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

$$a = n \cdot \frac{\lambda}{2} \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

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

又据 de Broglie 关系

$$p = h/\lambda \qquad (2)$$

而能量

$$E = p^2/2m = \hbar^2/2m\lambda^2$$
$$= \frac{h^2 n^2}{2m \cdot 4a^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots) \qquad (3)$$

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

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

即

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

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

同理可得，

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

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

粒子能量

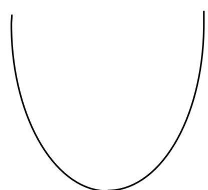
$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right)$$

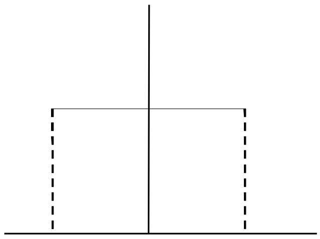
$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \cdots$$

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

$V(x)$





解：能量为E的粒子在谐振子势中的活动范围为

$$|x| \le a \qquad (1)$$

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

由此得 $\quad a = \sqrt{2E/m\omega^2}$ ， （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

$$E_n = n\hbar\omega, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \qquad (4)$$

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$\int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = nh, \quad n = 1, 2, \cdots,\ p_\varphi$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），$p_\varphi$是运动惯量。按量子化条件

$$\int_0^{2\pi} p_\varphi dx = 2\pi p_\varphi = mh, \qquad m = 1, 2, 3, \cdots$$

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

因而平面转子的能量

$$E_m = p_\varphi^2 / 2I = m^2\hbar^2 / 2I,$$

$$m = 1, 2, 3, \cdots$$

第二章 波函数与 Schrödinger 方程

2.1 设质量为m的粒子在势场$V(\vec{r})$中运动。

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

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

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

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

证：（a）粒子的能量平均值为（设ψ 已归一化）

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

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

$$\overline{T} = \int d^3r \psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi \qquad (\qquad\qquad)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\left[\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi\right) - \left(\nabla\psi^*\right)\cdot\left(\nabla\psi\right)\right]$$

其中 $\overline{T}$ 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

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

结合式（1)、（2）和（3)，可知能量密度

$$w = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi + \psi^* V\psi, \qquad (4)$$

且能量平均值 $E = \int d^3r\cdot w$ 。

（**b**）由（4）式，得

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi + \nabla\psi^*\cdot\nabla\dot{\psi}\right] + \dot{\psi}^* V\psi + \psi^* V\dot{\psi}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\cdot\left(\dot{\psi}^*\nabla\psi + \dot{\psi}\nabla\psi^*\right) - \left(\dot{\psi}^*\nabla^2\psi + \dot{\psi}\nabla^2\psi^*\right)\right] + \dot{\psi}^* V\psi + \psi^* V\dot{\psi}$$

$$= -\nabla\cdot\vec{s} + \dot{\psi}^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi + \dot{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi^*$$

$$= -\nabla\cdot\vec{s} + E\left(\dot{\psi}^*\psi + \dot{\psi}\psi^*\right)$$

$$= -\nabla\cdot\vec{s} + E\frac{\partial}{\partial t}\rho \qquad \text{（}\rho\text{ ：几率密度）}$$

$$= -\nabla\cdot\vec{s} \qquad \text{（定态波函数，几率密度 }\rho\text{ 不随时间改变）}$$

所以 $\dfrac{\partial w}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{s} = 0$ 。

2.2 考虑单粒子的 **Schrödinger** 方程

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

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

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

证：（a）式（1）取复共轭， 得

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

$\psi^*\times$（1）$-\psi\times$（2）, 得

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

$$\therefore\quad\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=-\frac{\hbar}{2im}\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)+\frac{2V_2}{\hbar}(\psi^*\psi) \qquad (3)$$

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

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

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\iiint_\tau d^3r(\psi^*\psi)&=-\frac{\hbar}{2im}\iiint_\tau\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)d^3r+\frac{2}{\hbar}\iiint_\tau d^3rV_2(\psi^*\psi)\\&=-\frac{\hbar}{2im}\oiint_S\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)\cdot d\vec{S}+\frac{2}{\hbar}\iiint_\tau d^3rV_2\psi^*\psi\end{aligned}$$

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（$=-\oiint\vec{j}\cdot d\vec{S}$），而第二项代表体积$\tau$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

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

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

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

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

$\psi_2\times$（3）$-\psi_1^*\times$（2），得

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi_1^*\psi_2\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2\right)$$

对全空间积分：

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\int d^3r\psi_1^*(\vec{r},t)\psi_2(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\left[\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\left[\nabla\cdot\left(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2\right)-(\nabla\psi_2)\cdot(\nabla\psi_1^*)+(\nabla\psi_1^*)\cdot(\nabla\psi_2)\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\left[\nabla\cdot\left(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2\right)\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2\right)\cdot d\vec{S}=0$$，（无穷远边界面上，$\psi_1,\psi_2\to 0$）

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

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

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

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

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

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

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

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\cdot\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\xi^2}d\xi$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\cdot\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}e^{imx^2/2\hbar t}\cdot\sqrt{\pi}e^{-i\pi/4}$$

$$=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}\exp\left[i\left(\frac{mx^2}{2\hbar t}-\frac{\pi}{4}\right)\right]$$

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{m}{2\pi\hbar t} 。$$

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 $\lim\limits_{\alpha\to\infty}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}e^{i\pi/4}e^{-i\alpha x^2}=\delta(x)$。

证：根据平面波的时间变化规律

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

任意时刻的波函数为

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(k)e^{i(kx-\hbar tk^2/2m)}dk$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{imx^2/2\hbar t}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\varphi(k)\cdot\exp\left[-i\frac{\hbar t}{2m}\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)^2\right] \qquad (1)$$

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

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

参照本题的解题提示，即得

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

$$= \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} e^{-i\pi/4} e^{imx^2/2\hbar t} \varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right) \qquad (3)$$

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

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。

2.7 写出动量表象中的不含时 Schrödinger 方程。

解：经典能量方程 $E = \frac{p^2}{2m} + V(\bar{r})$ 。

在动量表象中，只要作变换 $p \to p$，$\bar{r} \to i\hbar \frac{d}{dp}$

所以在动量表象中，Schrödinger 为：

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

第三章一维定态问题

3.1）设粒子处在二维无限深势阱中，

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

当$a=b=c$时，

$$E_{n_x n_y n_z}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$$

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

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

3.3）设粒子处在一维无限深方势阱中，

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

证明处于定态$\psi_n(x)$的粒子

$$\bar{x}=\frac{a}{2}, \qquad \overline{(x-\bar{x})^2}=\frac{a^2}{12}(1-\frac{6}{n^2\pi^2})$$

讨论 $n\to\infty$ 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

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

$$\bar{x}=\int_0^a x|\psi_n|^2 dx=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi}{a}xdx \overset{\text{分部}}{=\!=} \frac{a}{2} \qquad (1)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2=\int_0^a x^2|\psi_n|^2 dx-\frac{a^2}{4}$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^a x^2\cdot\frac{1}{2}(1-\cos\frac{2n\pi x}{a})dx-\frac{a^2}{4}$$

$$=\frac{a^2}{12}(1-\frac{6}{n^2\pi^2}) \qquad (2)$$

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 $x\to x+dx$ 范围的几率为 dx/a，故

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

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

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

当 $n\to\infty$ 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 $\qquad \psi_1=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi x}{a}\ ,$ （参 P57，（12））

$$\therefore \phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-a/2}^{a/2}e^{-ipx/\hbar}\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi x}{a}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\int_{-a/2}^{a/2}e^{-ipx/\hbar}\cdot\frac{1}{2}(e^{i\pi x/a}+e^{-i\pi x/a})dx$$

$$=\frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar a}}\int_{-a/2}^{a/2}\left[e^{i(\frac{\pi}{a}-\frac{p}{\hbar})}+e^{-i(\frac{\pi}{a}+\frac{p}{\hbar})}\right]dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\left\{\frac{1}{2i\left(\frac{\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)}\cdot\left[e^{i\left(\frac{\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}}-e^{-i\left(\frac{\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}}\right]+\frac{1}{-2i\left(\frac{\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)}\cdot\left[e^{-i\left(\frac{\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}}-e^{i\left(\frac{\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)\frac{a}{2}}\right]\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\left\{\frac{1}{\frac{\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}}\cos\frac{pa}{2\hbar}+\frac{1}{\frac{\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}}\cos\frac{pa}{2\hbar}\right\}$$

$$=\frac{2\sqrt{\pi q\hbar^3}}{\pi^2\hbar^2-a^2p^2}\cos\frac{pa}{2\hbar}$$

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

3.5）设粒子处于半壁高的势场中

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

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 $s.eq$:

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

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

方程的解为

$$\begin{aligned}\psi_1(x)&=Ae^{ik'x}+Be^{-ik'x}\\ \psi_2(x)&=Ce^{kx}+De^{-kx}\end{aligned}\qquad（4）$$

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

$$C=0$$

当 $x=0$ 时，$\psi_1(x)=0$，则 $A+B=0$

于是

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

在 $x=a$ 处，波函数及其一级导数连续，得

$$F\sin k^{'}a = De^{-ka}, \qquad k^{'}F\cos k^{'}a = -kDe^{-ka} \tag{6}$$

上两方程相比，得 $$tg\,k^{'}a = -\frac{k^{'}}{k} \tag{7}$$

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

若令 $$k^{'}a = \xi, \qquad \mathrm{k}a = \eta \tag{8}$$

则由（7）和（3），我们将得到两个方程：

$$\begin{cases} \eta = -\xi\, ctg\xi & (9) \\ \xi + \eta = \dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2}a^2 & (10) \end{cases}$$

（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 $\eta = -\xi ctg\xi$ 在第一象限的交点可决定束缚态能级。当 $r \geq \pi/2$，即 $\sqrt{\dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a \geq \pi/2$，亦即

$$\mu V_0 a^2 \geq \pi^2\hbar^2/8 \tag{11}$$

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—6）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 $0 < E < V_2$，

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

当 $x \to \pm\infty$ 时，$\psi \to 0$，故有

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

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

$$k_1 = kctg\delta, \qquad \mathrm{k}_2 = -kctg\left(ka+\delta\right) \tag{1}$$

由（1a）可得 $$\sin\delta = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} \tag{2}$$

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

又由（1），余切函数(ctg)的周期为π，故由(2)式，

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

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

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

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

一般而言，给定一个n值，有一个解k_n，相当于有一个能级：

$$E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m} \tag{7}$$

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 $$a\geq\frac{\hbar}{\sqrt{2mV_2}}\left(\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}\right) \tag{8}$$

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:

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

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

3—7）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

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

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　　　　$R=|r|^2=\dfrac{B^2}{A^2}=\dfrac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$

将k_1, k_2代入运算，可得

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

3—8）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，　$\overline{x}=0,$　　　　$\overline{V}=E_n/2$

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

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

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

$$\therefore \quad x\psi_n(x) = A_n e^{-\alpha^2x^2/2}\cdot xH_n(\alpha\, x) = \frac{1}{2\alpha}A_n e^{-\alpha^2x^2/2}\cdot 2\alpha\, xH_n(\alpha\, x)$$

$$= \frac{1}{2\alpha\, x}A_n e^{-\alpha^2x^2/2}\left[H_{n+1}(\alpha\, x) + 2nH_{n-1}(\alpha\, x)\right]$$

$$= \frac{1}{\alpha}\cdot\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\cdot 2^n\cdot n!}}\cdot e^{-\alpha^2x^2/2}\cdot nH_{n-1}(\alpha\, x) + \frac{1}{2\alpha}\cdot\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\cdot 2^n\cdot n!}}\cdot e^{-\alpha^2x^2/2}\cdot H_{n+1}(\alpha\, x)$$

$$= \frac{1}{\alpha}\cdot\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\cdot 2^{n-1}\cdot(n-1)!}}\cdot\sqrt{\frac{n}{2}}\cdot e^{-\alpha^2x^2/2}\cdot H_{n-1}(\alpha\, x)$$

$$+\frac{1}{\alpha}\cdot\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\cdot 2^{n+1}\cdot(n+1)!}}\cdot\sqrt{\frac{n+1}{2}}\cdot e^{-\alpha^2x^2/2}\cdot H_{n+1}(\alpha\, x)$$

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

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

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

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

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

$$\overline{V} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\cdot\frac{1}{2}m\omega^2x^2\cdot\psi_n(x)dx$$

$$= \int\psi_n^*(x)\cdot\frac{1}{2}m\omega^2\cdot\frac{1}{2\alpha^2}\cdot(2n+1)\psi_n(x)dx$$

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

3—9）利用 Hermite 多项式的求导公式。证明（参 A3.式（12））

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

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

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

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

$$= -\alpha^2 x\psi_n(x) + \sqrt{2n}\alpha\psi_{n-1}(x)$$

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

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

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

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

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

$$\overline{T} = \frac{\overline{p}^2}{2m} = \int\psi_n^*\cdot\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi_n dx$$

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

$$= \frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}\cdot(2n+1)\int\psi_n^*\psi_n dx = \frac{\hbar^2}{4m}\cdot\frac{m\omega}{\hbar}\cdot(2n+1) = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{E_n}{2}$$

3—10）谐振子处于ψ_n态下，计算

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

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

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

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

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

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

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

3—11）荷电 q 的谐振子，受到外电场ε的作用，

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\varepsilon x \tag{1}$$

求能量本征值和本征函数。

解： $$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\varepsilon x=H_0-q\varepsilon x \tag{2}$$

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

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，本症函数记为$\varphi_n(x)$。

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

其中 $$x_0=q\varepsilon/m\omega^2 \tag{3}$$

如作坐标平移，令 $$x'=x-x_0 \tag{4}$$

由于 $$p=-i\hbar\frac{d}{dx}=-i\hbar\frac{d}{dx'}=p' \tag{5}$$

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

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

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

$$\varphi_n(x)=\psi_n(x')=\psi_n(x-x_0) \tag{8}$$

即

$$\begin{aligned}E_n&=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{1}{2}m\omega^2\cdot\left(\frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2\\&=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2},\qquad n=0,1,2,\cdots\end{aligned} \tag{9}$$

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

其中 $$A_n=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\cdot2^n\cdot n!}},\qquad \alpha=\sqrt{\mathrm{m}\omega/\hbar} \tag{11}$$

3—12）设粒子在下列势阱中运动，

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,\\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & x>0.\end{cases}$$

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

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

3—13）设粒子在下列势阱中运动，

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

是否存在束缚定态？求存在束缚定态的条件。

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

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

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

积分$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx,\varepsilon\to0^+$,得$\psi'$跃变的条件

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

在$x\neq a$处，方程(4)化为

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi-\beta^2\psi=0 \tag{6}$$

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

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

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

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

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

由（8）（9）可得（以$-a/\psi(a)$乘以（9）式，利用（8）式）

$$\beta a+\beta a\coth\beta a=\frac{2mra}{\hbar^2} \tag{10}$$

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，$E\to 0^-$，所以$\beta a\to 0^+$，

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

（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 $$\frac{2mra}{\hbar^2}\geq 1 \tag{11}$$

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 $$a\geq L/2 \tag{12}$$

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$a\to\infty$（即$a>>L/2$），$\beta a\to\infty$时，左侧无限高势垒的影响可以完全忽略，此时$\coth\beta a\to 1$，式（10）给出

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

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

与势阱$V(x)=-r\delta(x)$的结论完全相同。

令$\beta a=\eta$， 则式（10）化为

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

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

$$E=-\frac{\hbar^2\eta^2}{2ma^2} \tag{15}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

则由（1）式，不难解得 $\quad F=F_{+}+iF_{-}$

4.2）设$F(x,p)$是x,p的整函数，证明

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

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$\left[p,x^{m}\right]=-mi\hbar x^{m-1}$，$\qquad \left[x,p^{n}\right]=ni\hbar p^{n-1}$。

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

同理，

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

现在，

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

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

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

又 $$[x,F]=\left[x,\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}x^m p^n\right]=\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}x^m\left[x,p^n\right]$$
$$=\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}x^m\left(ni\hbar p^{n-1}\right)$$

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

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

4.3）定义反对易式 $[A,B]_+=AB+BA$，证明

$$[AB,C]=A[B,C]_+-[A,C]_+B$$
$$[A,BC]=[A,B]_+C-B[A,C]_+$$

证：

$$[AB,C]=A[B,C]-[A,C]B$$
$$=ABC-ACB+ACB-CAB=A(BC+CB)-(AC+CA)B$$
$$=A[B,C]_+-[A,C]_+B$$

$$[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]=ABC-BAC+BAC-BCA$$
$$=(AB+BA)C-B(AC+CA)=[A,B]_+C-B[A,C]_+$$

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

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

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

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

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

$$\left[\left(\vec{A}\times\vec{B}\right)\times\vec{C}\right]_\alpha=\vec{A}\cdot\left(B_\alpha\vec{C}\right)-\overrightarrow{A_\alpha}\left(\vec{B}\cdot\vec{C}\right) \qquad (3)$$

证：

（1）式左端$=\vec{A}\cdot\left(\vec{B}\times\vec{C}\right)=A_x\left(B_yC_z-B_yC_z\right)+A_y\left(B_zC_x-B_xC_z\right)+A_z\left(B_xC_y-B_yC_x\right)$

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

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

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

$=A_\beta\left(B_\alpha C_\beta-B_\beta C_\alpha\right)-A_\gamma\left(B_\gamma C_\alpha-B_\alpha C_\gamma\right)=A_\beta B_\alpha C_\beta+A_\gamma B_\alpha C_\gamma-\left(A_\beta B_\beta+A_\gamma B_\gamma\right)C_\alpha$（2）式右端$=\vec{A}\cdot\left(B_\alpha\vec{C}\right)-\left(\vec{A}\cdot\vec{B}\right)C_\alpha$

$$=A_\alpha B_\alpha C_\alpha+A_\beta B_\alpha C_\beta+A_\gamma B_\alpha C_\gamma-A_\alpha B_\alpha C_\alpha-A_\beta B_\beta C_\alpha-A_\gamma B_\gamma C_\alpha$$
$$=A_\beta B_\alpha C_\beta+A_\gamma B_\alpha C_\gamma-\left(A_\beta B_\beta+A_\gamma B_\gamma\right)C_\alpha$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.6）设F是由$\vec{r}$，$\vec{p}$构成的标量算符，证明

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

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

$$[Lx,F]=[ypz-zpy,F]=y[p_z,F]+[y,F]p_z-z[p_y,F]-[z,F]p_y$$

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

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

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

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

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

将式（3）、（4）、（5）代入式（2），于是（1）式得证。

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

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

证：$\left(\vec{p}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{p}\right)_x=p_yL_z-p_zL_y+L_yp_z-L_zp_y=\left[p_y,L_z\right]+\left[L_y,p_z\right]$

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

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

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

$$\begin{aligned}\left[L^2,p_x\right]&=\left[L_y{}^2,p_x\right]+\left[L_Z{}^2,p_x\right]=\left[L_y,p_x\right]L_y+L_y\left[L_y,p_x\right]+\left[L_z,p_x\right]L_z+L_z\left[L_z,p_x\right]\\&=i\hbar\left(-p_zL_y-L_yp_z+p_yL_z+L_zp_y\right)\\&=i\hbar\left[\left(p_yL_z-p_zL_y\right)-\left(L_yp_z-L_zp_y\right)\right]\\&=i\hbar\left(\vec{p}\times\vec{L}-\vec{L}\times\vec{p}\right)_x\end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

（2）利用公式， $\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{p}=\vec{L}\cdot\left(\vec{p}\times\vec{p}\right)=0 \qquad (\Delta)$

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

$$=\left[\vec{L}\left(\vec{p}\cdot\vec{p}\right)-\left(\vec{L}\cdot\vec{p}\right)\vec{p}\right]\cdot\vec{L}=\left(\vec{L}p^2-0\right)\cdot\vec{L}=L^2p^2 \qquad \left(\left[\vec{L},p^2\right]=0\right) \qquad ①$$

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

$$=\vec{L}\cdot\left[p^2\vec{L}-\left(\vec{p}\cdot\vec{L}\right)\vec{p}\right]=L^2p^2 \qquad \left(\left[\vec{L},p^2\right]=0\right) \qquad ②$$

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

$$=\left[\vec{L}p^2-\vec{p}\left(\vec{L}\cdot\vec{p}\right)\right]\cdot\overleftarrow{L}=L^2p^2 \qquad ③$$

由①②③，则（2）得证。

（3）$-\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)\cdot\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\overset{4.7)\ (1)}{=\!=\!=}\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)\cdot\left(\vec{p}\times\vec{L}-2i\hbar\vec{p}\right)$

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

$$\overset{4.7)\ (1)}{=\!=\!=}L^2p^2-2i\hbar\left(2i\hbar\vec{p}-\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{p}\overset{(\Delta)}{=\!=}L^2p^2+4\hbar^2p^2$$

（4）就此式的一个分量加以证明，由 4.4)（2），

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

$$\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\times\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\right]_x=\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\left(L_x\vec{p}\right)-\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{L}\right]p_x \quad ,$$

其中 $L_x\vec{p}=\vec{p}L_x+i\hbar\left(p_z\vec{e_z}-p_y\vec{e_y}\right)$

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

$$\begin{aligned}\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\times\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\right]_x&=\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{p}L_x+i\hbar\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\left(p_z\vec{e_z}-p_y\vec{e_y}\right)-\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{L}\right]p_z\\&=i\hbar\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\times\vec{p}\right]_x=i\hbar\left[\left(\vec{L}\cdot\vec{p}\right)\vec{p}-\vec{L}\left(\vec{p}\cdot\vec{p}\right)\right]_x\\&=\left(-i\hbar\vec{L}p^2\right)_x=-i\hbar L_xp^2\end{aligned}$$

类似地。可以得到 y 分量和 z 分量的公式，故（4）题得证。

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

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

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

证：(a) $\quad \because\ (\mathrm{ABC})^+=C^+B^+A^+$，

$$\therefore\quad p_r^+=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\vec{r}\frac{1}{r}\right)^+=\frac{1}{2}\left[\vec{p}^{\,+}\cdot\vec{r}^{\,+}\left(\frac{1}{r}\right)^++\left(\frac{1}{r}\right)^+\vec{r}^{\,+}\cdot\vec{p}^{\,+}\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left(\vec{p}\cdot\vec{r}\frac{1}{r}+\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p}\right)=p_{\mathrm{r}}$$

即 p_{r} 为厄米算符。

$$(b)\quad p_{\mathrm{r}}=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\vec{r}\frac{1}{r}\right)=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}\right)+\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}\right)+\left(-i\hbar\nabla\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)\right]$$

$$=\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}-\frac{i\hbar}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)=-i\hbar\frac{\vec{r}}{r}\cdot\nabla-\frac{i\hbar}{2}\left[\frac{1}{r}\nabla\cdot\vec{r}+\vec{r}\cdot\nabla\frac{1}{r}\right]$$

$$=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{3}{r}-\vec{r}\cdot\frac{\vec{r}}{r^3}\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{3}{r}-\frac{1}{r}\right)$$

$$=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

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

$$=-i\hbar\left(r\frac{\partial}{\partial r}-1-r\frac{\partial}{\partial r}\right)=i\hbar$$

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

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

$$=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$$

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

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

因而 $$L^2 = r^2 p^2 + \hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}$$

$$= r^2 p^2 + \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

以 r^{-2} 左乘上式各项，即得

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

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 $E_x = \dfrac{p_x^{\ 2}}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2$。

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

（由(3.8)、(3.9)题可知 $\overline{x} = 0, \overline{p_x} = 0$ ）

$\therefore \quad \Delta x = x - \overline{x} = x$，$\Delta p_x = p_x - \overline{p_x} = p_x$，

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

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

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

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

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

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

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 $\nabla=\vec{e_r}\frac{d}{dr}+\vec{e_\theta}\frac{1}{r}\frac{d}{d\theta}+\vec{e_\varphi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{d}{d\varphi}$，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 $\Delta p_r\Delta r\sim\hbar$，$\Delta r\sim\bar{r}$，

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

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，$E\sim-mz^2e^4/2\hbar^2=-ze^2/2a$

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：

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

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

$$\overline{p_i} = \left\langle \Psi \middle| \hat{p}_i \middle| \Psi \right\rangle = \frac{u}{i\hbar} \langle \Psi | [x_i, H] | \Psi \rangle$$

$$= \frac{u}{i\hbar} \left(\langle \Psi | x_i H | \Psi \rangle - \langle \Psi | H x_i | \Psi \rangle \right)$$

$$= \frac{u}{i\hbar} \left(\langle \Psi | x_i E | \Psi \rangle - \langle \Psi | E x_i | \Psi \rangle \right) = 0$$

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 $\hat{C} = i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$，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 $L_z|\psi\rangle = m\hbar|\psi\rangle$

$\because$ $\quad [\mathrm{L_y}, \mathrm{L_z}] = \mathrm{L_y L_z} - \mathrm{L_z L_y} = i\hbar L_x$，

$\quad [\mathrm{L_z}, \mathrm{L_x}] = \mathrm{L_z L_x} - \mathrm{L_x L_z} = i\hbar L_y$，

$\therefore$

$$\overline{L_x} = \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \Psi | L_y L_z | \Psi \rangle - \langle \Psi | L_z L_y | \Psi \rangle \right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \Psi | L_y L_z | \Psi \rangle - \langle \Psi | L_z L_y | \Psi \rangle \right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \left(m\hbar \langle \Psi | L_y | \Psi \rangle - m\hbar \langle \Psi | L_y | \Psi \rangle \right) = 0$$

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 $\quad \vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$，

可得算符关系 $\quad i\hbar L_x{}^2 = i\hbar L_x L_x = (L_y L_z - L_z L_y) L_x = L_y (L_z L_x) - L_z L_y L_x$

$$= L_y (L_x L_z + i\hbar L_y) - L_z L_y L_x = i\hbar L_y{}^2 + L_y L_x L_z - L_z L_y L_x$$

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 $\langle L_x^2\rangle=\langle L_y^2\rangle$

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

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

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

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

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

4.15)设体系处于$\psi=C_1Y_{11}+C_2Y_{20}$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。

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

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

（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）L_x在$l=1$的空间，(L^2,L_z)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，$b=\sqrt{2}\lambda a$，$a+c=\sqrt{2}\lambda b$，$b=\sqrt{2}\lambda c$。$\lambda=0,\pm1$。

ⅰ）取$\lambda=0$，得$b=0,\quad c=-a$，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 $C_1Y_{11}=C_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 态下， L_x 取 0 的振幅为 $C_1\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}=C_1/\sqrt{2}$，$L_x$ 取 0 的几率为 $|C_1|^2/2$ ；L_x 取 $\hbar$ 的振幅为 $C_1\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}=C_1/2$，相应的几率为 $|C_1|^2/4$ ；

L_x 取 $-\hbar$ 的振幅为 $C_1\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}=C_1/2$，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 $$\langle j\ m+1|j_x|j\ m\rangle=\frac{1}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$
$$\langle j\ m-1|j_x|j\ m\rangle=\frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

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

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

$b=\lambda a$，$a+\sqrt{\frac{3}{2}}c=\lambda b$，$\sqrt{\frac{3}{2}}(b+d)=\lambda c$，$\sqrt{\frac{3}{2}}c+e=\lambda d$，$d=\lambda e$，$\lambda=0,\pm1,\pm2$。

i）$\lambda=0$，$b=0$，$a=-\sqrt{\frac{3}{2}}c$，$d=0$，$e=-\sqrt{\frac{3}{2}}c$ 本征矢为 $\sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$。在 $C_2Y_{20}=C_2\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 态下，测得 $L_x=0$

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

ii）$\lambda=1$，$b=a$，$c=0$，$d=-b$，$d=e$，本征矢为$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\-1\\-1\end{pmatrix}$。在$C_2Y_{20}$态下，测得$L_x=\hbar$的振幅为

$C_2\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\-1\\-1\end{pmatrix}=0$，几率为$0$。

iii）$\lambda=-1$，$b=-a$，$c=0$，$d=-b$，$e=-d$，本征矢为$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1\\-1\\0\\1\\1\end{pmatrix}$，在$C_2Y_{20}$态下，测得$L_x=-\hbar$几率为$0$。

iv）$\lambda=2$，$b=2a$，$c=\sqrt{6}a$，$d=2e=2a$，$e=\frac{c}{\sqrt{6}}=a$，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$L_x=2\hbar$

的振幅为$C_2\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{6}}{4}C_2$。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$\frac{3}{8}|C_2|^2$。

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

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，彼此线形独立，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

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

$Tr(AB) = Tr(BA)$，$Tr(S^{-1}AS) = TrA$，$Tr(ABC) = Tr(BCA) = Tr(CAB)$，

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

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

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

故上式可写成：$\det A = \sum_{i_1\cdots i_n} P(i_1\cdots i_n)P(j_1\cdots j_n)a_{j_1i_1}a_{j_2i_2}\cdots a_{j_ni_n}$，

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

$$\therefore \quad \det C=\det(AB)=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)C_{1i_1}C_{2i_2}\cdots C_{ni_n}$$

$$=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)\sum_{j_1\cdots j_n}a_{1j_1}b_{j_1i_1}a_{2j_2}b_{j_2i_2}\cdots a_{nj_n}b_{j_ni_n}$$

$$=\sum_{j_1\cdots j_n}a_{1j_1}a_{2j_2}\cdots a_{nj_n}\left[\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)b_{j_1i_1}b_{j_2i_2}\cdots b_{j_ni_n}\right]$$

$$=\sum_{j_1\cdots j_n}P(j_1\cdots j_n)a_{1j_1}a_{2j_2}\cdots a_{nj_n}\left[\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)P(j_1\cdots j_n)b_{j_1i_1}b_{j_2i_2}\cdots b_{j_ni_n}\right]$$

$$=\det A\cdot\det B$$

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

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

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

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

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

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

令 $\overline{[A,H]}=\overline{C}$

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

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

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

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

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

$$\overline{\frac{dA}{dt}}=\left(\psi_n,\frac{dA}{dt}\psi_n\right)=\frac{d}{dt}(\psi_n,A\psi_n)-\left(\dot{\psi}_n,A\psi_n\right)-\left(\psi_n,A\dot{\psi}_n\right)$$

$$=\overline{\frac{dA}{dt}}-\left(\frac{1}{i\hbar}H\psi_n,A\psi_n\right)-\left(\psi_n,A\frac{1}{i\hbar}H\psi_n\right)$$

$$=\overline{\frac{\partial A}{\partial t}}+\frac{1}{i\hbar}\overline{[A,H]}+\frac{1}{i\hbar}(\psi_n,HA\psi_n)-\frac{1}{i\hbar}(\psi_n,AH\psi_n)$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\overline{[A,H]}-\frac{1}{i\hbar}(\psi_n,(AH-HA)\psi_n)=\frac{1}{i\hbar}\left(\overline{[A,H]}-\overline{[H,A]}\right)=0\text{。}$$

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

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

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

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$m\hbar$。（还有解法二，参 钱. .《剖析》. P327）

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

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

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，$H|n\rangle=E_n|n\rangle$。

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

$$A=\sum_n (E_n-E_m)|x_{nm}|^2=\sum_n\langle m|x|n\rangle\langle n|(E_n-E_m)|m\rangle=\sum_n\langle m|x|n\rangle[\langle n|Hx|m\rangle-\langle n|xH|m\rangle]$$

$$=-\sum_n\langle m|x|n\rangle\langle n|[x,H]|m\rangle\overset{(\Delta)}{=}-\frac{1}{2u}\sum_n\langle m|x|n\rangle\langle n|[x,P_x^{\ 2}]|m\rangle=-\frac{i\hbar}{u}\sum_n\langle m|x|n\rangle\langle n|P_x|m\rangle$$

$$=-\frac{i\hbar}{u}\sum_n\langle m|xP_x|n\rangle$$

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

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

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

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

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

证：式（1）左端$\overset{令}{=}A=\sum_n(E_n-E_k)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle=\sum_n\langle k|F|n\rangle\langle n|(HF-FH)|k\rangle$

$$=\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle \qquad (2)$$

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：

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

式（2）取共轭$(^+)$，得到

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

结合式（2）和（4），得

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

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υ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：

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

势能在两个参照系中的表示式有下列关系

$$V'(x', t') = V'(x' - \upsilon t, t) = V(x, t) \qquad (2)$$

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

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

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

证：由波函数的统计解释，ψ和ψ'的意义完全相同。

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

$|\psi'(x',t')|^2 = w'(x',t')$，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

$$w(x,t) = w'(x',t') \qquad (6)$$

从（1）式有 $w'(x - \upsilon t, t) = w(x,t)$ （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

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

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

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

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

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

将（7’）代入（8）式，可得

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

（9）

选择适当的$S(x,t)$，使得（9）$\rightarrow$（4），

$$\frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x}-\upsilon=0 \quad 。 \tag{10}$$

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

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

$f(t)$是τ的任意函数，将（11）代入（10'），可得

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

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

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

$$S=\frac{m\upsilon}{\hbar}x-\frac{m\upsilon^2}{2\hbar}t \tag{12}$$

代入（7'）式，最后得到波函数的变换规律：

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

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

相当于式（13）中的$\upsilon\rightarrow-\upsilon$，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

$$P^{'}=P-m\upsilon$$

$$E^{'}=\frac{P^{'2}}{2m}=\frac{P^2}{2m}-\upsilon P+\frac{1}{2}m\upsilon^2=E-\upsilon P+\frac{1}{2}m\upsilon^2 \tag{14}$$

据此，K系和$K^{'}$系中相应的平面波波函数为

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

（1）、（14）代入（15），即得

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

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υ，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

相对动量　$\vec{p}=\mu\dot{\vec{r}}=\dfrac{1}{M}\left(m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2\right)$　（1）

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

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

总动能　$T=\dfrac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1}+\dfrac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2}=\dfrac{\vec{P}^2}{2M}+\dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu}$　（4）

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

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

以上各式中，$M=m_1+m_2$，　$\mu=m_1m_2/\left(m_1+m_2\right)$

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

相对动量　$\vec{p}=\mu\dot{\vec{r}}=\dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}\left(\dot{\vec{r}}_1-\dot{\vec{r}}_2\right)=\dfrac{1}{M}\left(m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2\right)$　（1'）

总动量　$\vec{P}=M\dot{\vec{R}}=\left(m_1+m_2\right)\dfrac{m_1\dot{\vec{r}}_1+m_2\dot{\vec{r}}_2}{m_1+m_2}=\vec{p}_1+\vec{p}_2$　（2'）

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

$$\overset{(5)}{=}\left(\vec{R}+\frac{u}{m_1}\vec{r}\right)\times\vec{p}_1+\left(\vec{R}-\frac{u}{m_2}\vec{r}\right)\times\vec{p}_2$$

$$=\vec{R}\times\left(\vec{p}_1+\vec{p}_2\right)+\vec{r}\times\frac{1}{M}\left(m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2\right)$$

$$\overset{(1)(2)}{=}\vec{R}\times\vec{P}+\vec{r}\times\vec{p}$$

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

总动能 $T=\dfrac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1}+\dfrac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2}\overset{(6)}{=}\dfrac{\left(\dfrac{\mu}{m_2}\vec{P}+\vec{p}\right)^2}{2m_1}+\dfrac{\left(\dfrac{\mu}{m_1}\vec{P}-\vec{p}\right)^2}{2m_2}$

$$=\frac{u^2}{2m_1m_2^{\ 2}}\vec{P}^2+\frac{\vec{p}^2}{2m_1}+\frac{u\vec{P}\cdot\vec{p}}{m_1m_2}+\frac{u^2}{2m_1^{\ 2}m_2}\vec{P}^2+\frac{\vec{p}^2}{2m_2}-\frac{u\vec{P}\cdot\vec{p}}{m_1m_2}$$

$$=\frac{m_1}{2(m_1+m_2)^2}\vec{P}^2+\frac{m_2}{2(m_1+m_2)^2}\vec{P}^2+\frac{1}{2}\vec{p}^2\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)$$

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

［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

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

解：$$\vec{p}=\frac{1}{M}\left(m_2\vec{p_1}-m_1\vec{p_2}\right)=\frac{-i\hbar}{M}\left(m_2\nabla_{r_1}-m_1\nabla_{r_2}\right) \qquad （1）$$

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

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

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

（利用上题（17）（18）式。）

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

代入（1）中，得 $$\vec{p}=\frac{-i\hbar}{M}\left(\frac{m_1m_2}{M}\nabla_R+m_2\nabla_r-\frac{m_1m_2}{M}\nabla_R+m_1\nabla_r\right)$$

$$=-i\hbar\nabla_r \qquad （3）$$

$$\vec{P}=\vec{p}_1+\vec{p}_2=-i\hbar\left(\nabla_{r_1}+\nabla_{r_2}\right)\overset{(2)}{=}-i\hbar\nabla_R \qquad （4）$$

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

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：

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

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

（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： * 在求坐标系中，空间反演：$\vec{r} \to \overrightarrow{-r}$（$r - r, \theta \to \pi - \theta, \varphi \to \pi + \varphi$）。

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

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

由于ψ_{100}各向同性，呈球对称分布，显然有

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

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

$$\overline{\vec{p}^{\,2}} = -\hbar^2 \int \psi_{100} \nabla^2 \psi_{100} d\tau = -\hbar^2 \int \left[\nabla \cdot (\psi_{100} \nabla \psi_{100}) - \nabla \psi_{100} \cdot \nabla \psi_{100}\right] d\tau$$

$$= \hbar^2 \int \left|\nabla \psi_{100}\right|^2 d\tau = \hbar^2 \int \left(\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right)^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi = \hbar^2 / a_0^{\,2} \qquad (5)$$

因此 $\overline{x^2} = a_0^{\,2}$，$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \overline{x}^2} = a_0$ （6）

$\overline{p_x^{\,2}} = \frac{\hbar^2}{3a_0^{\,2}}$，$\Delta p_x = \sqrt{\overline{p_x^{\,2}} - \overline{p_x}^{\,2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}a_0}$ （7）

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

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

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

6.6）对于类氢原子（核电荷Ze）的“圆轨迹”（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

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

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

决定。$l=n-1$时，$n_r=0$。

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

代入（2）式，容易求得 $r_{几}=n^2a_0/Z$ （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）

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

（参 钱伯初、曾谨言《量子力学习题精选与剖析》P197）

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

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

依次再取$\lambda=1,2$，得到

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

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

因此，r的涨落

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

$$\frac{\Delta r}{\left\langle r\right\rangle}=\sqrt{\frac{n}{2}}\Big/\sqrt{n^2+\frac{n}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2n+1}} \tag{10}$$

可见，n越大，$\Delta r/\left\langle r\right\rangle$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（$1s$轨迹上的电子）在衰变后仍然保持在新的原子$(Z+1)$的K轨迹的几率。

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，其波函数仍未

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

而新原子中K电子的波函数应为

$$\psi_{100}(Z+1,r)=\left[\frac{(Z+1)^3}{\pi a^3}\right]^{1/2}e^{-(Z+1)r/a} \tag{2}$$

将$\psi_{100}(Z,r)$按新原子的能量本征态作线形展开：

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

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

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

因此，本题所求的几率为

$$p_{100}=\left|\left\langle\psi_{100}(Z+1)\middle|\psi_{100}(Z)\right\rangle\right|^2=\frac{Z^3(Z+1)^3}{\pi^2a^6}(4\pi)^2\left|e^{-(2Z+1)r/a}r^2dr\right|^2$$

$$=\frac{Z^3(Z+1)^3}{\left(Z+\frac{1}{2}\right)^6}=\left(1+\frac{1}{Z}\right)^3\left(1+\frac{1}{2Z}\right)^{-6} \qquad (5)$$

展开时保留到第三项

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

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

$\qquad\quad Z=30$， $\quad p_{100}\approx 0.9992$。

6.8）设碱金属原子中的价电子所受电子实（原子核+满壳电子）的作用近似表为

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

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

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

$u(r)$ 满足径向方程

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

令 $l(l+1)-2\lambda=l'(l'+1)$ （4）

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

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

将 l 换成 l'，即得价电子的能级：

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

通常令 $\qquad l'=l+\Delta_l \qquad$（7）

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

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

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

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

由于$\lambda << 1$，$\therefore$ $|\Delta_l| << 1$，因此，本题所得能级E_{nl}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。

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

6.9）在二维谐振子势$V(x,y)=\dfrac{1}{2}K_x x^2+\dfrac{1}{2}K_y y^2$中的粒子，求解其能量本正值。对于二维各向同性（$K_x = K_y = K$）的谐振子，求能级的简并度。（参 书卷 I P302-303）

解：

第七章 粒子在电磁场中的运动

7.1）设带电粒子在互相垂直的均匀电场$\vec{\varepsilon}$和均匀磁场$\vec{B}$中运动，求能级本征值和本征。

（参《导论》$P225$）

解：以电场方向为x轴，磁场方向为z轴，则

$$\vec{\varepsilon}=(\varepsilon,0,0), \qquad \vec{B}=(0,0,B) \qquad (1)$$

去电磁场的标势和矢势为

$$\phi=-\varepsilon x, \qquad \vec{A}=(0,Bx,0) \qquad (2)$$

满足关系 $\vec{\varepsilon}=-\nabla\phi$， $\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$

粒子的 Hamiton 量为 $H=\dfrac{1}{2u}\left[p_x{}^2+\left(p_y-\dfrac{qB}{C}x\right)^2+p_z{}^2\right]-q\varepsilon x$ （3）

取守恒量完全集为(H,p_y,p_z)，它们的共同本征函数可写成

$$\psi(x,y,z)=\psi(x)e^{i(p_y y+p_z z)/\hbar} \qquad (4)$$

其中P_y和P_z为本征值，可取任意函数。

$\psi(x,y,z)$满足能量本证方程： $H\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$

因此$\psi(x)$满足方程

$$\frac{1}{2u}\left[p_x{}^2+\left(p_y-\frac{qB}{C}x\right)^2+p_z{}^2\right]\psi(x)-q\varepsilon x\psi(x)=E\psi(x) \tag{5}$$

亦即，对于$\psi(x)$来说，H和F式等价：

$$H\Rightarrow-\frac{\hbar^2}{2u}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2uC^2}x^2-\left(q\varepsilon+\frac{qB}{uC}p_y\right)x+\frac{1}{2u}\left(p_y{}^2+p_z{}^2\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2u}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2uC^2}(x-x_0)^2-\frac{q^2B^2}{2uC^2}x_0{}^2+\frac{1}{2u}\left(p_y{}^2+p_z{}^2\right) \tag{6}$$

其中 $$x_0=\frac{uC^2}{q^2B^2}\left(q\varepsilon+\frac{qB}{uC}p_y\right)=\frac{uC}{qB}\left(\frac{C\varepsilon}{B}+\frac{p_y}{u}\right) \tag{7}$$

式（6）相当于一维谐振子能量算符

$$-\frac{\hbar^2}{2u}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}u\omega^2(x-x_0)^2,\qquad \omega=\frac{|q|B}{uC}$$

再加上两项函数，因此本题能级为

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2B^2}{2uC^2}x_0{}^2+\frac{1}{2u}\left(p_y^2+p_z^2\right)$$

$$=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar B|q|}{uC}-\frac{C^2\varepsilon^2u}{2B^2}-\frac{C\varepsilon}{B}p_y+\frac{1}{2u}p_z^2 \tag{8}$$

其中P_y和P_z为任意实数， $n=0,1,2,\cdots$

式（4）中 为以$\psi(x)$为$(x-x_0)$变量的一维谐振子能量本征函数，即

$$\psi(x)=\psi_n(x-x_0)=H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{9}$$

$H_n(\xi)$为厄密多项式，$\xi=\sqrt{\frac{u\omega}{\hbar}}(x-x_0)=\sqrt{\frac{|q|B}{\hbar C}}(x-x_0)$ 。

7.2）设带电粒子在均匀磁场$\vec{B}$和各向同性谐振子势$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$中运动，求能量本征值。

第八章 自旋

8.1) 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$a=\lambda b$ $\therefore\lambda^2=1,\lambda=\pm1$ 。

$\lambda=1$, 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

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

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

解：在 δ_z 表象中，$\vec{\delta}$ 的矩阵表示为

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\tag{1}$$

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

$$=\begin{pmatrix}n_z & n_x-in_y\\ n_x+in_y & -n_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi}\\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\tag{2}$$

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

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

由（3）式的系数行列式 $=0$，可解得 $\lambda=\pm1$。

对于 $\lambda=1$，代回（3）式，可得

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

归一化本征函数用 (θ,φ) 表示，通常取为

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

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

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

如 $n_z\neq\pm1$，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

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

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

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

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

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

解：$\overline{(\Delta s_x)^2}=\overline{(s_x-\overline{s_x})^2}=\overline{s_x^{\ 2}}-\overline{s_x}^{\,2}$

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

$$\overline{s_x}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0,$$

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

8.4) （a）在 s_z 本征态 $\chi_{1/2}$ 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 $\chi_{1/2}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 中，$\sigma_n=1$ 的几率为

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

$\sigma_n=-1$ 的几率为

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

（b）在自旋态 $\phi_1\ (\sigma_n=1)$ 态，$\sigma_z=1$ 的几率为

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

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

$$\left\langle\sigma_z\right\rangle=\frac{1}{2}\left(1+n_z\right)\cdot1+\frac{1}{2}\left(1-n_z\right)\cdot\left(-1\right)=n_z$$

[或 $\left\langle\sigma_z\right\rangle=\cos^2\frac{\theta}{2}\times1+\sin^2\frac{\theta}{2}\times\left(-1\right)=\cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2}=\cos\theta=n_z$ （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：

$\sigma_x=\pm1$的几率为$\frac{1}{2}\left(1\pm n_x\right)$， （6）

$\left\langle\sigma_x\right\rangle=n_x$ （7）

$\sigma_y=\pm1$的几率为$\frac{1}{2}\left(1\pm n_y\right)$ （8）

$\left\langle\sigma_y\right\rangle=n_y$ （9）

将式（5）、（7）、（9）合并写成矢量形式如下：

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

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

$\left\langle\sigma_n\right\rangle=w_+\times1+w_-\times\left(-1\right)=w_+-w_-$ （12）

由于 $\sigma_n=\sigma_x n_x+\sigma_y n_y+\sigma_z n_z$ （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，

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

由式（12）、（14），并利用$w_++w_-=1$，就可求出

$w_+=\frac{1}{2}\left(1+n_z\right)$， $w_-=\frac{1}{2}\left(1-n_z\right)$ （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$\phi_1\left(\sigma_n=1\right)$中，$\left\langle\vec{\sigma}\right\rangle=\vec{n}$ （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

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

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

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

8.5) 证明$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \cos 2\lambda \cdot \sigma_x - \sin 2\lambda \cdot \sigma_y$（$\lambda$为常数）[量Ⅱ]

8.7）由两个非全同粒子（自旋均为$\hbar/2$）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

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

易见总自旋$\vec{s}$是守恒量，所以定态波函数可以选为$\vec{s}^{\,2}$、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

$$\left.\begin{aligned} &s=1, \quad \chi_{1M_s}, \quad E_1 = A/4, \\ &s=0, \quad \chi_{00}, \quad E_0 = -3A/4 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

$t=0$时，体系的自旋态为

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

因此，$t>0$时波函数为

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

即 $$\chi(t) = \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]e^{-iAt/4} + \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]e^{3iAt/4}$$

$$= \left[\alpha(1)\beta(2)\cos\frac{At}{2} - i\beta(1)\alpha(2)\sin\frac{At}{2}\right]e^{iAt/4} \tag{4'}$$

(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

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

第九章 力学量本征值问题的代数解法

9—1） 在 8.2 节式（21）中给出了自旋（$1/2$）与轨迹角动量（l）耦合成总角动量j的波函数ϕ_{ljm_j}，这相当于$j_1=l,j_2=s=1/2$的耦合。试由 8.2 节中式（21）写出表 9.1（a）中的 CG 系数 $\left\langle j_1m_1\frac{1}{2}m_2\middle|jm\right\rangle$

解：8.2 节式（21a）（21b）：$\left(j=l-1/2\quad(l\neq0),m_j=m+1/2\right)$

$$\phi_{ljm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1}Y_{lm}\\\sqrt{l-m}Y_{lm+1}\end{pmatrix}$$

$$\xlongequal{\left(j=l+1/2,m_j=m+1/2\right)}\frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix}\sqrt{j+m_j}Y_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\\sqrt{j-m_j}Y_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}\qquad(21a)$$

$$(l=j-1/2)$$

$$\phi_{ljm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l-1}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l-m}Y_{lm}\\\sqrt{l+m+1}Y_{lm+1}\end{pmatrix}$$

$$\xlongequal{\left(j=l-1/2\quad(l\neq0),m_j=m+1/2\right)}\frac{1}{\sqrt{2j+2}}\begin{pmatrix}-\sqrt{j-m_j+1}Y_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\\sqrt{j+m_j+1}Y_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}\qquad(21b)$$

$$(l+j+1/2)$$

此二式中的l相当于 CG 系数中的j_1，而$j_2=s=1/2,m_j\sim m,\sim m_1,m_2=\pm1/2$。

因此，（21a）式可重写为

$$|jm\rangle=\sum_{m_2}|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$$

$$=\left\langle j_1 m_1 \frac{1}{2}\frac{1}{2}\middle| jm\right\rangle \left| j_1 m_1 \frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle + \left\langle j_1 m_1 \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| jm\right\rangle \left| j_1 m_1 \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\xlongequal[\quad]{(21a),\ j=l+1/2=j_1+1/2} \begin{pmatrix} \left(\dfrac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}\right)^{1/2} \left| j_1 m_1 \dfrac{1}{2}\dfrac{1}{2}\right\rangle \\ \left(\dfrac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}\right)^{1/2} \left| j_1 m_1 \dfrac{1}{2}-\dfrac{1}{2}\right\rangle \end{pmatrix} \qquad \text{（21a'）}$$

对照 CG 系数表，可知：当 $j=j_1+j_2=j_1+1/2$, $m_2=1/2$ 时 ，

$$\left\langle j_1 m_1 \frac{1}{2}\frac{1}{2}\middle| jm\right\rangle = \left(\frac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}\right)^{1/2}$$

而 $m_2=-1/2$ 时，

$$\left\langle j_1 m_1 \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| jm\right\rangle = \left(\frac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}\right)^{1/2}$$

对于 $j=l-1/2=j_1-1/2$ 的（21b）式，有

$$\left\langle j_1 m_1 \frac{1}{2}\frac{1}{2}\middle| j_1-\frac{1}{2},m\right\rangle = -\left(\frac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}\right)^{1/2}$$

$$\left\langle j_1 m_1 \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| j_1-\frac{1}{2},m\right\rangle = \left(\frac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}\right)^{1/2}$$

9－2）设两个全同粒子角动量 $j=j_1=j_2$，耦合成总角动量 J，

$$\psi_{j^2JM}=\sum_{m_1m_2}\langle jm_1 j\ m_2|JM\rangle \psi_{jm_1}(1)\psi_{jm_2}(2) \qquad \text{（1）}$$

利用 CG 系数的对称性，证明

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

由此证明，无论是 Bose 子或 Fermi 子，J 都必须取偶数

证：由式（1），

$$p_{12}\psi_{j^2JM}=\sum_{m_1m_2}\langle jm_1 jm_2|JM\rangle \psi_{jm_1}(2)\psi_{jm_2}(1)$$

把 $m_1\leftrightarrow m_2$， $$=\sum_{m_1m_2}\langle jm_2 jm_1|JM\rangle \psi_{jm_2}(2)\psi_{jm_1}(1)$$

利用 CG 系数的对称性 $$=(-)^{2j-J}\sum_{m_1m_2}\langle j_1m_2 j_2m_1|JM\rangle \psi_{jm_1}(1)\psi_{jm_2}(2)$$

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

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

即要求$\left(-\right)^{2j-J}=-1$，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

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

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

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

即$\left(-\right)^{2j-J}=1$，故J也必须为偶数

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

9－3）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）$J=L+s,\cdots,|L-s|$。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：$l_1=l_2=l$，$L=2l,2l-1,\cdots,1,0.$

其中$L=$偶是对称态，$L=$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

$s=0$时，$L=2l,2l-2,\cdots,0.$

$s=1$时，$L=2l,2l-1,\cdots,1.$

在两种情况下，$L+s$都为偶数，但

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

对于$s=0$，$J=L=$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？］

9－4）大小相等的两个角动量耦合成角动量为0的态ψ_{jj00}，　证明$j_{1z}=-j_{2z}=j,j-1,\cdots,-j$的几率却相等，即$1/(2j+1)$。

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

证：Dirac 符号表示，有 $\psi_{jj00}=|j_1j_2JM\rangle=|jj00\rangle$，

$$|j_1j_2JM\rangle=|JM\rangle=\sum_{m_1}|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|JM\rangle \tag{1}$$

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

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

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$j, j-1,\cdots,-j$各可能值）的几率。

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

$$\therefore\qquad |\langle jmj\ -m|00\rangle|^2=\frac{1}{2j+1} \tag{4}$$

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

9－5）设$\vec{J_1}+\vec{J_2}=\vec{J}$，在$|j_1j_2jm\rangle$态下，证明（取$\hbar=1$）

$\langle j_{1x}\rangle=\langle j_{1y}\rangle=\langle j_{2x}\rangle=\langle j_{2y}\rangle=0$，

$$\langle j_{1z}\rangle=m\frac{j(j+1)+j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)}{2j(j+1)}$$

$$\langle j_{2z}\rangle=m\frac{j(j+1)+j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)}{2j(j+1)}=m-\langle j_{1z}\rangle$$

证：（参剖析，8.68 等）

9－6）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

$$J_\pm|jm\rangle=\sqrt{(j\pm m+1)(j\mp m)}|j\ m\pm1\rangle$$

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

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

$$J_x=\frac{1}{2}\left(J_++J_{-1}\right)。$$

对于本题，以上方式中$j\to l$，$J_x\to L_x$，$J_\pm\to L_\pm$，$\left(J_z\to L_z\right)$

不难求得

$$\left(L_x\right)_{mm'}=\left(L_x\right)_{-1-1}=\left(L_x\right)_{00}=\left(L_x\right)_{11}=\left(L_x\right)_{-11}=\left(L_x\right)_{1-1}=0$$

$$\left(L_x\right)_{-10}=\left(L_x\right)_{0-1}=\left(L_x\right)_{01}=\left(L_x\right)_{10}=\frac{\sqrt{2}}{2}。$$

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

$$L_x=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix} \tag{1}$$

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

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

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：$\lambda\left(\lambda^2-1\right)=0,$

$$\lambda=1,0,-1. \tag{3}$$

将$\lambda=1$代入（2），可得

$$-a+b/\sqrt{2}=0,\quad a/\sqrt{2}-b+c/\sqrt{2}=0,\quad b/\sqrt{2}-c=0。$$

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

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

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

同理，将$\lambda=0,-1$分别代入（2），可求得

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

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 $H = H_0 + H'$

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

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

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

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

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

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

$$x^3\psi_n(x) = \frac{1}{2\sqrt{2}\alpha^3}\left[\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3} + 3n\sqrt{n}\psi_{n-1} + 3(n+1)\sqrt{n+1}\psi_{n+1} + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}\right]$$ 计算一级微扰：$E_n^{(1)} = \langle\psi_n|H'|\psi_n\rangle = \beta\langle\psi_n|x^3|\psi_n\rangle = 0$。

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

计算二级微扰，只有下列四个矩阵元不为0：

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

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

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

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

计算 $|H'_{kn}|^2$：$|H'_{n-3,n}|^2 = \dfrac{n(n-1)(n-2)\beta^2}{8\alpha^6}$

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

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

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

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

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

$$\therefore\quad E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}=E_n^{(0)}+H'_{nn}+\sum_k{}'\frac{\left|H'_{kn}\right|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$$

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

$$\psi_n=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}=\psi_n^{(0)}+\sum_k{}'\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}$$

$$=\psi_n^{(0)}-\frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3\hbar\omega}\left[\frac{1}{3}\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3}^{(0)}+3n\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}-3(n-1)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}-\frac{1}{3}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}^{(0)}\right]$$

10－2) 考虑耦合振子，$H=H_0+H'$ 参 书.下册 § 9.2

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

$H'=-\lambda x_1x_2$（λ 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

$$\psi_{n_1n_2}(x_1,x_2)=\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\qquad(1)$$

$$E_{n_1n_2}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$=(n_1+n_2+1)\hbar\omega,\quad n_1,n_2=0,1,2,\cdots\qquad(2)$$

令 $N=n_1+n_2$ （3）

则能量表示式可改为 $E_N=(N+1)\hbar\omega$，$N=0,1,2,\cdots$ （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）$N=1$ 为第一激态（基态 $N=0$），能级为二重简并，

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 $f_1(x_1,x_2)$。

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：$W_{11}=W_{22}=0$

$$W_{12}=W_{21}=-(f_1,x_1x_2f_2)=-(\psi_0(x_1),x_1\psi_1(x_1))(\psi_1(x_2),x_2\psi_0(x_2))$$

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

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

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

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

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

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：

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

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

易证：

$$\left.\begin{aligned}&x_1^2+x_1^2=\xi^2+\eta^2\\&x_1x_2=(\xi^2-\eta^2)/2\\&\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}=\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\end{aligned}\right\} \qquad （8）$$

因此，S.eq: $-\frac{\hbar^2}{2u}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\psi+\left[\frac{1}{2}u\omega^2(x_1^2+x_2^2)-\lambda x_1x_2\right]\psi=E\psi$ （9）

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

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

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

于是方程（10）变为

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

是二彼此独立的谐振子，所以可以取

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

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

$$\psi_{n_2}(\xi)=\left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}\cdot 2^{n_1}\cdot n_2!}\right)^{1/2}H_{n_2}(\alpha_2\eta)e^{-\alpha_2^2\eta^2/2}，\quad \alpha_2=\sqrt{\frac{u\omega_2}{\hbar}} \tag{13}$$

相应的能量为

$$E_{n_1n_2}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2$$

$$n_1,n_2=0,1,2,\cdots \tag{13}$$

当$|\lambda|<<u\omega^2$时，由（11）式，得

$$\begin{aligned}\omega_1&=\omega\left(1-\lambda/u\omega^2\right)^{1/2}\approx\omega\left(1-\lambda/2u\omega^2\right)\\ \omega_2&=\omega\left(1+\lambda/u\omega^2\right)^{1/2}\approx\omega\left(1+\lambda/2u\omega^2\right)\end{aligned}$$

此时 $$\begin{aligned}E_{n_1n_2}&\approx\left(n_1+\frac{1}{2}+n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\left(n_2-n_1\right)\frac{\lambda\hbar}{2u\omega}\\ &=(N+1)\hbar\omega+\left(n_2-n_1\right)\frac{\lambda\hbar}{2u\omega}\end{aligned} \tag{14}$$

$N=1$（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

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

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

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

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

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

基态能量的一级修正为

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

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

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

$v=\pi-\dfrac{\pi x}{a}$， $x=a-\dfrac{av}{\pi}$， $dx=\dfrac{-a}{\pi}dv$。

代入上式完成积分，

$$E_1^{(1)}=\frac{4\lambda}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}\sin^2u\cdot udu-\frac{4\lambda}{\pi^2}\int_{\pi/2}^{0}\sin^2(\pi-v)\cdot vdv$$

$$=\frac{8\lambda}{\pi^2}\int_0^{\pi/2}\sin^2u\cdot udu=\left(\frac{1}{2}+\frac{2}{\pi^2}\right)\lambda。$$

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

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

Ze 为核电荷，试把非点电荷效应看成微扰，

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

计算原子的 $1s$ 能级的一级微扰修正。

解：.类氢离子中 $1s$ 轨迹电子波函数为

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

a 为波尔半径，$1s$ 能级的微扰论一级修正为

$$E_{1s}^{(1)}=\langle\psi_{1s}|H'|\psi_{1s}\rangle=\int_0^R\psi_{1s}^2H'\cdot4\pi r^2dr$$

由于核半径R远小于原子半径a/Z，积分时可取

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

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

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

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$H^{'}=e\varepsilon Z$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

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

$n=3$的 9 个态分别记为：

$$\psi_1=|320\rangle,\psi_2=|310\rangle,\psi_3=|300\rangle,(m=0)；\psi_4=|321\rangle,\psi_5=|311\rangle，(m=1)；$$

$$\psi_6=|32-1\rangle,\psi_7=|31-1\rangle,(m=-1)；\psi_8=|322\rangle,(m=2)；\psi_9=|322\rangle\ (m=-2)； \tag{2}$$

视外电场为微扰，微扰作用势

$$H^{'}=e\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}=e\varepsilon Z=e\varepsilon r\cos\theta \tag{3}$$

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

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

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

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

$H^{'}$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：

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

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

$$W_{45}=W_{54}=-\frac{9}{2},\quad W_{67}=W_{76}=-\frac{9}{2}\text{。}$$

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

$$\begin{array}{r}m=0\left\{\begin{array}{c}\\ \\ \\ \end{array}\right.\\ m=1\left\{\begin{array}{c}\\ \\ \end{array}\right.\\ m=-1\left\{\begin{array}{c}\\ \\ \end{array}\right.\\ m=2\ \{\\ m=-2\ \{\end{array}\begin{vmatrix}-E^{(1)} & -3\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ -3\sqrt{3} & -E^{(1)} & -3\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -3\sqrt{6} & -E^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & -9/2 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -9/2 & -E^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & -9/2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -9/2 & -E^{(1)} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -E^{(1)}\end{vmatrix}=0$$

即

$$\left(E^{(1)}\right)^3\left[\left(E^{(1)}\right)^2-9^2\right]\left[\left(E^{(1)}\right)^2-(9/2)^2\right]^2=0$$

$$\therefore\quad E_3^{(1)}=0,\,0,\,0,\,\pm\frac{9}{2}e\varepsilon a,\,\pm\frac{9}{2}e\varepsilon a,\,\pm 9e\varepsilon a\text{。}$$

（由 $\begin{vmatrix}-E^{(1)} & -3\sqrt{3} & 0\\ -3\sqrt{3} & -E^{(1)} & -3\sqrt{6}\\ 0 & -3\sqrt{6} & -E^{(1)}\end{vmatrix}=0$，解得 $E^{(1)}=0,9,-9$）

（由 $\begin{vmatrix}-E^{(1)} & -9/2\\ -9/2 & -E^{(1)}\end{vmatrix}=0$ ，解得 $E^{(1)}=-9/2,9/2$）

结果， $n=3$ 的能级分裂成五条：

$$E_{31}=E_3^{(0)}-9e\varepsilon a,\quad E_{32}=E_3^{(0)}-\frac{9}{2}e\varepsilon a,\quad E_{33}=E_3^{(0)},\quad E_{34}=E_3^{(0)}+\frac{9}{2}e\varepsilon a,\quad E_{35}=E_3^{(0)}+9e\varepsilon a\text{。}$$

10－6) 设 $H=H_0+H^{'}$，

$$H_0=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & 0\\ 0 & E_2^{(0)}\end{pmatrix},\quad H^{'}=\begin{pmatrix}a & b\\ b & a\end{pmatrix}\ （a,b\text{为实数}）$$

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

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_k{}' \frac{\left|H'_{kn}\right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

得 $E_1 = E_1^{(0)} + a - \dfrac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$， $E_2 = E_2^{(0)} + a + \dfrac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$

（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 $$\left(E_1^{(0)} + a - E\right)\left(E_2^{(0)} + a - E\right) - b^2 = 0$$

这是关于 $(a - E)$ 的二次方程，其解为

$$a - E = \frac{1}{2}\left[-\left(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}\right) \pm \sqrt{\left(E_1^{(0)} - E_2^{(0)}\right)^2 + 4b^2}\right]$$

$$= -\frac{1}{2}\left(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}\right) \pm \frac{1}{2}\left(E_2^{(0)} - E_1^{(0)}\right)\left[1 + \left(\frac{2b}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}\right)^2\right]^{1/2}$$

$$= -\frac{1}{2}\left(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}\right) \pm \frac{1}{2}\left(E_2^{(0)} - E_1^{(0)}\right)\left[1 + \frac{2b^2}{\left(E_2^{(0)} - E_1^{(0)}\right)^2} - \cdots\right]$$

$$\doteq -\frac{1}{2}\left(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}\right) \pm \left[\frac{1}{2}\left(E_2^{(0)} - E_1^{(0)}\right) + \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}\right]$$

以上的近似符合定态微扰论的要求，$\dfrac{b}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} < 1$，

即微扰矩阵元小于能级差。上式分开 ± 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

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|Ce^{-\lambda x^2}\right|^2 dx = |C|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\lambda x^2}dx = |C|^2\left(\frac{\pi}{2\lambda}\right)^{1/2} = 1,$$

取 $C = \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4}$， $\therefore$ $\psi = \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\lambda x^2}$ 。

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

$$E(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\hat{H}\psi\,dx = \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\lambda x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2u}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}u\omega^2 x^2\right)e^{-\lambda x^2}dx$$

$$= \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/2}\left[\frac{\lambda\hbar^2}{u}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2\lambda x^2}(1-2\lambda x)dx + \frac{1}{2}u\omega^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2\lambda x^2}\cdot x^2 dx\right]$$

$$= \frac{\lambda\hbar^2}{2u} + \frac{u\omega^2}{8\lambda} \qquad (1)$$

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$x\to\infty$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

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}e^{-\alpha^2x^2/2}$$

（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：$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2u}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*\frac{d^2}{dx^2}\psi_0\,dx = \frac{\alpha^3\hbar^2}{2u\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2}(1-\alpha^2x^2)dx = \frac{\alpha^2\hbar^2}{4u}$ （1）

$$\langle V\rangle = \lambda\int_{-\infty}^{+\infty}x^4\psi_0^2\,dx = \frac{\lambda\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-\alpha^2x^2}dx = \frac{3\lambda}{4\alpha^4} \qquad (2)$$

$$E(\alpha) = \langle T+V\rangle = \frac{\alpha^2\hbar^2}{4u} + \frac{3\lambda}{4\alpha^4} \qquad (3)$$

由 $\dfrac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha}=0$，得 $\dfrac{\alpha\hbar^2}{2u}-\dfrac{3\lambda}{\alpha^5}=0$，

解得 $\alpha^2=\left(6u\lambda/\hbar^2\right)^{1/3}$ （4）

代入（3），得基态能量 $E_0=\dfrac{3\sqrt[3]{3}}{4}\left(\dfrac{\hbar^2}{2u}\right)^{2/3}\lambda^{1/3}$ （5）

10－9) 氢原子基态试探波函数取为 $e^{-\lambda(r/a)^2}$， $a=\dfrac{\hbar^2}{ue^2}$（Bohr 半径），λ 为参数，用变分法求基态能量，并与严格解比较。

解：

10－10) 设在氘核中的质子与中子的相互作用表成 $V(r)=-Ae^{-r/a}$，（$A=32Mev$ ，$a=2.2\times10^{-15}m$）。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，用变分法计算氘核得基态能量。

解：取 $\psi=Ne^{-\lambda r/2a}$ ， （1）

归一化，$\int|\psi|^2 d\tau=4\pi\int_0^\infty N^2e^{-\lambda r/a}r^2dr=1$，

得 $N=\left(\dfrac{\lambda^3}{8\pi a^3}\right)^{1/2}$ （2）

（而 Hamilton 量为 $H=\left(-\dfrac{\hbar^2}{2u}\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}r^2\dfrac{\partial}{\partial r}\right)+\left(-Ae^{-r/a}\right)=T+V$ ）

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2u}\int\left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2d\tau=\frac{\hbar^2}{2u}\left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2$$

$$\langle V\rangle=-AN^2\cdot4\pi\int_0^\infty e^{-r/a}e^{-\lambda r/a}r^2dr=-A\left(\frac{\lambda}{1+\lambda}\right)^3$$

因此 $E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\dfrac{\hbar^2\lambda^2}{8ua^2}--A\left(\dfrac{\lambda}{1+\lambda}\right)^3$ （3）

其中 u 为质子一中子体系的约化质量，即

$$u=\frac{m_pm}{m_p+m}=469.45\,Mev/c^2$$

由极值条件 $\dfrac{\partial E}{\partial\lambda}=0$，求得 λ 最佳值满足的方程：

$$\frac{\lambda}{(1+\lambda)^4}=\frac{\hbar^2}{12ua^2A} \qquad （4）$$

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

$$E=\frac{\hbar^2}{4ua^2}\lambda^2\left[\frac{1}{2}-\frac{1}{3}(1+\lambda)\right] \tag{5}$$

式（4）中，$\dfrac{\hbar^2}{12ua^2A}=\dfrac{(\hbar c)^2}{12uc^2a^2A}=0.04531$

由式（4）求得λ最佳值为　$\lambda=1.326$　（6）
代入（5）式，即得　$E=-2.15Mev$　（7）
氘核基态能级的实验值为$E=-2.23Mev$，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

$r_0=2a/\lambda=3.26\,(fm)$　　$[\,fm:10^{-15}m\,]$　（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

$$\left.\frac{d}{dr}\left(r^2\psi^2\right)\right|_{r=r_0}=0 \tag{9}$$

由式（1）还可求出基态平均半径为

$$\langle r\rangle=\int r\psi^2d\tau=3a/\lambda=4.89\ (fm) \tag{10}$$

第十一章 量子跃迁
11—1）荷电q的离子在平衡位置附近作小振动（简谐振动）。受到光照射而发生跃迁。设照射光的能量密度为$\rho(\omega)$，波长较长。求：（a）跃迁选择定则；（b）设离子原来处于基态，求每秒跃迁到第一激发态的几率。

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$\psi(\vec{r},t)=\sum_n C_n(t)\psi_n(\vec{r})e^{-iE_nt/\hbar}$　（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

$$\sum_n i\hbar\psi_n\frac{dC_n}{dt}e^{-iE_nt/\hbar}=H'\psi_1=e\varepsilon_0z\psi_1\delta(t)$$

以ψ_n^*左乘上式两端并全空间积分，得

$$i\hbar\frac{dC_n}{dt}=e\varepsilon_0z_{n1}\delta(t)e^{-iE_nt/\hbar}$$

再对τ积分，由$t=0^-\rightarrow t>0$，即得

$$C_n(t)=\frac{e\varepsilon_0}{i\hbar}z_{n1}\qquad(n\neq1) \tag{7}$$

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]

$$P_n = \left|C_n(t)\right|^2 = \left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2 \left|z_{n1}\right|^2 \tag{8}$$

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

$$\sum_n{}' P_n = \left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2 \sum_n{}' \left|z_{n1}\right|^2 = \left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2 \left[\sum_n \left|z_{n1}\right|^2 - \left|z_{11}\right|^2\right] \tag{9}$$

其中 $\quad z_{11} = \langle \psi_1 | z | \psi_1 \rangle = 0 \quad$（$\because$ z 为奇宇称）

$$\sum_n \left|z_{n1}\right|^2 = \sum_n \langle \psi_1 | z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | z | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | z^2 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{3} \langle \psi_1 | r^2 | \psi_1 \rangle = a^2 \tag{10}$$

a 为 Bohr 半径，代入式（9）即得

$$\sum_n{}' P_n = \left(\frac{e\varepsilon_0 a}{\hbar}\right)^2 \tag{11}$$

电场作用后电子仍留在基态的几率为

$$1 - \sum_n{}' P_n = 1 - \left(\frac{e\varepsilon_0 a}{\hbar}\right)^2 \tag{12}$$

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：$t \ge 0$ 时，体系 $H = H_0 + H'$，其矩阵表示（H_0 表象）为

$$H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_1 + \alpha & \gamma \\ \gamma & E_2 + \beta \end{pmatrix} \tag{1}$$

设 H 的本征函数为

$$\psi_E = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 \Rightarrow \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \tag{2}$$

代入本征方程 $H\psi_E = E\psi_E$ （3）

得到

$$\begin{cases} (E_1+\alpha-E)C_1+\gamma C_2=0 \\ \gamma C_1+(E_2+\beta-E)C_2=0 \end{cases} \tag{4}$$

上式存在非平庸解的条件为

$$\begin{vmatrix} E_1+\alpha-E & \gamma \\ \gamma & E_2+\beta-E \end{vmatrix} = (E_1+\alpha-E)(E_2+\beta-E)-\gamma^2=0$$

由此解出 $E=\dfrac{1}{2}\left[E_1+\alpha+E_2+\beta\pm\sqrt{(E_2+\beta-E_1-\alpha)^2+4\gamma^2}\right]=E_\pm$ （5）

令 $\omega_1=\dfrac{E_1+\alpha}{\hbar}$，$\omega_2=\dfrac{E_2+\beta}{\hbar}$，$\omega=\omega_2-\omega_1$ （6）

式（5）可以写成 $E_\pm=\dfrac{\hbar}{2}\left[\omega_1+\omega_2\pm\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right]$ （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

$$\psi_{E_+}=\psi_1+\frac{\hbar}{2\gamma}\left(\omega+\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right)\psi_2 \tag{7}$$

当$E=E_-$，类似可求得

$$\psi_{E_-}=\psi_1+\frac{\hbar}{2\gamma}\left(\omega-\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right)\psi_2 \tag{8}$$

$t=0$时，体系的初始状态为

$$\psi(t=0)=\psi_1=\frac{\Omega-\omega}{2\Omega}\psi_{E_+}+\frac{\Omega+\omega}{2\Omega}\psi_{E_-} \tag{9}$$

其中 $\Omega=\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}$ （10）

因此$t\geq 0$时波函数为

$$\psi(t)=\frac{\Omega-\omega}{2\Omega}\psi_{E_+}e^{-iE_+t/\hbar}+\frac{\Omega+\omega}{2\Omega}\psi_{E_-}e^{-iE_-t/\hbar} \tag{11}$$

以式（5’）、（7）、（8）代入上式，即得

$$\psi(t)=\psi_1\left(\cos\frac{\Omega t}{2}+i\frac{\omega}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)e^{-\frac{i}{2}(\omega_1+\omega_2)t}+\psi_2\left(-i\frac{2\gamma}{\hbar\omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)e^{-\frac{i}{2}(\omega_1+\omega_2)t} \tag{12}$$

体系处于ψ_2态的几率为

$$\left|\langle\psi_2|\psi(t)\rangle\right|^2=\left(\frac{2\gamma}{\hbar\Omega}\right)^2\sin^2\frac{\Omega t}{2} \tag{13}$$

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$B_1\ (<<B_0)$ 。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 $\vec{u}=u\vec{\sigma}$ （1）

$\vec{\sigma}$为泡利算符，磁场对粒子的作用势为

$$H'=-\vec{u}\cdot\vec{B}=-\mu(B_1\sigma_x+B_0\sigma_z). \tag{2}$$

在σ_z表象中，H的矩阵表示为

$$H=-uB_1\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}-uB_0\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=-u\begin{pmatrix}B_0&B_1\\B_1&-B_0\end{pmatrix} \tag{2'}$$

以下求H的本征值和本征函数，设本征函数为

$$\psi=C_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+C_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix} \tag{3}$$

本征方程为$H\psi=E\psi$，则

$$-u\begin{pmatrix}B_0&B_1\\B_1&-B_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix} \tag{4}$$

能级方程为

$$\det(E-H)=\begin{vmatrix}E+uB_0&uB_1\\uB_1&E-uB_0\end{vmatrix}=0 \tag{5}$$

令 $uB_0=\hbar\omega_0$， $uB_1=\hbar\omega_1$， $\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}=\omega$ （6）

由式（5）容易解出 $E=\pm\hbar\omega$ （7）

将E之值代回式（4），即可求出如下本征函数：

$$\left.\begin{array}{ll}E=\hbar\omega & E=-\hbar\omega\\[2ex] \dfrac{C_1}{C_2}=-\dfrac{\omega_1}{\omega+\omega_0} & \dfrac{C_1}{C_2}=\dfrac{\omega_1}{\omega-\omega_0}\\[2ex] \psi_+=\begin{pmatrix}\omega_1\\ \omega+\omega_0\end{pmatrix} & \psi_-=\begin{pmatrix}\omega_1\\ \omega-\omega_0\end{pmatrix}\end{array}\right\} \tag{8}$$

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，

$$\psi(t=0)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{2\omega}\left(\psi_{+}+\psi_{-}\right) \tag{9}$$

因此，$t>0$时波函数

$$\begin{aligned}\psi(t)&=\frac{1}{2\omega}\left(\psi_{+}e^{-i\omega t}+\psi_{-}e^{i\omega t}\right)\\&=i\frac{\omega_1}{\omega}\sin\omega t\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\left(\cos\omega t-i\frac{\omega_0}{\omega}\sin\omega t\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{10}$$

注意$\psi(t)$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

$$\begin{aligned}P(\sigma_z=1)&=\left|i\frac{\omega_1}{\omega}\sin\omega t\right|^2=\frac{\omega_1^2}{\omega^2}\sin^2\omega t\\&=\frac{B_1^2}{B_0^2+B_1^2}\left[\sin\left(\frac{u}{\hbar}\sqrt{B_0^2+B_1^2}\,t\right)\right]^2\end{aligned} \tag{11}$$

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。

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

$$\begin{aligned}\sigma(\theta)&=\frac{1}{k^2}\left|e^{i\delta_0}\sin\delta_0+3e^{i\delta_1}\sin\delta_1\cos\theta\right|^2\\&=\frac{1}{k^2}\left|\sin^2\delta_0+6\sin\delta_0\cos\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1)\cos\theta+9\sin^2\delta_1\cos^2\theta\right|^2\\&=\frac{1}{k^2}\left|A_0+A_1\cos\theta+A_2\cos^2\theta\right|^2\end{aligned}$$

其中 $A_0=\sin^2\delta_0$，$A_1=6\sin\delta_0\cos\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1)$，$A_2=9\sin^2\delta_1$。

12－2)用波恩近似法计算如下势散射的微分截面：

（a） $V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a;\\ 0, & r>a.\end{cases}$

（b） $V(r)=V_0e^{-\alpha r^2}$

（c） $V(r)=\kappa\, e^{-\alpha\gamma}\Big/ r$

（d） $V(r)=\gamma\delta(r).$

解：本题的势场皆为中心势场，故有

$$f(\theta)=-\frac{2u}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r' V(r')\sin qr' dr' \quad , \quad q=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{1}$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{4u^2}{\hbar^4 q^2}\left|\int_0^\infty r' V(r')\sin qr' dr'\right|^2 \tag{1}$$

（a） $\int_0^a r'(-V_0)\sin qr' dr' = -\frac{V_0}{q^2}(\sin qa-qa\cos qa)$

$\therefore \qquad \sigma(\theta)=\frac{4u^2V_0^2}{\hbar^4 q^6}(\sin qa-qa\cos qa)^2$

（b） $\int_0^\infty r'\left(V_0e^{-\alpha r'^2}\right)\sin qr' dr' = \frac{V_0}{2i}\int_0^\infty r' e^{-\alpha r'^2}\left(e^{iqr'}-e^{-iqr'}\right)dr'$

$$=\frac{V_0}{2i}\left[\int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r'-\frac{iq}{2\alpha}\right)^2-\frac{q^2}{4\alpha}}dr'-\int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r'+\frac{iq}{2\alpha}\right)^2-\frac{q^2}{4\alpha}}dr'\right]$$

$$=\frac{V_0}{2i}e^{-q^2/4\alpha}\left[\int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r'-\frac{iq}{2\alpha}\right)^2}dr'-\int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r'+\frac{iq}{2\alpha}\right)^2}dr'\right]$$

$$=\frac{V_0}{2i}e^{-q^2/4\alpha}\left[I_1-I_2\right] \tag{3}$$

其中 $I_1=\int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r'-\frac{iq}{2\alpha}\right)^2}dr' = \int_0^\infty\left(r'-iq/2\alpha\right)e^{-\alpha\left(r'-\frac{iq}{2\alpha}\right)^2}dr'+\frac{iq}{2\alpha}\int_0^\infty e^{-\alpha\left(r'-\frac{iq}{2\alpha}\right)^2}dr'$

$$=\int_0^\infty \xi e^{-\alpha\xi^2}d\xi+\frac{iq}{2\alpha}\int_0^\infty e^{-\alpha\xi^2}d\xi=\frac{1}{2\alpha}+\frac{iq\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}} \tag{4}$$

类似地可求得 $I_2=\int_0^\infty r' e^{-\alpha\left(r'+\frac{iq}{2\alpha}\right)^2}dr' = \frac{1}{2\alpha}-\frac{iq\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}}$ （5）

（4）、（5）代入（3），得

$$\int_0^\infty r'\left(V_0e^{-\alpha r'^2}\right)\sin qr' dr' = \frac{V_0}{2i}e^{-q^2/4\alpha}\left(-\frac{iq\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}}\right)=-\frac{V_0q\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}}e^{-q^2/4\alpha} \tag{6}$$

代入（2），得

$$\sigma(\theta)=\frac{\pi u^2V_0^2}{4\hbar^4\alpha^3}e^{-q^2/2\alpha} \tag{7}$$

（c）$\int_0^\infty r'\left(\kappa e^{-\alpha r'}\big/r'\right)\sin qr'dr' = \kappa\int_0^\infty e^{-\alpha r'}\sin qr'dr' = I = -\frac{\kappa}{\alpha}\int_0^\infty \sin qr' de^{-\alpha r'}$

$$= -\frac{\kappa}{\alpha}\left[\sin qr' e^{-\alpha r'}\Big|_0^\infty - q\int_0^\infty e^{-\alpha r'}\cos qr'dr'\right] = \frac{q\kappa}{\alpha}\int_0^\infty\left(-\frac{1}{\alpha}\right)\cos qr' de^{-\alpha r'}$$

$$= -\frac{q\kappa}{\alpha^2}\left[\cos qr' e^{-\alpha r'}\Big|_0^\infty + q\int_0^\infty e^{-\alpha r'}\sin qr'dr'\right]$$

$$= -\frac{q\kappa}{\alpha^2}\left[-1+\frac{q}{\kappa}I\right]$$

由此解得 $\quad I = \int_0^\infty r'\left(\kappa e^{-\alpha r'}\big/r'\right)\sin qr'dr' = \frac{q\kappa}{\alpha^2+q^2}$ （8）

代入（2），解得 $\quad \sigma(\theta) = \frac{4u^2}{\hbar^4 q^2}\left|\frac{q\kappa}{\alpha^2+q^2}\right|^2 = \frac{4u^2\kappa^2}{\hbar^4\left(\alpha^2+q^2\right)^2}$ （9）

将$V(r)=\gamma\delta(r)$.代入§12.3.2 式（18），

$f(\theta,\varphi) = -\frac{u}{2\pi\hbar^2}\int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'}V\left(\vec{r}'\right)$，得

$f(\theta,\varphi) = -\frac{u}{2\pi\hbar^2}\int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'}\gamma\delta\left(\vec{r}'\right) = -\frac{u\gamma}{2\pi\hbar^2}$

$\therefore \quad \sigma(\theta) = \left|f(\theta,\varphi)\right|^2 = \frac{u^2\gamma^2}{2\pi^2\hbar^4}$ （10）

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 波），设粒子自旋为$1/2$，相互作用为

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V_0\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2, & r\le a \\ 0, & r>a \end{cases} \qquad (1)$$

$V_0>0$, 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

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} -3V_0, & r\le a \\ 0, & r>a \end{cases} \qquad (1')$$

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

$$V(r)=\begin{cases}-3V_0, & r\le a\\ 0, & r>a\end{cases} \tag{1'}$$

在质心系中，s波空间波函数可以写成

$$\psi(r)=u(r)/r \tag{2}$$

其中r为两粒子的相对距离，即$r=\left|\vec{r_1}-\vec{r_2}\right|$，$E\to 0$时。径向方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2u}u''+V(r)u=0 \tag{3}$$

亦即

$$\begin{aligned}&u''+k_0^2u=0\,,\ r\le a\\ &u''=0\,,\qquad\ \ r>a\end{aligned}\qquad (E\to 0) \tag{3'}$$

其中 $$k_0=\sqrt{6uV_0}\Big/\hbar=\sqrt{3mV_0}\Big/\hbar \tag{4}$$

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

$$u(r)=\begin{cases}A\sin k_0r\,, & r\le a\\ C\left(1-\dfrac{r}{a_0}\right), & r>a\end{cases} \tag{5}$$

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

$$a_0=-a\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right) \tag{6}$$

$$f(\theta)=-a_0=a\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right) \tag{7}$$

由于是全同粒子散射，s波微分截面为

$$\sigma(\theta)=\left|f(\theta)+f(\pi-\theta)\right|^2=4a_0^2 \tag{8}$$

总截面（自旋单态，s波）为

$$\sigma_t=4\pi\sigma(\theta)=16\pi\,a_0^2 \tag{9}$$

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$1/4$，形成自旋三重态$(s=1)$的几率为$3/4$，后若对s波散射无贡献。因此，有效的总截面为

$$\sigma_{有效}=\frac{1}{4}\sigma_t=4\pi\,a_0^2=4\pi\,a^2\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)^2 \tag{10}$$

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$a_0 \to \pm\infty$，亦即（参考式（6））

$$k_0 a = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \cdots \tag{11}$$

这正是势阱的“阱口”出现束缚能级$\left(E = 0^-\right)$的条件，这时式（9）和（10）应改为

$$\sigma_t = 16\pi\left|f\right|^2 = \frac{16\pi}{k^2} = \frac{8\pi\hbar^2}{uE_c} = \frac{32\pi\hbar^2}{mE} \tag{12}$$

$$\sigma_{有效} = \frac{1}{4}\sigma_t = \frac{8\pi\hbar^2}{mE}$$

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，$E_c = \hbar^2 k^2 / 2u$。