

第一章 量子力学的诞生

1.1 设质量为 m 的粒子在一维无限深势阱中运动, $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, x > a \\ 0, & 0 < x < a \end{cases}$

试用 de Broglie 的驻波条件, 求粒子能量的可能取值。

解: 据驻波条件, 有 $a = n \cdot \frac{\lambda}{2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$

$$\therefore \lambda = 2a/n \quad (1)$$

又据 de Broglie 关系 $p = h/\lambda \quad (2)$

而能量

$$\begin{aligned} E &= p^2/2m = \hbar^2/2m\lambda^2 \\ &= \frac{h^2 n^2}{2m \cdot 4a^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned} \quad (3)$$

1.2 设粒子限制在长、宽、高分别为 a, b, c 的箱内运动, 试用量子化条件求粒子能量的可能取值。

解: 除了与箱壁碰撞外, 粒子在箱内作自由运动。假设粒子与箱壁碰撞不引起内部激发, 则碰撞为弹性碰撞。动量大小不改变, 仅方向反向。选箱的长、宽、高三个方向为 x, y, z 轴方向, 把粒子沿 x, y, z 轴三个方向的运动分开处理。利用量子化条件, 对于 x 方向, 有

$$\oint p_x \cdot dx = n_x h, \quad (n_x = 1, 2, 3, \dots)$$

即 $p_x \cdot 2a = n_x h \quad (2a: \text{一来一回为一个周期})$

$$\therefore p_x = n_x h / 2a,$$

同理可得, $p_y = n_y h / 2b, \quad p_z = n_z h / 2c,$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

粒子能量 $E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$

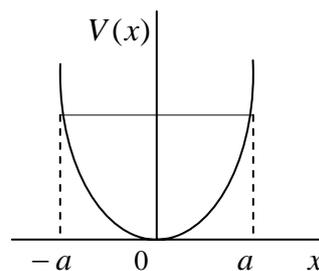
1.3 设质量为 m 的粒子在谐振子势 $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ 中运动, 用量子化条件求粒子能量 E 的可能取值。

提示: 利用 $\oint p \cdot dx = nh, \quad n = 1, 2, \dots, \quad p = \sqrt{2m[E - V(x)]}$

解: 能量为 E 的粒子在谐振子势中的活动范围为

$$|x| \leq a \quad (1)$$

其中 a 由下式决定: $E = V(x)|_{x=a} = \frac{1}{2} m \omega^2 a^2.$



由此得 $a = \sqrt{2E/m\omega^2}$, (2)

$x = \pm a$ 即为粒子运动的转折点。有量子化条件

$$\oint p \cdot dx = 2 \int_{-a}^{+a} \sqrt{2m(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)} dx = 2m\omega^2 \int_{-a}^{+a} \sqrt{a^2 - x^2} dx$$

$$= 2m\omega a^2 \cdot \frac{\pi}{2} = m\omega\pi a^2 = nh$$

得 $a^2 = \frac{nh}{m\omega\pi} = \frac{2\hbar n}{m\omega}$ (3)

代入 (2), 解出 $E_n = n\hbar\omega$, $n = 1, 2, 3, \dots$ (4)

积分公式: $\int \sqrt{a^2 - u^2} du = \frac{u}{2} \sqrt{a^2 - u^2} + \frac{a^2}{2} \arcsin \frac{u}{a} + c$

1.4 设一个平面转子的转动惯量为 I , 求能量的可能取值。

提示: 利用 $\int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = nh$, $n = 1, 2, \dots$, p_φ 是平面转子的角动量。转子的能量 $E = p_\varphi^2 / 2I$ 。

解: 平面转子的转角 (角位移) 记为 φ 。

它的角动量 $p_\varphi = I \dot{\varphi}$ (广义动量), p_φ 是运动惯量。按量子化条件

$$\int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = 2\pi p_\varphi = mh, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

$$\therefore p_\varphi = mh,$$

因而平面转子的能量 $E_m = p_\varphi^2 / 2I = m^2 \hbar^2 / 2I$, $m = 1, 2, 3, \dots$

第二章 波函数与 Schrödinger 方程

2.1 设质量为 m 的粒子在势 $V(\vec{r})$ 中运动。

(a) 证明粒子的能量平 值为 $E = \int d^3r \cdot \omega$,

$$\omega = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \nabla \psi + \psi^* V \psi \quad (\text{能量密度})$$

(b) 证明能量守恒公式 $\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{s} = 0$

$$\vec{s} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \nabla \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \nabla \psi^* \right) \quad (\text{能流密度})$$

证: (a) 粒子的能量平 值为 (设 ψ 已归一化)

$$E = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi d^3r = \bar{T} + \bar{V} \quad (1)$$

$$\bar{V} = \int d^3r \psi^* V \psi \quad (\text{势能平均值}) \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \int d^3r \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi \quad (\text{动能平均值}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \left[\nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) \right] \end{aligned}$$

其中 \bar{T} 的第一项可化为面积分，而在无穷远处归一化的波函数必然为 0。因此

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi \quad (3)$$

结合式 (1)、(2) 和 (3)，可知能量密度 $\omega = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + \psi^* V \psi$, (4)

且能量平均值 $E = \int d^3r \cdot \omega$ 。

(b) 由 (4) 式，得

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla \cdot \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \cdot \nabla \psi + \nabla \psi^* \cdot \nabla \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} V \psi + \psi^* V \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla \cdot \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \nabla \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \nabla \psi^* \right) - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \nabla^2 \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \nabla^2 \psi^* \right) \right] + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} V \psi + \psi^* V \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= -\nabla \cdot \bar{s} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^* \\ &= -\nabla \cdot \bar{s} + E \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* \right) \\ &= -\nabla \cdot \bar{s} + E \frac{\partial}{\partial t} \rho \quad (\rho : \text{几率密度}) \\ &= -\nabla \cdot \bar{s} \quad (\text{定态波函数, 几率密度 } \rho \text{ 不随时间改变}) \end{aligned}$$

所以 $\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{s} = 0$ 。

2.2 考虑单粒子的 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + [V_1(\vec{r}) + iV_2(\vec{r})] \psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

V_1 与 V_2 为实函数。

(a) 证明粒子的几率（粒子数）不守恒。

(b) 证明粒子在空间体积 τ 内的几率随时间的变化为

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\tau} d^3r \psi^* \psi = -\frac{\hbar}{2im} \iint_S (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \cdot d\vec{S} + \frac{2V_2}{\hbar} \iiint_{\tau} d^3r \psi^* \psi$$

证：(a) 式 (1) 取复共轭，得

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + (V_1 - iV_2) \psi^* \quad (2)$$

$\psi^* \times (1) - \psi \times (2)$ ，得

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) + 2i\psi^* V_2 \psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + 2iV_2 \psi^* \psi \\ \therefore \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) &= -\frac{\hbar}{2im} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \frac{2V_2}{\hbar} (\psi^* \psi) \end{aligned} \quad (3)$$

即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = \frac{2V_2}{\hbar} \rho \neq 0,$$

此即几率不守恒的微分表达式。

(b) 式 (3) 对空间体积 τ 积分，得

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\tau} d^3r (\psi^* \psi) &= -\frac{\hbar}{2im} \iiint_{\tau} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) d^3r + \frac{2}{\hbar} \iiint_{\tau} d^3r V_2 (\psi^* \psi) \\ &= -\frac{\hbar}{2im} \iint_S (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \cdot d\vec{S} + \frac{2}{\hbar} \iiint_{\tau} d^3r V_2 \psi^* \psi \end{aligned}$$

上式右边第一项代表单位时间内粒子经过表面进入体积 τ 的几率 ($= -\iint_S \vec{j} \cdot d\vec{S}$)，而第二项代表体积 τ 中“产生”的几率，这一项表征几率（或粒子数）不守恒。

2.3 设 ψ_1 和 ψ_2 是 Schrödinger 方程的两个解，证明

$$\frac{d}{dt} \int d^3r \psi_1^* (\vec{r}, t) \psi_2 (\vec{r}, t) = 0.$$

证： $\therefore i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi_1 \quad (1)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi_2 \quad (2)$$

取 (1) 之复共轭： $-i\hbar \frac{\partial \psi_1^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi_1^* \quad (3)$

$$\psi_2 \times (3) - \psi_1^* \times (2), \text{ 得} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_1^* \psi_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_2 \nabla^2 \psi_1^* - \psi_1^* \nabla^2 \psi_2)$$

对全空间积分:

$$\begin{aligned} & -i\hbar \frac{d}{dt} \int d^3r \psi_1^*(\vec{r}, t) \psi_2(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r [\psi_2 \nabla^2 \psi_1^* - \psi_1^* \nabla^2 \psi_2] \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r [\nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) - (\nabla \psi_2) \cdot (\nabla \psi_1^*) + (\nabla \psi_1^*) \cdot (\nabla \psi_2)] \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r [\nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2)] \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \int (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) \cdot d\vec{S} = 0, \quad (\text{无穷远边界面上, } \psi_1, \psi_2 \rightarrow 0) \end{aligned}$$

即
$$\frac{d}{dt} \int d^3r \psi_1^*(\vec{r}, t) \psi_2(\vec{r}, t) = 0。$$

2.4 设一维自由粒子的初态 $\psi(x, 0) = e^{ip_0x/\hbar}$, 求 $\psi(x, t)$ 。

解:
$$\psi(x, t) = e^{i\left(p_0x - \frac{p_0^2}{2m}t\right)/\hbar}$$

2.5 设一维自由粒子的初态 $\psi(x, 0) = \delta(x)$, 求 $|\psi(x, t)|^2$ 。

提示: 利用积分公式
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cos(\xi^2) d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \sin(\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi/2}$$

或
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[i\xi^2] d\xi = \sqrt{\pi} \exp[i\pi/4]。$$

解: 作 Fourier 变换:
$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) e^{ipx/\hbar} dp,$$

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x, 0) e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

$\therefore \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp \quad (E = p^2/2m)$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}t - px\right)} dp \quad (\text{指数配方})$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{imx^2/2\hbar t} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{it}{2m\hbar}\left(p - \frac{mx}{t}\right)^2\right] dp$$

令 $\xi^2 = \frac{t}{2m\hbar} \left(p - \frac{mx}{t} \right)^2$ ，则

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{imx^2/2\hbar t} \cdot \sqrt{\frac{2m\hbar}{t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\xi^2} d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \cdot \sqrt{\frac{2m\hbar}{t}} e^{imx^2/2\hbar t} \cdot \sqrt{\pi} e^{-i\pi/4} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}} \exp\left[i\left(\frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ |\psi(x,t)|^2 &= \frac{m}{2\pi\hbar t} \text{。}\end{aligned}$$

2.6 设一维自由粒子的初态为 $\psi(x,0)$ ，证明在足够长时间后，

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \exp[-i\pi/4] \cdot \exp\left[\frac{imx^2}{2\hbar t} \right] \cdot \varphi\left(\frac{mx}{\hbar t} \right)$$

式中 $\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,0) e^{-ikx} dx$ 是 $\psi(x,0)$ 的 **Fourier** 变换。

提示：利用 $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{i\pi/4} e^{-i\alpha x^2} = \delta(x)$ 。

证：根据平面波的时间变化规律

$$e^{ikx} \rightarrow e^{i(kx - \omega t)} \text{ , } \quad \omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m \text{ ,}$$

任意时刻的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) e^{i(kx - \hbar k^2 t/2m)} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{imx^2/2\hbar t} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \varphi(k) \cdot \exp\left[-i \frac{\hbar t}{2m} \left(k - \frac{mx}{\hbar t} \right)^2 \right] \quad (1)\end{aligned}$$

当时间足够长后（所谓 $t \rightarrow \infty$ ），上式被积函数中的指数函数具有 δ 函数的性质，取

$$\alpha = \hbar t/2m \text{ , } \quad u = \left(k - \frac{mx}{\hbar t} \right) \text{ ,} \quad (2)$$

参照本题的解题提示，即得

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{imx^2/2\hbar t} \cdot \sqrt{\frac{2\pi m \alpha}{\hbar t}} e^{-i\pi/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) \delta\left(k - \frac{mx}{\hbar t} \right) dk \\ &= \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} e^{-i\pi/4} e^{imx^2/2\hbar t} \varphi\left(\frac{mx}{\hbar t} \right) \quad (3)\end{aligned}$$

$$|\psi(x,t)|^2 \approx \frac{m}{\hbar t} \left| \varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right) \right|^2 \quad (4)$$

物理意义：在足够长时间后，各不同 k 值的分波已经互相分离，波群在 x 处的主要成分为 $k = mx/\hbar t$ ，即 $x = \hbar kt/m$ ，强度 $\propto |\varphi(k)|^2$ ，因子 $m/\hbar t$ 描述整个波包的扩散，波包强度 $|\psi|^2 \propto 1/t$ 。

设整个波包中最强的动量成分为 $\hbar k_0$ ，即 $k = k_0$ 时 $|\varphi(k)|^2$ 最大，由 (4) 式可见，当 t 足够大以后， $|\varphi|^2$ 的最大值出现在 $mx/\hbar t = k_0$ 处，即 $x = \hbar k_0 t/m$ 处，这表明波包中心处波群的主要成分为 k_0 。

第三章 一维定态问题

3.1) 设粒子处在二维无限深势阱中，

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b \\ \infty, & \text{其余区域} \end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征波函数。如 $a = b$ ，能级的简并度如何？

解：能量的本征值和本征函数为

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right)$$

$$\psi_{n_x n_y} = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin \frac{\pi n_x x}{a} \sin \frac{\pi n_y y}{b}, \quad n_x, n_y = 1, 2, \dots$$

若 $a = b$ ，则 $E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2)$

$$\psi_{n_x n_y} = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi n_x x}{a} \sin \frac{\pi n_y y}{a}$$

这时，若 $n_x = n_y$ ，则能级不简并；若 $n_x \neq n_y$ ，则能级一般是二度简并的（有偶然简并情况，如 $n_x = 10, n_y = 5$ 与 $n_x = 11, n_y = 2$ ）

3.2) 设粒子限制在矩形匣子中运动，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。如 $a = b = c$ ，讨论能级的简并度。

解：能量本征值和本征波函数为

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right),$$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_x x}{a} \sin \frac{\pi n_y y}{b} \sin \frac{\pi n_z z}{c},$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

当 $a = b = c$ 时, $E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin \frac{\pi n_x x}{a} \sin \frac{\pi n_y y}{a} \sin \frac{\pi n_z z}{a}$$

$n_x = n_y = n_z$ 时, 能级不简并;

n_x, n_y, n_z 三者中有二者相等, 而第三者不等时, 能级一般为三重简并的。

n_x, n_y, n_z 三者皆不相等时, 能级一般为 6 度简并的。

如 $\begin{cases} 5^2 + 6^2 + 8^2 = 3^2 + 4^2 + 10^2 & (1,7,9) \rightarrow (1,3,11) \\ 10^2 + 12^2 + 16^2 = 6^2 + 8^2 + 20^2 & (1,5,10) \rightarrow (3,6,9) \end{cases}$

3.3) 设粒子处在一维无限深方势阱中,

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

证明处于定态 $\psi_n(x)$ 的粒子 $\bar{x} = \frac{a}{2}, \quad \overline{(x - \bar{x})^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2}\right)$

讨论 $n \rightarrow \infty$ 的情况, 并于经典力学计算结果相比较。

证: 设粒子处于第 n 个本征态, 其本征函数

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

$$\bar{x} = \int_0^a x |\psi_n|^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx \stackrel{\text{分部}}{=} \frac{a}{2} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \overline{(x - \bar{x})^2} &= \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \int_0^a x^2 |\psi_n|^2 dx - \frac{a^2}{4} \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}\right) dx - \frac{a^2}{4} \\ &= \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2}\right) \quad (2) \end{aligned}$$

在经典情况下, 在 $(0, a)$ 区间粒子除与阱壁碰撞 (设碰撞时间不计, 且为弹性碰撞, 即粒子碰撞后仅运动方向

改变, 但动能、速度不变) 外, 来回作匀速运动, 因此粒子处于 $x \rightarrow x + dx$ 范围的几率为 $\frac{dx}{a}$, 故

$$\bar{x} = \int_0^a x \cdot \frac{dx}{a} = \frac{a}{2}, \quad (3)$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a x^2 \cdot \frac{dx}{a} = \frac{a^2}{3},$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{4} \quad (4)$$

当 $n \rightarrow \infty$ 时, 量子力学的结果与经典力学结果一致。

3.4) 设粒子处在一维无限深方势阱中,

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2 \\ \infty, & |x| > a/2 \end{cases}$$

处于基态 ($n=1$), 求粒子的动量分布。

解: 基态波函数为
$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a}, \quad (\text{参 P57, (12)})$$

$$\begin{aligned} \therefore \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ipx/\hbar} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ipx/\hbar} \cdot \frac{1}{2} (e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a}) dx \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar a}} \int_{-a/2}^{a/2} \left[e^{i\left(\frac{\pi-p}{\hbar}\right)x} + e^{-i\left(\frac{\pi+p}{\hbar}\right)x} \right] dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \left\{ \frac{1}{2i\left(\frac{\pi-p}{\hbar}\right)} \left[e^{i\left(\frac{\pi-p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}} - e^{-i\left(\frac{\pi-p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}} \right] + \frac{1}{-2i\left(\frac{\pi+p}{\hbar}\right)} \left[e^{-i\left(\frac{\pi+p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}} - e^{i\left(\frac{\pi+p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \left\{ \frac{1}{\frac{\pi-p}{\hbar}} \cos \frac{pa}{2\hbar} + \frac{1}{\frac{\pi+p}{\hbar}} \cos \frac{pa}{2\hbar} \right\} \\ &= \frac{2\sqrt{\pi q \hbar^3}}{\pi^2 \hbar^2 - a^2 p^2} \cos \frac{pa}{2\hbar} \end{aligned}$$

动量的几率分布
$$\rho(p) = |\phi(p)|^2 = \frac{4\pi a \hbar^3}{(\pi^2 \hbar^2 - a^2 p^2)^2} \cos^2 \frac{pa}{2\hbar}$$

3.5) 设粒子 (能量 $E > 0$) 从左入射, 碰到下列势阱 (图), 求阱壁处的反射系数。

解: 势阱为
$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x < 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases}$$

在区域 I 上有入射波与反射波, 在区域 II 上仅有透射波。故

$$\begin{aligned} \psi_1 &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & k_1 &= \sqrt{2m(V_0 + E)}/\hbar \\ \psi_2 &= Ce^{ik_2x}, & k_2 &= \sqrt{2mE}/\hbar \end{aligned}$$

由 $\psi_1(0) = \psi_2(0)$, 得 $A + B = C$ 。

由 $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$, 得 $k_1(A - B) = k_2C$ 。

从上二式消去 c , 得 $(k_1 - k_2)A = (k_1 + k_2)B$ 。

反射系数 $R = |r|^2 = \frac{B^2}{A^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$

将 k_1, k_2 代入运算, 可得

$$R = \frac{V_0^2}{(\sqrt{V_0 + E} + \sqrt{E})^4} = \begin{cases} V_0^2/16E^2, & E \gg V_0 \\ 1 - 4\sqrt{E/V_0}, & E \ll V_0 \end{cases}$$

3.6) 利用 Hermite 多项式的递推关系 (附录 A3. 式 (11)), 证明谐振子波函数满足下列关系

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x) \right]$$

$$x^2\psi_n(x) = \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x) + (2n+1)\psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x) \right]$$

并由此证明, 在 ψ_n 态下, $\bar{x} = 0$, $\bar{V} = E_n/2$

证: 谐振子波函数 $\psi_n(x) = A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x)$ (1)

其中, 归一化常数 $A_n = \frac{\alpha}{\sqrt{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}}$, $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ (2)

$H_n(\alpha x)$ 的递推关系为 $H_{n+1}(\alpha x) - 2\alpha x H_n(\alpha x) + 2n H_{n-1}(\alpha x) = 0$. (3)

$$\begin{aligned} \therefore x\psi_n(x) &= A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot x H_n(\alpha x) = \frac{1}{2\alpha} A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot 2\alpha x H_n(\alpha x) \\ &= \frac{1}{2\alpha x} A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} [H_{n+1}(\alpha x) + 2n H_{n-1}(\alpha x)] \\ &= \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot n H_{n-1}(\alpha x) + \frac{1}{2\alpha} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot H_{n+1}(\alpha x) \\ &= \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{\sqrt{\pi} \cdot 2^{n-1} \cdot (n-1)!}} \cdot \sqrt{\frac{n}{2}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot H_{n-1}(\alpha x) \\ &\quad + \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{\sqrt{\pi} \cdot 2^{n+1} \cdot (n+1)!}} \cdot \sqrt{\frac{n+1}{2}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot H_{n+1}(\alpha x) \\ &= \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore x^2\psi_n(x) &= \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}}x\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}x\psi_{n+1}(x) \right] \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \left[\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n(x) \right] + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_n(x) + \sqrt{\frac{n+2}{2}}\psi_{n+2}(x) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x) + (2n+1)\psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x) \right] \end{aligned}$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* x \psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \cdot \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right] dx = 0$$

$$\begin{aligned} \bar{V} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \cdot \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cdot \psi_n(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \cdot \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot \frac{1}{2\alpha^2} \cdot (2n+1) \psi_n(x) dx \\ &= \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot \frac{1}{2\alpha^2} \cdot (2n+1) = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = E_n / 2 \end{aligned}$$

3.7) 利用 Hermite 多项式的求导公式。证明 (参 A3.式 (12))

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_n(x) &= \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1} \right] \\ \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) &= \frac{\alpha^2}{2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2} - (2n+1) \psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2} \right] \end{aligned}$$

证: A3.式 (12): $H_n'(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi)$, $\frac{dH_n(\alpha x)}{dx} = 2n\alpha H_{n-1}(\alpha x)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_n(x) &= A_n \cdot \left[(-\alpha^2 x^2) e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) + e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot 2n\alpha H_{n-1}(\alpha x) \right] \\ &= -\alpha^2 x \psi_n(x) + \sqrt{2n\alpha} \psi_{n-1}(x) \\ &= -\alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right] + \alpha \cdot \sqrt{2n} \psi_{n-1}(x) \\ &= \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) &= \alpha \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \cdot \alpha \left[\sqrt{\frac{n-1}{2}} \psi_{n-2} - \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_n \right] - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \cdot \alpha \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_n - \sqrt{\frac{n+2}{2}} \psi_{n+2} \right] \right\} \\ &= \frac{\alpha^2}{2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2} - (2n+1) \psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2} \right] \end{aligned}$$

$$\bar{p} = \int \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_n dx = (-i\hbar) \int \psi_n^* \cdot \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1} \right] dx = 0$$

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{\bar{p}^2}{2m} = \int \psi_n^* \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_n dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_n^* \cdot \frac{\alpha^2}{2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2} - (2n+1) \psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2} \right] dx \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m} \cdot (2n+1) \int \psi_n^* \psi_n dx = \frac{\hbar^2}{4m} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} \cdot (2n+1) = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \frac{E_n}{2} \end{aligned}$$

3.8) 谐振子处于 ψ_n 态下, 计算

$$\Delta x = \left[\overline{(x - \bar{x})^2} \right]^{1/2}, \quad \Delta p = \left[\overline{(p - \bar{p})^2} \right]^{1/2}, \quad \Delta x \cdot \Delta p = ?$$

解：由题 3—6), $\bar{x} = 0$, $\overline{x^2} = \frac{2\bar{V}}{m\omega^2} = \frac{E_n}{m\omega^2} = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar}{m\omega}$

由题 3—7), $\bar{p} = 0$, $\overline{p^2} = 2m\bar{T} = mE_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)m\hbar\omega$

$$\Delta x = \left[\overline{(x - \bar{x})^2}\right]^{1/2} = \left(\overline{x^2} - \bar{x}^2\right)^{1/2} = \left[\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}\right]^{1/2}$$

$$\Delta p = \left[\overline{(p - \bar{p})^2}\right]^{1/2} = \left(\overline{p^2} - \bar{p}^2\right)^{1/2} = \left[\left(n + \frac{1}{2}\right)m\hbar\omega\right]^{1/2}$$

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

对于基态, $n = 0$, $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$, 刚好是测不准关系所规定的下限。

3.9) 荷电 q 的谐振子, 受到外电场 \mathcal{E} 的作用,

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\mathcal{E}x \quad (1)$$

求能量本征值和本征函数。

解: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\mathcal{E}x = H_0 - q\mathcal{E}x \quad (2)$

H_0 的本征函数为 $\psi_n = A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x)$,

本征值 $E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

现将 H 的本征值记为 E_n , 本征函数记为 $\varphi_n(x)$ 。

式 (1) 的势能项可以写成 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 [(x - x_0)^2 - x_0^2]$

其中 $x_0 = q\mathcal{E}/m\omega^2 \quad (3)$

如作坐标平移, 令 $x' = x - x_0 \quad (4)$

由于 $p = -i\hbar \frac{d}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx'} = p' \quad (5)$

H 可表成 $H = \frac{p'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \quad (6)$

(6) 式中的 H 与 (2) 式中的 H_0 相比较, 易见 H 和 H_0 的差别在于变量由 x 换成 x' , 并添加了常数项

$\left(-\frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2\right)$, 由此可知

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \quad (7)$$

$$\varphi_n(x) = \psi_n(x') = \psi_n(x - x_0) \quad (8)$$

即

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

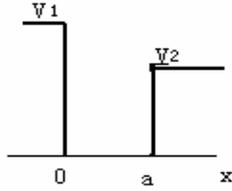
$$= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

$$\varphi_n(x) = A_n e^{-\alpha^2 \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2 / 2} H_n \left[\alpha \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right) \right] \quad (10)$$

其中

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}}, \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \quad (11)$$

3.10) 求不对称势阱中粒子的能量本征值。



解：仅讨论分立能级的情况，即 $0 < E < V_2$ ，

$$\therefore \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\psi$$

当 $x \rightarrow \pm\infty$ 时， $\psi \rightarrow 0$ ，故有

$$\psi = \begin{cases} A_1 e^{k_1 x}, & x < 0, \quad k_1 = \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar \\ A \sin(kx + \delta), & 0 < x < a, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\delta < \pi) \\ A_2 e^{-k_2 x}, & a < x, \quad k_2 = \sqrt{2m(V_2 - E)}/\hbar \end{cases}$$

由 $d \ln \psi / dx$ 在 $x=0$ 、 $x=a$ 处的连续条件，得

$$k_1 = k \operatorname{ctg} \delta, \quad k_2 = -k \operatorname{ctg}(ka + \delta) \quad (1)$$

由 (1a) 可得

$$\sin \delta = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} \quad (2)$$

由于 k_1, k_2, k 皆为正值，故由 (1b)，知 $ka + \delta$ 为二，四象限的角。

因而

$$\sin(ka + \delta) = \pm \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} \quad (3)$$

又由 (1)，余切函数 (ctg) 的周期为 π ，故由 (2) 式，

$$\delta = n_1\pi + \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} \quad (4)$$

由(3), 得 $ka + \delta = n\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}}$ (5)

结合(4),(5), 得 $ka = n_2\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} - n_1\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}}$

或 $ka = n\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}}$ (6)

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

一般而言, 给定一个 n 值, 有一个解 k_n , 相当于有一个能级:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (7)$$

当 $V_2 \neq V_1$ 时, 仅当 $\frac{a\sqrt{2mV_2}}{\hbar} \geq \frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \sqrt{\frac{V_2}{V_1}}$

才有束缚态, 故 V_1, V_2 给定时, 仅当 $a \geq \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_2}} \left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \sqrt{\frac{V_2}{V_1}} \right)$ (8)

时才有束缚态 (若 $V_1 = V_2 = V$, 则无论 V 和 a 的值如何, 至少总有一个能级)

当 V_1, V_2, a 给定时, 由(7)式可求出 n 个能级 (若有 n 个能级的话)。相应的波函数为:

$$\psi_n = \begin{cases} A_n \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} e^{k_n x} & , \quad x < 0 \quad , \quad k_{1n} = \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar \\ A_n \sin(k_n x + \delta_n) & , \quad 0 < x < a, \\ A_n (-1)^{n-1} \frac{\hbar k_{2n}}{\sqrt{2mV_2}} e^{-k_{2n}(x-a)} & , \quad x > a \quad , \quad k_{2n} = \sqrt{2m(V_2 - E)}/\hbar \end{cases}$$

其中 $A_n = \sqrt{2/(a + 1/k_{1n} + 1/k_{2n})}$

3.11) 设粒子在下列势阱中运动,

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, & x > 0. \end{cases} \quad \text{求粒子能级。}$$

解: 既然粒子不能穿入 $x < 0$ 的区域, 则对应的 S.eq 的本征函数必须在 $x = 0$ 处为零。另一方面, 在 $x > 0$ 的区域, 这些本征函数和谐振子的本征函数相同 (因在这个区域, 粒子的 H 和谐振子的 H 完全一样, 粒子的波函数和谐振子的波函数满足同样的 S.eq)。振子的具有 $n = 2k + 1$ 的奇宇称波函数在 $x = 0$ 处为零, 因而这些波函数是这一问题的解 ($n = 2k$ 的偶宇称波函数不满足边条件 $\psi(0) = 0$) 所以

$$E_k = (2k + 3/2)\hbar\omega, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

3.12) 设粒子处于半壁高的势场中

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ -V_0, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases} \quad (1)$$

求粒子的能量本征值。求至少存在一条束缚能级的体积。

解：分区域写出 *seq*：

$$\begin{aligned} \psi_1''(x) + k'^2 \psi_1(x) &= 0, & 0 < x < a \\ \psi_2''(x) - k^2 \psi_2(x) &= 0, & x > a \end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{其中} \quad k'^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E), \quad k^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \text{方程的解为} \quad \psi_1(x) &= Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x} \\ \psi_2(x) &= Ce^{kx} + De^{-kx} \end{aligned} \quad (4)$$

根据对波函数的有限性要求，当 $x \rightarrow \infty$ 时， $\psi_2(x)$ 有限，则

$$C = 0$$

当 $x = 0$ 时， $\psi_1(x) = 0$ ，则 $A + B = 0$

$$\begin{aligned} \text{于是} \quad \psi_1(x) &= F \sin k'x, & 0 < x < a \\ \psi_2(x) &= De^{-kx}, & x > a \end{aligned} \quad (5)$$

在 $x = a$ 处，波函数及其一级导数连续，得

$$F \sin k'a = De^{-ka}, \quad k'F \cos k'a = -kDe^{-ka} \quad (6)$$

$$\text{上两方程相比，得} \quad \text{tg } k'a = -\frac{k'}{k} \quad (7)$$

$$\text{即} \quad \text{tg} \left[a \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E)} \right] = -\sqrt{-\frac{V_0 + E}{E}} \quad (7')$$

$$\text{若令} \quad k'a = \xi, \quad ka = \eta \quad (8)$$

则由 (7) 和 (3)，我们将得到两个方程：

$$\begin{cases} \eta = -\xi \text{ctg } \xi \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} a^2 \end{cases} \quad (10)$$

(10) 式是以 $r = \sqrt{2\mu V_0/\hbar^2} a$ 为半径的圆。对于束缚态来说， $-V_0 < E < 0$ ，

结合 (3)、(8) 式可知， ξ 和 η 都大于零。(10) 式表达的圆与曲线 $\eta = -\xi \text{ctg } \xi$ 在第一象限的交点可决定束缚

态能级。当 $r \geq \pi/2$ ，即 $\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}} a \geq \pi/2$ ，亦即

$$\mu V_0 a^2 \geq \pi^2 \hbar^2 / 8 \quad (11)$$

时, 至少存在一个束缚态能级。这是对粒子质量, 位阱深度和宽度的一个限制。

3.13) 设粒子在下列势阱中运动,

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ -r\delta(x-a), & x > 0. \end{cases} \quad (r, a > 0) \quad (1)$$

是否存在束缚定态? 求存在束缚定态的条件及确定束缚能级的公式。

解: S.eq:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi - r\delta(x-a)\psi = E\psi \quad (2)$$

对于束缚态 ($E < 0$), 令 $\beta = \sqrt{-2mE}/\hbar$ (3)

则
$$\frac{d^2}{dx^2} \psi - \beta^2 \psi + \frac{2mr}{\hbar^2} \delta(x-a)\psi = 0 \quad (4)$$

积分 $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx, \varepsilon \rightarrow 0^+$, 得 ψ' 跃变的条件

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = -\frac{2mr}{\hbar^2} \psi(a) \quad (5)$$

在 $x \neq a$ 处, 方程(4)化为

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi - \beta^2 \psi = 0 \quad (6)$$

边条件为 $\psi(0) = 0, \quad \psi(\infty) = 0$ (束缚态)

因此
$$\psi(x) = \begin{cases} sh \beta x, & 0 \leq x < a, \\ Ae^{-\beta x}, & x > a. \end{cases} \quad (7)$$

再根据 $x = a$ 点 $\psi(x)$ 连续条件及 $\psi'(x)$ 跃变条件(5), 分别得

$$sh \beta a = Ae^{-\beta a} = \psi(a) \quad (8)$$

$$-\beta Ae^{-\beta a} - \beta ch \beta a = -\frac{2mr}{\hbar^2} \psi(a) \quad (9)$$

由 (8) (9) 可得 (以 $-a/\psi(a)$ 乘以 (9) 式, 利用 (8) 式)

$$\beta a + \beta a \coth \beta a = \frac{2mra}{\hbar^2} \quad (10)$$

此即确定能级的公式。下列分析至少存在一条束缚态能级的条件。

当势阱出现第一条能级时, $E \rightarrow 0^-$, 所以 $\beta a \rightarrow 0^+$,

利用
$$\lim_{\beta a \rightarrow 0} \beta a \coth \beta a = \lim_{\beta a \rightarrow 0} \frac{\beta a}{th \beta a} = 1,$$

(10) 式化为
$$\frac{2mra}{\hbar^2} = \beta a + \beta a \coth \beta a = 1 + 0^+,$$

因此至少存在一条束缚态能级的条件为
$$\frac{2mra}{\hbar^2} \geq 1 \quad (11)$$

纯 δ 势阱中存在唯一的束缚能级。当一侧存在无限高势垒时, 由于排斥作用(表现为 $\psi(x) \equiv 0$, 对 $x \leq 0$)。

束缚态存在与否是要受到影响的。纯 δ 势阱的特征长度 $L = \hbar^2/mr$ 。

条件 (11) 可改写为 $a \geq L/2$ (12)

即要求无限高势垒离开 δ 势阱较远 ($a \geq L/2$)。才能保证 δ 势阱中的束缚态能存在下去。显然, 当 $a \rightarrow \infty$ (即 $a \gg L/2$), $\beta a \rightarrow \infty$ 时, 左侧无限高势垒的影响可以完全忽略, 此时 $\coth \beta a \rightarrow 1$, 式 (10) 给出

$$\beta = mr^2/\hbar^2$$

即
$$E = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} = \frac{mr^2}{2\hbar^2} \quad (13)$$

与势阱 $V(x) = -r\delta(x)$ 的结论完全相同。

令 $\beta a = \eta$, 则式 (10) 化为

$$\eta(1 + \coth \eta) = \frac{2mra}{\hbar^2} \quad (14)$$

由于 $\eta(1 + \coth \eta) \geq 1$, 所以只当 $\frac{2mra}{\hbar^2} \geq 1$ 时, 式 (10) 或 (14) 才有解。解出根 η 之后, 利用

$\eta = \beta a = a\sqrt{-2mE}/\hbar$, 即可求出能级

$$E = -\frac{\hbar^2 \eta^2}{2ma^2} \quad (15)$$

第四章 力学量用算符表达与表象变换

4.1) 设 A 与 B 为厄米算符, 则 $\frac{1}{2}(AB + BA)$ 和 $\frac{1}{2i}(AB - BA)$ 也是厄米算符。由此证明, 任何一个算符 F 均可

分解为 $F = F_+ + iF_-$, F_+ 与 F_- 均为厄米算符, 且

$$F_+ = \frac{1}{2}(F + F^+), \quad F_- = \frac{1}{2i}(F - F^+)$$

证: i) $\left[\frac{1}{2}(AB + BA)\right]^+ = \frac{1}{2}(B^+A^+ + A^+B^+) = \frac{1}{2}(BA + AB) = \frac{1}{2}(AB + BA)$

$$\therefore \frac{1}{2}(AB + BA) \text{ 为厄米算符。}$$

ii) $\left[\frac{1}{2i}(AB - BA)\right]^+ = \frac{1}{-2i}(B^+A^+ - A^+B^+) = -\frac{1}{2i}(BA - AB) = \frac{1}{2i}(AB - BA)$

$$\therefore \frac{1}{2i}(AB - BA) \text{ 也为厄米算符。}$$

iii) 令 $F = AB$, 则 $F^+ = (AB)^+ = B^+A^+ = BA$,

$$\text{且定义} \quad F_+ = \frac{1}{2}(F + F^+), \quad F_- = \frac{1}{2i}(F - F^+) \quad (1)$$

由 i), ii) 得 $F_+^+ = F_+$, $F_-^+ = F_-$, 即 F_+ 和 F_- 皆为厄米算符。

则由 (1) 式, 不难解得 $F = F_+ + iF_-$

4.2) 设 $F(x, p)$ 是 x, p 的整函数, 证明

$$[p, F] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} F, \quad [x, F] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} F$$

整函数是指 $F(x, p)$ 可以展开成 $F(x, p) = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m p^n$ 。

证: (1) 先证 $[p, x^m] = -mi\hbar x^{m-1}$, $[x, p^n] = ni\hbar p^{n-1}$ 。

$$\begin{aligned} [p, x^m] &= x^{m-1}[p, x] + [p, x^{m-1}]x \\ &= -i\hbar x^{m-1} + x^{m-2}[p, x]x + [p, x^{m-2}]x^2 \\ &= -2i\hbar x^{m-1} + x^{m-3}[p, x]x^2 + [p, x^{m-3}]x^3 \\ &= -3i\hbar x^{m-1} + [p, x^{m-3}]x^3 = \dots \\ &= -(m-1)i\hbar x^{m-1} + [p, x^{m-(m-1)}]x^{m-1} \\ &= -(m-1)i\hbar x^{m-1} - i\hbar x^{m-1} = -mi\hbar x^{m-1} \end{aligned}$$

同理,

$$\begin{aligned} [x, p^n] &= p^{n-1}[x, p] + [x, p^{n-1}]p \\ &= i\hbar p^{n-1} + p^{n-2}[x, p]p + [x, p^{n-2}]p^2 \\ &= 2i\hbar p^{n-1} + [x, p^{n-2}]p^2 = \dots \\ &= ni\hbar p^{n-1} \end{aligned}$$

现在,

$$\begin{aligned} [p, F] &= \left[p, \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m p^n \right] = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} [p, x^m] p^n \\ &= \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} (-mi\hbar x^{m-1}) p^n \end{aligned}$$

$$\text{而} \quad -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x} = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} (-mi\hbar x^{m-1}) p^n。$$

$$\therefore [p, F] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} F$$

$$[x, F] = \left[x, \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m p^n \right] = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m [x, p^n]$$

又

$$= \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m (ni\hbar p^{n-1})$$

而
$$i\hbar \frac{\partial F}{\partial p} = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m (ni\hbar p^{n-1})$$

$$\therefore [x, F] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} F$$

4.3) 定义反对易式 $[A, B]_{\pm} = AB + BA$, 证明

$$\begin{aligned} [AB, C] &= A[B, C]_{\pm} - [A, C]_{\pm} B \\ [A, BC] &= [A, B]_{\pm} C - B[A, C]_{\pm} \end{aligned}$$

证:

$$\begin{aligned} [AB, C] &= A[B, C] - [A, C]B \\ &= ABC - ACB + ACB - CAB = A(BC + CB) - (AC + CA)B \\ &= A[B, C]_{\pm} - [A, C]_{\pm} B \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C] = ABC - BAC + BAC - BCA \\ &= (AB + BA)C - B(AC + CA) = [A, B]_{\pm} C - B[A, C]_{\pm} \end{aligned}$$

4.4) 设 $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ 为矢量算符, \vec{A} 和 \vec{B} 的标积和矢积定义为

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} B_{\alpha}, \quad (\vec{A} \times \vec{B}) = \sum_{\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} A_{\alpha} B_{\beta}$$

$\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$, $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 为 Levi-civita 符号, 试验证

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C} = \sum_{\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} A_{\alpha} B_{\beta} C_{\gamma} \quad (1)$$

$$[\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})]_{\alpha} = \vec{A} \cdot (B_{\alpha} \vec{C}) - (\vec{A} \cdot \vec{B}) C_{\alpha} \quad (2)$$

$$[(\vec{A} \times \vec{B}) \times \vec{C}]_{\alpha} = \vec{A} \cdot (B_{\alpha} \vec{C}) - \vec{A}_{\alpha} (\vec{B} \cdot \vec{C}) \quad (3)$$

证: (1) 式左端 $= \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = A_x (B_y C_z - B_z C_y) + A_y (B_z C_x - B_x C_z) + A_z (B_x C_y - B_y C_x)$

$$= \sum_{\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} A_{\alpha} B_{\beta} C_{\gamma}$$

(1) 式右端也可以化成 $(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C} = \sum_{\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} A_{\alpha} B_{\beta} C_{\gamma}$ 。 (1) 式得证。

(2) 式左端 $= [\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C})]_{\alpha} = A_{\beta} (\vec{B} \times \vec{C})_{\gamma} - A_{\gamma} (\vec{B} \times \vec{C})_{\beta} \quad (\alpha = 1, \beta = 2, \gamma = 3)$

$$= A_{\beta} (B_{\alpha} C_{\beta} - B_{\beta} C_{\alpha}) - A_{\gamma} (B_{\gamma} C_{\alpha} - B_{\alpha} C_{\gamma}) = A_{\beta} B_{\alpha} C_{\beta} + A_{\gamma} B_{\alpha} C_{\gamma} - (A_{\beta} B_{\beta} + A_{\gamma} B_{\gamma}) C_{\alpha}$$

(2) 式右端 $= \vec{A} \cdot (B_{\alpha} \vec{C}) - (\vec{A} \cdot \vec{B}) C_{\alpha}$

$$\begin{aligned} &= A_{\alpha} B_{\alpha} C_{\alpha} + A_{\beta} B_{\alpha} C_{\beta} + A_{\gamma} B_{\alpha} C_{\gamma} - A_{\alpha} B_{\alpha} C_{\alpha} - A_{\beta} B_{\beta} C_{\alpha} - A_{\gamma} B_{\gamma} C_{\alpha} \\ &= A_{\beta} B_{\alpha} C_{\beta} + A_{\gamma} B_{\alpha} C_{\gamma} - (A_{\beta} B_{\beta} + A_{\gamma} B_{\gamma}) C_{\alpha} \end{aligned}$$

故 (2) 式成立。

(3) 式验证可仿 (2) 式。

4.5) 设 \vec{A} 与 \vec{B} 为矢量算符, F 为标量算符, 证明

$$[F, \vec{A} \cdot \vec{B}] = [F, \vec{A}] \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot [F, \vec{B}] \quad (1)$$

$$[F, \vec{A} \times \vec{B}] = [F, \vec{A}] \times \vec{B} + \vec{A} \times [F, \vec{B}] \quad (2)$$

证: (1) 式右端 = $(F\vec{A} - \vec{A}F) \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot (F\vec{B} - \vec{B}F)$

$$= F\vec{A} \cdot \vec{B} - \vec{A}F \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot F\vec{B} - \vec{A} \cdot \vec{B}F$$

$$= F\vec{A} \cdot \vec{B} - \vec{A} \cdot \vec{B}F = [F, \vec{A} \cdot \vec{B}] = \text{(1) 式左端}$$

(2) 式右端 = $(F\vec{A} - \vec{A}F) \times \vec{B} + \vec{A} \times (F\vec{B} - \vec{B}F)$

$$= F\vec{A} \times \vec{B} - \vec{A}F \times \vec{B} + \vec{A} \times F\vec{B} - \vec{A} \times \vec{B}F$$

$$= F\vec{A} \times \vec{B} - \vec{A} \times \vec{B}F = [F, \vec{A} \times \vec{B}] = \text{(2) 式左端}$$

4.6) 设 F 是由 \vec{r} , \vec{p} 构成的标量算符, 证明

$$[\vec{L}, F] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial \vec{p}} \times \vec{p} - i\hbar \vec{r} \times \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} \quad (1)$$

证: $[\vec{L}, F] = [L_x, F]\vec{i} + [L_y, F]\vec{j} + [L_z, F]\vec{k} \quad (2)$

$$[L_x, F] = [yp_z - zp_y, F] = y[p_z, F] + [y, F]p_z - z[p_y, F] - [z, F]p_y$$

$$\stackrel{(4.2 \text{题})}{=} -i\hbar y \frac{\partial F}{\partial z} + i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_y} p_z + i\hbar z \frac{\partial F}{\partial y} - i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_z} p_y$$

$$= i\hbar \left(\frac{\partial F}{\partial p_y} p_z - \frac{\partial F}{\partial p_z} p_y \right) - i\hbar \left(y \frac{\partial F}{\partial z} - z \frac{\partial F}{\partial y} \right)$$

$$= i\hbar \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{p}} \times \vec{p} \right)_x - i\hbar \left(\vec{r} \times \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} \right)_x \quad (3)$$

同理可证, $[L_y, F] = i\hbar \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{p}} \times \vec{p} \right)_y - i\hbar \left(\vec{r} \times \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} \right)_y \quad (4)$

$$[L_z, F] = i\hbar \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{p}} \times \vec{p} \right)_z - i\hbar \left(\vec{r} \times \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} \right)_z \quad (5)$$

将式 (3)、(4)、(5) 代入式 (2), 于是 (1) 式得证。

4.7) 证明 $\vec{p} \times \vec{L} + \vec{L} \times \vec{p} = 2i\hbar \vec{p}$

$$i\hbar (\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) = [L^2, \vec{p}] \text{。}$$

证: $(\vec{p} \times \vec{L} + \vec{L} \times \vec{p})_x = p_y L_z - p_z L_y + L_y p_z - L_z p_y = [p_y, L_z] + [L_y, p_z]$

利用基本对易式 $[L_\alpha, p_\beta] = [p_\alpha, L_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} p_\gamma$

即得 $(\vec{p} \times \vec{L} + \vec{L} \times \vec{p})_x = 2i\hbar p_x$ 。

因此 $\vec{p} \times \vec{L} + \vec{L} \times \vec{p} = 2i\hbar \vec{p}$

其次, 由于 p_x 和 L_x 对易, 所以

$$\begin{aligned} [L^2, p_x] &= [L_y^2, p_x] + [L_z^2, p_x] = [L_y, p_x]L_y + L_y[L_y, p_x] + [L_z, p_x]L_z + L_z[L_z, p_x] \\ &= i\hbar(-p_z L_y - L_y p_z + p_y L_z + L_z p_y) \\ &= i\hbar[(p_y L_z - p_z L_y) - (L_y p_z - L_z p_y)] \\ &= i\hbar(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p})_x \end{aligned}$$

因此, $i\hbar(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) = [L^2, \vec{p}]$

4.8) 证明 $L^2 = r^2 p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p}) + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p}$ (1)

$$(\vec{L} \times \vec{p})^2 = (\vec{p} \times \vec{L})^2 = -(\vec{L} \times \vec{p}) \cdot (\vec{p} \times \vec{L}) = L^2 p^2$$
 (2)

$$-(\vec{p} \times \vec{L}) \cdot (\vec{L} \times \vec{p}) = L^2 p^2 + 4\hbar^2 p^2$$
 (3)

$$(\vec{L} \times \vec{p}) \times (\vec{L} \times \vec{p}) = -i\hbar \vec{L} p^2$$
 (4)

证: (1) 利用公式, $\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{C}$, 有

$$\begin{aligned} L^2 &= -(\vec{p} \times \vec{r}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = -[(\vec{p} \times \vec{r}) \times \vec{r}] \cdot \vec{p} = [\vec{p}(\vec{r} \cdot \vec{r}) - (\vec{p} \cdot \vec{r})\vec{r}] \cdot \vec{p} \\ &= (\vec{p} r^2) \cdot \vec{p} - (\vec{p} \cdot \vec{r})(\vec{r} \cdot \vec{p}) \end{aligned}$$

其中 $\vec{p} r^2 = r^2 \vec{p} - i\hbar(\nabla r^2) = r^2 \vec{p} - 2i\hbar \vec{r}$

$$\vec{p} \cdot \vec{r} = \vec{r} \cdot \vec{p} - i\hbar(\nabla \cdot \vec{r}) = \vec{r} \cdot \vec{p} - 3i\hbar$$

因此 $L^2 = r^2 p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p}$

(2) 利用公式, $(\vec{L} \times \vec{p}) \cdot \vec{p} = \vec{L} \cdot (\vec{p} \times \vec{p}) = 0$ (Δ)

可得 $-(\vec{L} \times \vec{p}) \cdot (\vec{p} \times \vec{L}) = -[(\vec{L} \times \vec{p}) \times \vec{p}] \cdot \vec{L}$

$$= [\vec{L}(\vec{p} \cdot \vec{p}) - (\vec{L} \cdot \vec{p})\vec{p}] \cdot \vec{L} = (\vec{L} p^2 - 0) \cdot \vec{L} = L^2 p^2 \quad ([\vec{L}, p^2] = 0) \quad \textcircled{1}$$

$$(\vec{L} \times \vec{p})^2 = (\vec{L} \times \vec{p}) \cdot (\vec{L} \times \vec{p}) = \vec{L} \cdot [\vec{p} \times (\vec{L} \times \vec{p})]$$

$$= \vec{L} \cdot [p^2 \vec{L} - (\vec{p} \cdot \vec{L})\vec{p}] = L^2 p^2 \quad ([\vec{L}, p^2] = 0) \quad \textcircled{2}$$

$$(\vec{p} \times \vec{L})^2 = (\vec{p} \times \vec{L}) \cdot (\vec{p} \times \vec{L}) = [(\vec{p} \times \vec{L}) \times \vec{p}] \cdot \vec{L}$$

$$= [\vec{L}p^2 - \vec{p}(\vec{L} \cdot \vec{p})] \cdot \vec{L} = L^2 p^2$$

③

由①②③, 则(2)得证。

$$\begin{aligned} (3) \quad & -(\vec{p} \times \vec{L}) \cdot (\vec{L} \times \vec{p}) \stackrel{4.7)(1)}{=} (\vec{p} \times \vec{L}) \cdot (\vec{p} \times \vec{L} - 2i\hbar \vec{p}) \\ & = (\vec{p} \times \vec{L})^2 - 2i\hbar (\vec{p} \times \vec{L}) \cdot \vec{p} \\ & \stackrel{4.7)(1)}{=} L^2 p^2 - 2i\hbar (2i\hbar \vec{p} - \vec{L} \times \vec{p}) \cdot \vec{p} \stackrel{(A)}{=} L^2 p^2 + 4\hbar^2 p^2 \end{aligned}$$

(4) 就此式的一个分量加以证明, 由4.4)(2),

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

$$\text{其中 } L_x \vec{p} = \vec{p} L_x + i\hbar (p_z \vec{e}_z - p_y \vec{e}_y)$$

$$(\text{即 } [L_x, p_x \vec{i} + p_y \vec{j} + p_z \vec{k}] = 0 + i\hbar p_z \vec{j} - i\hbar p_y \vec{k})$$

$$\begin{aligned} [(\vec{L} \times \vec{p}) \times (\vec{L} \times \vec{p})]_{\alpha} &= (\vec{L} \times \vec{p}) \cdot \vec{p} L_{\alpha} + i\hbar (\vec{L} \times \vec{p}) \cdot (p_z \vec{e}_z - p_y \vec{e}_y) - [(\vec{L} \times \vec{p}) \cdot \vec{L}] p_{\alpha} \\ &= i\hbar [(\vec{L} \times \vec{p}) \times \vec{p}]_{\alpha} = i\hbar [(\vec{L} \cdot \vec{p}) \vec{p} - \vec{L}(\vec{p} \cdot \vec{p})]_{\alpha} \\ &= (-i\hbar \vec{L} p^2)_{\alpha} = -i\hbar L_{\alpha} p^2 \end{aligned}$$

类似地。可以得到 y 分量和 z 分量的公式, 故(4)题得证。

$$4.9) \text{ 定义径向动量算符 } p_r = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r} \frac{1}{r} \right)$$

$$\text{证明: (a) } p_r^{\dagger} = p_r, \quad (b) \quad p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right),$$

$$(c) \quad [r, p_r] = i\hbar,$$

$$(d) \quad p_r^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r},$$

$$(e) \quad p^2 = \frac{1}{r^2} L^2 + p_r^2$$

$$\text{证: (a) } \because (\text{ABC})^{\dagger} = C^{\dagger} B^{\dagger} A^{\dagger},$$

$$\begin{aligned} \therefore p_r^{\dagger} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r} \frac{1}{r} \right)^{\dagger} = \frac{1}{2} \left[\vec{p}^{\dagger} \cdot \vec{r}^{\dagger} \left(\frac{1}{r} \right)^{\dagger} + \left(\frac{1}{r} \right)^{\dagger} \vec{r}^{\dagger} \cdot \vec{p}^{\dagger} \right] \\ &= \frac{1}{2} \left(\vec{p} \cdot \vec{r} \frac{1}{r} + \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} \right) = p_r \end{aligned}$$

即 p_r 为厄米算符。

$$\begin{aligned}
(b) \quad p_r &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r} \frac{1}{r} \right) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} \right) + \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} \right) + \left(-i\hbar \nabla \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) \right] \\
&= \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} - \frac{i\hbar}{2} \left(\nabla \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) = -i\hbar \frac{\vec{r}}{r} \cdot \nabla - \frac{i\hbar}{2} \left[\frac{1}{r} \nabla \cdot \vec{r} + \vec{r} \cdot \nabla \frac{1}{r} \right] \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{3}{r} - \vec{r} \cdot \frac{\vec{r}}{r^3} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{3}{r} - \frac{1}{r} \right) \\
&= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(c) \quad [r, p_r] &= -i\hbar \left[r, \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right] = -i\hbar \left[r, \frac{\partial}{\partial r} \right] = -i\hbar \left(r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r} r \right) \\
&= -i\hbar \left(r \frac{\partial}{\partial r} - 1 - r \frac{\partial}{\partial r} \right) = i\hbar
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(d) \quad p_r^2 &\stackrel{(b)}{=} -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} + \frac{1}{r^2} \right) \\
&= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} + \frac{1}{r^2} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\
&= -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}
\end{aligned}$$

(e) 据 4.8) (1), $L^2 = r^2 \cdot p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p}$ 。

其中 $\vec{r} \cdot \vec{p} = -i\hbar \vec{r} \cdot \nabla = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}$,

$$\begin{aligned}
\text{因而} \quad L^2 &= r^2 p^2 + \hbar^2 \left(r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \\
&= r^2 p^2 + \hbar^2 \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r} \right)
\end{aligned}$$

以 r^{-2} 左乘上式各项, 即得

$$p^2 = \frac{1}{r^2} L^2 - \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \stackrel{4.9)(d)}{=} \frac{1}{r^2} L^2 + p_r^2$$

4.10) 利用测不准关系估算谐振子的基态能量。

解: 一维谐振子能量 $E_x = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ 。

又 $\bar{x} = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0$ 奇, $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$, $\overline{p_x} = 0$,

(由(3.6)、(3.7)题可知 $\bar{x} = 0, \overline{p_x} = 0$)

$$\therefore \Delta x = x - \bar{x} = x, \quad \Delta p_x = p_x - \bar{p}_x = p_x,$$

由测不准关系, $\Delta x \Delta p_x = \hbar/2$, 得 $p_x = \hbar/2x$ 。

$$\therefore E_x = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{2x} \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$\frac{dE_x}{dx} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(-\frac{2}{x^3} \right) + m\omega^2 x = 0, \quad \text{得} \quad x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$E_{0x} = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

$$\text{同理有 } E_{0y} = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad E_{0z} = \frac{1}{2} \hbar \omega。$$

$$\therefore \text{谐振子(三维)基态能量 } E_0 = E_{0x} + E_{0y} + E_{0z} = \frac{3}{2} \hbar \omega。$$

4.11) 利用测不准关系估算类氢原子中电子的基态能量。

解: 类氢原子中有关电子的讨论与氢原子的讨论十分相似, 只是把氢原子中有关公式中的核电荷数 $+e$ 换成 $+ze$

(z 为氢原子系数) 而 u 理解为相应的约化质量。故玻尔轨迹半径 $a_0 = \hbar^2/ue^2$, 在类氢原子中变为 $a = a_0/z$ 。

类氢原子基态波函数 $\psi_{100} = \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}} e^{-r/a}$, 仅是 r 的函数。

而 $\nabla = e_r \frac{d}{dr} + e_\theta \frac{1}{r} \frac{d}{d\theta} + e_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{d}{d\phi}$, 故只考虑径向测不准关系 $\Delta p_r \Delta r \sim \hbar$, 类氢原子径向能量为:

$$E = \frac{p_r^2}{2u} - \frac{ze^2}{r}。$$

而 $H = \frac{p^2}{2u} - \frac{ze^2}{r}$, 如果只考虑基态, 它可写为

$$H = \frac{p_r^2}{2u} - \frac{ze^2}{r}, \quad p_r = -i\hbar \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right)$$

p_r 与 r 共轭, 于是 $\Delta p_r \Delta r \sim \hbar$, $\Delta r \sim \bar{r}$,

$$E = \frac{\overline{p_r^2}}{2u} - \frac{\overline{ze^2}}{r} \sim \frac{\hbar^2}{2m\bar{r}^2} - \frac{ze^2}{\bar{r}} \quad (1)$$

$$\text{求极值} \quad 0 = \frac{\partial E}{\partial \bar{r}} = \frac{-\hbar^2}{m\bar{r}^3} + \frac{ze^2}{\bar{r}}$$

由此得 $\bar{r} = \hbar^2/mze^2 = a_0/z = a$ (a_0 : 玻尔半径; a : 类氢原子中的电子基态“轨迹”半径)。代入(1)式, 得

基态能量, $E \sim -mz^2 e^4 / 2\hbar^2 = -ze^2 / 2a$

运算中做了一些不严格的代换, 如 $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \sim 1 / \langle r \rangle$, 作为估算是允许的。

4.12) 证明在分立的能量本征态下动量平均值为 0。

证: 设定态波函数的空间部分为 $|\psi\rangle$, 则有 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

为求 \vec{p} 的平均值, 我们注意到坐标算符 x_i 与 H 的对易关系:

$$[x_i, H] = \left[x_i, \sum_j p_j p_j / 2u + V(\vec{x}) \right] = i\hbar p_i / u。$$

这里已用到最基本的对易关系 $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$, 由此

$$\begin{aligned} \overline{p_i} &= \left\langle \Psi \left| \hat{p}_i \right| \Psi \right\rangle = \frac{u}{i\hbar} \langle \Psi | [x_i, H] | \Psi \rangle \\ &= \frac{u}{i\hbar} \left(\langle \Psi | x_i H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H x_i | \Psi \rangle \right) \\ &= \frac{u}{i\hbar} \left(\langle \Psi | x_i E | \Psi \rangle - \langle \Psi | E x_i | \Psi \rangle \right) = 0 \end{aligned}$$

这里用到了 H 的厄米性。

这一结果可作一般结果推广。如果厄米算符 \hat{C} 可以表示为两个厄米算符 \hat{A} 和 \hat{B} 的对易子 $\hat{C} = i[\hat{A}, \hat{B}]$, 则在

\hat{A} 或 \hat{B} 的本征态中, \hat{C} 的平均值必为 0。

4.13) 证明在 L_z 的本征态下, $\overline{L_x} = \overline{L_y} = 0$ 。

(提示: 利用 $L_y L_z - L_z L_y = i\hbar L_x$, 求平均。)

证: 设 $|\psi\rangle$ 是 L_z 的本征态, 本征值为 $m\hbar$, 即 $L_z |\psi\rangle = m\hbar |\psi\rangle$

$$\therefore [L_y, L_z] = L_y L_z - L_z L_y = i\hbar L_x,$$

$$[L_z, L_x] = L_z L_x - L_x L_z = i\hbar L_y,$$

$$\begin{aligned} \therefore \overline{L_x} &= \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \Psi | L_y L_z | \Psi \rangle - \langle \Psi | L_z L_y | \Psi \rangle \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \Psi | L_y L_z | \Psi \rangle - \langle \Psi | L_z L_y | \Psi \rangle \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(m\hbar \langle \Psi | L_y | \Psi \rangle - m\hbar \langle \Psi | L_y | \Psi \rangle \right) = 0 \end{aligned}$$

同理有: $\overline{L_y} = 0$ 。

4.14) 设粒子处于 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 状态下, 求 $\overline{(\Delta L_x)^2}$ 和 $\overline{(\Delta L_y)^2}$

解: 记本征态 Y_{lm} 为 $|lm\rangle$, 满足本征方程

$$L^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle, \quad L_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle, \quad \langle lm|L_z = m\hbar\langle lm|,$$

利用基本对易式 $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar\vec{L}$,

$$\begin{aligned} \text{可得算符关系 } i\hbar L_x^2 &= i\hbar L_x L_x = (L_y L_z - L_z L_y)L_x = L_y(L_z L_x) - L_z L_y L_x \\ &= L_y(L_x L_z + i\hbar L_y) - L_z L_y L_x = i\hbar L_y^2 + L_y L_x L_z - L_z L_y L_x \end{aligned}$$

将上式在 $|lm\rangle$ 态下求平均, 因 L_z 作用于 $|lm\rangle$ 或 $\langle lm|$ 后均变成本征值 $m\hbar$, 使得后两项对平均值的贡献互相抵

消, 因此 $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle$

$$\text{又} \because \quad \langle L_x^2 + L_y^2 \rangle = \langle \vec{L}^2 - L_z^2 \rangle = [l(l+1) - m^2] \hbar^2$$

$$\therefore \quad \langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \hbar^2$$

上题已证 $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$ 。

$$\therefore \quad \overline{(\Delta L_x)^2} = \overline{(L_x - \overline{L_x})^2} = \overline{L_x^2} - \overline{L_x}^2 = \overline{L_x^2} = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \hbar^2$$

$$\text{同理 } \overline{(\Delta L_y)^2} = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \hbar^2。$$

4.15) 设体系处于 $\psi = C_1 Y_{11} + C_2 Y_{20}$ 状态 (已归一化, 即 $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$), 求

- (a) L_z 的可能测值及平均值;
- (b) L^2 的可能测值及相应的几率;
- (c) L_x 的可能测值及相应的几率。

$$\text{解: } \because \quad L^2 Y_{11} = 2\hbar^2 Y_{11}, \quad L^2 Y_{20} = 6\hbar^2 Y_{20};$$

$$L_z Y_{11} = \hbar Y_{11}, \quad L_z Y_{20} = 0\hbar Y_{20}。$$

(a) 由于 ψ 已归一化, 故 L_z 的可能测值为 \hbar , 0 , 相应的几率为 $|C_1|^2$, $|C_2|^2$ 。平均值 $\overline{L_z} = |C_1|^2 \hbar$ 。

(b) L^2 的可能测值为 $2\hbar^2$, $6\hbar^2$, 相应的几率为 $|C_1|^2$, $|C_2|^2$ 。

(c) 若 C_1, C_2 不为 0, 则 L_x (及 L_y) 的可能测值为: $2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$ 。

$$1) \quad L_x \text{ 在 } l=1 \text{ 的空间, } (L^2, L_z) \text{ 对角化的表象中的矩阵是 } \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

求本征矢并令 $\hbar = 1$, 则 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$,

得, $b = \sqrt{2}\lambda a$, $a + c = \sqrt{2}\lambda b$, $b = \sqrt{2}\lambda c$. $\lambda = 0, \pm 1$.

i) 取 $\lambda = 0$, 得 $b = 0$, $c = -a$, 本征矢为 $\begin{pmatrix} a \\ 0 \\ -a \end{pmatrix}$, 归一化后可得本征矢为 $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$.

ii) 取 $\lambda = 1$, 得 $b = \sqrt{2}a = \sqrt{2}c$, 本征矢为 $\begin{pmatrix} a \\ \sqrt{2}a \\ a \end{pmatrix}$, 归一化后可得本征矢为 $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$.

iii) 取 $\lambda = -1$, 得 $b = -\sqrt{2}a = -\sqrt{2}c$, 归一化后可得本征矢为 $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$.

在 $C_1 Y_{11} = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 态下, L_x 取 0 的振幅为 $C_1 (1 \ 0 \ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = C_1 / \sqrt{2}$, L_x 取 0 的几率为 $|C_1|^2 / 2$; L_x 取

\hbar 的振幅为 $C_1 (1 \ 0 \ 0) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = C_1 / 2$, 相应的几率为 $|C_1|^2 / 4$;

L_x 取 $-\hbar$ 的振幅为 $C_1 (1 \ 0 \ 0) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = C_1 / 2$, 相应的几率为 $|C_1|^2 / 4$. 总几率为 $|C_1|^2$.

2) L_x 在 $l = 2$ 的空间, (L^2, L_z) 对角化表象中的矩阵

利用 $\langle j \ m + 1 | j_x | j \ m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j - m)(j + m + 1)}$

$\langle j \ m - 1 | j_x | j \ m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j + m)(j - m + 1)}$

$\therefore \langle 2 \ 2 | j_x | 2 \ 1 \rangle = 1$, $\langle 2 \ 1 | j_x | 2 \ 0 \rangle = \sqrt{\frac{3}{2}}$, $\langle 2 \ 0 | j_x | 2 \ -1 \rangle = \sqrt{\frac{3}{2}}$, $\langle 2 \ -1 | j_x | 2 \ -2 \rangle = 1$.

$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, 本征方程 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix}$

$$b = \lambda a, \quad a + \sqrt{\frac{3}{2}}c = \lambda b, \quad \sqrt{\frac{3}{2}}(b+d) = \lambda c, \quad \sqrt{\frac{3}{2}}c + e = \lambda d, \quad d = \lambda e, \quad \lambda = 0, \pm 1, \pm 2.$$

$$\text{i) } \lambda = 0, \quad b = 0, \quad a = -\sqrt{\frac{3}{2}}c, \quad d = 0, \quad e = -\sqrt{\frac{3}{2}}c \text{ 本征矢为 } \sqrt{\frac{3}{8}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \text{ 在 } C_2 Y_{20} = C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ 态下, 测得 } L_x = 0$$

$$\text{的振幅为 } C_2 (0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0) \sqrt{\frac{3}{8}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{C_2}{2}. \text{ 几率为 } |C_2|^2 / 4;$$

$$\text{ii) } \lambda = 1, \quad b = a, \quad c = 0, \quad d = -b, \quad d = e, \text{ 本征矢为 } \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}. \text{ 在 } C_2 Y_{20} \text{ 态下, 测得 } L_x = \hbar \text{ 的振幅为}$$

$$C_2 (0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0, \text{ 几率为 } 0.$$

$$\text{iii) } \lambda = -1, \quad b = -a, \quad c = 0, \quad d = -b, \quad e = -d, \text{ 本征矢为 } \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ 在 } C_2 Y_{20} \text{ 态下, 测得 } L_x = -\hbar \text{ 几率为 } 0.$$

$$\text{iv) } \lambda = 2, \quad b = 2a, \quad c = \sqrt{6}a, \quad d = 2e = 2a, \quad e = \frac{c}{\sqrt{6}} = a, \text{ 本征矢为 } \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \sqrt{6} \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ 在 } C_2 Y_{20} \text{ 态下, 测得 } L_x = 2\hbar$$

$$\text{的振幅为 } C_2 (0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0) \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \sqrt{6} \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{6}}{4} C_2. \text{ 几率为 } \frac{3}{8} |C_2|^2;$$

v) $\lambda = -2$, $b = -2a$, $c = \sqrt{6}a$, $d = -2a$, $e = a$, 本征矢为 $\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ \sqrt{6} \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$, 在 C_2Y_{20} 态下, 测得 $L_x = -2\hbar$ 的

几率为 $\frac{3}{8}|C_2|^2$ 。

$$\therefore \left(\frac{3}{8} + \frac{3}{8} + \frac{1}{4}\right)|C_2|^2 = |C_2|^2。$$

在 $\psi = C_1Y_{11} + C_2Y_{20}$ 态中, 测 L_x (和 L_y) 的可能值及几率分别为:

$$\begin{array}{ccccc} 2\hbar & \hbar & 0 & -\hbar & -2\hbar \\ \frac{3}{8}|C_2|^2 & \frac{1}{4}|C_1|^2 & \frac{1}{2}|C_1|^2 + \frac{1}{4}|C_2|^2 & \frac{1}{4}|C_1|^2 & \frac{3}{8}|C_2|^2 \end{array}$$

4.16) 设属于能级 E 有三个简并态 ψ_1 , ψ_2 和 ψ_3 , 彼此线性独立, 但不正交, 试利用它们构成一组彼此正交归一的波函数。

解: $\varphi_1 = a\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{(\psi_1, \psi_1)}}\psi_1$

$$\varphi_2' = \psi_2 - (\varphi_1, \psi_2)\varphi_1, \quad \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{(\varphi_2', \varphi_2')}}\varphi_2'$$

$$\varphi_3' = \psi_3 - (\varphi_1, \psi_3)\varphi_1 - (\varphi_2, \psi_3)\varphi_2, \quad \varphi_3 = \frac{1}{\sqrt{(\varphi_3', \varphi_3')}}\varphi_3'$$

$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ 是归一化的。

$$(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{1}{\sqrt{(\varphi_2', \varphi_2')}} [(\varphi_1, \psi_2) - (\varphi_1, \psi_2)(\varphi_1, \varphi_1)] = 0,$$

$$(\varphi_1, \varphi_3) = \frac{1}{\sqrt{(\varphi_3', \varphi_3')}} [(\varphi_1, \psi_3) - (\varphi_1, \psi_3)(\varphi_1, \varphi_1) - (\varphi_2, \psi_3)(\varphi_1, \varphi_2)] = 0,$$

$$(\varphi_2, \varphi_3) = \frac{1}{\sqrt{(\varphi_3', \varphi_3')}} [(\varphi_2, \psi_3) - (\varphi_1, \psi_3)(\varphi_2, \varphi_1) - (\varphi_2, \psi_3)(\varphi_2, \varphi_2)] = 0。$$

\therefore 它们是正交归一的, 但仍然是简并的 (可验证: 它们仍对应于同一能级)。

4.17) 设有矩阵 A, B, C, S 等, 证明

$$\det(AB) = \det(A) \cdot \det(B), \quad \det(S^{-1}AS) = \det A,$$

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA), \quad \text{Tr}(S^{-1}AS) = \text{Tr}A, \quad \text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB),$$

$\det A$ 表示矩阵 A 相应的行列式得值, $\text{Tr}A$ 代表矩阵 A 的对角元素之和。

证: (1) 由定义 $\det A = \sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) a_{1i_1} a_{2i_2} \cdots a_{ni_n}$,

$$P(i_1 \cdots i_n) = \begin{cases} 1 & \text{当}(i_1 \cdots i_n)\text{是}(1 \cdots n)\text{的偶置换} \\ -1 & \text{当}(i_1 \cdots i_n)\text{是}(1 \cdots n)\text{的奇置换} \\ 0 & \text{其他情形} \end{cases}$$

故上式可写成: $\det A = \sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) P(j_1 \cdots j_n) a_{j_1 i_1} a_{j_2 i_2} \cdots a_{j_n i_n}$,

其中 $(j_1 \cdots j_n)$ 是 $(1 \cdots n)$ 的任意一个置换。

$$\begin{aligned} \therefore \det C &= \det(AB) = \sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) C_{1i_1} C_{2i_2} \cdots C_{ni_n} \\ &= \sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) \sum_{j_1 \cdots j_n} a_{1j_1} b_{j_1 i_1} a_{2j_2} b_{j_2 i_2} \cdots a_{nj_n} b_{j_n i_n} \\ &= \sum_{j_1 \cdots j_n} a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n} \left[\sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) b_{j_1 i_1} b_{j_2 i_2} \cdots b_{j_n i_n} \right] \\ &= \sum_{j_1 \cdots j_n} P(j_1 \cdots j_n) a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n} \left[\sum_{i_1 \cdots i_n} P(i_1 \cdots i_n) P(j_1 \cdots j_n) b_{j_1 i_1} b_{j_2 i_2} \cdots b_{j_n i_n} \right] \\ &= \det A \cdot \det B \end{aligned}$$

$$(2) \det(S^{-1}AS) = \det S^{-1} \cdot \det A \cdot \det S = \det S^{-1} \cdot \det S \cdot \det A$$

$$= \det(S^{-1}S) \cdot \det A = \det A$$

$$(3) \operatorname{Tr}(AB) = \sum_{ik} a_{ik} b_{ki} = \sum_{ik} b_{ki} a_{ik} = \operatorname{Tr}(BA)$$

$$(4) \operatorname{Tr}(S^{-1}AS) = \operatorname{Tr}[S^{-1}(AS)] = \operatorname{Tr}[(AS)S^{-1}] = \operatorname{Tr}(ASS^{-1}) = \operatorname{Tr}A$$

$$(5) \operatorname{Tr}(ABC) = \sum_{ijk} a_{ij} b_{jk} c_{ki} = \sum_{ijk} b_{jk} c_{ki} a_{ij} = \operatorname{Tr}(BCA) = \sum_{ijk} c_{ki} a_{ij} b_{jk} = \operatorname{Tr}(CAB)$$

第五章 力学量随时间的变化与对称性

5.1) 设力学量 A 不显含 t , H 为本体系的 Hamilton 量, 证明

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \bar{A} = \overline{[A, H], H}$$

证. 若力学量 A 不显含 t , 则有 $\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A, H]$,

$$\text{令 } \overline{[A, H]} = \bar{C}$$

$$\text{则 } \frac{d^2 \bar{A}}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar} \frac{d\bar{C}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \overline{[C, H]} = -\frac{1}{\hbar^2} \overline{[C, H]},$$

$$\therefore -\hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \bar{A} = \overline{[A, H], H}$$

5.2) 设力学量 A 不显含 t , 证明束缚定态, $\frac{d\bar{A}}{dt} = 0$

证: 束缚定态为: $\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r})e^{-iE_n t/\hbar}$ 。

在束缚定态 $\psi_n(\vec{r}, t)$, 有 $H\psi_n(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\vec{r}, t) = E_n \psi_n(\vec{r}, t)$ 。

其复共轭为 $H^* \psi_n^*(\vec{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n^*(\vec{r}, t) e^{iE_n t/\hbar} = E_n \psi_n^*(\vec{r}, t)$ 。

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{A}}{dt} &= \left(\frac{\partial \psi_n}{\partial t}, A \psi_n \right) + \left(\psi_n, A \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \right) + \left(\psi_n, \frac{\partial A}{\partial t} \psi_n \right) = \left(\frac{H\psi_n}{i\hbar}, A \psi_n \right) + \left(\psi_n, A \frac{H\psi_n}{i\hbar} \right) + \left(\psi_n, \frac{\partial A}{\partial t} \psi_n \right) \\ &= -\frac{E_n}{i\hbar} (\psi_n, A \psi_n) + \frac{E_n}{i\hbar} (\psi_n, A \psi_n) = 0 \end{aligned}$$

5.3) $D_x(a) = \exp\left\{-a \frac{\partial}{\partial x}\right\} = \exp\{-iaP_x/\hbar\}$ 表示沿 x 方向平移距离 a 算符. 证明下列形式波函数 (Bloch 波函数)

$$\psi(x) = e^{ikx} \phi_k(x), \phi_k(x+a) = \phi_k(x)$$

是 $D_x(a)$ 的本征态, 相应的本征值为 e^{-ika}

证: $D_x(a)\psi(x) = \psi(x+a) = e^{ik(x+a)} \phi_k(x+a)$

$$= e^{ika} \cdot e^{ikx} \phi_k(x) = e^{ika} \psi(x), \text{证毕。}$$

5.4) 设 $|m\rangle$ 表示 L_z 的本征态 (本征值为 $m\hbar$), 证明

$$e^{-ikL_z \varphi/\hbar} e^{-ikL_y \theta/\hbar} |m\rangle$$

是角动量 \vec{L} 沿空间 (θ, φ) 方向的分量 L_n

$$L_x \sin \theta \cos \varphi + L_y \sin \theta \sin \varphi + L_z \cos \theta = L_n = \vec{L} \cdot \vec{n}$$

的本征态。

证: 算符 $e^{-ikL_y \theta/\hbar}$ 相当于将体系绕 y 轴转 θ 角, 算符 $e^{-ikL_z \varphi/\hbar}$ 相当于将体系绕 z 轴转 φ 角, $|m\rangle$ 原为 L_z 的本征态,

本征值为 $m\hbar$, 经过两次转动, 固定于体系的坐标系 (即随体系一起转动的坐标系) 的 z' 轴 (开始时和实验室 z 轴重合) 已转到实验室坐标系的 (θ, φ) 方向, 即 \vec{n} 方向, $Y_{lm} = |m\rangle$ 变成了 ψ , 即变成了 L_n 的本征态。本征值是状态的物理属性, 不受坐标变换的影响, 故仍为 $m\hbar$ 。

5.5) 设 Hamilton 量 $H = \frac{P^2}{2u} + V(\vec{r})$ 。证明下列求和规则

$$\sum_n (E_n - E_m) |x_{nm}|^2 = \hbar^2 / 2u。$$

x 是 \vec{r} 的一个分量, \sum_n 是对一切定态求和, E_n 是相应于 n 态的能量本征值, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ 。

$$\text{证: } [x, H] = \frac{1}{2u} [x, p_x^2] = \frac{1}{2u} \cdot 2i\hbar p_x = \frac{i\hbar}{u} p_x \quad (\Delta)$$

$$\begin{aligned} A &= \sum_n (E_n - E_m) |x_{nm}|^2 = \sum_n \langle m|x|n \rangle \langle n|(E_n - E_m)x|m \rangle = \sum_n \langle m|x|n \rangle [\langle n|Hx|m \rangle - \langle n|xH|m \rangle] \\ &= -\sum_n \langle m|x|n \rangle \langle n|[x, H]m \rangle \stackrel{(\Delta)}{=} -\frac{1}{2u} \sum_n \langle m|x|n \rangle \langle n|[x, p_x^2]m \rangle = -\frac{i\hbar}{u} \sum_n \langle m|x|n \rangle \langle n|p_x|m \rangle \\ &= -\frac{i\hbar}{u} \langle m|x p_x|m \rangle \end{aligned}$$

$$\text{又 } A = \sum_n \langle m|(E_n - E_m)x|n \rangle \langle n|x|m \rangle = \sum_n \langle m|[x, H]n \rangle \langle n|x|m \rangle \stackrel{(\Delta)}{=} +\frac{i\hbar}{u} \sum_n \langle m|p_x x|m \rangle$$

$$\therefore 2A = \frac{i\hbar}{u} \langle m|(p_x x - x p_x)|m \rangle = -\frac{i\hbar}{u} \langle m|[x, p_x^2]|m \rangle = \frac{-i\hbar}{u} \cdot i\hbar = \frac{\hbar^2}{u},$$

$$\therefore A = \sum_n (E_n - E_m) |x_{nm}|^2 = \frac{\hbar^2}{2u}.$$

不难得出, 对于 Y, Z 分量, 亦有同样的结论, 证毕。

5.6) 设 $F(\vec{r}, \vec{p})$ 为厄米算符, 证明能量表象中求和规则为

$$\sum_n (E_n - E_k) |F_{nk}|^2 = \frac{1}{2} \langle k|[F, [H, F]]k \rangle \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \text{证: 式 (1) 左端} &\stackrel{\text{①}}{=} A = \sum_n (E_n - E_k) \langle k|F|n \rangle \langle n|F|k \rangle = \sum_n \langle k|F|n \rangle \langle n|(HF - FH)|k \rangle \\ &= \langle k|F[H, F]|k \rangle \quad (2) \end{aligned}$$

计算中用到了公式 $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$ 。

由于 H, F 是厄米算符, 有下列算符关系:

$$*[H, F]^+ = (HF - FH)^+ = F^+ H^+ - H^+ F^+ = FH - HF = -[H, F] \quad (3)$$

式 (2) 取共轭⁽⁺⁾, 得到

$$A = A^+ = \langle k|[F, [H, F]]k \rangle^+ = \langle k|[H, F]^+ F^+|k \rangle \stackrel{(3)}{=} -\langle k|[H, F]F|k \rangle \quad (4)$$

结合式 (2) 和 (4), 得

$$A = \sum_n (E_n - E_k) |F_{nk}|^2 = \frac{1}{2} \langle k|[F, [H, F]]k \rangle \quad \text{证毕。}$$

5.7) 证明 schrödinger 方程变换在 Galileo 变换下的不变性, 即设惯性参照系 K' 的速度 v 相对于惯性参照系 K 运动 (沿 x 轴方向), 空间任何一点 两个参照系中的坐标满足下列关系:

$$x = x' + vt, y = y', z = z', t = t' \quad (1)$$

势能在两个参照系中的表示式有下列关系

$$V'(x', t') = V'(x' - vt, t) = V(x, t) \quad (2)$$

证明 schrodinger 方程在 K' 参照系中表为 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi' = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V' \right) \psi'$

$$\text{在 } K \text{ 参照系中表为} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi$$

$$\text{其中} \quad \psi = \exp \left[i \left(\frac{mv}{\hbar} x - \frac{mv^2}{2\hbar} t \right) \right] \psi'(x - vt, t)$$

证：由波函数的统计解释， ψ 和 ψ' 的意义完全相同。

$|\psi(x, t)|^2 = \omega(x, t)$ ，是 t 时刻在 x 点找到粒子的几率密度；

$|\psi'(x', t')|^2 = \omega'(x', t')$ ，是 t' 时刻在 x' 点找到粒子的几率密度。

但是在给定时刻，给定地点发现粒子的几率应与参照系的选择无关，所以相应的几率应相等，即

$$\omega(x, t) = \omega'(x', t') \quad (6)$$

$$\text{从 (1) 式有} \quad \omega'(x - vt, t) = \omega(x, t) \quad (6')$$

由此可以得出， ψ 和 ψ' 两个波函数彼此只应差绝对值为 1 的相因子，所以

$$\psi(x, t) = e^{iS} \psi'(x', t') = e^{iS(x, t)} \psi'(x - vt, t) \quad (7)$$

$$\psi'(x - vt, t) = e^{-iS(x, t)} \psi(x, t) \quad (7')$$

$$\text{由 (1) 式,} \quad \frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial t'} = v \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x'^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$(3) \text{ 式变为: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi'(x', t') + V'(x', t') \psi'(x', t')$$

$$= i\hbar v \frac{\partial}{\partial x} \psi'(x', t') + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(x', t') \quad (8)$$

将 (7') 代入 (8) 式，可得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + i\hbar \left(\frac{\hbar}{m} \frac{\partial S}{\partial x} - v \right) \frac{\partial \psi}{\partial x} + \left[V(x, t) + i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - \hbar v \frac{\partial S}{\partial x} - \hbar \frac{\partial S}{\partial t} \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (9)$$

选择适当的 $S(x, t)$ ，使得 (9) \rightarrow (4)，

$$\frac{\hbar}{m} \frac{\partial S}{\partial x} - v = 0 \quad (10)$$

$$i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - \hbar v \frac{\partial S}{\partial x} - \hbar \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (10')$$

$$\text{从 (10) 可得} \quad S = \frac{m\nu}{\hbar}x + f(t) \quad (11)$$

$f(t)$ 是 t 的任意函数, 将 (11) 代入 (10'), 可得

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{m\nu^2}{2\hbar}$$

$$\text{积分, 得} \quad f(t) = -\frac{m\nu^2}{2\hbar}t + C$$

C 为积分常数, 但 $\nu = 0$ 时, K' 系和 K 系重合, ψ' 应等于 ψ , 即 S 应等于 0, 故应取 $C = 0$, 从而得到

$$S = \frac{m\nu}{\hbar}x - \frac{m\nu^2}{2\hbar}t \quad (12)$$

代入 (7') 式, 最后得到波函数的变换规律:

$$\psi' = \psi \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\left(m\nu x - \frac{1}{2}m\nu^2 t\right)\right] \quad (13)$$

$$\text{逆变换为} \quad \psi = \psi' e^{iS} = \psi' \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(m\nu x' + \frac{1}{2}m\nu^2 t'\right)\right] \quad (13')$$

相当于式 (13) 中的 $\nu \rightarrow -\nu$, 带“,” 的量和不带“,” 的量互换。

讨论: $S(x, t)$ 的函数形式也可用下法求出:

因 $S(x, t)$ 和势能 V 无关, 所以只需要比较平面波 (自由粒子) 在 K 和 K' 系中的表现形式, 即可确定 $S(x, t)$.

沿 x 方向运动的自由粒子, 在伽利略变换下, 动量、能量的变换关系为

$$\begin{aligned} P' &= P - m\nu \\ E' &= \frac{P'^2}{2m} = \frac{P^2}{2m} - \nu P + \frac{1}{2}m\nu^2 = E - \nu P + \frac{1}{2}m\nu^2 \end{aligned} \quad (14)$$

据此, K 系和 K' 系中相应的平面波波函数为

$$\psi = e^{i(Px - Et)/\hbar}, \quad \psi' = e^{i(P'x' - E't')/\hbar} \quad (15)$$

(1)、(14) 代入 (15), 即得

$$\psi' = \psi \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\left(m\nu x - \frac{1}{2}m\nu^2 t\right)\right]$$

此即 (13) 式, 由于这个变换关系仅取决于 K 和 K' 系的相对速度 ν , 而与粒子的动量 P 无关, 所以上式适用于任何自由粒子。它正是所求的变换关系。

第六章 中心力场

6.1) 利用 6.1.3 节中式 (17)、(18), 证明下列关系式

$$\text{相对动量} \quad \bar{p} = \mu \dot{\bar{r}} = \frac{1}{M}(m_2 \bar{p}_1 - m_1 \bar{p}_2) \quad (1)$$

$$\text{总动量} \quad \bar{P} = M \dot{\bar{R}} = \bar{p}_1 + \bar{p}_2 \quad (2)$$

$$\text{总轨迹角动量} \quad \bar{L} = \bar{L}_1 + \bar{L}_2 = \bar{r}_1 \times \bar{p}_1 + \bar{r}_2 \times \bar{p}_2 = \bar{R} \times \bar{P} + \bar{r} \times \bar{p} \quad (3)$$

$$\text{总动能} \quad T = \frac{\bar{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\bar{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\bar{P}^2}{2M} + \frac{\bar{p}^2}{2\mu} \quad (4)$$

$$\text{反之, 有} \quad \bar{r}_1 = \bar{R} + \frac{\mu}{m_1} \bar{r}, \quad \bar{r}_2 = \bar{R} - \frac{\mu}{m_2} \bar{r} \quad (5)$$

$$\vec{p}_1 = \frac{\mu}{m_2} \vec{P} + \vec{p}, \quad \vec{p}_2 = \frac{\mu}{m_1} \vec{P} - \vec{p} \quad (6)$$

以上各式中, $M = m_1 + m_2$, $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$

$$\text{证:} \quad \bar{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad (17) \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (18)$$

$$\text{相对动量} \quad \bar{p} = \mu \dot{\bar{r}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \left(\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2 \right) = \frac{1}{M} (m_2 \bar{p}_1 - m_1 \bar{p}_2) \quad (1')$$

$$\text{总动量} \quad \bar{P} = M \dot{\bar{R}} = (m_1 + m_2) \frac{m_1 \dot{\vec{r}}_1 + m_2 \dot{\vec{r}}_2}{m_1 + m_2} = \bar{p}_1 + \bar{p}_2 \quad (2')$$

$$\text{总轨迹角动量} \quad \bar{L} = \bar{L}_1 + \bar{L}_2 = \bar{r}_1 \times \bar{p}_1 + \bar{r}_2 \times \bar{p}_2$$

$$\begin{aligned} &= \left(\bar{R} + \frac{u}{m_1} \bar{r} \right) \times \bar{p}_1 + \left(\bar{R} - \frac{u}{m_2} \bar{r} \right) \times \bar{p}_2 \\ &= \bar{R} \times (\bar{p}_1 + \bar{p}_2) + \bar{r} \times \frac{1}{M} (m_2 \bar{p}_1 - m_1 \bar{p}_2) \\ &\stackrel{(1)(2)}{=} \bar{R} \times \bar{P} + \bar{r} \times \bar{p} \end{aligned}$$

由 (17)、(18) 可解出 \bar{r}_1, \bar{r}_2 , 即 (5) 式; 由 (1') (2') 可解出 (6)。

$$\begin{aligned} \text{总动能} \quad T &= \frac{\bar{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\bar{p}_2^2}{2m_2} \stackrel{(6)}{=} \frac{\left(\frac{\mu}{m_2} \bar{P} + \bar{p} \right)^2}{2m_1} + \frac{\left(\frac{\mu}{m_1} \bar{P} - \bar{p} \right)^2}{2m_2} \\ &= \frac{u^2}{2m_1 m_2^2} \bar{P}^2 + \frac{\bar{p}^2}{2m_1} + \frac{u \bar{P} \cdot \bar{p}}{m_1 m_2} + \frac{u^2}{2m_1^2 m_2} \bar{P}^2 + \frac{\bar{p}^2}{2m_2} - \frac{u \bar{P} \cdot \bar{p}}{m_1 m_2} \\ &= \frac{m_1}{2(m_1 + m_2)^2} \bar{P}^2 + \frac{m_2}{2(m_1 + m_2)^2} \bar{P}^2 + \frac{1}{2} \bar{p}^2 \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \end{aligned}$$

$$= \frac{\bar{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} \quad (4')$$

[从 (17), (18) 式可解出 (5) 式; 从 (1), (2) 式可解出 (6) 式].

6.2) 同上题, 求坐标表象中 \vec{p} 、 \vec{P} 和 \vec{L} 的算术表示式

$$\vec{p} = -i\hbar\nabla_r, \quad \vec{P} = -i\hbar\nabla_R, \quad \vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} + \vec{r} \times \vec{p}$$

$$\text{解: } \vec{p} = \frac{1}{M} (m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2) = \frac{-i\hbar}{M} (m_2 \nabla_{r_1} - m_1 \nabla_{r_2}) \quad (1)$$

$$\text{其中 } \nabla_{r_1} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x_1} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y_1} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z_1},$$

$$\text{而 } \frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\text{同理, } \frac{\partial}{\partial y_1} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial Y} + \frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{\partial}{\partial z_1} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial Z} + \frac{\partial}{\partial z};$$

(利用上题 (17) (18) 式。)

$$\therefore \nabla_{r_1} = \frac{m_1}{M} \nabla_R + \nabla_r; \quad \text{仿此可设 } \nabla_{r_2} = \frac{m_1}{M} \nabla_R - \nabla_r \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \text{代入 (1) 中, 得 } \vec{p} &= \frac{-i\hbar}{M} \left(\frac{m_1 m_2}{M} \nabla_R + m_2 \nabla_r - \frac{m_1 m_2}{M} \nabla_R + m_1 \nabla_r \right) \\ &= -i\hbar \nabla_r \end{aligned} \quad (3)$$

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = -i\hbar (\nabla_{r_1} + \nabla_{r_2}) \stackrel{(2)}{=} -i\hbar \nabla_R \quad (4)$$

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P} + \vec{r} \times \vec{p}$$

只要将 (3)、(4) 式中的 \vec{p} 、 \vec{P} 以相应的算符代入即可。

6.3) 利用氢原子能级公式, 讨论下列体系的能谱:

(a) 电子偶素 (positronium, 指 $e^+ - e^-$ 束缚体系)

(b) u 原子 (muonic atom)

(c) u 子偶素 (muonium, 指 $u^+ - u^-$ 束缚体系)

解: 由氢原子光谱理论, 能级表达式为:

$$E_n = -\frac{ue^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad u = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}.$$

$$\text{(a) 电子偶素能级 } E_n = -\frac{ue^4}{4\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (u = \frac{m_e m_e}{m_e + m_e} = \frac{m_e}{2})$$

(b) u 原子能级 $E_n = -\frac{u_u e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, ($u_u = \frac{m_u m_p}{m_u + m_p}$)

(c) u 子偶素能级 $E_n = -\frac{m_u e^4}{4\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, ($u = \frac{m_u m_u}{m_u + m_u} = \frac{m_u}{2}$)

6.4) 对于氢原子基态, 计算 $\Delta x \cdot \Delta p$ 。

解: * 在球坐标系中, 空间反演: $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ($r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \pi + \varphi$)。

氢原子基态波函数为 $\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a}$ (1)

宇称为偶。由于均为奇宇称算符, 所以 $\overline{x} = 0$, $\overline{p_x} = 0$ (2)

由于 ψ_{100} 各向同性, 呈球对称分布, 显然有

$$\begin{aligned} \overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2} &= \frac{1}{3} \overline{r^2} \\ \overline{p_x^2} = \overline{p_y^2} = \overline{p_z^2} &= \frac{1}{3} \overline{p^2} \end{aligned} \quad (3)$$

容易算出 $\overline{r^2} = \int r^2 (\psi_{100})^2 d\tau = \int r^2 \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right) e^{-2r/a} r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = 3a^2$ (4)

$$\begin{aligned} \overline{p^2} &= -\hbar^2 \int \psi_{100} \nabla^2 \psi_{100} d\tau = -\hbar^2 \int [\nabla \cdot (\psi_{100} \nabla \psi_{100}) - \nabla \psi_{100} \cdot \nabla \psi_{100}] d\tau \\ &= \hbar^2 \int |\nabla \psi_{100}|^2 d\tau = \hbar^2 \int \left(\frac{\partial}{\partial r} \psi_{100}\right)^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = \hbar^2 / a^2 \end{aligned} \quad (5)$$

因此 $\overline{x^2} = a^2$, $\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \overline{x}^2} = a$ (6)

$$\overline{p_x^2} = \frac{\hbar^2}{3a^2}, \quad \Delta p_x = \sqrt{\overline{p_x^2} - \overline{p_x}^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}a} \quad (7)$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar / \sqrt{3} \quad (8)$$

测不准关系的普遍结论是 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$ (9)

显然式 (8) 和 (9) 式是不矛盾的。而且 $\hbar/\sqrt{3}$ 很接近式 (9) 规定的下限 $\hbar/2$ 。

6.5) 对于氢原子基态, 求电子处于经典禁区 ($r > 2a$) (即 $E - V < 0$) 的几率。

解: 氢原子基态波函数为 $\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-r/a}$, $a = \hbar^2 / ue^2$,

相应的能量 $E_1 = -\frac{ue^4}{2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a}$

动能 $T(r) = E_1 - V = -\frac{e^2}{2a} + \frac{e^2}{r}$

$T = E - V < 0$ 是经典不允许区。由上式解出为 $r > 2a$ 。

因此，电子处于经典不允许区的几率为

$$p = \frac{1}{\pi a^3} \int_{2a}^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} e^{-2r/a} r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi \quad (\text{令 } \xi = 2r/a)$$

$$= \frac{4}{a^3} \left(\frac{a}{2}\right)^3 \int_4^{\infty} e^{-\xi} \xi^2 d\xi = 13e^{-4} = 0.2381$$

6.6) 对于类氢原子 (核电荷 Ze) 的“圆轨道”(指 $n_r = 0, l = n - 1$ 的轨迹), 计算

(a) 最可几半径;

(b) 平均半径;

(c) 涨落 $\Delta r = \left[\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 \right]^{1/2}$

解: 类氢原子中电子波函数 ψ_{nlm} 可以表示为

$$\psi_{nlm} = R_{n,l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{n,l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1)$$

(a) 最可几半径由径向几率分布的极值条件 $\frac{d}{dr} |u_{n,l}(r)|^2 = 0$ (2)

决定。 $l = n - 1$ 时, $n_r = 0$ 。

$$u_{0,n-1}(r) = Cr^n e^{-Zr/na}$$

代入 (2) 式, 容易求得 $r_{jl} = n^2 a_0 / Z$ (4)

这结果和玻尔量子论中圆轨迹的半径公式一致。

(b) 在 ψ_{nlm} 态下, 各 $\langle r^\lambda \rangle$ 之间有递推关系 (Kramers 公式)

$$\frac{\lambda+1}{n^2} \langle r^\lambda \rangle - (2\lambda+1) \frac{a}{Z} \langle r^{\lambda-1} \rangle + \frac{\lambda}{4} [(2l+1)^2 - \lambda^2] \frac{a^2}{Z^2} \langle r^{\lambda-2} \rangle = 0 \quad (5)$$

在 (5) 式中令 $\lambda = 0$, 注意到 $\langle r^0 \rangle = 1$ 。可设

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{n^2 a} \quad (6)$$

依次再取 $\lambda = 1, 2$, 得到

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)] \frac{Z}{a} \stackrel{(l=n-1)}{=} \left(n^2 + \frac{n}{2} \right) \frac{a}{Z} \quad (7)$$

$$(c) \langle r^2 \rangle_{nlm} = \frac{n^2}{2} [1 + 5n^2 - 3l(l+1)] \left(\frac{Z}{a} \right)^2 \stackrel{(l=n-1)}{=} n^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) (n+1) \left(\frac{a}{Z} \right)^2 \quad (8)$$

因此, r 的涨落

$$\Delta r = \left[\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 \right]^{1/2} = \left(\frac{n^3}{2} + \frac{n^2}{4} \right)^{1/2} \frac{a}{Z} \quad (9)$$

$$\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \sqrt{\frac{n^3}{2} + \frac{n^2}{4}} / \left(n^2 + \frac{n}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \quad (10)$$

可见, n 越大, $\Delta r / \langle r \rangle$ 越小, 量子力学的结果和玻尔量子轨迹的图像越加接近。

6.7) 设电荷为 Ze 的原子核突然发生 β^- 衰变, 核电荷变成 $(Z+1)e$, 求衰变前原子 Z 中一个 K 电子 ($1s$ 轨道上的电子) 在衰变后仍然保持在新的原子 $(Z+1)$ 的 K 轨道的几率。

解: 由于原子核的 β^- 衰变是突然发生的。可以认为核外的电子状态还来不及变化。对于原来的 K 电子, 其波

函数仍为
$$\psi_{100}(Z, r) = \left(\frac{Z^3}{\pi a^3} \right)^{1/2} e^{-Zr/a} \quad (1)$$

而新原子中 K 电子的波函数应为
$$\psi_{100}(Z+1, r) = \left[\frac{(Z+1)^3}{\pi a^3} \right]^{1/2} e^{-(Z+1)r/a} \quad (2)$$

将 $\psi_{100}(Z, r)$ 按新原子的能量本征态作线形展开:

$$\psi_{100}(Z, r) = \sum_{nlm} C_{nlm} \psi_{nlm}(Z+1, r) \quad (3)$$

则衰变前的 $1s$ 电子在衰变后处于新原子的 $\psi_{nlm}(Z+1, r)$ 态的几率为

$$p_{nlm} = |C_{nlm}|^2 = \left| \langle \psi_{nlm}(Z+1) | \psi_{100}(Z) \rangle \right|^2 \quad (4)$$

因此, 本题所求的几率为

$$\begin{aligned} p_{100} &= \left| \langle \psi_{100}(Z+1) | \psi_{100}(Z) \rangle \right|^2 = \frac{Z^3 (Z+1)^3}{\pi^2 a^6} (4\pi)^2 \left| \int_0^\infty e^{-(2Z+1)r/a} r^2 dr \right|^2 \\ &= \frac{Z^3 (Z+1)^3}{\left(Z + \frac{1}{2} \right)^6} = \left(1 + \frac{1}{Z} \right)^3 \left(1 + \frac{1}{2Z} \right)^{-6} \end{aligned} \quad (5)$$

展开时保留到第三项

当 $Z \gg 1$, 上式可近似取成
$$p_{100} \approx 1 - \frac{3}{4Z^2} \quad (5')$$

例如, $Z = 10$, $p_{100} \approx 0.9932$;

$Z = 30$, $p_{100} \approx 0.9992$ 。

6.8) 设碱金属原子中的价电子所受原子实 (原子核+满壳电子) 的作用近似表为

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \lambda \frac{e^2 a}{r^2} \quad (0 < \lambda \ll 1) \quad (1)$$

a 为 Bohr 半径, 求价电子的能级。

提示: 令 $l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1)$, 解出 $l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right) \left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2}$

解: 取守恒量完全集为 (H, L^2, L_z) , 其共同本征函数为

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2)$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2u} u'' + \left[l(l+1) \frac{\hbar^2}{2ur^2} - \frac{e^2}{r} - \lambda \frac{e^2 a}{r^2} \right] u = Eu \quad (3)$$

$$\text{令 } l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) \quad (4)$$

$$\text{式 (3) 就可以化为 } -\frac{\hbar^2}{2u} u'' + \left[l'(l'+1) \frac{\hbar^2}{2ur^2} - \frac{e^2}{r} \right] u = Eu \quad (3')$$

相当于氢原子径向方程中 l 换成 l' 。所以式 (3') 的求解过程完全类似于氢原子问题。后者能级为

$$E_n = -\frac{e^2}{2n^2 a}, \quad n = n_r + l + 1, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

将 l 换成 l' , 即得价电子的能级:

$$E_{n'l'} = -\frac{e^2}{2n'^2 a}, \quad n' = n_r + l' + 1 \quad (6)$$

$$\text{通常令 } l' = l + \Delta_l \quad (7)$$

$$n' = n_r + l + \Delta_l + 1 = n + \Delta_l \quad (8)$$

Δ_l 称为量子数 l 和 n 的“修正数”。由于 $\lambda \ll 1$, 可以对式 (4) 作如下近似处理:

$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) = (l + \Delta_l)(l + \Delta_l + 1) = l(l+1) + (2l+1)\Delta_l + (\Delta_l)^2$$

$$\text{略去 } (\Delta_l)^2, \text{ 即得 } \Delta_l \approx -\lambda / \left(l + \frac{1}{2}\right) \quad (9)$$

由于 $\lambda \ll 1$, $\therefore |\Delta_l| \ll 1$, 因此, 本题所得能级 $E_{n'l'}$ 和氢原子能级仅有较小的差别, 但是能级的“ l 简并”已经消除。式 (6) 和碱金属光谱的实验资料大体一致, 尤其是, 修正数 $|\Delta_l|$ 随 l 之升高而减小, 这一点和实验符合的极好。

$$\text{式 (4) 的精确解为 } l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2} \right) \left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2} \right]^{1/2} \quad (10)$$

若对上式作二项式展开, 保留 λ 项, 略去 λ^2 以上各项, 即可得到式 (9)。

第八章 自旋

8.1 (a) 在 σ_z 表象中, 求 σ_x 的本征态。

解: 在 σ_z 表象中, σ_x 的矩阵表示为: $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

设 σ_x 的本征矢 (在 σ_z 表象中) 为 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, 则有 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

可得 $b = \lambda a$ 及 $a = \lambda b \quad \therefore \lambda^2 = 1, \lambda = \pm 1$ 。

$\lambda = 1$, 则 $a = b$; $\lambda = -1$, 则 $a = -b$

利用归一化条件, 可求出 σ_x 的两个本征态为

$$\lambda = 1, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \lambda = -1, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}。$$

8.2 在 σ_z 表象中, 求 $\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ 的本征态, $\vec{n}(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ 是 (θ, φ) 方向的单位矢。

解: 在 σ_z 表象中, $\vec{\sigma}$ 的矩阵表示为

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

因此, $\sigma_n = \vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$

$$= \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2)$$

设 σ_n 的本征函数表示为 $\Phi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, 本征值为 λ , 则本征方程为

$$(\sigma_n - \lambda)\Phi = 0, \quad \text{即} \quad \begin{pmatrix} \cos \theta - \lambda & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \quad (3)$$

由 (3) 式的系数行列式 = 0, 可解得 $\lambda = \pm 1$ 。

对于 $\lambda = 1$, 代回 (3) 式, 可得

$$\frac{a}{b} = \frac{\sin \theta e^{-i\varphi}}{1 - \cos \theta} = \frac{\cos \theta / 2}{\sin \theta / 2} e^{-i\varphi} = \frac{1 + n_x}{n_x + i n_y} = \frac{n_x - i n_y}{1 - n_x}$$

归一化本征函数用 (θ, φ) 表示, 通常取为

$$\phi_1(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \text{ 或 } \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \quad (4)$$

后者形式上更加对称, 它和前者相差因子 $e^{-i\varphi/2}$, 并无实质差别。若用 \vec{n} 的直角坐标分量来表示, 可以取为

$$\phi_1(\vec{n}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}} \begin{pmatrix} 1+n_z \\ n_x + in_y \end{pmatrix} \text{ 或 } \frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}} \begin{pmatrix} n_x - in_y \\ 1-n_z \end{pmatrix} \quad (4')$$

如 $n_z \neq \pm 1$, 二者等价 (仅有相因子的差别)。若 $\vec{n} = (0, 0, 1)$, 应取前者; 若 $\vec{n} = (0, 0, -1)$, 应取后者。

对于 $\lambda = -1$, 类似地可以求得

$$\frac{a}{b} = -\frac{1-\cos\theta}{\sin\theta} e^{-i\varphi} = -\frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}} e^{-i\varphi} = -\frac{1-n_x}{n_x+in_y} = -\frac{n_x-in_y}{1+n_x}$$

$$\phi_{-1}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \text{ 或 } \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\text{或 } \phi_{-1}(\vec{n}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}} \begin{pmatrix} n_x - in_y \\ -(1+n_z) \end{pmatrix} \text{ 或 } \frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}} \begin{pmatrix} -(1-n_z) \\ n_x + in_y \end{pmatrix} \quad (5')$$

若 $\vec{n} = (0, 0, 1)$, 取 $\phi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; 若 $\vec{n} = (0, 0, -1)$, 取 $\phi_{-1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 。

8.3 在 s_z 本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}(s_z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 下, 求 $\overline{(\Delta s_x)^2}$ 和 $\overline{(\Delta s_y)^2}$ 。

$$\text{解: } \overline{(\Delta s_x)^2} = \overline{(s_x - \bar{s}_x)^2} = \overline{s_x^2} - \bar{s}_x^2$$

但 $\overline{s_x^2} = \hbar^2/4$ (常数矩阵),

$$\bar{s}_x = \frac{\hbar}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$\therefore \overline{(\Delta s_x)^2} = \hbar^2/4$, 类似有 $\overline{(\Delta s_y)^2} = \hbar^2/4$ 。

8.4 (a) 在 s_z 本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 下, 求 $\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ 的可能测值及相应的几率。(b) 同第 2 题, 若电子处

于 $\vec{\sigma} \cdot \vec{n} = +1$ 的自旋态下, 求 $\vec{\sigma}$ 的各分量的可能测值及相应的几率以及 $\vec{\sigma}$ 的平均值。

解: (a) 利用 8.2) 题求得 σ_n 的本征函数, 容易求出: 在自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 中, $\sigma_n = 1$ 的几率为

$$\left| \langle \phi_1 | \chi_{1/2} \rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1+n_z) \quad (1)$$

$\sigma_n = -1$ 的几率为

$$\left| \langle \phi_{-1} | \chi_{1/2} \rangle \right|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1-n_z) \quad (2)$$

(b) 在自旋态 ϕ_1 ($\sigma_n = 1$) 态, $\sigma_z = 1$ 的几率为

$$\left| \langle \chi_{1/2} | \phi_1 \rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1+n_z) \quad (3)$$

$$\sigma_z = -1 \text{ 的几率为: } \left| \langle \chi_{-1/2} | \phi_{-1} \rangle \right|^2 = \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1-n_z) \quad (4)$$

$$\langle \sigma_z \rangle = \frac{1}{2}(1+n_z) \cdot 1 + \frac{1}{2}(1-n_z) \cdot (-1) = n_z$$

$$[\text{或 } \langle \sigma_z \rangle = \cos^2 \frac{\theta}{2} \times 1 + \sin^2 \frac{\theta}{2} \times (-1) = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} = \cos \theta = n_z \quad (5^*)]$$

考虑到 $\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$,

$\vec{\sigma}$ 各分量以及 \vec{n} 各分量在 σ_n 的构造中地位对称, 所以利用式 (3)、(4)、(5), 作 x, y, z 轮换, 就可推论出以下各点:

$$\sigma_x = \pm 1 \text{ 的几率为 } \frac{1}{2}(1 \pm n_x), \quad (6)$$

$$\langle \sigma_x \rangle = n_x \quad (7)$$

$$\sigma_y = \pm 1 \text{ 的几率为 } \frac{1}{2}(1 \pm n_y) \quad (8)$$

$$\langle \sigma_y \rangle = n_y \quad (9)$$

将式 (5)、(7)、(9) 合并写成矢量形式如下:

$$\text{自旋态 } \phi_1 (\sigma_n = 1) \text{ 中, } \langle \vec{\sigma} \rangle = \vec{n} \quad (10)$$

$$\text{类似地, 容易算出: 自旋态 } \phi_{-1} (\sigma_n = -1) \text{ 中, } \langle \vec{\sigma} \rangle = -\vec{n} \quad (11)$$

解二: (a) 在 $\sigma_z = 1$ 自旋态 $\chi_{1/2}$ 中, σ_n 的可能测值为本征值 ± 1 ; 设相应的几率为 w_+ 及 w_- , 则

$$\langle \sigma_n \rangle = w_+ \times 1 + w_- \times (-1) = w_+ - w_- \quad (12)$$

$$\text{由于 } \sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z \quad (13)$$

考虑到在 σ_z 的本征态中 σ_x 和 σ_y 的平均值为 0, σ_z 的平均值即为其本征值, 因此在 $\chi_{1/2}$ 态下,

$$\langle \sigma_n \rangle = \langle \sigma_z \rangle n_z = 1 \cdot n_z = n_z = \cos \theta \quad (14)$$

由式 (12)、(14)，并利用 $w_+ + w_- = 1$ ，就可求出

$$w_+ = \frac{1}{2}(1+n_z), \quad w_- = \frac{1}{2}(1-n_z) \quad (15)$$

此即解一中的式 (1)、(2)。

(b) 在式 (14) 中， θ 是 z 轴和 \vec{n} 的夹角。 z 轴和 \vec{n} 的选取是任意的。完全可以将原来的 z 轴作为新的 \vec{n} 轴，而原来的 \vec{n} 取作新的 z 轴。由此可知：在 $\sigma_n = 1$ 的自旋态中， σ_z 的平均值仍为 $\cos\theta$ ，即 n_z 。再令 x, y, z 轮换，即得自旋态 $\phi_1(\sigma_n = 1)$ 中， $\langle \vec{\sigma} \rangle = \vec{n}$ (10)

在 ϕ_1 态下 $\vec{\sigma}$ 各分量的取值大部分当然均为 ± 1 ，其几率也可估照 (a) 中计算而写出，即

$$\sigma_x = \pm 1 \text{ 的几率为 } \frac{1}{2}(1 \pm n_x) \quad (6)$$

$$\sigma_y = \pm 1 \text{ 的几率为 } \frac{1}{2}(1 \pm n_y) \quad (8)$$

$$\sigma_z = \pm 1 \text{ 的几率为 } \frac{1}{2}(1 \pm n_z) \quad (3, 4)$$

8.8 由两个非全同粒子（自旋均为 $\frac{\hbar}{2}$ ）组成的体系，设粒子间相互作用表为 $H = A\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$ （不考虑轨迹运动）。

设初始时刻 ($t=0$) 粒子 1 自旋“向上” ($s_{1z} = 1/2$)，粒子 2 自旋“向下” ($s_{2z} = -1/2$)。求时刻 $t(>0)$ 时，

(a) 粒子 1 自旋向上的几率（答： $\cos^2(At/2)$ ，取 $\hbar = 1$ ）

(b) 粒子 1 和 2 的自旋向上的几率（答：0）

(c) 总自旋 $s=0$ 和 1 的几率（答：都是 $1/2$ ）

(d) 求和的平均值（答： $\langle s_{1x} \rangle = \langle s_{1y} \rangle = \langle s_{2x} \rangle = \langle s_{2y} \rangle = 0$ ， $\langle s_{1z} \rangle = \frac{1}{2} \cos At$ ， $\langle s_{2z} \rangle = -\frac{1}{2} \cos At$ ）。

解：从求体系的自旋波函数入手，由于

$$H = A\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{A}{2} \left(s^2 - \frac{3}{2} \right) \quad (1)$$

易见总自旋 \vec{s} 是守恒量，所以定态波函数可以选为 s^2 、 s_z 的共同本征函数，按照总自旋量子数 s 的不同取值，本征函数和能级为

$$\left. \begin{array}{l} s=1, \quad \chi_{1M_s}, \quad E_1 = A/4, \\ s=0, \quad \chi_{00}, \quad E_0 = -3A/4 \end{array} \right\} \quad (2)$$

$t=0$ 时，体系的自旋态为

$$\chi(0) = \alpha(1)\beta(2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10} + \chi_{00}) \quad (3)$$

因此， $t > 0$ 时波函数为

$$\chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{10} e^{-iE_1 t} + \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{00} e^{-iE_0 t} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{即 } \chi(t) &= \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]e^{-iAt/4} + \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]e^{3iAt/4} \\ &= \left[\alpha(1)\beta(2)\cos\frac{At}{2} - i\beta(1)\alpha(2)\sin\frac{At}{2} \right] e^{iAt/4} \end{aligned} \quad (4')$$

(a) 由式(4')可知, 在时刻 t , 粒子 1 自旋“向上”[同时粒子 2 自旋“向下”, 相当于 $\alpha(1)\beta(2)$ 项] 的几率为 $\cos^2\left(\frac{At}{2}\right)$ 。

(b) 粒子 1 和 2 自旋均“向上”[相应于 $\alpha(1)\alpha(2)$, 式(4')中没有这种项] 的几率为 0。这是容易理解的。因为总自旋 s_z 为守恒量, 而体系初态 $s_z = 0$, 所以任何时刻 s_z 必为 0, 不可能出现两个粒子均“向上”($s_z = 1$) 的情形。

(c) 由式(4)可知, 总自旋量子数 s 取 1 和 0 的几率相等, 各为 1/2。由于 \vec{s}^2 守恒, 这个几率不随时间改变

(d) 利用式(4')容易算出 \vec{s}_1 和 \vec{s}_2 的平均值为

$$\left. \begin{aligned} \langle s_{1x} \rangle_t &= \langle s_{1y} \rangle_t = \langle s_{2x} \rangle_t = \langle s_{2y} \rangle_t = 0, \\ \langle s_{1z} \rangle_t &= \frac{1}{2} \left[\cos^2 \frac{At}{2} - \sin^2 \frac{At}{2} \right] = \frac{1}{2} \cos At, \\ \langle s_{2z} \rangle_t &= -\langle s_{1z} \rangle_t = -\frac{1}{2} \cos At. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

第九章 力学量本征值问题的代数解法

9.4 设两个全同粒子角动量 $j = j_1 = j_2$, 耦合成总角动量 J ,

$$\psi_{j^2 JM} = \sum_{m_1 m_2} \langle j m_1 j m_2 | JM \rangle \psi_{j m_1}(1) \psi_{j m_2}(2) \quad (1)$$

利用 CG 系数的对称性, 证明

$$p_{12} \psi_{j^2 JM} = (-)^{2j-J} \psi_{j^2 JM}$$

由此证明, 无论是 Bose 子或 Fermi 子, J 都必须取偶数

证: 由式(1),

$$p_{12} \psi_{j^2 JM} = \sum_{m_1 m_2} \langle j m_1 j m_2 | JM \rangle \psi_{j m_1}(2) \psi_{j m_2}(1)$$

$$\text{把 } m_1 \leftrightarrow m_2, \quad = \sum_{m_1 m_2} \langle j m_2 j m_1 | JM \rangle \psi_{j m_2}(2) \psi_{j m_1}(1)$$

$$\begin{aligned} \text{利用 CG 系数的对称性} \quad &= (-)^{2j-J} \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_2 j_2 m_1 | JM \rangle \psi_{j m_1}(1) \psi_{j m_2}(2) \\ &= (-)^{2j-J} \psi_{j^2 JM} \end{aligned} \quad (2)$$

对于 Fermi 子, $j =$ 半奇数, $2j =$ 奇数, 但要求 $p_{12} \psi = -\psi$,

即要求 $(-)^{2j-J} = -1$, 所以 J 必须为偶数。

$J_{\max} = 2j - 1$, ($J_{\max} = 2j$ 情况, 只能构成交换对称态, 为什么?) 因此

$$J = (2j - 1), (2j - 3), \dots, 2, 0$$

可验证: 态 $\psi_{j^2 JM}$ 的总数为 $j(2j + 1)$ 。 [$\sum_{J=0}^{2j-1} (2J + 1) = j(2j + 1)$]

对于 Bose 子, $j = \text{整数}$, $2j = \text{偶数}$, 但要求 $p_{12}\psi = \psi$

即 $(-1)^{2j-J} = 1$, 故 J 也必须为偶数

$$J = 2j, 2j - 2, \dots, 2, 0$$

9.5 设原子中有两个价电子, 处于 E_{nl} 能级上, 按 LS 耦合方案, $\vec{L}_1 + \vec{L}_2 = \vec{L}$, $\vec{s}_1 + \vec{s}_2 = \vec{s}$, $\vec{L} + \vec{s} = \vec{J}$ (总角动量)

证明: (a) $L + s$ 必为偶数;

(b) $J = L + s, \dots, |L - s|$ 。当 $s = 0$ 时, $J = L$ (偶); $s = 1$ 时, $J = L + 1, L, L - 1$, J 可以为奇,

也可以为偶。

证: 自旋的耦合: $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$, $s = \begin{cases} 1. (\text{对称, 三重态}) \\ 0. (\text{反对称, 单态}) \end{cases}$

轨迹角动量的耦合: $l_1 = l_2 = l$, $L = 2l, 2l - 1, \dots, 1, 0$.

其中 $L = \text{偶}$ 是对称态, $L = \text{奇}$ 是反对称态, 总的波函数 (对于交换全部坐标, 包括自旋) 要求反对称, 所以

$$s = 0 \text{ 时, } L = 2l, 2l - 2, \dots, 0.$$

$$s = 1 \text{ 时, } L = 2l, 2l - 1, \dots, 1.$$

在两种情况下, $L + s$ 都为偶数, 但

$$J = L + s, \dots, |L - s|$$

对于 $s = 0$, $J = L = \text{偶}$;

$$s = 1, J = L + 1, L, |L - 1|。$$

J 可以为奇, 也可以为偶

[讨论本题结论与题 9-2 有无矛盾? (按 jj 耦合方案, 似乎 J 必为偶数)。提示: 在本题中, 若用 jj 耦合来分析, $j = ?$ 是否只有一个 j 值? 两种耦合方案得出的态数是否相等?]

9.6 大小相等的两个角动量耦合角动量为 0 的态 ψ_{jj00} , 证明 $j_{1z} = -j_{2z} = j, j - 1, \dots, -j$ 的几率却相等, 即 $1/(2j + 1)$ 。

提示: 利用 $\langle jmj - m | 00 \rangle = (-1)^{j-m} / \sqrt{2j + 1}$ (P235, 式 (23))

证: Dirac 符号表示, 有 $\psi_{jj00} = |j_1 j_2 JM\rangle = |jj00\rangle$,

$$|j_1 j_2 JM\rangle = |JM\rangle = \sum_{m_1} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle \quad (1)$$

在本题的情况下， $j_1 = j_2 = j$ ， $J = M = 0$ ， $m_1 = -m_2 \stackrel{\text{令}}{=} m$ 。

$$\text{则 (1) 成为 } |jj00\rangle = \sum_m |jmj - m\rangle \langle jmj - m | 00\rangle \quad (2)$$

其中 $\langle jmj - m | 00\rangle$ 即为耦合表象中的态 $|jj00\rangle$ 用无耦合表象基矢展开时的展开式系数—CG 系数，其模即表示体系处于 $|jj00\rangle$ 态时，测得 j_{1z} 取值 m （同时 J_{2z} 取值 $-m$ ， m 取 $j, j-1, \dots, -j$ 各可能值）的几率。

$$\text{由提示, } \langle jmj - m | 00\rangle = (-)^{j-m} / \sqrt{2j+1} \quad (3)$$

$$\therefore \left| \langle jmj - m | 00\rangle \right|^2 = \frac{1}{2j+1} \quad (4)$$

即，对于给定的 $j_1 = j_2 = j$ 所合成的态 ψ_{jj00} ， $j_{1z} = -j_{2z} = j, j-1, \dots, -j$ 的几率与 m 的具体取值无关，皆为 $1/(2j+1)$ 。

9.8 在 (L^2, L_z) 表象(以为 $|lm\rangle$ 基矢)中， $l=1$ 的子空间的维数为 3，求 L_x 在此三维空间中的矩阵表示，再利用矩阵方法求出 L_x 的本征值和本征态

解：在 (L^2, L_z) 表象中， $l=1$ 的子空间中的基矢为 $|lm\rangle = |1m\rangle$ ， $m=1, 0, -1$ 。由于

$$\begin{aligned} J_{\pm} |jm\rangle &= \sqrt{(j \pm m + 1)(j \mp m)} |j m \pm 1\rangle \\ \langle j m + 1 | J_x | jm\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(j + m + 1)(j - m)} \\ \langle j m - 1 | J_x | jm\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(j - m + 1)(j + m)} \\ J_x &= \frac{1}{2} (J_+ + J_-) \end{aligned}$$

对于本题，以上方式中 $j \rightarrow l$ ， $J_x \rightarrow L_x$ ， $J_{\pm} \rightarrow L_{\pm}$ ， $(J_z \rightarrow L_z)$

不难求得

$$\begin{aligned} (L_x)_{mm} &= (L_x)_{-1-1} = (L_x)_{00} = (L_x)_{11} = (L_x)_{-11} = (L_x)_{1-1} = 0 \\ (L_x)_{-10} &= (L_x)_{0-1} = (L_x)_{01} = (L_x)_{10} = \frac{\sqrt{2}}{2} \end{aligned}$$

$\therefore L_x$ 在此三维空间中的矩阵表示为 $[(L^2, L_z)$ 表象]

$$L_x = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

设 L_x 的本征值为 λ ($\hbar=1$), 本征矢为 $\phi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$, 则本征方程为

$$\begin{pmatrix} -\lambda & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\lambda & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \quad (2)$$

此方程有非平庸解的条件为系数行列式等于零, 由此可解得本征值: $\lambda(\lambda^2 - 1) = 0$,

$$\lambda = 1, 0, -1. \quad (3)$$

将 $\lambda=1$ 代入 (2), 可得

$$-a + \frac{b}{\sqrt{2}} = 0, \quad \frac{a}{\sqrt{2}} - b + \frac{c}{\sqrt{2}} = 0, \quad \frac{b}{\sqrt{2}} - c = 0.$$

由此得 $a = c = \frac{b}{\sqrt{2}}$, $\therefore \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$

归一化 $\frac{b^2}{2}(1+2+1)=1$, 取 $b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 。

$$\therefore \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \sim \lambda = +1 \quad (4)$$

同理, 将 $\lambda=0, -1$ 分别代入 (2), 可求得

$$\therefore \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \sim \lambda = 0 \quad ; \quad \phi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \sim \lambda = -1.$$

第十章 定态问题的常用近似方法

10.1 设非简谐振子的 Hamilton 量表为 $H = H_0 + H'$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2u} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} u \omega^2 x^2$$

$$H' = \beta x^3 \quad (\beta \text{ 为实常数})$$

用微扰论求其能量本征值 (准到二级近似) 和本征函数 (准到一级近似)。

解: 已知 $H_0 \psi_n^{(0)} = E_n \psi_n^{(0)}$, $\psi_n^{(0)} = N_n e^{-\alpha^2 x^2 / 2} H_n(\alpha x)$,

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \alpha = \sqrt{\frac{u\omega}{\hbar}}$$

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left[\sqrt{n}\psi_{n-1} + \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \right]$$

$$x^2\psi_n(x) = \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n(n+1)}\psi_{n-2} + (2n+1)\psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2} \right]$$

$$x^3\psi_n(x) = \frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3} \left[\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3} + 3n\sqrt{n}\psi_{n-1} + 3(n+1)\sqrt{n+1}\psi_{n+1} + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3} \right] \text{ 计算}$$

$$\text{一级微扰: } E_n^{(1)} = \langle \psi_n | H' | \psi_n \rangle = \beta \langle \psi_n | x^3 | \psi_n \rangle = 0.$$

$$\left(\text{也可由 } E_n^{(1)} = H_{nn}' = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 \cdot \beta x^3 dx = 0 \text{ (奇)} \text{ 直接得出} \right)$$

计算二级微扰，只有下列四个矩阵元不为 0：

$$\langle \psi_{n-3} | \beta x^3 | \psi_n \rangle = \frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3} \sqrt{n(n-1)(n-2)} = H_{n-3,n}'$$

$$\langle \psi_{n-1} | \beta x^3 | \psi_n \rangle = \frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3} \cdot 3n\sqrt{n} = H_{n-1,n}'$$

$$\langle \psi_{n+1} | \beta x^3 | \psi_n \rangle = \frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3} \cdot 3(n+1)\sqrt{n+1} = H_{n+1,n}'$$

$$\langle \psi_{n+3} | \beta x^3 | \psi_n \rangle = \frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3} \cdot \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} = H_{n+3,n}'$$

$$\text{计算 } |H_{kn}'|^2 : |H_{n-3,n}'|^2 = \frac{n(n-1)(n-2)\beta^2}{8\alpha^6}$$

$$|H_{n-1,n}'|^2 = 9n^3\beta^2/8\alpha^6$$

$$|H_{n+1,n}'|^2 = 9n^3\beta^2/8\alpha^6$$

$$|H_{n+3,n}'|^2 = (n+1)(n+2)(n+3)\beta^2/8\alpha^6$$

$$\text{又 } E_n^{(0)} - E_{n-3}^{(0)} = 3\hbar\omega, \quad E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)} = \hbar\omega,$$

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

$$\therefore E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = E_n^{(0)} + H_{nn}' + \sum_k' \frac{|H_{kn}'|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{30n^2 + 30n + 11}{8} \cdot \frac{\hbar^2\beta^2}{u^3\omega^4}$$

$$\begin{aligned}\psi_n &= \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} = \psi_n^{(0)} + \sum_k \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} \\ &= \psi_n^{(0)} - \frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3 \hbar \omega} \left[\frac{1}{3} \sqrt{n(n-1)(n-2)} \psi_{n-3}^{(0)} + 3n\sqrt{n} \psi_{n-1}^{(0)} - 3(n-1)\sqrt{n+1} \psi_{n+1}^{(0)} - \frac{1}{3} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \psi_{n+3}^{(0)} \right]\end{aligned}$$

10.2 考虑耦合振子, $H = H_0 + H'$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2u} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{1}{2} u \omega^2 (x_1^2 + x_2^2)$$

$$H' = -\lambda x_1 x_2 \quad (\lambda \text{ 为实常数, 刻画耦合强度})$$

(a) 求出 H_0 的本征值及能级简并度。

(b) 以第一激发态为例, 用简并微扰论计算 H' 对能级的影响 (一级近似)。

(c) 严格求解 H 的本征值, 并与微扰论计算结果比较, 进行讨论。

提示: 作坐标变换, 令 $x_1 = \frac{1}{2}(\xi + \eta)$, $x_2 = \frac{1}{2}(\xi - \eta)$, 则 H 可化为两个独立的谐振子, ξ, η 称为简正坐标。

解: (a) H_0 的本征函数和本征值可分别表为

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2) \quad (1)$$

$$\begin{aligned}E_{n_1 n_2} &= \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \\ &= (n_1 + n_2 + 1) \hbar \omega, \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots\end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{令 } N = n_1 + n_2 \quad (3)$$

$$\text{则能量表示式可改为 } E_N = (N+1)\hbar\omega, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

由式 (3) 可以看出, 对于 $N \neq 0$ 情况。能级是简并的, 简并度为 $(N+1)$ 。

(b) $N=1$ 为第一激发态 (基态 $N=0$), 能级为二重简并,

$$\text{能量本征值为 } E_1 = 2\hbar\omega$$

相应的本征函数为 $\psi_0(x_1)\psi_1(x_2)$ 与 $\psi_1(x_1)\psi_0(x_2)$ (或考虑它们的线形迭加), 分别记为 $f_1(x_1, x_2)$ 和 $f_2(x_1, x_2)$ 。

利用

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

不难得出: $W_{11} = W_{22} = 0$

$$W_{12} = W_{21} = -(f_1, x_1 x_2 f_2) = -(\psi_0(x_1), x_1 \psi_1(x_1)) (\psi_1(x_2), x_2 \psi_0(x_2))$$

$$= -\frac{1}{2\alpha^2} = -\frac{\hbar}{2u\omega} \quad (\text{实}) \quad (5)$$

代入方程 $\det|W_{uv} - E^{(1)}\delta_{uv}| = 0$

$$\text{得} \quad \begin{vmatrix} -E^{(1)} & -\hbar/2u\omega \\ -\hbar/2u\omega & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

解之, 得 $E_{\pm}^{(1)} = \pm \hbar/2u\omega$

因此, 原来二重简并的能级 E_1 变成两条, 能量分别为

$$E_{\pm} = 2\hbar\omega \pm \lambda\hbar/2u\omega \quad (6)$$

能级简并被解除, 类似还可求出其他能级的分裂, 如图所示。

(c) 严格求解如下:

$$\text{令} \quad x_1 = \frac{1}{2}(\xi + \eta), \quad x_2 = \frac{1}{2}(\xi - \eta) \quad (7)$$

$$\text{其逆变换为} \quad \xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) \quad (7')$$

易证:

$$\left. \begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 &= \xi^2 + \eta^2 \\ x_1 x_2 &= (\xi^2 - \eta^2)/2 \\ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

$$\text{因此, S.eq:} \quad -\frac{\hbar^2}{2u} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) \psi + \left[\frac{1}{2}u\omega^2(x_1^2 + x_2^2) - \lambda x_1 x_2 \right] \psi = E\psi \quad (9)$$

$$\text{变为} \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2u} \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) + \frac{1}{2}u\omega^2(\xi^2 + \eta^2) - \frac{\lambda}{2}(\xi^2 - \eta^2) \right] \psi = E\psi \quad (10)$$

$$\text{令} \quad \frac{1}{2}u\omega^2\xi^2 - \frac{\lambda}{2}\xi^2 = \frac{1}{2}u\omega_1^2\xi^2, \quad \frac{1}{2}u\omega^2\eta^2 + \frac{\lambda}{2}\eta^2 = \frac{1}{2}u\omega_2^2\eta^2$$

$$\text{即} \quad \begin{aligned} \omega_1^2 &= \omega^2 - \lambda/u = \omega^2(1 - \lambda/u\omega^2) \\ \omega_2^2 &= \omega^2 + \lambda/u = \omega^2(1 + \lambda/u\omega^2) \end{aligned} \quad (11)$$

于是方程 (10) 变为

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2u} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2}u\omega_1^2\xi^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2u} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{1}{2}u\omega_2^2\eta^2 \right) \right] \psi = E\psi \quad (12)$$

是二彼此独立的谐振子, 所以可以取

$$\psi = \psi_{n_1}(\xi)\psi_{n_2}(\eta)$$

$$\psi_{n_1}(\xi) = \left(\frac{\alpha_1}{\sqrt{\pi} \cdot 2^{n_1} \cdot n_1!} \right)^{1/2} H_{n_1}(\alpha_1\xi) e^{-\alpha_1^2\xi^2/2}, \quad \alpha_1 = \sqrt{\frac{u\omega_1}{\hbar}}$$

$$\psi_{n_2}(\xi) = \left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi} \cdot 2^{n_2} \cdot n_2!} \right)^{1/2} H_{n_2}(\alpha_2 \eta) e^{-\alpha_2^2 \eta^2 / 2}, \quad \alpha_2 = \sqrt{\frac{u\omega_2}{\hbar}} \quad (13)$$

相应的能量为

$$E_{n_1 n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_2$$

$$n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots \quad (13)$$

当 $|\lambda| \ll u\omega^2$ 时, 由 (11) 式, 得

$$\omega_1 = \omega \left(1 - \lambda/u\omega^2 \right)^{1/2} \approx \omega \left(1 - \lambda/2u\omega^2 \right)$$

$$\omega_2 = \omega \left(1 + \lambda/u\omega^2 \right)^{1/2} \approx \omega \left(1 + \lambda/2u\omega^2 \right)$$

此时

$$E_{n_1 n_2} \approx \left(n_1 + \frac{1}{2} + n_2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + (n_2 - n_1) \frac{\lambda \hbar}{2u\omega}$$

$$= (N + 1) \hbar \omega + (n_2 - n_1) \frac{\lambda \hbar}{2u\omega} \quad (14)$$

$N = 1$ (第一激发态) 的情况下, 可有 $(n_1, n_2) = (1, 0)$ 与 $(0, 1)$ 两种情况 (二简并态), 相应的能量分别为

$$E_{10} = 2\hbar\omega - \frac{\lambda\hbar}{2u\omega}, \quad E_{01} = 2\hbar\omega + \frac{\lambda\hbar}{2u\omega}$$

能级分裂 $\Delta E = |E_{01} - E_{10}| = \frac{|\lambda|\hbar}{u\omega}$

与微扰论计算结果一致。

10.3 一维无限深势阱 ($0 < x < a$) 中的粒子, 受到微扰 H' 作用

$$H'(x) = \begin{cases} 2\lambda x/a, & 0 < x < a/2 \\ 2\lambda(1-x/a), & a/2 < x < a \end{cases}$$

求基态能量的一级修正。

解: 一维无限深势阱的能量本征值及本征函数为

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ua^2}, \quad \psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

基态 $E_1^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ua^2}, \quad \psi_1^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a},$

基态能量的一级修正为

$$E_1^{(1)} = H_{11}' = \int_0^a |\psi_1^{(0)}(x)|^2 \cdot H'(x) dx$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^{a/2} \sin^2 \frac{\pi x}{a} \cdot \frac{2\lambda x}{a} dx + \frac{2}{a} \int_{a/2}^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} \cdot 2\lambda \left(1 - \frac{x}{a} \right) dx$$

作变换 $u = \frac{\pi x}{a}, \quad x = \frac{au}{\pi}, \quad dx = \frac{a}{\pi} du;$

$$v = \pi - \frac{\pi x}{a}, \quad x = a - \frac{av}{\pi}, \quad dx = \frac{-a}{\pi} dv.$$

代入上式完成积分,

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \frac{4\lambda}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \sin^2 u \cdot u du - \frac{4\lambda}{\pi^2} \int_{\pi/2}^0 \sin^2(\pi - v) \cdot v dv \\ &= \frac{8\lambda}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \sin^2 u \cdot u du = \left(\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2} \right) \lambda. \end{aligned}$$

10.4 实际原子核不是一个点电荷, 它具有一定大小, 可近似视为半径为 R 的均匀分球体它产生的电势为

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{Ze}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right), & r < R \\ \frac{Ze}{r}, & r > R \end{cases}$$

Ze 为核电荷, 试把非点电荷效应看成微扰,

$$H' = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) + \frac{Ze^2}{R}, & r < R \\ 0, & r > R \end{cases}$$

计算原子的 $1s$ 能级的一级微扰修正。

解: 类氢离子中 $1s$ 轨道电子波函数为

$$\psi_{1s} = \left(\frac{Z^3}{\pi a^3} \right)^{1/2} e^{-Zr/a}$$

a 为波尔半径, $1s$ 能级的微扰论一级修正为

$$E_{1s}^{(1)} = \langle \psi_{1s} | H' | \psi_{1s} \rangle = \int_0^R \psi_{1s}^2 H' \cdot 4\pi r^2 dr$$

由于核半径 R 远小于原子半径 a/Z , 积分时可取

$$e^{-2Zr/a} \approx 1$$

$$\text{从而求出} \quad E_{1s}^{(1)} \approx \frac{4Z^4 e^2}{a^3} \int_0^R \left(r + \frac{r^4}{2R^3} - \frac{3r^2}{2R} \right) dr = \frac{2}{5} \frac{Z^4 e^2 R^2}{a^3} = \frac{4}{5} \left(\frac{ZR}{a} \right)^2 |E_{1s}^{(0)}|^2$$

$$\text{其中} \quad E_{1s}^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a}$$

为类氢离子的基态能级。

10.5 设氢原子处 $n=3$ 能级, 求它的 Stark 分裂。

提示: 参阅 10.2 节中例 1。注意 $n=3$ 能级简并度为 9, 考虑到微扰 $H' = e\mathcal{E}Z$ 相应的选择定则, 此 9 维空间可以分解为若干个不变子空间。

解: 加电场前, 能级共对应有 9 个状态。零级波函数形式为

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1)$$

$n=3$ 的 9 个态分别记为:

$$\begin{aligned} \psi_1 = |320\rangle, \psi_2 = |310\rangle, \psi_3 = |300\rangle, (m=0); \quad \psi_4 = |321\rangle, \psi_5 = |311\rangle, (m=1); \\ \psi_6 = |32-1\rangle, \psi_7 = |31-1\rangle, (m=-1); \quad \psi_8 = |322\rangle, (m=2); \quad \psi_9 = |32\bar{2}\rangle (m=-2); \end{aligned} \quad (2)$$

视外电场为微扰，微扰作用势

$$H' = e\vec{\varepsilon} \cdot \vec{r} = e\varepsilon Z = e\varepsilon r \cos\theta \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} R_{32} &= \frac{4}{81\sqrt{30} \cdot a^{3/2}} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \\ R_{31} &= \frac{8}{27\sqrt{6} \cdot a^{3/2}} \cdot \left(\frac{r}{a}\right)^2 \cdot \left(1 - \frac{r}{6a}\right) e^{-r/3a} \\ R_{30} &= \frac{2}{3\sqrt{3} \cdot a^{3/2}} \left[1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a}\right)^2\right] e^{-r/3a} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

将 H' 写成 $H' = e\varepsilon a \cdot \frac{r}{a} \cos\theta = \lambda W$, $W = \frac{r}{a} \cos\theta$. (5)

由于 $[H', L_z] = 0$, 所以 H' 作用于 ψ_{nlm} 的结果, 磁量子数 m 不变。又因为

$$\cos\theta Y_{lm} = a_{lm} Y_{l+1,m} + a_{l-1,m} Y_{l-1,m} \quad (6)$$

$$a_{lm} = \left[\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} \quad (6')$$

H' 作用于 ψ_{nlm} , 量子数 l 将改变 ± 1 。因此在计算微扰矩阵元 W_{uv} 中, 只有 $W_{12} = W_{21}$, $W_{23} = W_{32}$, $W_{45} = W_{54}$,

$W_{67} = W_{76}$ 不为零。

先算径向积分:

$$\int_0^\infty R_{32} \cdot \frac{r}{a} \cdot R_{31} r^2 dr = -\frac{9}{2} \sqrt{5}, \quad \int_0^\infty R_{31} \cdot \frac{r}{a} \cdot R_{30} r^2 dr = -9\sqrt{2}$$

再求出: $W_{12} = W_{21} = -3\sqrt{3}$, $W_{23} = W_{32} = -3\sqrt{6}$,

$$W_{45} = W_{54} = -\frac{9}{2}, \quad W_{67} = W_{76} = -\frac{9}{2}.$$

再代入方程 $\det|W_{uv} - E^{(1)}\delta_{uv}| = 0$, 得

$$\begin{array}{l}
m=0 \\
m=1 \\
m=-1 \\
m=2 \\
m=-2
\end{array}
\left\{ \begin{array}{cccccccccc}
-E^{(1)} & -3\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-3\sqrt{3} & -E^{(1)} & -3\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -3\sqrt{6} & -E^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & -9/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -9/2 & -E^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & -9/2 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -9/2 & -E^{(1)} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)}
\end{array} \right\} = 0 \quad \text{即}$$

$$(E^{(1)})^3 [(E^{(1)})^2 - 9^2] [(E^{(1)})^2 - (9/2)^2] = 0$$

$$\therefore E_3^{(1)} = 0, 0, 0, \pm \frac{9}{2} e\epsilon a, \pm \frac{9}{2} e\epsilon a, \pm 9e\epsilon a。$$

$$\text{(由 } \begin{vmatrix} -E^{(1)} & -3\sqrt{3} & 0 \\ -3\sqrt{3} & -E^{(1)} & -3\sqrt{6} \\ 0 & -3\sqrt{6} & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \text{ 解得 } E^{(1)} = 0, 9, -9)$$

$$\text{(由 } \begin{vmatrix} -E^{(1)} & -9/2 \\ -9/2 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \text{ 解得 } E^{(1)} = -9/2, 9/2)$$

结果, $n=3$ 的能级分裂成五条:

$$E_{31} = E_3^{(0)} - 9e\epsilon a, \quad E_{32} = E_3^{(0)} - \frac{9}{2} e\epsilon a, \quad E_{33} = E_3^{(0)}, \quad E_{34} = E_3^{(0)} + \frac{9}{2} e\epsilon a, \quad E_{35} = E_3^{(0)} + 9e\epsilon a。$$

10.6 设 $H = H_0 + H'$,

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix}, \quad H' = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \quad (a, b \text{ 为实数})$$

用微扰论求解能级修正 (准到二级近似), 并与严格解 (把 H 矩阵对角化) 比较。

解: (1) 由 H' 表达式可见, 微扰哈密顿的矩阵元为

$$H'_{11} = H'_{22} = a, \quad H'_{12} = H'_{21} = b$$

代入能量的微扰论二级近似公式

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_k \frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$\text{得 } E_1 = E_1^{(0)} + a - \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}, \quad E_2 = E_2^{(0)} + a + \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

(2) 直接求能量。设 H 的本征矢为 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, 对应的本征值为 E , 则本征方程为

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} + a & b \\ b & E_2^{(0)} + a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

即
$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} + a - E & b \\ b & E_2^{(0)} + a - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0$$

α, β 有非零解的条件为

$$\begin{vmatrix} E_1^{(0)} + a - E & b \\ b & E_2^{(0)} + a - E \end{vmatrix} = 0$$

即
$$(E_1^{(0)} + a - E)(E_2^{(0)} + a - E) - b^2 = 0$$

这是关于 $(a - E)$ 的二次方程，其解为

$$\begin{aligned} a - E &= \frac{1}{2} \left[-(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm \sqrt{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2 + 4b^2} \right] \\ &= -\frac{1}{2} (E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm \frac{1}{2} (E_2^{(0)} - E_1^{(0)}) \left[1 + \left(\frac{2b}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= -\frac{1}{2} (E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm \frac{1}{2} (E_2^{(0)} - E_1^{(0)}) \left[1 + \frac{2b^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2} - \dots \right] \\ &= -\frac{1}{2} (E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm \left[\frac{1}{2} (E_2^{(0)} - E_1^{(0)}) + \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \right] \end{aligned}$$

以上的近似符合定态微扰论的要求， $\frac{b}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} < 1$ ，

即微扰矩阵元小于能级差。上式分开 \pm 号再写一步，得能级的二级近似

$$E_1 = E_1^{(0)} + a - \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}, \quad E_2 = E_2^{(0)} + a + \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

这与 (1) 中用微扰论公式求得的结果完全一致。

10.7 对于一维谐振子，取基态试探波函数形式为 $e^{-\lambda x^2}$ ， λ 为参数，用变分法求基态能量，并与严格解比较。

解：设基态波函数 $\psi = Ce^{-\lambda x^2}$ ，归一化，得

$$\int_{-\infty}^{\infty} |Ce^{-\lambda x^2}|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda x^2} dx = |C|^2 \left(\frac{\pi}{2\lambda} \right)^{\frac{1}{2}} = 1,$$

取 $C = \left(\frac{2\lambda}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}}$ ， $\therefore \psi = \left(\frac{2\lambda}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\lambda x^2}$ 。

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2u} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} u \omega^2 x^2$$

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{H} \psi dx = \left(\frac{2\lambda}{\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2u} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} u \omega^2 x^2 \right) e^{-\lambda x^2} dx \\ &= \left(\frac{2\lambda}{\pi} \right)^{1/2} \left[\frac{\lambda \hbar^2}{u} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\lambda x^2} (1 - 2\lambda x) dx + \frac{1}{2} u \omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\lambda x^2} \cdot x^2 dx \right] \\ &= \frac{\lambda \hbar^2}{2u} + \frac{u \omega^2}{8\lambda} \end{aligned} \quad (1)$$

由 $\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{\hbar^2}{2u} - \frac{u \omega^2}{8\lambda^2} = 0$, 得 $\lambda = \pm \frac{u \omega}{2\hbar}$

考虑 $\psi(x)$ 在 $x \rightarrow \infty$ 处要求有限的条件, 取 $\lambda = \frac{u \omega}{2\hbar} = \frac{1}{2} \alpha^2$ (2)

代入式 (1), 得谐振子 (一维) 基态能量 $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$

与严格解求得的结果完全一致。

10.8 对于非谐振子, $H = -\frac{\hbar^2}{2u} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4$, 取试探波函数为 $\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2}$

(与谐振子基态波函数形式相同), α 为参数, 用变分法求基态能量。

解: $\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2u} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* \frac{d^2}{dx^2} \psi_0 dx = \frac{\alpha^3 \hbar^2}{2u \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} (1 - \alpha^2 x^2) dx = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{4u}$ (1)

$$\langle V \rangle = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \psi_0^2 dx = \frac{\lambda \alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{3\lambda}{4\alpha^4} \quad (2)$$

$$E(\alpha) = \langle T + V \rangle = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{4u} + \frac{3\lambda}{4\alpha^4} \quad (3)$$

由 $\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} = 0$, 得 $\frac{\alpha \hbar^2}{2u} - \frac{3\lambda}{\alpha^5} = 0$,

解得 $\alpha^2 = (6u\lambda/\hbar^2)^{1/3}$ (4)

代入 (3), 得基态能量 $E_0 = \frac{3\sqrt[3]{3}}{4} \left(\frac{\hbar^2}{2u} \right)^{2/3} \lambda^{1/3}$ (5)

10.10 设在氦核中的质子与中子的相互作用表成 $V(r) = -Ae^{-r/a}$, ($A = 32 \text{ Mev}$, $a = 2.2 \times 10^{-15} \text{ m}$)。设质子

与中子相对运动波函数取为 $e^{-\lambda r/2a}$, λ 为变分参数, 用变分法计算氦核得基态能量。

解: 取 $\psi = Ne^{-\lambda r/2a}$, (1)

归一化, $\int |\psi|^2 d\tau = 4\pi \int_0^\infty N^2 e^{-\lambda r/a} r^2 dr = 1,$

$$\text{得 } N = \left(\frac{\lambda^3}{8\pi a^3} \right)^{1/2} \quad (2)$$

$$\text{(而 Hamilton 量为 } H = \left(-\frac{\hbar^2}{2u} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + (-Ae^{-r/a}) = T + V \text{)}$$

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2u} \int \left(\frac{d\psi}{dr} \right)^2 d\tau = \frac{\hbar^2}{2u} \left(\frac{\lambda}{2a} \right)^2$$

$$\langle V \rangle = -AN^2 \cdot 4\pi \int_0^\infty e^{-r/a} e^{-\lambda r/a} r^2 dr = -A \left(\frac{\lambda}{1+\lambda} \right)^3$$

$$\text{因此 } E(\lambda) = \langle T + V \rangle = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{8ua^2} - A \left(\frac{\lambda}{1+\lambda} \right)^3 \quad (3)$$

其中 u 为质子-中子体系的约化质量, 即 $u = \frac{m_p m}{m_p + m} = 469.45 \text{ Mev}/c^2$

由极值条件 $\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0$, 求得 λ 最佳值满足的方程:

$$\frac{\lambda}{(1+\lambda)^4} = \frac{\hbar^2}{12ua^2 A} \quad (4)$$

给定了上式右端各参数值之后, 可用数值法求出 λ 的最佳值, 相应的 $E(\lambda)$ 最小值可以表成

$$E = \frac{\hbar^2}{4ua^2} \lambda^2 \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{3}(1+\lambda) \right] \quad (5)$$

$$\text{式 (4) 中, } \frac{\hbar^2}{12ua^2 A} = \frac{(\hbar c)^2}{12uc^2 a^2 A} = 0.04531$$

$$\text{由式 (4) 求得 } \lambda \text{ 最佳值为 } \lambda = 1.326 \quad (6)$$

$$\text{代入 (5) 式, 即得 } E = -2.15 \text{ Mev} \quad (7)$$

氘核基态能级的实验值为 $E = -2.23 \text{ Mev}$, 二者相差约 3.6%。

式 (1) 作为基态波函数的近似表达式, 虽不十分准确, 但简明易算。例如, 由式 (1) 易得基态最可几半径为

$$r_0 = 2a/\lambda = 3.26 \text{ (fm)} \quad [\text{fm}: 10^{-15} \text{ m}] \quad (8)$$

和公认的数值基本一致。最可几半径由径向几率密度的极值条件决定, 即满足

$$\left. \frac{d}{dr} (r^2 \psi^2) \right|_{r=r_0} = 0 \quad (9)$$

由式 (1) 还可求出基态平均半径为

$$\langle r \rangle = \int r \psi^2 d\tau = 3a/\lambda = 4.89 \text{ (fm)} \quad (10)$$

第十一章 量子跃迁

11.2 氢原子处于基态。收到脉冲电场的作用 $\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \delta(t)$ 。使用微扰论计算它跃迁到各激发态的几率以及仍然处于基态的几率（取 ε_0 沿 z 轴方向来计算）。

解：令 $\psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$ (6)

初始条件 (5) 亦即 $C_n(0^-) = \delta_{n1}$ (5)

用式 (6) 代入式 (4)，但微扰项 $H' \psi$ 中 ψ 取初值 ψ_1 （这是微扰论的实质性要点！）即得

$$\sum_n i\hbar \psi_n \frac{dC_n}{dt} e^{-iE_n t/\hbar} = H' \psi_1 = e\varepsilon_0 z \psi_1 \delta(t)$$

以 ψ_n^* 左乘上式两端并全空间积分，得

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = e\varepsilon_0 z_{n1} \delta(t) e^{-iE_n t/\hbar}$$

再对 τ 积分，由 $t = 0^- \rightarrow t > 0$ ，即得

$$C_n(t) = \frac{e\varepsilon_0}{i\hbar} z_{n1} \quad (n \neq 1) \quad (7)$$

因此 $t > 0$ 时（即脉冲电场作用后）电子已跃迁到 ψ_n 态的几率为[可直接代入 P291 式 (23)、P321 式 (15) 而得下式]

$$P_n = |C_n(t)|^2 = \left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2 |z_{n1}|^2 \quad (8)$$

根据选择定则 ($\Delta l = 1, \Delta m = 0$)，终态量子数必须是

$$(nlm) = (n10)$$

即电子只能跃迁到各 np 态 ($l = 1$)，而且磁量子数 $m = 0$ 。

跃迁到各激发态的几率总和为

$$\sum_n P_n = \left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2 \sum_n |z_{n1}|^2 = \left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2 \left[\sum_n |z_{n1}|^2 - |z_{11}|^2 \right] \quad (9)$$

其中 $z_{11} = \langle \psi_1 | z | \psi_1 \rangle = 0$ ($\because z$ 为奇宇称)

$$\sum_n |z_{n1}|^2 = \sum_n \langle \psi_1 | z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | z | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | z^2 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{3} \langle \psi_1 | r^2 | \psi_1 \rangle = a^2 \quad (10)$$

a 为 Bohr 半径，代入式 (9) 即得

$$\sum_n P_n = \left(\frac{e\varepsilon_0 a}{\hbar}\right)^2 \quad (11)$$

电场作用后电子仍留在基态的几率为

$$1 - \sum_n P_n = 1 - \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a}{\hbar} \right)^2 \quad (12)$$

11.3 考虑一个二能级体系，Hamilton 量 H_0 表为（能量表象）

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}, \quad E_1 < E_2,$$

设 $t=0$ 时刻体系处于基态，后受微扰 H' 作用， $H' = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma & \beta \end{pmatrix}$ ，

求 t 时刻体系处于激发态的几率。

解： $t \geq 0$ 时，体系 $H = H_0 + H'$ ，其矩阵表示（ H_0 表象）为

$$H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_1 + \alpha & \gamma \\ \gamma & E_2 + \beta \end{pmatrix} \quad (1)$$

设 H 的本征函数为

$$\psi_E = C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2 \Rightarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\text{代入本征方程} \quad H\psi_E = E\psi_E \quad (3)$$

得到

$$\begin{cases} (E_1 + \alpha - E)C_1 + \gamma C_2 = 0 \\ \gamma C_1 + (E_2 + \beta - E)C_2 = 0 \end{cases} \quad (4)$$

上式存在非平庸解的条件为

$$\begin{vmatrix} E_1 + \alpha - E & \gamma \\ \gamma & E_2 + \beta - E \end{vmatrix} = (E_1 + \alpha - E)(E_2 + \beta - E) - \gamma^2 = 0$$

$$\text{由此解出} \quad E = \frac{1}{2} \left[E_1 + \alpha + E_2 + \beta \pm \sqrt{(E_2 + \beta - E_1 - \alpha)^2 + 4\gamma^2} \right] = E_{\pm} \quad (5)$$

$$\text{令} \quad \omega_1 = \frac{E_1 + \alpha}{\hbar}, \quad \omega_2 = \frac{E_2 + \beta}{\hbar}, \quad \omega = \omega_2 - \omega_1 \quad (6)$$

$$\text{式 (5) 可以写成} \quad E_{\pm} = \frac{\hbar}{2} \left[\omega_1 + \omega_2 \pm \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2} \right] \quad (5')$$

当 $E = E_+$ ，由式 (4) 求得

$$C_2 = \frac{\hbar}{2\gamma} \left(\omega + \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2} \right) C_1$$

取 $C_1 = 1$ ，即得相应的能量本征函数（未归一化）为

$$\psi_{E_+} = \psi_1 + \frac{\hbar}{2\gamma} \left(\omega + \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2} \right) \psi_2 \quad (7)$$

当 $E = E_-$ ，类似可求得

$$\psi_{E_-} = \psi_1 + \frac{\hbar}{2\gamma} \left(\omega - \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2} \right) \psi_2 \quad (8)$$

$t = 0$ 时，体系的初始状态为

$$\psi(t=0) = \psi_1 = \frac{\Omega - \omega}{2\Omega} \psi_{E_+} + \frac{\Omega + \omega}{2\Omega} \psi_{E_-} \quad (9)$$

其中
$$\Omega = \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2} \quad (10)$$

因此 $t \geq 0$ 时波函数为

$$\psi(t) = \frac{\Omega - \omega}{2\Omega} \psi_{E_+} e^{-iE_+t/\hbar} + \frac{\Omega + \omega}{2\Omega} \psi_{E_-} e^{-iE_-t/\hbar} \quad (11)$$

以式 (5')、(7)、(8) 代入上式，即得

$$\psi(t) = \psi_1 \left(\cos \frac{\Omega t}{2} + i \frac{\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right) e^{-\frac{i}{2}(\omega_1 + \omega_2)t} + \psi_2 \left(-i \frac{2\gamma}{\hbar\omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right) e^{-\frac{i}{2}(\omega_1 + \omega_2)t} \quad (12)$$

体系处于 ψ_2 态的几率为

$$\left| \langle \psi_2 | \psi(t) \rangle \right|^2 = \left(\frac{2\gamma}{\hbar\Omega} \right)^2 \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad (13)$$

11.4 自旋为 $1/2$ 的粒子，磁矩为 u ，处于沿 z 轴方向的常磁场 B_0 中，初始时刻粒子自旋向下 ($\sigma_z = -1$)。后来

加上沿 x 轴方向的常磁场 B_1 ($\ll B_0$)。求 t 时刻粒子测得自旋向上的几率。(磁矩算符 $\vec{u} = u\vec{\sigma}$ ，与外磁场的

作用 $H' = -\vec{u} \cdot \vec{B} = -\mu(B_1\sigma_x + B_0\sigma_z)$ 。)

解：粒子的磁矩算符可表示成 $\vec{u} = u\vec{\sigma} \quad (1)$

$\vec{\sigma}$ 为泡利算符，磁场对粒子的作用势为

$$H' = -\vec{u} \cdot \vec{B} = -\mu(B_1\sigma_x + B_0\sigma_z) \quad (2)$$

在 σ_z 表象中， H 的矩阵表示为

$$H = -uB_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - uB_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -u \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix} \quad (2')$$

以下求 H 的本征值和本征函数，设本征函数为

$$\psi = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + C_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (3)$$

本征方程为 $H\psi = E\psi$ ，则

$$-u \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

能级方程为

$$\det(E - H) = \begin{vmatrix} E + uB_0 & uB_1 \\ uB_1 & E - uB_0 \end{vmatrix} = 0 \quad (5)$$

$$\text{令 } uB_0 = \hbar\omega_0, \quad uB_1 = \hbar\omega_1, \quad \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} = \omega \quad (6)$$

$$\text{由式 (5) 容易解出 } E = \pm \hbar\omega \quad (7)$$

将 E 之值代入式 (4)，即可求出如下本征函数：

$$\left. \begin{aligned} E = \hbar\omega & & E = -\hbar\omega \\ \frac{C_1}{C_2} = -\frac{\omega_1}{\omega + \omega_0} & & \frac{C_1}{C_2} = \frac{\omega_1}{\omega - \omega_0} \\ \psi_+ = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega + \omega_0 \end{pmatrix} & & \psi_- = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega - \omega_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

注意，这两个本征函数并未归一化。

将 $t = 0$ 时的初始波函数按能量本征函数展开，

$$\psi(t=0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\omega} (\psi_+ + \psi_-) \quad (9)$$

因此， $t > 0$ 时波函数

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \frac{1}{2\omega} (\psi_+ e^{-i\omega t} + \psi_- e^{i\omega t}) \\ &= i \frac{\omega_1}{\omega} \sin \omega t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \left(\cos \omega t - i \frac{\omega_0}{\omega} \sin \omega t \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10)$$

$$\text{注意 } \psi(t) \text{ 满足归一化条件 } \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$$

在时刻 $t > 0$ ，测得粒子自旋“向上” ($\sigma_z = 1$) 的几率为

$$\begin{aligned} P(\sigma_z = 1) &= \left| i \frac{\omega_1}{\omega} \sin \omega t \right|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega^2} \sin^2 \omega t \\ &= \frac{B_1^2}{B_0^2 + B_1^2} \left[\sin \left(\frac{u}{\hbar} \sqrt{B_0^2 + B_1^2} t \right) \right]^2 \end{aligned} \quad (11)$$

本题可以视为 11.3 题的一个实例。

第十二章 散射

12.1 对低能粒子散射，设只考虑 s 波和 p 波，写出散射截面的一般形式。

$$\text{解： } \sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2$$

只考虑 s 波和 p 波，则只取 $l = 0, 1$ ，于是

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \left| e^{i\delta_0} \sin \delta_0 P_0(\cos \theta) + 3e^{i\delta_1} \sin \delta_1 P_1(\cos \theta) \right|^2$$

$P_0(\cos \theta) = 1$, $P_1(\cos \theta) = \cos \theta$, 代入上式, 得

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{1}{k^2} \left| e^{i\delta_0} \sin \delta_0 + 3e^{i\delta_1} \sin \delta_1 \cos \theta \right|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \left(\sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1) \cos \theta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta \right) \\ &= \frac{1}{k^2} (A_0 + A_1 \cos \theta + A_2 \cos^2 \theta) \end{aligned}$$

其中 $A_0 = \sin^2 \delta_0$, $A_1 = 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1)$, $A_2 = 9 \sin^2 \delta_1$ 。

12.2 用波恩近似法计算如下势散射的微分截面:

$$(a) \quad V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a; \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

$$(b) \quad V(r) = V_0 e^{-\alpha r^2}$$

$$(c) \quad V(r) = \kappa e^{-\alpha r} / r$$

$$(d) \quad V(r) = \gamma \delta(r).$$

解: 本题的势场皆为中心势场, 故有

$$f(\theta) = -\frac{2u}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r' V(r') \sin qr' dr', \quad q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (1)$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4u^2}{\hbar^4 q^2} \left| \int_0^\infty r' V(r') \sin qr' dr' \right|^2 \quad (1)$$

$$(a) \quad \int_0^a r' (-V_0) \sin qr' dr' = -\frac{V_0}{q^2} (\sin qa - qa \cos qa)$$

$$\therefore \quad \sigma(\theta) = \frac{4u^2 V_0^2}{\hbar^4 q^6} (\sin qa - qa \cos qa)^2$$

$$(b) \quad \int_0^\infty r' (V_0 e^{-\alpha r'^2}) \sin qr' dr' = \frac{V_0}{2i} \int_0^\infty r' e^{-\alpha r'^2} (e^{iqr'} - e^{-iqr'}) dr'$$

$$= \frac{V_0}{2i} \left[\int_0^\infty r' e^{-\alpha \left(r' - \frac{iq}{2\alpha}\right)^2 - \frac{q^2}{4\alpha}} dr' - \int_0^\infty r' e^{-\alpha \left(r' + \frac{iq}{2\alpha}\right)^2 - \frac{q^2}{4\alpha}} dr' \right]$$

$$= \frac{V_0}{2i} e^{-q^2/4\alpha} \left[\int_0^\infty r' e^{-\alpha \left(r' - \frac{iq}{2\alpha}\right)^2} dr' - \int_0^\infty r' e^{-\alpha \left(r' + \frac{iq}{2\alpha}\right)^2} dr' \right]$$

$$= \frac{V_0}{2i} e^{-q^2/4\alpha} [I_1 - I_2] \quad (3)$$

$$\text{其中 } I_1 = \int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r' - \frac{iq}{2\alpha}\right)^2} dr' = \int_0^\infty \left(r' - iq/2\alpha\right) e^{-\alpha\left(r' - \frac{iq}{2\alpha}\right)^2} dr' + \frac{iq}{2\alpha} \int_0^\infty e^{-\alpha\left(r' - \frac{iq}{2\alpha}\right)^2} dr'$$

$$= \int_0^\infty \xi e^{-\alpha\xi^2} d\xi + \frac{iq}{2\alpha} \int_0^\infty e^{-\alpha\xi^2} d\xi = \frac{1}{2\alpha} + \frac{iq\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}} \quad (4)$$

$$\text{类似地可求得 } I_2 = \int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r' + \frac{iq}{2\alpha}\right)^2} dr' = \frac{1}{2\alpha} - \frac{iq\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}} \quad (5)$$

(4)、(5) 代入 (3), 得

$$\int_0^\infty r' \left(V_0 e^{-\alpha r'^2} \right) \sin qr' dr' = \frac{V_0}{2i} e^{-q^2/4\alpha} \left(-\frac{iq\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}} \right) = -\frac{V_0 q \sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}} e^{-q^2/4\alpha} \quad (6)$$

代入 (2), 得

$$\sigma(\theta) = \frac{\pi u^2 V_0^2}{4\hbar^4 \alpha^3} e^{-q^2/2\alpha} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \text{(c) } \int_0^\infty r' \left(\kappa e^{-\alpha r'} / r' \right) \sin qr' dr' &= \kappa \int_0^\infty e^{-\alpha r'} \sin qr' dr' = I = -\frac{\kappa}{\alpha} \int_0^\infty \sin qr' de^{-\alpha r'} \\ &= -\frac{\kappa}{\alpha} \left[\sin qr' e^{-\alpha r'} \Big|_0^\infty - q \int_0^\infty e^{-\alpha r'} \cos qr' dr' \right] = \frac{q\kappa}{\alpha} \int_0^\infty \left(-\frac{1}{\alpha} \right) \cos qr' de^{-\alpha r'} \\ &= -\frac{q\kappa}{\alpha^2} \left[\cos qr' e^{-\alpha r'} \Big|_0^\infty + q \int_0^\infty e^{-\alpha r'} \sin qr' dr' \right] \\ &= -\frac{q\kappa}{\alpha^2} \left[-1 + \frac{q}{\kappa} I \right] \end{aligned}$$

$$\text{由此解得 } I = \int_0^\infty r' \left(\kappa e^{-\alpha r'} / r' \right) \sin qr' dr' = \frac{q\kappa}{\alpha^2 + q^2} \quad (8)$$

$$\text{代入 (2), 解得 } \sigma(\theta) = \frac{4u^2}{\hbar^4 q^2} \left| \frac{q\kappa}{\alpha^2 + q^2} \right|^2 = \frac{4u^2 \kappa^2}{\hbar^4 (\alpha^2 + q^2)^2} \quad (9)$$

将 $V(r) = \gamma\delta(r)$ 代入 § 12.3.2 式 (18),

$$\begin{aligned} f(\theta, \varphi) &= -\frac{u}{2\pi\hbar^2} \int d^3 \vec{r}' e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}'), \text{ 得} \\ f(\theta, \varphi) &= -\frac{u}{2\pi\hbar^2} \int d^3 \vec{r}' e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} \gamma\delta(\vec{r}') = -\frac{u\gamma}{2\pi\hbar^2} \\ \therefore \sigma(\theta) &= |f(\theta, \varphi)|^2 = \frac{u^2 \gamma^2}{2\pi^2 \hbar^4} \quad (10) \end{aligned}$$

可见, $\sigma(\theta)$ 与 θ, φ 均无关, 是各项同性的, $\sigma = \frac{u^2 \gamma^2}{\pi \hbar^4}$ 。

12.3 计算低能粒子散射截面 (只考虑 s 波), 设粒子自旋为 $1/2$, 相互作用为

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V_0 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (1)$$

$V_0 > 0$, 入射粒子和靶粒子均未极化。

提示: 计及粒子的全同性, 对于 s 态 ($l=0$, 空间波函数对称), 两粒子自旋之和必为 $s=0$ (单态), 所以

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} -3V_0, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (1')$$

解: 自旋为 $1/2$ 的二全同粒子体系的总波函数必须是交换反对称的, s 波 ($l=0$) 波函数是两粒子空间坐标的对称函数, 所以自旋波函数必须是反对称的, 即为自旋单态, 因此, 体系总自旋为 0 ,

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = -3$$

亦即, 对于低能 s 波散射, 式 (1) 等价于球方势阱

$$V(r) = \begin{cases} -3V_0, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (1')$$

在质心系中, s 波空间波函数可以写成

$$\psi(r) = u(r)/r \quad (2)$$

其中 r 为两粒子的相对距离, 即 $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, $E \rightarrow 0$ 时。径向方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u'' + V(r)u = 0 \quad (3)$$

亦即

$$\begin{aligned} u'' + k_0^2 u &= 0, & r \leq a \\ u'' &= 0, & r > a \end{aligned} \quad (E \rightarrow 0) \quad (3')$$

$$\text{其中} \quad k_0 = \sqrt{6\mu V_0}/\hbar = \sqrt{3mV_0}/\hbar \quad (4)$$

m 为粒子质量, $\mu = m/2$ 为两粒子体系的约化质量。

方程 (3') 满足边界条件 $u(0) = 0$ 的解为

$$u(r) = \begin{cases} A \sin k_0 r, & r \leq a \\ C \left(1 - \frac{r}{a_0}\right), & r > a \end{cases} \quad (5)$$

其中 a_0 为散射密度 (待定), $(-a_0)$ 即散射振幅, 利用 $r = a$ 处 u'/u 的连续条件, 求得

$$a_0 = -a \left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1 \right) \quad (6)$$

$$f(\theta) = -a_0 = a \left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1 \right) \quad (7)$$

由于是全同粒子散射， s 波微分截面为

$$\sigma(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 = 4a_0^2 \quad (8)$$

总截面（自旋单态， s 波）为

$$\sigma_t = 4\pi\sigma(\theta) = 16\pi a_0^2 \quad (9)$$

考虑到入射粒子和靶粒子都是未极化的，自旋指向取随机分布，两粒子形成自旋单态（ $s=0$ ）的几率为 $\frac{1}{4}$ ，形成自旋三重态（ $s=1$ ）的几率为 $\frac{3}{4}$ ，后若对 s 波散射无贡献。因此，有效的总截面为

$$\sigma_{\text{有效}} = \frac{1}{4}\sigma_t = 4\pi a_0^2 = 4\pi a^2 \left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1 \right)^2 \quad (10)$$

在不发生共振散射的条件下，散射振幅和散射截面均和入射能量无关，这是低能散射的特点。

共振散射的条件为 $a_0 \rightarrow \pm\infty$ ，亦即（参考式（6））

$$k_0 a = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots \quad (11)$$

这正是势阱的“阱口”出现束缚能级（ $E=0^-$ ）的条件，这时式（9）和（10）应改为

$$\sigma_t = 16\pi|f|^2 = \frac{16\pi}{k^2} = \frac{8\pi\hbar^2}{uE_c} = \frac{32\pi\hbar^2}{mE} \quad (12)$$

$$\sigma_{\text{有效}} = \frac{1}{4}\sigma_t = \frac{8\pi\hbar^2}{mE}$$

其中 E 为实验室坐标系中入射中子动能， $E_c = E/2$ 为质心系中总动能， $E_c = \hbar^2 k^2 / 2u$ 。