量子力学作业-第七周

题目 1

求证若 $\hat{U}$ 是幺正算符，则 $\hat{U}^{\dagger}$ 和 $\hat{U}^{\mathrm{T}}$ 也是幺正算符。

证明. $\hat{U}$ 是幺正算符时，注意到 $\hat{U}^{\dagger}\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^{\dagger}=I$，因此

$$(\psi,\varphi)=\left(\hat{U}\psi,\hat{U}\varphi\right)=\left(\psi,\hat{U}^{\dagger}\hat{U}\varphi\right)=\left(\psi,\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\varphi\right)=\left(\hat{U}^{\dagger}\psi,\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\varphi\right)$$

故 $\hat{U}^{\dagger}$ 也是幺正算符，对 $\hat{U}^{\dagger}\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^{\dagger}=I$ 两边取复共轭得

$$\hat{U}^{T}\hat{U}^{*}=\hat{U}^{*}\hat{U}^{T}=I$$

因此

$$(\psi,\varphi)=\left(\hat{U}^{T}\hat{U}^{*}\psi,\varphi\right)=\left(\hat{U}^{T}\psi,\hat{U}^{T}\varphi\right)$$

从而 $\hat{U}^{\mathrm{T}}$ 也是幺正算符，进一步地，$\hat{U}^{*}=\left(\hat{U}^{\dagger}\right)^{T}$ 也是幺正算符。

题目 2

(曾谨言 1.7) 处于势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中的粒子, 在坐标表象中的能量本征方程表示成

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

试在动量表象中写出相应的能量本征方程。

解答. 考虑傅里叶幺正变换对哈密顿算符的变换

$$
\begin{aligned}
\hat{U}\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]\hat{U}^{-1} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d\boldsymbol{r}e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d\boldsymbol{p}'e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}} \\
&= -\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\hbar^2}{2m}\int d\boldsymbol{r}e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\nabla^2\int d\boldsymbol{p}'e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\boldsymbol{r}e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\boldsymbol{r}\cdot\nabla)^n V(0)}{n!}\int d\boldsymbol{p}'e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\hbar^2}{2m}\int d\boldsymbol{r}e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\int\frac{\boldsymbol{p}'^2}{\hbar^2}d\boldsymbol{p}'e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left\{\left[\int d\boldsymbol{r}e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{r}\int d\boldsymbol{p}'e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}}\right]\cdot\nabla\right\}^n V(0) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\hbar^2}{2m}\int d\boldsymbol{p}'\frac{\boldsymbol{p}'^2}{\hbar^2}\int d\boldsymbol{r}e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left\{\left[i\hbar\nabla_{\boldsymbol{p}}\cdot\int d\boldsymbol{r}\int d\boldsymbol{p}'e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}}\right]\cdot\nabla\right\}^n V(0) \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\hbar^2}{2m}\int d\boldsymbol{p}\frac{\boldsymbol{p}'^2}{\hbar^2}(2\pi\hbar)^3\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left\{\left[i\hbar\nabla_{\boldsymbol{p}}\cdot\int d\boldsymbol{p}'\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\right]\cdot\nabla\right\}^n V(0) \\
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}1_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left\{\left[i\hbar\nabla_{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{p}\right]\cdot\nabla\right\}^n V(0) \\
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}1_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}+V\left(i\hbar\nabla_{\boldsymbol{p}}\cdot 1_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}\right)
\end{aligned}
$$

于是在动量表象下的能量本征方程为

$$
\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V\left(i\hbar\nabla_{\boldsymbol{p}}\right)\right]\psi(\boldsymbol{p})=E\psi(\boldsymbol{p})
$$

题目 3

求角动量算符 $\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{x}},\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{y}},\hat{\mathrm{L}}_{z}$ 在坐标表象和动量表象的具体表达式，并检验它们的对易关系是否改变。

解答. 由于

$$
\begin{cases}
\hat{U}\hat{x}\hat{U}^{-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\\
\hat{U}\hat{y}\hat{U}^{-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}\\
\hat{U}\hat{z}\hat{U}^{-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}
\end{cases},
\begin{cases}
\hat{U}\hat{p}_x\hat{U}^{-1}=p_x\\
\hat{U}\hat{p}_y\hat{U}^{-1}=p_y\\
\hat{U}\hat{p}_z\hat{U}^{-1}=p_z
\end{cases}
$$

因此

$$
\begin{aligned}
\hat{U}\hat{L}_x\hat{U}^{-1}&=\hat{U}\left(y\hat{p}_z-z\hat{p}_y\right)\hat{U}^{-1}=\hat{U}y\hat{p}_z\hat{U}^{-1}-\hat{U}z\hat{p}_y\hat{U}^{-1}\\
&=\hat{U}\hat{y}\hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{p}_z\hat{U}^{-1}-\hat{U}\hat{z}\hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{p}_y\hat{U}^{-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}p_z-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}p_y
\end{aligned}
$$

同理可得

$$
\hat{U}\hat{L}_y\hat{U}^{-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}p_x-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}p_z
$$

$$
\hat{U}\hat{L}_z\hat{U}^{-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}p_y-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}p_x
$$

记 $\hat{x}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x},\hat{y}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y},\hat{z}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}$，则

$$\begin{cases}\hat{L}_x=\hat{y}p_z-\hat{z}p_y\\ \hat{L}_y=\hat{z}p_x-\hat{x}p_z\\ \hat{L}_z=\hat{x}p_y-\hat{y}p_x\end{cases}$$

对易关系

$$\begin{cases}[\hat{x},p_x]=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}p_x-p_xi\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}=i\hbar\\ [\hat{y},p_y]=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}p_y-p_yi\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}=i\hbar\\ [\hat{z},p_z]=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}p_z-p_zi\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}=i\hbar\end{cases}$$

故

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=[\hat{y}p_z-\hat{z}p_y,\hat{z}p_x-\hat{x}p_z]=[\hat{y}p_z,\hat{z}p_x]+[\hat{z}p_y,\hat{x}p_z]-[\hat{y}p_z,\hat{x}p_z]-[\hat{z}p_y,\hat{z}p_x]$$

$$=p_x\left[\hat{y}p_z,\hat{z}\right]+p_y\left[\hat{z},\hat{x}p_z\right]=-i\hbar p_x\hat{y}+i\hbar p_y\hat{x}=i\hbar\hat{L}_z$$

同理可得

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

题目 4

求证：宇称算符 $\hat{P}$ 既是幺正算符，又是厄密算符。

解答. 宇称算符满足

$$\hat{P}\psi\left(\boldsymbol{r}\right)=\psi\left(-\boldsymbol{r}\right)$$

于是

$$\begin{aligned}\int_{V_{\boldsymbol{r}}}\left[\hat{P}\psi\left(\boldsymbol{r}\right)\right]^*\hat{P}\psi\left(\boldsymbol{r}\right)d\boldsymbol{r}&=\int_{V_{\boldsymbol{r}}}\psi^*\left(-\boldsymbol{r}\right)\psi\left(-\boldsymbol{r}\right)d\boldsymbol{r}\\ \xlongequal{\boldsymbol{r}'=-\boldsymbol{r}}\int_{V_{\boldsymbol{r}}}\psi^*\left(\boldsymbol{r}'\right)\psi\left(\boldsymbol{r}'\right)d\left(-\boldsymbol{r}'\right)&=\int_{V_{\boldsymbol{r}'}}\psi^*\left(\boldsymbol{r}'\right)\psi\left(\boldsymbol{r}'\right)d\boldsymbol{r}'\end{aligned}$$

另一方面

$$\begin{aligned}\int_{V_{\boldsymbol{r}}}\left[\hat{P}\psi\left(\boldsymbol{r}\right)\right]^*\psi\left(\boldsymbol{r}\right)d\boldsymbol{r}&=\int_{V_{\boldsymbol{r}}}\psi^*\left(-\boldsymbol{r}\right)\psi\left(\boldsymbol{r}\right)d\boldsymbol{r}\\ \xlongequal{\boldsymbol{r}'=-\boldsymbol{r}}\int_{V_{\boldsymbol{r}}}\psi^*\left(\boldsymbol{r}'\right)\psi\left(-\boldsymbol{r}'\right)d\left(-\boldsymbol{r}'\right)&=\int_{V_{\boldsymbol{r}'}}\psi^*\left(\boldsymbol{r}'\right)\hat{P}\psi\left(\boldsymbol{r}'\right)d\boldsymbol{r}'\end{aligned}$$

对于全空间来说，$V_{\boldsymbol{r}}=V_{\boldsymbol{r}'}$，因此宇称算符是幺正算符，因此宇称算符 $\hat{P}$ 既是幺正算符，又是厄密算符。

题目 5

(曾谨言 4.2) 设体系有两个粒子, 每个粒子可处于三个单粒子态 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ 中的任何一个态. 试求体系可能态的数目, 分三种情况讨论:

(a) 两个全同 Bose 子;

(b) 两个全同 Fermi 子;

(c) 两个不同粒子.

解答. 不考虑粒子特性时，设两个粒子分别为粒子 1 和粒子 2，体系可能态有

$$\psi_1(1)\psi_1(2), \psi_1(1)\psi_2(2), \psi_1(1)\psi_3(2)$$

$$\psi_2(1)\psi_1(2), \psi_2(1)\psi_2(2), \psi_2(1)\psi_3(2)$$

$$\psi_3(1)\psi_1(2), \psi_3(1)\psi_2(2), \psi_3(1)\psi_3(2)$$

(a) 对于两个全同 Bose 子，系统波函数应该交换对称，可能的态有

$$\Psi_1 = \psi_1(1)\psi_1(2)$$

$$\Psi_2 = \psi_2(1)\psi_2(2)$$

$$\Psi_3 = \psi_3(1)\psi_3(2)$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_2(1)\psi_1(2)]$$

$$\Psi_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(1)\psi_3(2) + \psi_3(1)\psi_1(2)]$$

$$\Psi_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_2(1)\psi_3(2) + \psi_3(1)\psi_2(2)]$$

因此，体系可能态的数目为 6；

(2) 对于两个全同 Fermi 子，系统波函数应该交换反对称，可能的态有

$$\Psi_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_2(1)\psi_1(2)]$$

$$\Psi_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(1)\psi_3(2) - \psi_3(1)\psi_1(2)]$$

$$\Psi_9 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_2(1)\psi_3(2) - \psi_3(1)\psi_2(2)]$$

因此，体系可能态的数目为 3；

(3) 对于两个不同粒子，波函数没有以上限制，可能的态有

$$\Psi_{ij} = \psi_i(1)\psi_j(2), i, j = 1, 2, 3$$

因此，体系可能态的数目为 9；

题目 6

(曾谨言 4.3) 设体系由 3 个粒子组成, 每个粒子可能处于 3 个单粒子态 φ_1, φ_2 和 φ_3 中任何一个态，分析体系的可能态的数目，分二种情况:

（a）不计及波函数的交换对称性;

(b) 要求波函数对于交换是反对称;

(c) 要求波函数对于交换是对称.

试问: 对称态和反对称态的总数 = ?, 与 (a) 的结果是否相同? 对此做出说明.

解答. (a) 不计及波函数的交换对称性时，体系的可能态有

$$\Psi_{ijk} = \psi_i(1)\psi_j(2)\psi_k(3), i, j, k = 1, 2, 3$$

共有 27 个可能态；

(b) 波函数对于交换是反对称的可能态只能为

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \psi_1(3) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \psi_2(3) \\ \psi_3(1) & \psi_3(2) & \psi_3(3) \end{vmatrix}$$

(c) 波函数交换对称的可能态由下面公式给出

$$\psi^S_{n_1 \cdots n_N} = \sqrt{\frac{\prod_i n_i!}{N!}} \sum_P P\left[\psi_{k_1}(q_1)\psi_{k_2}(q_2)\cdots\psi_{k_N}(q_N)\right]$$

对于题中的三个粒子

(1) 若 $n_1 = 1, n_2 = 1, n_3 = 1$，即系统波函数中含有三种成分的态，则

$$\begin{aligned}\psi^S_{111} = \frac{1}{\sqrt{6}}[&\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3) + \psi_1(2)\psi_2(1)\psi_3(3) + \psi_1(3)\psi_2(2)\psi_3(1) \\ &+ \psi_1(1)\psi_2(3)\psi_3(2) + \psi_1(2)\psi_2(3)\psi_3(1) + \psi_1(3)\psi_2(1)\psi_3(2)]\end{aligned}$$

这种形式的态只有一个；

(2) 若 $n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 0$，即系统波函数中含有两种成分的态，则

$$\psi^S_{210} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi_1(1)\psi_1(2)\psi_2(3) + \psi_1(1)\psi_1(3)\psi_3(2) + \psi_1(3)\psi_1(2)\psi_2(1)\right]$$

这种形式的态有 $A_3^3 = 6$ 个；

(3) 若 $n_1 = 3, n_2 = 0, n_3 = 0$，即系统波函数中只含有 1 种成分的态，则

$$\psi^S_{300} = \psi_1(1)\psi_1(2)\psi_1(3)$$

这种形式的态有 3 个；

综上可知总共的可能态数目为 10, 对称态和反对称态的总数为 11，和 (a) 的结果不相同，这是由全同粒子的不可分辨性导致的结果；