

其中$H'_{\nu\mu}=\langle\psi_{k\nu}^{(0)}|H'|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle$，省略了表明第k能级，但要清楚。
到此都可以想象出一个矩阵了，写成矩阵的形式，有:

$$\begin{bmatrix} H'_{11}-E_k^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1f_k} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_k^{(1)} & \cdots & H'_{2f_k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H'_{f_k1} & H'_{F_k2} & \cdots & H'_{f_kf_k}-E_k^{(1)} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{f_k} \end{bmatrix}=0 \tag{11}$$

其中f_k为简并度。这是以$|\psi_k^{(0)}\rangle=\sum_{\mu=1}^{f_k}a_\mu|\psi_{k\mu}^{(0)}\rangle$前的系数$a_\mu$为未知数的一次齐次方程组。

11.2.1 简并能级一级修正

要想a_μ有不全为零的解的条件是：$\det|H'_{\nu\mu}-E_k^{(1)}\delta_{\nu\mu}|=0$，即:

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E_k^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1f_k} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_k^{(1)} & \cdots & H'_{2f_k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H'_{f_k1} & H'_{f_k2} & \cdots & H'_{f_kf_k}-E_k^{(1)} \end{vmatrix}=0$$

这个行列式方程称为久期方程。
解这个方程必然得到能量一级修正$E_k^{(1)}$的简并度f_k个根（如有重根，重根也算一个）$E_{k\alpha}^{(1)}(\alpha=1,2,\cdots,f_k)$。

由$E_k=E_k^0+E_k^{(1)}$
若$E_k^{(1)}$的f_k个根$E_{k\alpha}^{(1)}$无重根，则一级微扰可以将f_k度简并完全消除；
若$E_k^{(1)}$有几重根，则说不简并只是部分的被消除，必须进一步考虑能量的二级修正，才有可能使能级完全分裂开来。

有:

$$E_k = E_k^{(0)} + \begin{cases} E_{k1}^{(1)} \\ E_{k2}^{(1)} \\ \vdots \\ E_{kf_k}^{(1)} \end{cases}$$

11.2.2 简并零级波函数

将求解出来的f_k个根$E_{k\alpha}^{(1)}$代入方程（11）**（注意不是一起代入，而是一次代一个，一次解出一组a_ν）**，可以得出相应的f_k组$a_{\alpha\nu}(\alpha = 1, 2, \cdots, f_k)$。于是得出的各简并项对应的零级波函数为:

$$|\psi_{k\alpha}^{(0)}\rangle = \sum_{\nu=1}^{f_k} a_{\alpha\nu} |\psi_{k\nu}^{(0)}\rangle$$

有:

$$E_k = E_k^{(0)} + \begin{cases} E_{k1}^{(1)} \\ E_{k2}^{(1)} \\ \vdots \\ E_{kf_k}^{(1)} \end{cases} \qquad |\psi_{k\alpha}^{(0)}\rangle = \begin{cases} \sum_{\nu=1}^{f_k} a_{1\nu} |\psi_{k\nu}^{(0)}\rangle \\ \sum_{\nu=1}^{f_k} a_{2\nu} |\psi_{k\nu}^{(0)}\rangle \\ \vdots \\ \sum_{\nu=1}^{f_k} a_{f_k\nu} |\psi_{k\nu}^{(0)}\rangle \end{cases}$$

11.2.3 简并定态微扰法的应用——氢原子的一级斯塔克效应

【周世勋《量子力学教程》5.3】

斯塔克效应：氢原子光谱线在外电场作用下产生分裂的现象。

由于电子在氢原子中受到球对称的库仑场的作用，第n个能级有n^2度简并。当加入外电场后，势场的对称性受到破坏，能级发生分裂，使简并部分地被消除。

设外电场ε是均匀的，方向沿z轴，则电子在外电场中的势能为$e\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}$，即氢原子在外电场中的哈密顿量为：$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$

$$\hat{H}^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{r^2} \qquad \hat{H}' = e\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r} = e\varepsilon z = e\varepsilon r\cos\theta$$

原子内部的电场约为$10^{11}V/m$，一般外电场达到$10^{9}V/m$已经是很强的了，因此，相对于原子内部的电场，可将外电场看成微扰。

由于氢原子第一能级（基态）无简并，这里求氢原子在外电场中第二能级（第一激发态）的分裂情况。当$n=2$时，$\hat{H}^0$的本征值为：

$$E_2^0=-\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}=-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}=-\frac{e^2}{8a}$$

其中$a=\frac{\hbar^2}{me^2}$是第一波尔半径。

当$n=2$时，简并度为$n^2=4$，相应的波函数为：

$$\begin{aligned}
\phi_1=\psi_{200}=R_{20}Y_{00}&=\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}\\
\phi_2=\psi_{210}=R_{21}Y_{10}&=\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}}\cos\theta\\
\phi_3=\psi_{211}=R_{21}Y_{11}&=\frac{1}{8\sqrt{\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta e^{i\varphi}\\
\phi_4=\psi_{21,-1}=R_{21}Y_{1,-1}&=\frac{1}{8\sqrt{\pi}}(\frac{1}{a})^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta e^{-i\varphi}
\end{aligned}$$

（1）求第二能级的一级修正值。【前面的二是能级，后面的一是修正级数】

先求$\hat{H}'$的矩阵元，由球谐函数的奇偶性，可以看出，除矩阵元$\hat{H}'_{12}$不等于零，其他矩阵元都是零。

$$\begin{aligned}
H'_{12}=H'_{21}&=\int\phi_1^*\hat{H}'\phi_2d\tau\\
&=\frac{1}{32\pi}(\frac{1}{a})^3\int_o^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}e\varepsilon r\cos\theta\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}}\cos\theta r^2\sin\theta drd\theta d\varphi\\
&=\frac{1}{32\pi}(\frac{1}{a})^4e\varepsilon\int_o^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{a}}r^4\cos^2\theta\sin\theta drd\theta d\varphi\\
&=\frac{1}{16}(\frac{1}{a})^4e\varepsilon\int_o^\infty\int_0^\pi(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{a}}r^4\cos^2\theta\sin\theta drd\theta\\
&=\frac{1}{24}\frac{e\varepsilon}{a^4}\int_0^\infty(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{a}}r^4dr\\
&=-3e\varepsilon a
\end{aligned}$$

代人久期方程有：

$$\begin{vmatrix} -E_2^1 & -3e\varepsilon a & 0 & 0 \\ -3e\varepsilon a & -E_2^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^1 \end{vmatrix} = 0$$

即：$(E_2^1)^2[(E_2^1)^2 - (3e\varepsilon a)^2] = 0$

解得：

$$\begin{aligned} E_{21}^1 &= 3e\varepsilon a \\ E_{22}^1 &= -3e\varepsilon a \\ E_{23}^1 &= E_{24}^1 = 0 \end{aligned}$$

讨论：

最后两根是重根。由此可见，在外电场的作用下，原来是四度简并的能级，在一级修正中分裂为三个能级，简并部分的被消除。三个能级为：$E_2^0 + 3e\varepsilon a, E_2^0, E_2^0 - 3e\varepsilon$。

相应地，原来从E_2^0跃迁到E_1^0的一根谱线也变成了三根线。一根仍然保持原有的频率，另两根，一根频率大些，一根频率小些。【缺图】

（2）求第二能级的零级近似波函数。

$$\begin{pmatrix} -E_2^1 & -3e\varepsilon a & 0 & 0 \\ -3e\varepsilon a & -E_2^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^0 \\ C_2^0 \\ C_3^0 \\ C_4^0 \end{pmatrix} = 0$$

得一组线性方程：

$$\begin{aligned} -3e\varepsilon a C_2^0 - E_2^1 C_1^0 &= 0 \\ -3e\varepsilon a C_1^0 - E_2^1 C_2^0 &= 0 \\ E_2^1 C_3^0 &= 0 \\ E_2^1 C_4^0 &= 0 \end{aligned}$$

①当$E_2^1=E_{21}=3e\varepsilon a$时，解得:

$$C_1^0=-C_2^0 \qquad C_3^0=C_4^0=0$$

对应于能级$E_2^0+3e\varepsilon a$的零级近似波函数为:

$$\psi_{21}^0=C_1^0\phi_1-C_1^0\phi_2$$

归一化为:

$$\psi_{21}^0=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1-\phi_2)$$

②当$E_2^1=E_{22}=-3e\varepsilon a$时，解得:

$$C_1^0=C_2^0 \qquad C_3^0=C_4^0=0$$

对应于能级$E_2^0-3e\varepsilon a$的零级近似波函数为:

$$\psi_{22}^0=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1+\phi_2)$$

③当$E_2^1=E_{23}=E_{24}=0$时，解得:

$$C_1^0=C_2^0=0 \qquad C_3^0\text{和}C_4^0\text{为不同时等于零的常数}$$

对应于能级E_2的零级近似波函数为:

$$\psi_{23}^0,\psi_{24}^0=C_3^0\phi_3+C_4^0\phi_4$$

Chapter 12

散射理论

参考:
1、周世勋《量子力学教程》

12.1 说在前面

在量子力学中，散射现在也称为碰撞现象。
1、弹性碰撞（弹性散射）：一粒子与另一粒子碰撞的过程中，只有动能的交换，粒子内部状态并无改变。
2、非弹性碰撞（非弹性散射）：碰撞中粒子内部状态有所改变。

12.1.1 束缚态理论与散射理论的比较

束缚态理论兴趣在于如何求出体系的离散的能量本征值和本征态，以及在外界作用下它们之间的量子跃迁概率；**在实验上**是主要通过光谱线的波长（频率）及谱线强度的观测，选择定则的分析等来获取有关的信息。

散射理论散射态是一种非束缚态，涉及体系能谱的连续区部分，人们可以自由地控制入射粒子的能量，这与处理束缚态的着眼点有所不同。在散射问题中，人们感兴趣的是散射粒子的角分布以及散射过程中粒子各种性质（例如，极化，角关联等）的变化。由于角分布等的实验观测都是在离开靶子"很远"的地方（相对而言，$r \gg \lambda, \lambda$是入射粒子的德布罗意波长）进

行，因此角分布依赖于波函数在$r\to\infty$的渐近行为。所以散射理论的兴趣不在于求能量本征值，而在于研究波函数在$r\to\infty$处的渐近行为，它与入射粒子能量，入射粒子与靶粒子的相互作用等有关。

12.2 粒子被另一粒子或力场散射的描述

考虑一束粒子流（例如电子流）沿着Z轴向粒子A（例如原子）射来，A称为散射中心。设A的质量比入射粒子的质量大得多，由碰撞而引起的A的运动可以略去。

散射角θ: 粒子被散射后的运动方向与入射方向之间的夹角。

入射粒子流强度N:垂直于入射粒子流前进的方向取一单位面积s_0，单位时间内穿过s_0的粒子数。

1、单位时间内散射到面积元ds上的粒子数dn

（1）与ds成正比，与ds到A点距离平方成反比，即与ds对A所张得立体角$d\Omega$成正比:

$$dn\sim d\Omega=\frac{ds}{r^2}$$

（2）还与入射粒子流强度N成正比:

$$dn\sim Nd\Omega$$

2、以q表示比例关系中的比例系数，在一般情况下，它与观察的方向(θ,φ)（将粒子流沿z轴入射，能体会θ,φ吧，想球坐标）有关，即$q(\theta,\varphi)$，有:

$$dn=q(\theta,\varphi)Nd\Omega$$

3、当强度N固定时，单位时间内散射到θ,φ方向的粒子数dn由$q(\theta,\varphi)$决定。$q(\theta,\varphi)$与入射粒子、散射中心的性质以及它们之间的相互作用和相对动能有关。对$q(\theta,\varphi)$进行量纲分析（不懂，详看书），$q(\theta,\varphi)$具有面积的量纲，称$q(\theta,\varphi)$为微分散射截面。其物理意义为：一个入射粒子经散射后，散射到θ,φ方向单位立体角的概率。4、将$q(\theta,\varphi)d\Omega$对立体角，即所有可能方向积分，得:

$$Q=\int q(\theta,\varphi)d\Omega=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}q(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi$$

（这个积分，注意看看球坐标下体积元：$dv=r^2\sin\theta drd\varphi d\theta$）Q称为总散射截面，表示一个入射粒子被散射后，散射到任何方向的概率。

12.3 量子力学中由解薛定谔方程来定散射截面

1、取散射中心为坐标原点。用$U(\vec{r})$表示入射粒子与散射中心之间的相互作用势能，则体系的薛定谔方程写为：

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

2、令

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}$$
$$V(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}U(\vec{r})$$

则：

$$\nabla^2\psi + [k^2 - V(\vec{r})]\psi = 0$$

我们观察被散射粒子都是在离开散射中心很远的地方，所以只需讨论$r \to \infty$时ψ的行为就够了。

3、假设$r \to \infty$时，$U(\vec{r}) \to 0$，即在粒子远离散射中心时，两者之间的相互作用趋于零。这样，在$\to \infty$的地方，波函数应由两部分组成：
（1）描写入射粒子的平面波：$\psi_1 = Ae^{ikz}$;
（2）描写散射粒子的球面散射波：$\psi_2 = f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$。
这个波是由散射中心向外传播的，有：

$$\psi_{r\to\infty} \to \psi_1 + \psi_2 = Ae^{ikz} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

这里考虑的是弹性散射，所以散射波的能量没有改变，即波矢k的数值不变。上式中$f(\theta,\varphi)$仅是θ和φ的函数，而与r无关。

4、取A=1，则$|\psi_1|^2 = 1$，这表明每个单位体积只有一个入射粒子。
（1）入射波的几率流密度是：

$$\begin{aligned} J_z &= \frac{i\hbar}{2m}[\psi_1\frac{\partial\psi_1^*}{\partial z} - \psi_1^*\frac{\partial\psi_1}{\partial z}] \\ &= \frac{i\hbar}{2m}[-ik\psi_1\psi_1^* - ik\psi_1^*\psi_1] \\ &= \frac{\hbar k}{m} = v \end{aligned}$$

v是粒子的速率。它在数值上等于单位时间内穿过垂直粒子前进方向即z轴上单位面积的粒子数，即入射粒子流的强度N。

（2）散射波的概率流密度是:

$$
\begin{aligned}
J_r &= \frac{i\hbar}{2m}[\psi_2\frac{\partial\psi_2^*}{\partial r} - \psi_2^*\frac{\partial\psi_2}{\partial r}] \\
&= \frac{i\hbar}{2m}|f(\theta,\varphi)|^2[\frac{e^{ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{-ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r}] \\
&= \frac{i\hbar}{2m}|f(\theta,\varphi)|^2(-\frac{2ik}{r^2}) \\
&= \frac{\hbar k}{mr^2}|f(\theta,\varphi)|^2 \\
&= \frac{v}{r^2}|f(\theta,\varphi)|^2
\end{aligned}
$$

J_r表示单位时间内穿过球面上单位面积的粒子数。

5、单位时间穿过面积ds的粒子数是:

$$dn = J_r ds = \frac{v}{r^2}|f(\theta,\varphi)|^2 ds = v|f(\theta,\varphi)|^2 d\Omega$$

由$dn = q(\theta,\varphi)Nd\Omega, v = N$，有:

$$q(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2$$

$f(\theta,\varphi)$称为散射振幅。$f(\theta,\varphi)$的具体形式通过求schrodinger方程的解并要求在$r\to\infty$时解具有（2）的形式得出。

12.4 散射截面

dn:单位时间内散射到面积ds上的粒子数。

N: 入射粒子流强度，垂直于入射粒子流前进的方向取一单位面积s_0，单位时间内穿过s_0的粒子数。

$$dn \sim N\frac{ds}{r^2} \qquad d\Omega = \frac{ds}{r^2}$$

$$dn = q(\theta,\varphi)Nd\Omega$$

$q(\theta,\varphi)$为微分散射截面，与θ,φ有关。

总散射截面:

$$Q = \int q(\theta,\varphi) d\Omega = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} q(\theta,\varphi) \sin\theta d\theta d\varphi$$

12.5 中心力场中的弹性散射

12.5.1 分波法（低能）

微分散射截面

$$q(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2 = \left| \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) e^{i\delta_l} \sin\delta_l \right|^2$$

总散射截面

$$Q = \sum_{l=0}^{\infty} Q_l$$
$$Q_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \text{（第l分波的散射截面）}$$

对于s分波

$$\frac{d^2U_0}{dr^2} + [k^2 - V(r)]U_0 = 0$$

其中U_0不用管它，一个形式；$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; V(r) = \frac{2m}{\hbar^2}U(\vec{r})$这几个注意下。

$$f(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin\delta_0$$

$$Q_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0$$

12.5.2 Born近似法（高能）

粒子质量为m，势场是$V(\vec{r})$，入射粒子波数$\vec{k}_i$，散射粒子波数$\vec{k}_f$。对于弹性散射，散射前后波数大小不变，$k_i = k_f = k, k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$。
散射粒子与入射粒子波数矢量差:

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \vec{q} \qquad q = q(\theta) = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

（$q(\theta)$画个图就知道）
散射振幅为：

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}}V(\vec{r})d\tau$$

微分散射截面：

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2$$

对于中心势$V(r)$，散射振幅与φ无关，有：

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r)r\sin qr dr$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \qquad q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

对于玻恩近似用到的一些积分

$$u_0 e^{-ar} \Longrightarrow \int_0^\infty re^{-ar}\sin kr dr = \frac{2ak}{(a^2+k^2)^2}$$

$$u_0 e^{-a^2r^2} \Longrightarrow \int_0^\infty e^{-a^2r^2}\cos kr dr = \frac{\sqrt{\pi}e^{-\frac{k^2}{4a^2}}}{2a}$$

$$u_0\frac{e^{-ar}}{r} \Longrightarrow \int_0^\infty e^{-ar}\sin kr dr = \frac{k^2}{a^2+k^2}$$

$$u_0\frac{1}{r^2} \Longrightarrow \int_0^\infty \frac{\sin kr}{r}dr = \frac{\pi}{2}$$

12.5.3 Born近似法计算各种散射的微分截面

【这是最常见的几种计算了，到处都有，所以要掌握！而且更多的是考察数学积分的功底了！】

$$(1)V(r) = \begin{cases} -V_0, & r<a \\ 0, & r>a \end{cases}$$

解：

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^a (-V_0)r\sin qr dr = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^a r\sin qr dr$$

$$\begin{aligned}\int r\sin qr dr &= -\frac{1}{q}\int r d\cos qr = -\frac{1}{q}(r\cos qr - \int\cos qr dr)\\ &= -\frac{1}{q}(r\cos qr - \frac{1}{q}\sin qr) = \frac{1}{q^2}\sin qr - \frac{r}{q}\cos qr\\ \int_0^a r\sin qr dr &= \frac{1}{q^2}\sin qa - \frac{a}{q}\cos qa\\ \sigma(\theta) &= \left[\frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}(\sin qa - qa\cos qa)\right]^2 = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4 q^6}(\sin qa - qa\cos qa)^2\end{aligned}$$

(2)$V(r) = V_0 e^{-\alpha r^2} \quad (\alpha > 0)$

解:

$$f(\theta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^\infty e^{-\alpha r^2} r\sin qr dr$$

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-\alpha r^2} r\sin qr dr &= \int_0^\infty \frac{1}{(-\alpha 2r)} r\sin qr de^{-\alpha r^2} = -\frac{1}{2\alpha}\int_0^\infty \sin qr de^{-\alpha r^2}\\ &= -\frac{1}{2\alpha}(\sin qr e^{-\alpha r^2}|_0^\infty - \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} d\sin qr)\\ &= \frac{q}{2\alpha}\int_0^\infty e^{-\alpha r^2}\cos qr dr \qquad (\sin qr e^{-\alpha r^2}|_0^\infty = 0)\text{算算就是了}\\ &= \frac{q}{4\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha r^2}\cos qr dr \qquad (e^{-\alpha r^2}\cos qr)\text{为偶函数懂得吧}\\ &= \frac{q}{4\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{2}e^{-\alpha r^2}(e^{iqr}+e^{-iqr})dr\\ &= \frac{q}{8\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}(e^{-\alpha r^2+iqr}+e^{-\alpha r^2-iqr})dr\\ &= \frac{q}{8\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}(e^{-\frac{q^2}{4\alpha}}+e^{-\frac{q^2}{4\alpha}}) \qquad (\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha x^2+\beta x}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}})\\ &= \frac{q}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}e^{-\frac{q^2}{4\alpha}}\end{aligned}$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4 q^2}\cdot\frac{q^2}{16\alpha^2}\frac{\pi}{\alpha}e^{-\frac{q^2}{2\alpha}} = \frac{\pi m^2 V_0^2}{4\alpha^3\hbar^4}e^{-\frac{q^2}{2\alpha}}$$

(3)$V(r)=\chi\frac{e^{-\alpha r}}{r}\quad \alpha>0$

解:

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r)r\sin qrdr\qquad q=2k\sin\frac{\theta}{2}$$
$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2 1}\int_0^\infty \chi\frac{e^{-\alpha r}}{r}r\sin qrdr=-\frac{2m\chi}{\hbar^2 q}\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qrdr$$

【考察积分功底来了！】

$$I=\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qrdr=-\frac{1}{a}\int_0^\infty \sin qrde^{-\alpha r}$$
$$=-\frac{1}{\alpha}(\sin qre^{-\alpha r}\Big|_0^\infty-q\int_0^\infty e^{-\alpha r}\cos qrdr)=-\frac{q}{\alpha^2}\int_0^\infty \cos qrde^{-\alpha r}$$
$$=-\frac{q}{\alpha^2}(\cos qre^{-\alpha r}\Big|_0^\infty+q\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qrdr)=-\frac{q}{\alpha^2}(-1+qI)$$

即:

$$I=\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin qrdr=\frac{q}{\alpha^2+q^2}$$
$$f(\theta)=-\frac{2m\chi}{\hbar^2 q}\frac{q}{\alpha^2+q^2}$$
$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{4m^2\chi^2}{\hbar^4}\frac{1}{(\alpha^2+q^2)^2}$$

（4）点电荷的Coulomb势是一个长程势（力程为∞）。严格说来，点电荷的Coulomb散射不能用Born近似来处理。但我们不妨把点电荷的Coulomb势

$$V(r)=\frac{b}{r}$$

看成Yukawa势

$$V(r) = \frac{be^{-\alpha r}}{r}$$

的长程极限。

【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。这可以直接利用上题结果。

解:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} V(r) r \sin qr dr = -\frac{2mb}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} e^{-\alpha r}\sin qr dr$$
$$= -\frac{2mb}{\hbar^2 q}\frac{q}{\alpha^2+q^2}$$

取极限$\alpha \to 0$，有:

$$f(\theta) = -\lim_{\alpha\to 0}\frac{2mb}{\hbar^2 q}\frac{q}{\alpha^2+q^2} = -\frac{2mb}{\hbar^2 w^2} = -\frac{mb}{2\hbar^2 k^2 \sin^2\frac{\theta}{2}}$$

(5)$V(r) = V_0 e^{-\alpha r} \quad \alpha > 0$

解:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} V(r) r \sin qr dr \qquad q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$
$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} e^{-\alpha r} r \sin qr dr$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha r} r \sin qr dr = \frac{2\alpha q}{(\alpha^2+q^2)^2} \qquad \text{见数学补充}$$

$$f(\theta) = -\frac{4mV_0\alpha}{\hbar^2(\alpha^2+q^2)^2}$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{16m^2V_0^2}{\hbar^4}\frac{\alpha^2}{(\alpha^2+q^2)^4}$$

(6)$V(r) = \frac{\alpha}{r^2}$

解:

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r) r \sin qr dr \qquad q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \\
&= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \frac{\sin qr}{r} dr
\end{aligned}$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin qr}{r} dr = \frac{\pi}{2} \qquad \text{见数学补充}$$

$$f(\theta) = -\frac{\pi\alpha}{\hbar^2 q}$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\pi^2 m^2 \alpha^2}{\hbar^4 q^2}$$

(7)$V(r) = b\delta(r-a)$

解:

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r) r \sin qr dr \qquad q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \\
f(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty b \sin qr \delta(r-a) dr = -\frac{2mb}{\hbar^2 q} a \sin qa \\
&= -\frac{2mba^2}{\hbar^2}\frac{\sin(2ak\sin\frac{\theta}{2})}{2ak\sin\frac{\theta}{2}} \\
\sigma(\theta) &= \frac{4m^2a^2b^2}{\hbar^4 q^2}\sin^2 qa
\end{aligned}$$

Appendix A

曾谨言《量子力学》卷I练习详解

使用的书

- 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。

A.1 量子力学的诞生

A.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：$\lambda=\sqrt{\frac{150}{E}}\mathring{A}$

【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？【都不动了，还观测个毛？】

A.2 波函数与Schrödinger方程

A.2.1 波函数的统计诠释

A.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$\psi(x) = A\sin\dfrac{\pi x}{a}$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）

$$\begin{aligned}
\int_0^a \psi^2(x)dx &= \int_0^a A^2\sin^2\frac{\pi x}{a}dx && \cos 2x = 1 - 2\sin^2 x \\
&= A^2\int_0^a (\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\frac{2\pi x}{a})dx && \text{经典的处理方法} \\
&= A^2[\frac{x}{2}\Big|_0^a - \frac{a}{4\pi}\int_0^a \cos\frac{2\pi x}{a}d\frac{2\pi x}{a}] && \text{降次} \\
&= A^2[\frac{a}{2} - \frac{a}{4\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}\Big|_0^a] \\
&= \frac{a}{2}A^2 = 1
\end{aligned}$$

即：$A=\sqrt{\frac{2}{a}}$

（2）

$$\psi^2(x)=A^2x^2(a-x)^2=A^2(a^2x^2-2ax^2+x^4)$$
$$\int_0^a\psi^2(x)dx=1$$
$$A^2(\frac{a^2}{3}x^3-\frac{a}{2}x^4+\frac{1}{5}x^5)\Big|_0^a=1$$
$$A^2\frac{a^5}{30}=1\qquad A=a\sqrt{30a}$$

$\psi^2(x)$的最大处x为粒子出现概率最大地方，有：

$$[\psi^2(x)]'=A^2(2a^2x-6ax^2+4x^3)=0$$
$$A^2x(2x-a)(x-a)=0$$

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：$A=(\frac{\alpha^2}{\pi})^4$

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。$|\psi(x)|^2 dxdydz$ 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$[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dydz] \cdot dx$就是要求对$y, z$全空间积分的值。
【解】

$$[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dydz] \cdot dx$$

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）

$$[\int_0^{2\pi} \int_{-1}^{+1} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 d\varphi d\cos\theta] r^2 dr$$

（b）

$$[\int_0^{\infty} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr] \cdot \sin\theta d\theta d\varphi$$

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）。

A.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$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}$

【注：表示平均值有两种形式吧。一种，$\langle x\rangle$；另一种，$\bar{x}$。】

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_0^a \psi(x)x\psi^8(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx && \text{换元}\\
&= \frac{2}{a}(\frac{a}{\pi})^2\int_0^\pi x'\sin^2 x'dx' && \text{降次}\cos 2x'=\cos^2 x'-\sin^2 x'\\
&= \frac{2}{a}(\frac{a}{\pi})^2\int_0^\pi \frac{1}{2}x'(1-\cos 2x')dx' && \sin^2 x'=\frac{1}{2}(1-\cos 2x')\\
&= \frac{2}{a}(\frac{a}{\pi})^2(\frac{1}{2}\int_0^\pi x'dx'-\frac{1}{2}\int_0^\pi x'\cos 2x'dx')\\
&= \frac{2}{a}(\frac{a}{\pi})^2\cdot\frac{\pi^2}{4}=\frac{1}{2}a
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_0^a \psi(x)\hat{p}\psi^*(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\sin\frac{\pi x}{a}dx\\
&= -i\hbar\frac{2}{a}\cdot\frac{\pi}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}dx\\
&= -2i\hbar\frac{\pi}{a^2}\cdot\frac{a}{4\pi}\int_0^{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}d\frac{2\pi}{a}x=0
\end{aligned}$$

【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：$\int_0^\pi x'\cos 2x'dx'=\frac{1}{2}\int_0^\pi x'd\sin 2x'=\frac{1}{2}(x'\cdot\sin 2x'|_0^\pi-\int_0^\pi \sin 2x'dx')=0$

A.2.2 Schrödinger方程

A.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:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int \psi_1^*\psi_2 d^3x &= \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\int \nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2)d^3x \\ &= \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\oint d\vec{S}\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2) \\ &= 0\end{aligned}$$

【评】d^3x一种体积元的表示方法吧。最后那个积分【不懂】诶!

A.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】

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

令$V'(\vec{r})=\vec{r}+C, E'=E+C$，有：

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

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

仍为：$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})]\psi=E\psi$，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，$E=\bar{T}+\bar{V}, \bar{T}\geq 0, \bar{V}\geq V_{min}$

【分析】①$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})]|\psi\rangle=E|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})]|\psi\rangle=\langle\psi|E|\psi\rangle=E\langle\psi|\psi\rangle \Rightarrow E=\bar{T}+\bar{V}$严格点应是：$E_n=\bar{T}_n+\bar{V}_n$；②$\bar{T}\geq 0$，动能是永远大于等于零的；③$\bar{V}\geq V_{min}$，平均值大于最小值，这也好理解。

【证明】

$$E=\bar{T}+\bar{V}$$

因为，$\bar{T}\geq 0, \bar{V}\geq V_{min}$，所以

$$\bar{E}\geq V_{min}$$

【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$\tau$。

【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！】

A.2.3 态叠加原理

A.2.3.1 量子态及其表象

p53

练习1、平面单色波$\psi_{p_0}(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ip_0x}{\hbar}}$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$\bar{\vec{r}}$。

A.3 一维定态问题

A.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。

A.3.2 方势阱

p66

练习1、【指导3.1】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。
【见《指导》p52（3.2）】
【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:

$$E=\frac{n_1^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\frac{n_2^2\pi^2\hbar^2}{2mb^2}+\frac{n_3^2\pi^2\hbar^2}{2mc^2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\Big(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\Big)$$

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z)&=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_2\pi y}{b}\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\frac{n_3\pi z}{c}\\&=\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{b}\sin\frac{n_3\pi z}{c}\end{aligned}$$

$$n_1,n_2,n_3=1,2,3\cdots \qquad \text{（它们彼此无关）}$$

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：

$$N^2=\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E \qquad 2NdN=\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}dE$$

$$\frac{dN}{dE}=\frac{mL^2}{\hbar^2\pi^2}\frac{1}{N} \qquad \text{（想办法消去N，用E表示）}$$

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：

$$\frac{4}{\pi}N=\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E \qquad dN=\frac{L^2}{2\pi\hbar^2}mdE$$

$$\rho(E)=\frac{L^2}{2\pi\hbar^2}m(\text{不依赖于E})$$

（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

$$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<\frac{a}{2}\\ \infty, & |x|\rangle\frac{a}{2}\end{cases}$$

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）】

A.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$\bar{x} = 0, \bar{V} = \frac{E_n}{2}$。
【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，

$$\bar{p} = 0, \qquad \bar{T} = \overline{\frac{p^2}{2m}} = \frac{E_n}{2}$$

练习3、在ψ_n态下，计算$\delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}, \delta p_x = \sqrt{\overline{(p_x-\bar{p}_x)^2}}, \delta x \cdot \delta p_x =$?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，

$$V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 x^2 - q\varepsilon x$$

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：

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{n=0}^{\infty}(\frac{1}{\sqrt{2}})^n\psi_n(x)e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}$$

A.4 力学量用算符表达

A.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】

$$
\begin{aligned}
[\hat{p}_x, f(x)]\psi &= \hat{p}_x f(x)\psi - f(x)\hat{p}_x\psi \\
&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(f(x)\psi) + i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi \\
&= -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi - i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi + i\hbar f(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi \\
&= -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi
\end{aligned}
$$

【得证】

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】

$$
\begin{aligned}
\hat{l}_z\hat{l}_\pm &= \hat{l}_z(\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y) = \hat{l}_z\hat{l}_x \pm i\hat{l}_z\hat{l}_y \\
[\hat{l}_z, \hat{l}_x] &= \hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z = i\hbar\hat{l}_y \qquad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = \hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y = i\hbar\hat{l}_x \\
\hat{l}_z\hat{l}_\pm &= i\hbar\hat{l}_y + \hat{l}_x\hat{l}_z \pm i(\hat{l}_y\hat{l}_z - i\hbar\hat{l}_x) = \hat{l}_x\hat{l}_z \pm i\hat{l}_y\hat{l}_z \pm \hat{l}_x\hbar + i\hat{l}_y\hbar \\
&= (\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y)\hat{l}_z \pm (\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y)\hbar = \hat{l}_\pm\hat{l}_z \pm \hat{l}_\pm\hbar \\
&= \hat{l}_\pm(\hat{l}_z \pm \hbar)
\end{aligned}
$$

【得证】【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）

$$[l_x, r^2] = l_x r^2 - r^2 l_x$$

$$=l_x(x^2+y^2+z^2)-(x^2+y^2+z^2)l_x$$
$$=[l_x,x^2]+[l_x,y^2]+[l_x,z^2]$$

①

$$[l_x,x^2]=l_xx^2-x^2l_x=l_xxx-xxl_x$$
$$[l_x,x]=l_xx-xl_x=0$$
$$[l_x,x^2]=xl_xx-xxl_x=x(l_xx-xl_x)=0$$

同理:

$$[l_y,y^2]=[l_z,z^2]=0$$

②

$$[l_x,y^2]=l_xy^2-y^2l_x=l_xyy-yyl_x$$
$$[l_x,y]=l_xy-yl_x=i\hbar z \quad l_xyy=yl_xy+i\hbar zy$$
$$[l_x,y^2]=yl_xy+i\hbar zy-yyl_x=y(l_xy-yl_x)+i\hbar zy=2i\hbar zy$$

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）

$$\begin{aligned}[\hat{l}_x,\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}}]&=[\hat{l}_x,x\hat{p}_x+y\hat{p}_y+z\hat{p}_z]\\&=[\hat{l}_x,x\hat{p}_x]+[\hat{l}_x,y\hat{p}_y]+[\hat{l}_x,z\hat{p}_z]\\&=x[\hat{l}_x,\hat{p}_x]+[\hat{l}_x,x]\hat{p}_x+y[\hat{l}_x,\hat{p}_y]+[\hat{l}_x,y]\hat{p}_y+z[\hat{l}_x,\hat{p}_z]+[\hat{l}_x,z]\hat{p}_z\end{aligned}$$

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：

$$[\hat{l}_x,\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}}]=0+0+i\hbar yp_z+i\hbar zp_y-i\hbar zp_y-i\hbar yp_z=0$$

【得证】

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）

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

【得证】

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】

$$\begin{aligned}[p_x^2,f(x)]\psi&=p_x^2f(x)\psi-f(x)p_x^2\psi\\&=[p_xp_x,f(x)]\psi\\&=p_x[p_x,f(x)]\psi+[p_x,f(x)]\psi\qquad[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\psi) - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi \qquad \text{（利用练习1）}\\
&= -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + (-i\hbar)^2\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\psi - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi\\
&= -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi - i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x\psi\\
&= (-\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x)\psi
\end{aligned}$$

即：

$$[p_x^2, f(x)] = -\hbar^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}p_x$$

【得证】

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$(\theta,\varphi)$，所以$[\vec{l}, v(r)] = 0$。【得证】【这样的证明貌似有问题！】【评】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】

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

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})$$
$$= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\vec{l}^2}{2mr^2}$$

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。【得证】【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】

$$\begin{aligned}
(\varphi^*, \hat{p}_x\psi^*) &= \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\hat{p}_x\psi^* dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\frac{\partial}{\partial x}\psi^* dx && \text{分部积分}\\
&= -i\hbar(\varphi\psi^*\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\varphi dx) && \text{波函数在无限远处为0}\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(-\hat{p}_x)\varphi dx\\
&= (\psi, -\hat{p}_x\varphi)
\end{aligned}$$

即：

$$\widetilde{\hat{p}}_x = -\hat{p}_x$$

【得证】

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：

$$\widetilde{\hat{A}\hat{B}} = \widetilde{\hat{B}}\widetilde{\hat{A}}$$

【得证】

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】

$$\hat{p}_x^\dagger = \widetilde{\hat{p}}_x^* = (-\hat{p}_x)^* = \hat{p}_x \qquad \text{练习}10, \widetilde{\hat{p}}_x = -\hat{p}_x$$

【得证】

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，$\widetilde{\hat{A}\hat{B}} = \widetilde{\hat{B}}\widetilde{\hat{A}}$，有：

$$(\hat{A}\widetilde{\hat{B}\hat{C}}\cdots) = \widetilde{\hat{B}\hat{C}\cdots}\widetilde{\hat{A}} = \widetilde{\hat{A}\cdots}\widetilde{\hat{B}}\widetilde{\hat{A}} = \cdots\widetilde{\hat{C}}\widetilde{\hat{B}}\widetilde{\hat{A}}$$

由$\hat{O}^\dagger = \widetilde{\hat{O}}^*$及（1），有；

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots)^\dagger = (\hat{A}\widetilde{\hat{B}\hat{C}}\cdots)^* = (\cdots\widetilde{\hat{C}}\widetilde{\hat{B}}\widetilde{\hat{A}})^* = \cdots\widetilde{\hat{C}}^*\widetilde{\hat{B}}^*\widetilde{\hat{A}}^* = \cdots\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{C}^\dagger$$

【得证】

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。

$$\begin{aligned}(\psi, \hat{T}\varphi) &= (\psi, \frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi) = \frac{1}{2m}(\psi, \hat{p}\hat{p}\varphi) = \frac{1}{2m}(\hat{p}\psi, \hat{p}\varphi) \\ &= \frac{1}{2m}(\hat{p}^2\psi, \varphi) = (\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi, \varphi) = (\hat{T}\psi, \varphi)\end{aligned}$$

即$\hat{T}$为厄米算符。

$$\begin{aligned}(\psi, \hat{l}_x\varphi) &= (\psi, (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)\varphi) = y(\psi, \hat{p}_z\varphi) - z(\psi, \hat{p}_z\varphi) \\ &= y(\hat{p}_z\psi, \varphi) - z(\hat{p}_z\psi, \varphi) = ((y\hat{p}_z - z\hat{p}_z)\psi, \varphi) = (\hat{l}_x\psi, \varphi)\end{aligned}$$

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。

【得证】

练习15、（1）设$\hat{A}$和$\hat{B}$为厄米算符，则$\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})$及$\frac{1}{2i}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})$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$\hat{O}_{+}=\frac{1}{2}(\hat{O}+\hat{O}^{\dagger}),\hat{O}_{-}=\frac{1}{2i}(\hat{O}-\hat{O}^{\dagger})$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

$$\hat{O}=\hat{O}_{+}+i\hat{O}_{-}$$

【得证】

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

$$\overline{F^\dagger F} = (\psi, F^\dagger F\psi) \geq 0$$

并求等号成立的条件。

A.4.2 共同本征函数

A.4.2.1 对易力学量完全集

练习1、对于一维自由粒子，$\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$是否构成一个CSCO？（见4.2节，例3）。$\hat{H} = \dfrac{1}{2m}\hat{p}_x^2$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$\pm 1$，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$\pm 1$。

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。

A.5 力学量随时间的演化与对称性

A.6 中心力场

A.6.1 中心力场中粒子运动的一般性质

A.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

$$\vec{T} = \frac{\dot{\vec{p}_1}}{2m_1} + \frac{\dot{\vec{p}_2}}{2m_2} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu}$$

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。

$$\vec{P} = -i\hbar\nabla_R, \qquad \vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} + \vec{r} \times \vec{p}, \qquad \vec{p} = -i\hbar\nabla$$

A.6.2 Hellmann-Feynman定理

A.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。

A.6.3 二维中心力场

A.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？

A.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$\nu\leq-1$和$\nu\geq-1$两种情况。

A.7 粒子在电磁场中的运动

A.8 表象变换与量子力学的矩阵形式

A.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。

A.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

$$H_{x'x''} = \langle x'|H|x''\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\delta(x'-x'') + V(x')\delta(x'-x'')$$

$$H_{p'p''} = \frac{p'^2}{2m}\delta(p'-p'') + V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'})\delta(p'-p'')$$

A.9 自旋

A.9.1 电子自旋

A.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$\sigma_z$，有：

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i\sigma_z^2$$

由$\sigma_z^2 = 1$，有：

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i$$

【得证】

练习2、【曾题集6.19】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】

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{A}=\sigma_x A_x+\sigma_y A_y+\sigma_z A_z \qquad \vec{\sigma}\cdot\vec{B}=\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z$$

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) &= (\sigma_x A_x+\sigma_y A_y+\sigma_z A_z)(\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z)\\ &= \sigma_x A_x\sigma_x B_x+\sigma_x A_x\sigma_y B_y+\sigma_x A_x\sigma_z B_z+\sigma_y A_y\sigma_x B_x\\ &+ \sigma_y A_y\sigma_y B_y+\sigma_y A_y\sigma_z B_z+\sigma_z A_z\sigma_x B_x+\sigma_z A_z\sigma_y B_y\\ &+ \sigma_z A_z\sigma_z B_z\\ &= A_xB_x+i\sigma_z A_xB_y-i\sigma_y A_xB_z-i\sigma_z A_yB_x+A_yB_y+i\sigma_x A_yB_z\\ &+ i\sigma_y A_zB_x-i\sigma_y A_zB_y+A_zB_z\\ &= \vec{A}\cdot\vec{B}+i\sigma\cdot(\vec{A}\times\vec{B})\end{aligned}$$

【得证】【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

$$(1)\qquad (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2=p^2 \qquad \vec{p}\text{为动量算符}$$

$$(2)\qquad (\vec{\sigma}\cdot\vec{l})^2=l^2-\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{l} \qquad \vec{l}\text{为轨道角动量算符}$$

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“ ^ ”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：

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}(\lambda\psi)=l(l+1)\hbar^2\psi-\hbar\lambda\psi$$

$$\lambda^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi - \hbar\lambda\psi$$
$$\lambda^2 + \hbar\lambda - l(l+1)\hbar^2 = 0$$

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$-(l+1)\hbar, l = 0, 1, 2, \cdots$。
【得证】【评】曾书上的证明将$\hbar$视为1，这能随便视为1的吗？也不知道这东西的物理意义？

练习4、【曾题集6.21】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：

$$\vec{\sigma}(\vec{\sigma}\cdot\vec{A}) - \vec{A} = \vec{A} - (\vec{\sigma}\cdot\vec{A})\vec{\sigma} = i\vec{A}\times\vec{\sigma}$$

【得证】

练习5、令$\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$，证明：

$(1)\sigma_\pm^2 = 0$

$(2)[\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z$

$(3)[\sigma_z, \sigma_\pm] = \pm 2\sigma_\pm$　　　即$\sigma_z\sigma_\pm = \sigma_\pm(\sigma_z \pm 2)$

【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）

$$
\begin{aligned}
[\sigma_z, \sigma_\pm] &= [\sigma_z, \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)] = \frac{1}{2}[\sigma_z, \sigma_x \pm i\sigma_y] \\
&= \frac{1}{2}[\sigma_z, \sigma_x] \pm \frac{1}{2}i[\sigma_z, \sigma_y] = \frac{1}{2}2i\sigma_y \pm \frac{1}{2}i(-2i\sigma_x) \\
&= i\sigma_y \pm \sigma_x = \pm(\sigma_x \pm i\sigma_y) = \pm 2\sigma_\pm
\end{aligned}
$$

【得证】

【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、【曾题集6.22】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:

$$e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{A}}=\cos A+i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{A}}{A}\sin A$$

【得证】【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$\sigma_z$表象中

$$\sigma_+=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\qquad\sigma_-=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$$

证明:

$$\sigma_x\alpha=\beta\qquad\qquad\sigma_x\beta=\alpha$$

$$\sigma_y\alpha = i\beta \qquad \sigma_y\beta = -i\alpha$$
$$\sigma_+\alpha = 0 \qquad \sigma_+\beta = \alpha$$
$$\sigma_-\alpha = \beta \qquad \sigma_-\beta = 0$$

【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

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta$$

$$\sigma_x\beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha$$

$$\sigma_y\alpha = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i\beta$$

$$\sigma_y\beta = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} = -i\alpha$$

$$\sigma_+\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\sigma_+\beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha$$
$$\sigma_-\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta$$
$$\sigma_-\beta = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

【得证】

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$P_-^2 = P_-$

$$P_+P_- = \frac{1}{4}(1+\sigma_z)(1-\sigma_z) = \frac{1}{4}(1-\sigma_z^2) = 0$$

$$\text{同理} P_+P_- = 0$$
$$P_+P_- = P_-P_+ = 0$$

（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）

$$P_+\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$P_-\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix} = b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

【得证】

练习9、【曾题集6.20】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】

$$\vec{\sigma} = \sigma_x\vec{i} + \sigma_y\vec{j} + \sigma_z\vec{k} \qquad \vec{A} = A_x\vec{i} + A_y\vec{j} + A_z\vec{k}$$

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{A} = \sigma_xA_x + \sigma_yA_y + \sigma_zA_z$$

$$
\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} A_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} A_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} A_z \\
&= \begin{pmatrix} 0 & A_x \\ A_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -iA_y \\ iA_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A_z & 0 \\ 0 & -A_z \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} A_z & A_x - iA_y \\ A_x + iA_y & -A_z \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$$Tr(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) = 0$$

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、【电子答案8.14】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、【电子答案8.15】证明$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$及$I$（$2 \times 2$单位矩阵）构成$2 \times 2$矩阵的完全集，即任何$2 \times 2$矩阵均可用它们的线性组合来表达。任何$2 \times 2$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$A=0$。

A.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$l_\pm=l_x\pm il_y,\sigma_\pm=\dfrac{1}{2}(\sigma_x\pm i\sigma_y)$。

【证明】

$$\begin{aligned}\sigma_+ l_- &= \frac{1}{2}(\sigma_x+i\sigma_y)(l_x-il_y)\\ &= \frac{1}{2}(\sigma_x l_x-i\sigma_x l_y+i\sigma_y l_x+\sigma_y l_y)\\ \sigma_- l_+ &= \frac{1}{2}(\sigma_x-i\sigma_y)(l_x+il_y)\\ &= \frac{1}{2}(\sigma_x l_x+i\sigma_x l_y-i\sigma_y l_x+\sigma_y l_y)\\ \sigma_+ l_- +\sigma_- l_+ = \sigma_x l_x+\sigma_y l_y\end{aligned}$$

即：$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}=\sigma_z l_z+\sigma_+ l_- +\sigma_- l_+$

【得证】【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：$\sum_{m=-l}^{l} m^2 = \frac{1}{3}l(l+1)(2l+1)$

A.9.3 二电子体系的自旋态

A.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】

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 &= \sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z} \\
(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)^2 &= (\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z})(\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}) \\
&= \sigma_{1x}^2\sigma_{2x}^2 + \sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{1z}\sigma_{2z} + \sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}^2\sigma_{2y}^2 \\
&+ \sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{1z}\sigma_{2z} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}\sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}^2\sigma_{2z}^2
\end{aligned}$$

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：$-3, 1$。
【得证】

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:

$$\vec{S}^2\chi_{1M_S}=\frac{3\hbar^2}{2}\chi_{1M_S}+\frac{\hbar^2}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1M_S}$$

$$2\hbar^2\chi_{1M_S}=\frac{3\hbar^2}{2}\chi_{1M_S}+\frac{\hbar^2}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1M_S}$$
$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S}$$
$$\vec{S}^2\chi_{00}=\frac{3\hbar^2}{2}\chi_{00}+\frac{\hbar^2}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{00}$$
$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{00}=-3\chi_{00}$$

【得证】

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：

$$\begin{aligned}
P_{12}\chi_{1M_S} &= \frac{1}{2}\chi_{1M_S} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_z\chi_{1M_S} \\
&= \frac{1}{2}\chi_{1M_S} + \frac{1}{2}\chi_{1M_S} = \chi_{1M_S} \\
P_{12}\chi_{00} &= \frac{1}{2}\chi_{00} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2\chi_{00} \\
&= \frac{1}{2}\chi_{00} - \frac{3}{2}\chi_{00} = -\chi_{00} \\
P_{12}^2 &= \frac{1}{4}[1 + 2\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)^2] \\
&= \frac{1}{4}[1 + 2\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + (3 - 2\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)] \\
&= 1 \\
\vec{S}^2 - 1 &= \frac{1}{2}(3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) - 1 = \frac{1}{2}(1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) = P_{12}
\end{aligned}$$

【得证】

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$\dfrac{\hbar}{2}$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

$$\begin{aligned}\langle\chi_{00}|(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})|\chi_{00}\rangle&=-\langle\chi_{00}|(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{b})|\chi_{00}\rangle\\&=-(\vec{a}\cdot\vec{b})-i\langle\chi_{00}|\vec{\sigma}_1|\chi_{00}\rangle\cdot(\vec{a}\times\vec{b})=-(\vec{a}\cdot\vec{b})\end{aligned}$$

A.10 力学量本征值的代数解法

A.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$(n=0), \Delta x\cdot\Delta p=\dfrac{\hbar}{2}$

【证明】

（1）

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

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

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

$\hat{p}=i(\dfrac{\hbar m\omega}{2})^{\frac{1}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})$ 同理：$\langle n|\hat{p}|n\rangle=0$

（2）

$$\begin{aligned}\hat{x}^2&=[\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger+\hat{a})]^2=\frac{1}{2}(\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a})\\&=\frac{1}{2}(\hat{a}^2+(\hat{a}^\dagger)^2+2\hat{N}+1)\end{aligned}$$

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle=\frac{1}{2}\langle n|\hat{a}^2|\rangle+\frac{1}{2}\langle n|(\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle+\frac{1}{2}\langle n|2\hat{N}|n\rangle+\langle n|n\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}(\sqrt{n-1}\langle n|\hat{a}|n-1\rangle + \frac{1}{2}\sqrt{n+1}\langle n|\hat{a}^\dagger|n+1\rangle + 2n+1) \\
&= \frac{1}{2}(2n+1) = (n+\frac{1}{2})
\end{aligned}
$$

（3）乱搞。前面无量纲。现在呢？又有量纲了。

$$(\Delta x)^2 = \overline{x^2} - (\bar{x})^2$$

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：$n - \dfrac{1}{3}$

A.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

$$\langle jmj - m|00\rangle = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$$

A.11 束缚定态微扰论

A.12 量子跃迁

A.13 散射理论

A.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

$$\lim_{\alpha\to\infty} e^{i\alpha x} = 2i\delta(x) \quad (x \geq 0)$$

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:

$$\sigma_k = \int |f(\theta,\varphi)|^2 \, d\Omega = \frac{4\pi}{k} Im f(0)$$

A.14 其他近似方法