目次

*　　*　　*　　*　　*

参考用书

1．曾谨言编著：量子力学上册　　科学。1981
2．周世勋编：量子力学教程　　人教。1979
3．L．I．席夫著，李淑娴，陈崇光译：量子力学　　人教。1982
4．D．特哈尔编，王正清，刘弘度译：量子力学习题集　　人教。1981
5．列维奇著，李平译：量子力学教程习题集　高教。1958
6．原岛鲜著：初等量子力学（日文）　裳华房。1972
7．N.F.Mott.I.N.Sneddon:Wave Mechanics and its Applications　西联影印。1948
8．L.Pauling.E.B.Wilson:Introduction to Quantum- Mechanics
(有中译本：陈洪生译，科学)　1951
9. A.S.Davydov: Quantum Mechanics Pergamon Press 1965
10. SIEGFRIED.Fluegge:Practical Quantum- Mechanics
（英译本）Springer Verlag 1973
11. A.Messian:Quantum Mechanics Vol I.North.Holland Pubs 1961
12.L.Landau,E.Lifshitz:Quantum-Mechanics1958

量子力学常用积分公式

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

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

(3) $\int e^{ax}\cos axdx = \frac{e^{ax}}{a^2+b^2}(a\cos bx + b\sin bx)$

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

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

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

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

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

(9) $$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^n x dx = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^n x dx = \begin{cases} \dfrac{(n-1)!!}{n!!}\dfrac{\pi}{2} & (n=\text{正偶数}) \\ \dfrac{(n-1)!!}{n!!} & (n=\text{正奇数}) \end{cases}$$

(10) $$\int_0^{\infty} \frac{\sin ax}{x} dx = \begin{cases} \dfrac{\pi}{2} & (a>0) \\ -\dfrac{\pi}{2} & (a<0) \end{cases}$$

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

(12) $$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

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

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

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

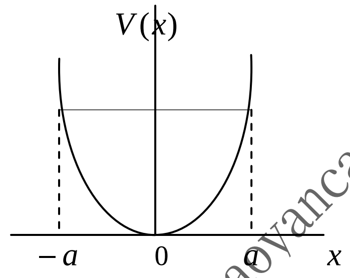
(16) $$\int_0^{\infty} xe^{-ax} \sin bx dx = \frac{2ab}{(a^2+b^2)^2} \qquad (a>0)$$

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

第一章　　　量子力学的诞生

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

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



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：$\boldsymbol{E=V(x)\big|_{x=a}=\frac{1}{2}m\omega^2a^2}$。

由此得　　$a=\sqrt{2E/m\omega^2}$ ，　　(2)

$x=\pm a$即为粒子运动的转折点。有量子化条件

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

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

1.2 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

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

即　　$p_x\cdot 2a=n_xh$　（$2a$：一来一回为一个周期）

$$\therefore\quad p_x=n_xh/2a,$$

同理可得，　$p_y=n_yh/2b,\quad p_z=n_zh/2c,$

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

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 $\int_0^{2\pi} p_\varphi d\varphi = nh,\quad n = 1, 2, \cdots,\quad p_\varphi$ 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

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

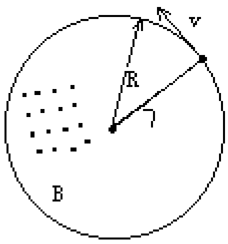
$$\therefore \qquad p_\varphi = mh,$$

因而平面转子的能量

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

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

1.4 有一带电荷 e 质量 m 的粒子在平面内运动,垂直于平面方向磁场是 B,求粒子能量允许值.



(解)带电粒子在匀强磁场中作匀速圆周运动,设圆半径是 r,线速度是 v,用高斯制单位，洛伦兹与向心力平衡条件是:

$$\frac{Bev}{c} = \frac{mv^2}{r} \qquad (1)$$

又利用量子化条件,令 $p =$ 电荷角动量 $\quad q =$ 转角 φ

$$\oint pdq = \int_0^{2\pi} mrvd\varphi = 2\pi mrv = nh \qquad (2)$$

即 $\quad mrv = nh \qquad (3)$

由(1)(2)求得电荷动能$=\frac{1}{2}mv^2 = \frac{Be\hbar n}{2mc}$

再求运动电荷在磁场中的磁势能，按电磁学通电导体在磁场中的势能 $=\frac{磁矩*场强}{c} = \frac{电流*线圈面积*场强}{c} = \frac{e\nu*\pi r^2*B}{c}$,$\nu$ 是电荷的旋转频率，$\nu = \frac{v}{2\pi r}$,代入前式得

运动电荷的磁势能= $\dfrac{Be\hbar n}{2mc}$　(符号是正的)

点电荷的总能量=动能+磁势能=E= $\dfrac{Be\hbar n}{2mc}$　($n=1,2,3$ 　)

1.5，1.6 未找到答案

1.7（1）试用 Fermat 最小光程原理导出光的折射定律

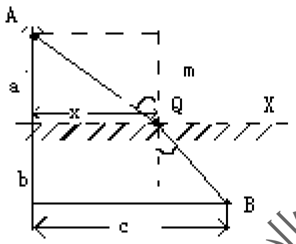
$$n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2$$

（2）光的波动论的拥护者曾向光的微粒论者提出下述非难：

如认为光是粒子，则其运动遵守最小作用量原理 $\delta\int pdl=0$ 认为 $p=mv$ 则 $\delta\int pdl=0$ 这将导得下述折射定律

$$n_1\sin\alpha_3=n_3\sin\alpha_1$$

这明显违反实验事实，即使考虑相对论效应，则对自由粒子：$p=\dfrac{Ev}{c^2}$ 仍就成立，E 是粒子能量，从一种媒质到另一种媒质 E 仍不变，仍有 $\delta\int pdl=0$，你怎样解决矛盾？



（解）甲法：光线在同一均匀媒质中依直线传播，因此自定点 A 到定点 B 的路径是两段直线：光程

$$I=n_1\overline{AQ}+n_2\overline{QB}$$

设 A，B 到界面距离是 a,b(都是常量)有

$$I=n_1 a\sec\alpha_1+n_2 b\sec\alpha_2$$

又 AB 沿界面的投影 c 也是常数，因而 α_1，α_2 存在约束条件：

$$a\,tg\,\alpha_1+b\,tg\,\alpha_2=c \qquad (2)$$

求(1)的变分,而将 α_1,α_2 看作能独立变化的,有以下极值条件

$$\delta I=n_1 a\sec\alpha_1 tg\,\alpha_1 d\alpha_1+n_2 b\sec\alpha_2 tg\,\alpha_2 d\alpha_2=0 \qquad (3)$$

再求（2）的变分　$a\sec^2\alpha_1 d\alpha_1+b\sec^2\alpha_2 d\alpha_2=\delta c=0$

(3)与(4)消去 $d\alpha_1$ 和 $d\alpha_2$ 得

$$n_1 \sin\alpha_1 = n_2 \sin\alpha_2 \qquad (5)$$

[乙法]见同一图,取 x 为变分参数,取 0 为原点，则有:

$$I = n_1\sqrt{a^2+x^2} + n_2\sqrt{b^2+(c-x^2)}$$

求此式变分,令之为零,有： $\delta I = \dfrac{n_1 x\delta x}{\sqrt{a^2+x^2}} - \dfrac{n_2(c-x)\delta x}{\sqrt{b^2+(c-x)^2}} = 0$

这个式子从图中几何关系得知,就是(5).

(2)按前述论点光若看作微粒则粒子速度 v 应等于光波的群速度 v_G 光程原理作 $\delta\int v_G dl = 0$,依前题相速 $v_p = \dfrac{c^2}{v_G}$,而 $v_G = \dfrac{c^2}{v_p} = cn$, n 是折射率, n 是波前阵面更引起的,而波阵面速度则是相速度 v_p,这样最小作用量原理仍可以化成最小光程原理.

$$\delta\int ndl = 0$$

前一非难是将光子的传播速度 v 看作相速度 v_p 的误解.

1.8 对高速运动的粒子(静质量 m)的能量和动量由下式给出:

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \qquad (1)$$

$$p = \frac{mv^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \qquad (2)$$

试根据哈密顿量 $H = E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ (3)

及正则方程式来检验以上二式.由此得出粒子速度和德布罗意的群速度相等的关系.计算速度并证明它大于光速.

(解)根据(3)式来组成哈氏正则方程式组: $\dot{q}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i}$,本题中 $\dot{q}_i = v$, $p_i = p$,因而

$$v = \frac{\partial}{\partial p}\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} = \frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}} \qquad (4)$$

从前式解出 p (用 v 表示)即得到(2).又若将(2)代入(3),就可得到(1)式.

其次求粒子速度 v 和它的物质波的群速度 v_G 间的关系.运用德氏的假设： $p = \hbar k$ 于(3)式右方，又用

$E=\hbar\omega$ 于(3)式左方,遍除 h:

$$\omega=\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2}+c^2k^2}=\omega(k)$$

按照波包理论，波包群速度 v_G 是角频率丢波数的一阶导数：

$$v_G=\frac{\partial}{\partial k}\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2}+c^2k^2}$$

$$=\frac{c^2k}{\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2}+c^2k^2}}=\frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}}$$

最后一式按照（4）式等于粒子速度 v，因而 $v_G=v$。

又按一般的波动理论，波的相速度 v_G 是由下式规定

$$v_p=\upsilon\lambda=\frac{\omega}{k}$$　（υ 是频率）

利用（5）式得知

$$v_p=\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2k^2}+c^2}>c \qquad (6)$$

故相速度（物质波的）应当超过光速。

最后找出 v_G 和 v_p 的关系，将（1）（2）相除，再运用德氏波假设：

$$\frac{E}{p}=\frac{\hbar\omega}{\hbar k}=\frac{c^2}{v}=\frac{c^2}{v_G},\quad v_p=\frac{c^2}{v_G} \qquad (7)$$

补充：

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

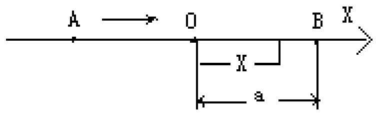
$$p = h/\lambda \qquad (2)$$

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] 试用量子化条件,求谐振子的能量[谐振子势能$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$]

(解)(甲法)可以用 Wilson-Sommerfeld 的量子化条件式:$\oint pdq = nh$



在量子化条件中,令 $p = m\dot{x}$ 为振子动量,$q = x$ 为振子坐标,设总能量 E

则 $E = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ $\quad p = \sqrt{2m(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2})}$

代入公式得: $\oint \sqrt{2m(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2})} dx = nh$

量子化条件的积分指一个周期内的位移,可看作振幅 $\overline{OA}$ 的四倍,要决定振幅 a,注意在 A 或 B 点动能为 0,$E = \frac{1}{2} m\omega^2 a^2$,(1)改写为:

$$2\int_{-a}^{a} m\omega \sqrt{a^2 - x^2} dx = nh \qquad (2)$$

积分得:$m\omega a^2 \pi = nh$

遍乘 $\frac{1}{2}\frac{\omega}{\pi}$ 得

$$E = \frac{h\omega}{2\pi} = n\hbar\omega$$

[乙法]也是利用量子化条件,大积分变量用时间t而不用位移x,按题意振动角频率为ω,直接写出位移x,用t的项表示:

$$q = x = a\sin\omega t$$

求微分: $dq = dx = a\omega\cos\omega t dt$ (4)

求积分: $p = m\dot{x} = ma\omega\cos\omega t$ (5)

将(4)(5)代量子化条件:

$$\oint pdq = ma^2\omega^2\int_0^T \cos^2\omega t dt = nh$$

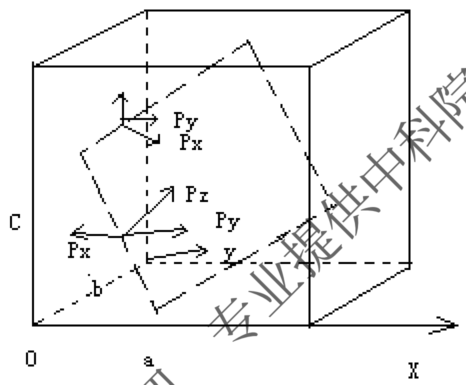
T 是振动周期,T=$\dfrac{2\pi}{\omega}$,求出积分,得

$$m\omega a^2\pi = nh \qquad E = \frac{h\omega}{2\pi}n = n\hbar\omega$$

$n = 1,2,3$ 正整数

#

[2]用量子化条件,求限制在箱内运动的粒子的能量,箱的长宽高分别为a,b,c.



(解)三维问题,有三个独立量子化条件,可设想粒子有三个分运动,每一分运动是自由运动.设粒子与器壁作弹性碰撞,则每碰一次时,与此壁正交方向的分动量变号(如$p_x \to -p_x$),其余分动量不变,设想粒子从某一分运动完成一个周期,此周期中动量与位移同时变号,量子化条件:

$$\oint p_x dq_x = n_x h = 2p_x\int_0^a dx = 2a p_x \qquad (1)$$

$$\oint p_y dq_y = n_y h = 2p_y\int_0^b dy = 2b p_y \qquad (2)$$

$$\oint p_z dq_z = n_z h = 2p_z\int_0^c dz = 2c p_z \qquad (3)$$

p_x, p_y, p_z都是常数,总动量平方 $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$ 总能量是:

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)$$

$$=\frac{1}{2m}[(\frac{n_x h}{2a})^2+(\frac{n_y h}{2b})^2+(\frac{n_z h}{2c})^2]$$

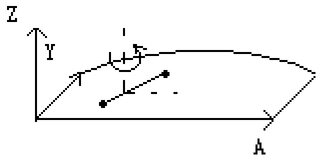
$$=\frac{h^2}{8m}[(\frac{n_x}{a})^2+(\frac{n_y}{b})^2+(\frac{n_z}{c})^2]$$

但 $n_x,n_y,n_z=1,2,3$　　正整数.

#

[3] 平面转子的转动惯量为 I ,求能量允许值.

(解)解释题意:平面转子是个转动体,它的位置由一坐标（例如转角 φ ）决定,它的运动是一种



刚体的平面平行运动.例如双原子分子的旋转.按刚体力学,转子的角动量 $\mathrm{I}\ \omega$,但 $\omega=\dot{\varphi}$ 是角速度,能量是 $E=\frac{1}{2}\mathrm{I}\omega^2$

利用量子化条件,将 p 理解成为角动量, q 理解成转角 φ ,一个周期内的运动理解成旋转一周,则有

$$\oint pdq=\int_0^{2\pi}\mathrm{I}\omega d\varphi=2\pi\mathrm{I}\omega=nh \qquad (1)$$

(1) 说明 ω 是量子化的

(2) $\omega=\frac{nh}{2\pi\mathrm{I}}=\frac{n\hbar}{\mathrm{I}}$　　$(n=1,2,3\ldots\ldots)$　　(2)

(3) 代入能量公式,得能量量子化公式: $E=\frac{1}{2}\mathrm{I}\omega^2=\frac{\mathrm{I}}{2}(\frac{n\hbar}{\mathrm{I}})^2=\frac{n^2\hbar^2}{2\mathrm{I}}$　　(3)

#

第二章：函数与波动方程

P69 当势能$V(\bar{r})$改变一常量 C 时,即$V(\bar{r}) \to V(\bar{r})+c$,粒子的波函数与时间无关部分变否?能量本征值变否?

(解)设原来的薛定谔方程式是$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi=0$

将方程式左边加减相等的量$C\psi$ 得: $\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\{[E+C]-[V(x)+C]\}\psi=0$

这两个方程式从数学形式上来说完全相同,因此它们有相同的解$\psi(x)$,

从能量本征值来说,后者比前者增加了 C。

设粒子势能的极小值是$V_{\min}$ 证明$E_n > V_{\min}$

(证)先求粒子在某一状态中的平均值能量$\overline{E}$

$$\boldsymbol{\overline{E}=\iiint_{\upsilon}\psi^*[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)]\psi d^3x}$$

其中动能平均值一定为正:

$$\overline{T}=\iiint\psi^*(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)\psi d^3x$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\iiint\{\nabla[\psi^*\nabla\psi]-\nabla\psi^*\nabla\psi\}d\tau$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\iiint\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)d\tau+\frac{\hbar^2}{2m}\iiint\ \nabla\psi^*\nabla\psi d\tau$$

用高斯定理:$\overline{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\iint_B(\psi^*\nabla\psi)\cdot d\bar{s}+\frac{\hbar^2}{2m}\iiint\nabla\psi^*\nabla\psi d\tau\ =\frac{\hbar^2}{2m}\iiint_\tau\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi d\tau$

中间一式的第一项是零,因为$\boldsymbol{\psi}$假定满足平方可积条件,因而$\overline{T}>0$因此 $\overline{E}=\overline{T}+\overline{V}>\overline{V}$,能让能量平均值$\overline{V}>V_{\min}$因此$\overline{E}>V_{\min}$

令$\psi=\psi_n$(本征态)则$\overline{E}=E_n$而$E_n>V_{\min}$得证

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

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

2.2 对于一维自由运动粒子，设 $\psi(x,0)=\delta(x)$ 求 $\left|\psi(x,t)\right|^2$。

（解）题给条件太简单，可以假设一些合理的条件，既然是自由运动，可设粒子动量是 p，能量是E，为了能代表一种最普遍的一维自由运动，可以认为粒子的波函数是个波包（许多平面波的叠加），其波函数：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{p=-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Ei)}dp \qquad (1)$$

这是一维波包的通用表示法，是一种福里哀变换，上式若令 $t=0$ 应有

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{p=-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp \qquad (2)$$

但按题意，此式等于 $\delta(x)$。但我们知道一维 δ 函数一种表示是：

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{k=-\infty}^{\infty}e^{ikx}dk \qquad (3)$$

将（2）（3）二式比较：知道 $k=\frac{p}{\hbar}$，并且求得 $\phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$，于是（1）成为

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{p=-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(px-Ei)}dp \qquad (4)$$

这是符合初条件的波函数，但 p,E 之间尚有约束条件 $E=\frac{p^2}{2m}$（因为是自由粒子，总能量等于动能），代入（4）

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{p=-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(px-\frac{p^2}{2m}i)}dp \qquad (5)$$

将此式变形成高斯积分，容易得到所需结果：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}}\int_{p=-\infty}^{\infty}e^{-\frac{it}{2m\hbar}(p-\frac{mx}{2}i)}dp$$

利用积分 $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha\xi^2}d\xi=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}}\sqrt{\frac{2m\hbar\pi}{it}}$$

写出共轭函数（前一式 i 变号）：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{-\frac{imx^2}{2\hbar t}}\sqrt{\frac{2m\hbar\pi}{-it}}$$

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\times\frac{2m\hbar\pi}{t}=\frac{m}{2\pi\hbar t}$$

本题也可以用 Fresnel 积分表示，为此可将（6）式积分改为：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\cos[\sqrt{\frac{t}{2m\hbar}}(p-\frac{mx}{t})]^2dp-i\int_{-\infty}^{\infty}\sin[\sqrt{\frac{t}{2m\hbar}}(p-\frac{mx}{t})]^2dp$$

用课本公式得 $\begin{matrix}\psi(x,t)\\ \psi^*(x,t)\end{matrix}=\frac{1}{2\pi\hbar}(1\mp i)\sqrt{\frac{m\hbar\pi}{t}}e^{\frac{\mp imx^2}{2\hbar t}}$，两者相乘，可得相同的结果。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3 设一维自由粒子初态为$\psi(x,0)$，证明在足够长时间后$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\exp[-i\pi/4]\cdot\exp\left[\frac{imx^2}{2\hbar t}\right]\cdot\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$

式中 $\varphi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)e^{-ikx}dx$ 是$\psi(x,0)$的 **Fourier** 变换。提示：利用 $\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}e^{i\pi/4}e^{-i\alpha x^2}=\delta(x)$。

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

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

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

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

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

参照本题的解题提示，即得

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

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

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

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。

2.4——1.7

2.5 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 $\boldsymbol{E=\int d^3r\cdot w}$，$\boldsymbol{w=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V\psi}$ （能量密度）

（**b**）证明能量守恒公式 $\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{s}=0$，$\boldsymbol{\vec{s}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla\psi^*\right)}$ （能流密度）

证：（a）粒子的能量平均值为（设 ψ 已归一化）

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

$$\boldsymbol{\overline{V}=\int d^3r\psi^*V\psi}$$

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

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

且能量平均值 $E=\int d^3r\cdot w$ 。

（**b**）由（4）式，得

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

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

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

$$\boldsymbol{=-\nabla\cdot\vec{s}+E\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^*\right)}$$

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

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

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

粒子满足含时间薛定谔方程及其共轭方程式：

$$\hbar i\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+\nabla\Psi \qquad -\hbar i\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*+\nabla\Psi^*$$

又设 $\vec{S}\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\cdot\nabla\Psi+\frac{\partial\Psi}{\partial t}\nabla\Psi^*]$ 则有

$$\frac{\partial W}{\partial t}=-\nabla\cdot\vec{S}+\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\frac{\partial\Psi}{\partial t}\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=-\nabla\cdot\vec{S}$$

公式(2)得证。

2.6 考虑单粒子的 Schrödinger 方程

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

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

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

证：（a）式（1）取复共轭， 得

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

$\psi^*\times$（1）$-\psi\times$（2），得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)+2i\psi^*V_2\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+2iV_2\psi^*\psi$$

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

即 $$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=\frac{2V_2}{\hbar}\rho\neq0$$ ，

此即几率不守恒的微分表达式。

利用高斯定理将右方第一项变形：

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\iiint_{\Omega}\{-\frac{\hbar}{2mi}\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\}d^3x+\frac{2}{\hbar}\iiint_{\Omega}\Psi^*V_2\Psi d^3x$$

$$=-\iiint_{\Omega}\frac{\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\cdot d\vec{S}+\frac{2}{\hbar}\iiint_{\Omega}\Psi^*V_2\Psi d^3x \qquad (3)$$

如果粒子的运动范围是无限的，并且符合平方可积条件，则在无限远处$\Psi\to 0$，$\nabla\Psi\cdot\Psi^*\to 0$，因而（3）式的面积分等于 0。

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{2}{\hbar}\iiint_{\Omega}\Psi^*V_2(x)\Psi d^3x \qquad (4)$$

这证明总几率$P=\iiint_{\Omega}\Psi^*\Psi d^3x$不守恒，因为$\frac{\partial P}{\partial t}\neq 0$。

（b）式（3）对空间体积τ积分，得

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

$$=-\frac{\hbar}{2im}\oiint_{S}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)\cdot d\vec{S}+\frac{2}{\hbar}\iiint_{\tau}d^3rV_2\psi^*\psi$$

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。

2.7——1.8

2.8 在非定域势中粒子的薛定谔方程式是：

$$\hbar i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{x},\ t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,\ t)+\int_{x'}V(\bar{x},\bar{x}')\Psi(\bar{x}',\ t)d^3x' \qquad (1)$$

求几率守恒对非定域势的要求。此时，只依赖于波函数Ψ在空间一点的几率波是否存在？

[解]按题意，是要求写出几率守恒的条件，从这个条件寻出$V(x,\ x')$应当遵守的要求。几率守恒的条件是：

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_{\Omega}\Psi^*\Psi d^3x=0$$

或
$$\iiint_{\Omega}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\right)d^3x'=0 \qquad (2)$$

与[13]题类似，可写出[1]的共轭方程式：

$$-\hbar i\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\bar{x},\ t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*(\bar{x},\ t)+\iiint_{x'}V^*(\bar{x},\ \bar{x}')\Psi^*(\bar{x}',\ t)d^3x' \qquad (3)$$

将[1]和[3]中的$\frac{\partial\Psi}{\partial t}$和$\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$想等同的式子代入到[2]式中去，就得到如下的条件：

$$-\frac{\hbar}{2mi}\iiint_{\Omega}\left(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*\right)d^3x+\frac{1}{\hbar i}$$
$$\iiint_{\Omega}\left[\Psi^*(\bar{x},\ t)\iiint_{x'}V(\bar{x},\ \bar{x}')\Psi(\bar{x}',\ t)-\Psi(\bar{x},\ t)\iiint_{x'}V^*(\bar{x},\ \bar{x}')\Psi^*(\bar{x}',\ t)\right]d^3x\cdot d^3x'=0$$

将前式等号左方第一项变成面积分[高斯定理]，第二项变成六重积分：

$$-\frac{\hbar}{2mi}\iint_{s}\left(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*\right)\cdot d\bar{s}+\frac{1}{\hbar i}$$
$$\iiint_{\Omega}\iiint_{x'}[\Psi^*(\bar{x},\ t)V(\bar{x},\ \bar{x}')\Psi(\bar{x}',\ t)-\Psi(\bar{x},\ t)V^*(\bar{x},\ \bar{x}')\Psi^*(\bar{x}',\ t)]d^3x\cdot d^3x'=0 \qquad (4)$$

前式等号左方第一项由于波函数平方可积条件（$\Psi^*\to 0$，$\Psi(x)\to 0$当$x\to\infty$时）可消去，因$\Psi(\bar{x},\ t)$和$\Psi(\bar{x}',\ t)$形式相同,xx'**对易**，$x\to x',x'\to x$ 对易：

$$\iiint_{\Omega}\iiint_{x'}\left\{\Psi^*(\bar{x},\ t)\cdot\left[V(\bar{x},\ \bar{x}')-V^*(\bar{x}',\ \bar{x})\right]\Psi(\bar{x}',\ t)\right\}d^3x\cdot d^3x'=0 \qquad (5)$$

这积分式定积分，它等于零的可能性要求被积函数为零，即：

$$V(\bar{x},\ \bar{x}')=V^*(\bar{x},\ \bar{x}')$$

因此$V(\bar{x},\ \bar{x}')$必须是$\bar{x}$，$\bar{x}'$实函数。

2.9 设 N 个粒子的哈密顿量为：

$$\hat{H}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^{\ 2}+\sum_{i=1}^{N}\mathrm{V}_{ij}[|\vec{r}_i-\vec{r}_j|] \qquad (1)$$

$\Psi(\vec{r}_1\vec{r}_2\cdots\vec{r}_N,t)$ 是它的任一态函数，定义：

$$\rho(\vec{r},t)=\sum\rho_i(\vec{r},t) \qquad (2)$$

$$\vec{j}(\vec{r},t)=\sum\vec{j}_i(\vec{r},t) \qquad (3)$$

$$\rho_1(\vec{r}_1,t)=\int\cdots\int d^3r_3d^3r_3\cdots d^3r_N\Psi^*\Psi$$

$$\vec{j}_1(\vec{r}_1,t)=\frac{\hbar}{2im}\int\cdots\int d^3r_3d^3r_3\cdots d^3r_N(\Psi^*\nabla_1\Psi-\Psi\nabla_1\Psi^*)$$

求证：$\dfrac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=0$ （4）

[证明]按定义：$\dfrac{\partial\rho}{\partial t}=\dfrac{\partial}{\partial t}\sum_i\rho_i(\vec{r},t)$

$$=\sum_i\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots d^3r_N\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\Psi$$

$$=\sum_i\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots d^3r_N(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi)$$

$$=\sum_i\frac{\partial}{\partial t}\rho_i(r,t) \qquad (5)$$

多粒子的体系的状态 $\Psi(\vec{r}_1\vec{r}_2\cdots\vec{r}_N,t)$ 应当满足多粒子薛定谔方程式，写出这个方程式和其共轭方程式：

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}=\sum_k(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2)\Psi+\sum_{jk}v_{jk}\Psi & \text{（6a）}\\ -\hbar i\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t}=\sum_k(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2)\Psi^*+\sum_{jk}v_{jk}\Psi^* & \text{(6b)}\end{cases}$$

将前二式等式右方的式子代替左方的$\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}$，$\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t}$，代进式(5)

$$\frac{\partial\rho_i}{\partial t}=\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots\sum_k-\frac{\hbar}{2im}(\Psi^*\nabla_k{}^2\Psi-\Psi\nabla_k{}^2\Psi^*)$$

$$+\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots\sum_{jk}-\frac{1}{i\hbar}(\Psi^*v_{jk}\Psi-\Psi v_{jk}\Psi^*)$$

$$=-\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots d^3r_N\cdot\sum_k\frac{\hbar}{2im}(\Psi^*\nabla_k{}^2\Psi-\Psi\nabla_k{}^2\Psi^*)$$

$$=-\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots d^3r_N\cdot\sum_k\frac{\hbar}{2im}\nabla_k\cdot(\Psi^*\nabla_k\Psi-\Psi\nabla_k\Psi^*) \qquad (7)$$

又待证的公式的等号左方第二项是：

$$\nabla\cdot\vec{j}\equiv\sum_i\nabla_i\cdot\sum_i j_i(\vec{r}_i,t)=(\nabla_1+\nabla_2+\cdots\nabla_i\cdots)[\vec{j}_1(\vec{r}_1,t)+\cdots\vec{j}_i(\vec{r}_i,t)+\cdots]$$

$$=\nabla_1\cdot\vec{j}_1(\vec{r}_1,t)+\nabla_2\cdot\vec{j}_2(\vec{r}_2,t)+\cdots\nabla_i\cdot\vec{j}_i(\vec{r}_i,t)\cdots=\sum_i\nabla_i\cdot\vec{j}_i(\vec{r}_i,t)$$

$$=\frac{\hbar}{2im}\sum_i\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots d^3r_N\nabla_{,i}\cdot(\Psi^*\nabla_i\Psi-\Psi\nabla_i\Psi^*)\qquad(8)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\sum_i\frac{\partial\rho_i}{\partial t}=\sum_i\int\cdots\int d^3r_1\cdots d^3r_{i-1}d^3r_{i+1}\cdots d^3r_N\sum_k\frac{\hbar}{2im}\nabla_{,k}\cdot(\Psi^*\nabla_k\Psi-\Psi\nabla_k\Psi^*)\qquad(9)$$

将⑼式两个求和合一，注意到$i\neq k$的项不存在，因而⑻⑼等值异号。

2.10*设在曲线坐标（$q^1q^2q^3$）中线元 ds 表为$ds^2=g_{ik}dq^idq^k$，写出这曲线坐标中的薛定谔方程式，写出球面坐标系中的薛定谔方程式。

（解） $dx=\frac{\partial x}{\partial q_1}dq_1+\frac{\partial x}{\partial q_2}dq_2+\frac{\partial x}{\partial q_3}dq_3$同样关于 y,z 有类似的二式。（这里为书写方便 q 的上标改成下标。）

*参看 Amer.J.Phys.Vol.41.1973-11

$$ds^2=dx^2+dy^2+dz^2=\left[\left(\frac{\partial x}{\partial q_1}\right)^2+\left(\frac{\partial y}{\partial q_1}\right)^2+\left(\frac{\partial z}{\partial q_1}\right)^1\right]dq_1^2$$

$$+\left[\left(\frac{\partial x}{\partial q_2}\right)^2+\left(\frac{\partial y}{\partial q_2}\right)^2+\left(\frac{\partial z}{\partial q_2}\right)^1\right]dq_2^2$$

$$+\left[\left(\frac{\partial x}{\partial q_3}\right)^2+\left(\frac{\partial y}{\partial q_3}\right)^2+\left(\frac{\partial z}{\partial q_3}\right)^1\right]dq_3^2$$

$$+2\left[\frac{\partial x}{\partial q_1}\frac{\partial x}{\partial q_2}+\frac{\partial y}{\partial q_1}\frac{\partial y}{\partial q_2}+\frac{\partial z}{\partial q_1}\frac{\partial z}{\partial q_2}\right]dq_1dq_2$$

$$+2\left[\frac{\partial x}{\partial q_2}\frac{\partial x}{\partial q_3}+\frac{\partial y}{\partial q_2}\frac{\partial y}{\partial q_3}+\frac{\partial z}{\partial q_2}\frac{\partial z}{\partial q_3}\right]dq_2dq_3$$

$$+2\left[\frac{\partial x}{\partial q_3}\frac{\partial x}{\partial q_1}+\frac{\partial y}{\partial q_3}\frac{\partial y}{\partial q_1}+\frac{\partial z}{\partial q_3}\frac{\partial z}{\partial q_1}\right]dq_3dq_1$$

令$g_{ik}=\sum_{xyz}(\frac{\partial x}{\partial q_i}\frac{\partial x}{\partial q_k})$为坐标变换系数：

设沿曲线坐标等势面的单位矢量是$\vec{a}_1$，$\vec{a}_2$，$\vec{a}_3$则

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

$$= \frac{\vec{a}_1}{g_{11}}\frac{\partial \Psi}{\partial q_1} + \frac{\vec{a}_2}{g_{22}}\frac{\partial \Psi}{\partial q_2} + \frac{\vec{a}_3}{g_{33}}\frac{\nabla \Psi}{\partial q_3}$$

$$= \frac{1}{g_{11}g_{22}g_{33}}[\vec{a}_1\frac{\partial}{\partial q_1}(g_{22}g_{33}\Psi) + \cdots]$$

$$\nabla^2\Psi = div(grad\Psi) = \frac{1}{g_{11}g_{22}g_{33}}\{\frac{\partial}{\partial q_1}[\frac{g_{22}g_{33}}{g_{11}}\frac{\partial \Psi}{\partial q_1}]$$

$$+\frac{\partial}{\partial q_2}[\frac{g_{33}g_{11}}{g_{22}}\frac{\partial \Psi}{\partial q_2}] + \frac{\partial}{\partial q_3}[\frac{g_{11}g_{22}}{g_{33}}\frac{\partial \Psi}{\partial q_3}]\} \quad (1)$$

代入直角坐标薛定谔方程式：

$$\hbar i\frac{\partial}{\partial t}\Psi'(q_1q_2q_3t) = -\frac{\hbar^2}{2mg_{11}g_{22}g_{33}}\{\frac{\partial}{\partial q_1}[\frac{g_{22}g_{33}}{g_{11}}\frac{\partial \Psi'}{\partial q_2}] + \frac{\partial}{\partial q_2}[\frac{g_{11}g_{33}}{g_{22}}\frac{\partial \Psi'}{\partial q_2}]$$

$$+\frac{\partial}{\partial q_3}[\frac{g_{11}g_{22}}{g_{33}}\frac{\partial \Psi'}{\partial q_2}]\} + V'(q_1q_2q_3)\Psi'(q_1q_2q_3t) \quad (2)$$

但 $\Psi'(q_1q_2q_3t) = \Psi\{x(q_1q_2q_3),\ y(q_1q_2q_3),\ z(q_1q_2q_3),\ t\}$

$$V' = V\{x(q_1q_2q_3)\cdots\}$$

在球坐标情形 $x = r\sin\theta\cos\psi$，$y = r\sin\theta\sin\psi$，$z = r\cos\theta$ 式正交坐标系

$$g_{11} = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial r}\right)^2} = 1$$

$$g_{22} = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \theta}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \theta}\right)^2} = r$$

$$g_{33} = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \psi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \psi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \psi}\right)^2} = r\sin\theta$$

代入后得

$$\hbar i\frac{\partial \Psi'}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2\sin^2\theta}\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\sin\theta\frac{\partial \Psi'}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \Psi'}{\partial \theta}\right)$$

$$+\frac{\partial}{\partial \psi}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial \Psi'}{\partial \psi}\right)\} + V'(r,\ \theta,\ \psi)\Psi'$$

化简得

$$\hbar i\frac{\partial\Psi'}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi'}{\partial r}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi'}{\partial\theta}\right)$$

$$+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\left(\frac{\partial\Psi'}{\partial\psi}\right)\}+V'(r,\ \theta,\ \psi)\Psi'$$

2.11——1.3

2.11 写出动量表象中的不含时 Schrödinger 方程。

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

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

所以在动量表象中，Schrödinger 为：

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

2.11 写出动量表象中的薛定谔方程式。
解：本题可有二种：A：含时间薛定谔方程式，B:定态薛定谔方程式。
A：写出含时间薛氏方程式：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(x)\Psi \qquad (1)$$

为将前式变换成动量表象，可写出含时间的表象变换式：

$$\Psi(\vec{x},\ t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_\tau\varphi(\vec{p},\ t)e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}d^3p \qquad (2)$$

$$\varphi(\vec{p},\ t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_\tau\Psi(\vec{x},\ t)e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}d^3x \qquad (3)$$

为了能用（3）变换（1）式，将（1）式遍乘 $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/h}$，对空间积分：

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}d^3x$$

$$=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint\nabla^2\Psi e^{-i\bar{p}\cdot\bar{x}/\hbar}d^3x \quad +\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint V(x)\psi e^{-i\bar{p}\cdot\bar{x}/\hbar}d^3x'$$

左方变形

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint\Psi(\bar{x},\ t)e^{-i\bar{p}\cdot\bar{x}/\hbar}d^3x = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\bar{p},\ t) \tag{4}$$

等号右方第一积分是可以用三重积分的分部积分来变形的，这式写成标量：

$$\frac{-1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\iiint\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}dxdydz \tag{5}$$

计算（5）的 x 部分分部积分法：

$$\int_z\int_y\int_x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}dxdydz = \int_z\int_y\int_x d\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}dydz$$

$$=\int_x\int_y\frac{\partial\Psi}{\partial x}e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}\Big|_{-\infty}^{\infty}dydz-\frac{ip_x}{\hbar}\iiint\frac{\partial\Psi}{\partial x}e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}dxdydz$$

$$=-\frac{ip_x}{\hbar}\int_z\int_y\int_x e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}d\Psi dydz$$

$$=-\frac{ip_x}{\hbar}\int_x\int_y\Psi e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}\Big|_{-\infty}^{\infty}dydz+\left(\frac{ip_x}{\hbar}\right)^2\int_z\int_y\int_x e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}\Psi dxdydz$$

$$=-\frac{p_x{}^2}{\hbar^2}\int_z\int_y\int_x e^{i(p_x x+p_y y+p_z z)/\hbar}\Psi dxdydz$$

关于 $\frac{\partial^2}{\partial y^2},\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ 的积分按同法计算，（5）式的结果是

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\frac{-\hbar^2}{2m}\iiint-\left(\frac{p_x{}^2+p_y{}^2+p_z{}^2}{\hbar^2}\right)\Psi(x,\ t)e^{-i\bar{p}\cdot\bar{x}/\hbar}dxdydz$$

$$=\frac{p^2}{2m}\iiint\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\Psi(x,\ t)e^{i\bar{p}\cdot\bar{x}/\hbar}$$

$$=\frac{p^2}{2m}\psi(\bar{p},\ t)$$

再计算（4）式右方第二积分

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_\tau V(\bar{x})\Psi(\bar{x},\ t)e^{-i\bar{p}'\cdot\bar{x}/\hbar}d^3x$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iiint_{\tau}V(\vec{x})\{\iiint_{\tau_p}\varphi(\vec{p}',\ t)e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{x}/\hbar}d^3p'\}e^{-ip\cdot x/\hbar}d^3x$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iiint_{\tau_p}\varphi(\vec{p}',\ t)\{\iiint_{\tau}V(\vec{x})e^{i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot x/\hbar}d^3x\}d^3p'$$

$$=\iiint_{\tau_p}G(\vec{p},\ \vec{p}')\cdot\varphi(\vec{p}',\ t)d^3p' \qquad (7)$$

但最后一个积分中

$$G(\vec{p},\ \vec{p}')\equiv\frac{1}{(2\pi h)^3}\iiint_{\tau_p}V(x)e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}/\hbar}d^3x$$

τ 指坐标空间，τ_p 指动量相空间，最后将（4）（6）（7）综合起来就得到动量表象的积分方程式如下：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{p},\ t)=\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p},\ t)+\iiint_{\tau_p}G(\vec{p},\ \vec{p}')\psi(\vec{p}',\ t)d^3p' \qquad (8)$$

若要将定态薛定谔方程式从坐标表象变成动量表象，运算步骤和上面只有很少的差别，设粒子能量为 E，坐标表象的薛氏方程：

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{x})+[E-V(\vec{x})]\Psi(\vec{x})=0$$

动量表象方程也是积分方程式，其中 G（$\vec{p}$，$\vec{p}'$）是这个方程式的核（Kernel）

$$-\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p})+E\psi(\vec{p})-\iiint_{\tau_p}G(\vec{p},\ \vec{p}')\psi(\vec{p}',\ t)d^2p'=0 \qquad (9)$$

2.12， 2.13，没找到

第三章： 一维定态问题

P86 设粒子处在二维无限深势阱中，

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

求粒子的能量本征值和本征波函数。如 $a=b$ ，能级的简并度如何？

解：能量的本征值和本征函数为

$$E_{n_x n_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}\right),\quad \psi_{n_x n_y}=\frac{2}{\sqrt{ab}}\sin\frac{\pi n_x x}{a}\sin\frac{\pi n_y y}{b},\qquad n_x,n_y=1,2,\cdots$$

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

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

$n_x=10,n_y=5$ 与 $n_x^{'}=11,n_y^{'}=2$）

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

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

$$\psi_{n_x n_y n_z}=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{\pi n_x x}{a}\sin\frac{\pi n_y y}{b}\sin\frac{\pi n_z z}{c},\qquad n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots$$

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

设粒子处在一维无限深方势阱中，

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

处于基态 $(n=1)$，求粒子的动量分布。

解：基态波函数为 $\psi_1=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\cos\dfrac{\pi x}{a}$ ，

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

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

P115　1.利用 Hermite 多项式的递推关系（附录 A3。式（11）），证明谐振子波函数满足下列关系

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.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）：$\boldsymbol{H_n'(\xi)=2nH_{n-1}(\xi)},\qquad \boldsymbol{\frac{\mathrm{dH_n}(\alpha x)}{\mathrm{d}x}=2n\alpha H_{n-1}(\alpha x)}$

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

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

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

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

3. 谐振子处于ψ_n态下，计算$\Delta x=\left[\overline{\left(x-\overline{x}\right)^2}\right]^{1/2}$，$\Delta p=\left[\overline{\left(p-\overline{p}\right)^2}\right]^{1/2}$，$\Delta x\cdot\Delta p=?$

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

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

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

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

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

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

4. 荷电 q 的谐振子，受到外电场ε的作用，

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

求能量本征值和本征函数。

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

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 $$x_0=q\varepsilon/m\omega^2 \qquad (3)$$

如作坐标平移，令 $$x'=x-x_0 \qquad (4)$$

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

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

（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

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

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

即

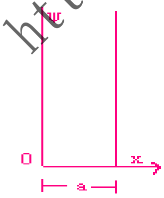
$$
\begin{aligned}
E_n &= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2\cdot\left(\frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2 \\
&= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}, \qquad n=0,1,2,\cdots
\end{aligned} \tag{9}
$$

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

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

3.1——1.2

3.2 对于无限深势阱中运动的粒子（见图 3-1）证明



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

并证明当 $n\to\infty$ 时上述结果与经典结论一致。

解：写出归一化波函数：

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \tag{1}$$

先计算坐标平均值：

$$\bar{x} = \int_0^a |\Psi|^2 x dx = \int_0^a \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a} x dx = \frac{1}{a}\int_0^a \left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right) x dx$$

利用公式：

$$\int x\sin px dx = -\frac{x\cos px}{p} + \frac{\sin px}{p^2} \tag{2}$$

得 $$\int x\cos px dx = -\frac{x\sin px}{p} + \frac{\cos px}{p^2} \tag{3}$$

$$\bar{x} = \frac{1}{a}\left|\frac{x^2}{2} - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)x\sin\frac{2n\pi x}{a} - \left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2\cos\frac{2n\pi x}{a}\right|_0^a = \frac{a}{2}$$

计算均方根值用 $\overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} - (\bar{x})^2$，$\bar{x}$ 以知，可计算 $\overline{x^2}$

$$\overline{x^2} = \int_0^a |\Psi|^2 x^2 dx = \int \frac{2}{a}x^2\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx = \frac{1}{a}\int_0^a x^2\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right) dx$$

利用公式 $$\int x^2\cos px dx = \frac{1}{p}x^2\sin px + \frac{2}{p^2}x\cos px - \frac{1}{p^3}\sin px \tag{5}$$

$$\overline{x^2}=\frac{1}{a}\left|\frac{1}{3}x^2-\left[\frac{a}{2n\pi}x^2-\left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2\right]\sin\frac{2n\pi x}{a}-\left(\frac{a}{2n\pi}\right)^2\cdot 2x\cos\frac{2n\pi x}{a}\right|_0^a=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}-\left(\overline{x}\right)^2=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}-\left(\frac{a}{2}\right)^2=\frac{a^2}{12}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2} \qquad (6)$$

在经典力学的一维无限深势阱问题中，因粒子局限在（0，a）范围中运动，各点的几率密度看作相同，由于总几率是 1，几率密度$\omega=\frac{1}{a}$。

$$\overline{x}=\int_0^a \omega x dx=\int_0^a \frac{1}{a}x dx=\frac{a}{2}\ ,\qquad \overline{x}^2=\int_0^a \frac{1}{a}x^2 dx=\frac{a^2}{3}\ ,\qquad \overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}-\left(\overline{x}\right)^2=\frac{a^2}{3}-\left(\frac{a}{2}\right)^2$$

故当$n\to\infty$时二者相一致。

3.3）设粒子处在一维无限深方势阱中，

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

证明处于定态$\psi_n(x)$的粒子

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

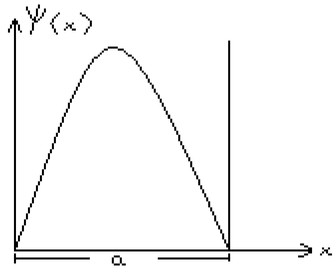
当$n\to\infty$时，量子力学的结果与经典力学结果一致。

3.3 设粒子处于无限深势阱中，状态用波函数$\psi(x)=Ax(a-x)$描述，$A=\sqrt{\frac{30}{a^5}}$是归一化常数，求

（1）粒子取不同能量几率分布。（2）能量平均值及涨落。

(解)在物理意义上，这是一种能量的非本征态，就是说体系在这种态上时，它的能量是不确定的，薛定谔方程是能量的本征方程，波函数不会满足薛氏方程式。但我们知道势阱中的粒子满足边界条件的解是：

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad (n=1,2,3,\quad \ldots\ldots)$$



这种解是能量本征态，相应的能量$E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

按叠加原理非本征态可用本征函数谱展开：

（1）$\psi(x)=\sum c_n\psi_n(x)=\sum_n c_n\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad (1)$

$$\boldsymbol{c_n=\int_0^a \psi(x)\psi_n^*(x)dx=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\int_0^a x(a-x)\sin\frac{n\pi x}{a}dx}\qquad (2)$$

利用积分公式：

$$\begin{cases}\int x\sin px dx=\frac{-x\cos px}{p}+\frac{\sin px}{p^2}\\[2ex] \int x^2\sin px dx=(\frac{2}{p^2}-\frac{x^2}{p})\cos px+\frac{2x}{p^2}\sin px\end{cases}$$

于（2）式，可求得：$c_n=\frac{2\sqrt{60}}{\pi^3n^3}[1-(-1)^n]\qquad (3)$

此式只有为奇数时才不为0，故只有量子数奇数的态

$$\boldsymbol{\psi(x)=\frac{1}{\pi^3}\sqrt{\frac{1920}{a}}\{\frac{\sin\frac{\pi x}{a}}{1^3}+\frac{\sin\frac{3\pi x}{a}}{3^3}+\ldots\ldots+\frac{\sin\frac{(2k-1)\pi x}{a}}{(2k-1)^3}+\ldots\ldots\}}\qquad (4)$$

仍是归一化的，故粒子具有能级 $\boldsymbol{E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}}$ 的几率是

$$\boldsymbol{c_n^* c_n = (\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3 n^3})^2 = \frac{960}{\pi^6 n^6}} \qquad (5)$$

（2）能量的平均值可以按照已知几率分布的公式计算：

$$\boldsymbol{\overline{E} = \sum_n c_n^* c_n \cdot E_n = \sum_n \frac{960}{\pi^6 n^6} \cdot \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} = \frac{960\hbar^2}{2m\pi^4 a^2}\sum_n \frac{1}{n^4} \quad \text{（n 为奇数）} \qquad (6)$$

根据福利衰级数可计算 $\sum_n \frac{1}{n^4}$(n 奇) 有几种方法，例如：

$$y(x) = x^2(3\pi - 2|x|) = \frac{\pi^3}{2} - \frac{48}{\pi}\sum_n \frac{\cos(2n-1)x}{(2n-1)^4} \qquad (-\pi < x < \pi)$$

上式中令 *x=0* 立刻得

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = 1 + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \frac{1}{7^4} \ldots\ldots = \frac{\pi^4}{96} \qquad (7)$$

代(6)式得 $\overline{E} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$

另一方法是直接依据题给的能量非本征态用积分法求平均值:

$$\boldsymbol{\overline{E} = \int_0^A \psi^* \hat{H}\psi dx = A^2\int_0^a (ax - x^2)(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2})(ax - x^2)dx}$$

$$\boldsymbol{= -\frac{30}{a^5} \cdot \frac{\hbar}{2m}\int_0^a -2(ax - x^2)dx = \frac{5\hbar^2}{ma^2}}$$

能够这样的原因是厄米算符.

(3)能量的涨落指能量的不准度 $\boldsymbol{\delta E = \sqrt{\overline{E^2} - (\overline{E})^2}}$ 现需求能量平方的平均值,这可利用前半题结果来计算.

$$\overline{E^2} = \sum_n c_n^* c_n E_n^2 = \sum_n \frac{960}{\pi^6 n^6} \cdot \frac{n^4\pi^4\hbar^4}{4m^2a^4} = \frac{240\hbar^4}{\pi^2 m^2 a^4}\sum_{n奇}\frac{1}{n^2}$$

但 $\sum_{n奇}\frac{1}{n^2} = \sum_{k=2}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}$

关于此求和式 $\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2} = 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2}$ 也用福利衰级数

$$\boldsymbol{y(x) = x = \frac{4l}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k-1}}{(2k-1)^2}\sin\frac{(2k-1)\pi x}{l}}$$

（展开区间 $-\frac{l}{2} < x < \frac{l}{2}$）此式中可取 $l = 1$

代入 $x=\frac{1}{2}$ 得 $\frac{\pi^2}{8}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k-1}}{(2k-1)^2}\sin(2k-1)\frac{\pi}{2}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}$

$\overline{E^2}=\frac{30\hbar^4}{m^2a^4}$， $\delta E=\sqrt{\frac{30\hbar^4}{m^2a^4}-\frac{25\hbar^4}{m^2a^4}}=\frac{\sqrt{5}\hbar^2}{ma^2}$

（补白）：本题若直接用积分求要利用厄米性：why?

$$\int\psi^*\hat{H}^2\psi dx=\int(\hat{H}\psi)^*(\hat{H}\psi)dx$$

3.4 没有答案

3.5 一维无限深势阱中求处于 $\psi_n(x)$ 态的粒子的动量分布几率密度 $|\varphi(p)|^2$。

（解）因为 $\boldsymbol{\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}}$ 是已知的，所以要求动量分布的几率密度，先要求动量波函数，

这可利用福利衰变换的一维公式: $\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}e^{-ipx/\hbar}\sin\frac{n\pi x}{a}dx$

利用不定积分公式 $\int e^{ax}\sin pxdx=\frac{a\sin px-p\cos px}{a^2+p^2}e^{ax}$

用于前一式得： $\boldsymbol{\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\cdot\frac{-\frac{ip}{\hbar}\sin\frac{n\pi x}{a}-\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi x}{a}}{(\frac{n\pi}{a})^2-(\frac{p}{\hbar})^2}e^{-ipx/\hbar}\Big|_0^a}$

$$=\frac{2n\sqrt{a\pi\hbar^8}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}\{\frac{-1+(-1)^ne^{\frac{ipa}{\hbar}}}{2}\}$$

$$=\frac{-2n\sqrt{a\pi\hbar^3}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}e^{\frac{ipa}{2\hbar}}\cos\frac{pa}{2\hbar}\qquad\text{(n 奇数)}$$

或者 $=\frac{-2ni\sqrt{a\pi\hbar^2}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}e^{\frac{ipa}{2\hbar}}\sin\frac{pa}{2\hbar}$， (n 偶数)

动量几率密度分别是

$\frac{4n^2a\pi\hbar^2}{(a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2)^2}\cos^2\frac{pa}{2\hbar}$， （n 奇数） $\frac{4n^2a\pi\hbar^2}{(a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2)^2}\sin^2\frac{pa}{2\hbar}$， (n 偶数)

3.5 设粒子处在一维无限深方势阱中，

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

处于基态 $(n=1)$，求粒子的动量分布。

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

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

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

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 $0<E<V_2$，

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

当 $x\to\pm\infty$ 时，$\psi\to 0$，故有

$$
\psi=\begin{cases}
A_1e^{k_1x}, & x<0, \quad k_1=\sqrt{2m(V_1-E)}/\hbar \\
A\sin(kx+\delta), & 0<x<a, \quad k=\sqrt{2mE}/\hbar \quad (\delta<\pi) \\
A_2e^{-k_2x}, & a<x, \quad k_2=\sqrt{2m(V_2-E)}/\hbar
\end{cases}
$$

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

$$k_1=k\,ctg\delta, \qquad k_2=-k\,ctg(ka+\delta) \qquad (1)$$

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

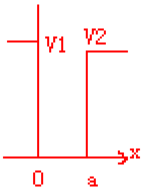
时才有束缚态（若$V_1=V_2=V$，则无论V和a的值如何，至少总有一个能级）

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

3.6 试求在不对称势阱中粒子的能级。



[解] （甲法）：根据波函数标准条件，设定各区间的波函数如下：

(x<0 区)： $\Psi = Ae^{k_1 x}$ （1）

（0<x<a 区）： $\Psi = Be^{ik_2 x} + Ce^{-ik_2 x}$ （2）

（x>a 区）： $\Psi = De^{-k_3 x}$ （3）

但 $k_1 \equiv \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar$ $k_2 \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$

$k_3 \equiv \sqrt{2m(V_2 - E)}/\hbar$

写出在连接点 x=0 处连续条件

$$\begin{cases} A = B + C & (4) \\ k_1 A = ik_2(B - C) & (5) \end{cases}$$

x=a 处连续条件

$$\begin{cases} Be^{ik_2 a} + Ce^{-ik_2 a} = De^{-k_3 a} & (6) \\ Be^{ik_2 a} - Ce^{-ik_2 a} = \dfrac{ik_3}{k_2} De^{-k_3 a} & (7) \end{cases}$$

（4）（5）二式相除得

$$\frac{k_1}{ik_2} = \frac{B - C}{B + C}$$

（6）（7）二式相除得

$$\frac{ik_3}{k_2} = \frac{Be^{ik_2 a} - Ce^{-ik_2 a}}{Be^{ik_2 a} + Ce^{-ik_2 a}}$$

从这两式间可消去 B，C，得到一个 $k_1 k_2 k_3$ 间的关系

$$\frac{ik_3}{k_2} = \frac{(k_1 + ik_2)e^{ik_2 a} - (-k_1 + ik_2)e^{-ik_2 a}}{(k_1 + ik_2)e^{ik_2 a} + (-k_1 + ik_2)e^{-ik_2 a}}$$

$$=\frac{k_1\cos k_2a-k_2\sin k_2a}{i(k_1\sin k_2a+k_2\cos k_2a)}$$

解出tgk_2a，得

$$tgk_2a=\frac{k_2(k_1+k_2)}{k_2^{\ 2}-k_1k_2}+n\pi(n=0,1,2,\ldots)\qquad(8)$$

最后一式用 E 表示时，就是能量得量子化条件：

$$tg\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a=\frac{\sqrt{E}\left(\sqrt{V_1-E}+\sqrt{V_2-E}\right)}{E-\sqrt{(V_1-E)(V_2-E)}}$$

（乙法）在 0<x<a 区间中波函数表示为

$$\Psi(x)=B\sin(k_2x+\delta)\qquad(2)'$$

现在和前一法相同写出边界条件：

（在 x=0 处） $A=B\sin\delta$ (9)

$$k_1A=k_2B\cos\delta\qquad(10)$$

(在 x=a 处) $B\sin(k_2a+\delta)=De^{-k_3a}$ (11)

$$-k_2B\cos(k_2a+\delta)=k_2De^{-k_3a}\qquad(12)$$

（9）（10）相除得

$$tg\delta=\frac{k_2}{k_1}=\sqrt{\frac{E}{V_1-E}}\qquad(13)$$

（11）（12）相除得

$$tg(k_2a+\delta)=-\frac{k_2}{k_3}=-\sqrt{\frac{E}{V_2-E}}\qquad(14)$$

写出（13）（14）的反正切关系式，得到：

$$\delta=tg^{-1}\sqrt{\frac{E}{V_1-E}}+m\pi$$

$$k_2a+\delta=tg^{-1}-\sqrt{\frac{E}{V_1-E}}+n\pi$$

$$k_2a=p\pi-tg^{-1}\sqrt{\frac{E}{V_1-E}}-tg^{-1}\sqrt{\frac{E}{V_2-E}}$$

或 $$k_2a=p\pi-\sin^{-1}\sqrt{\frac{E}{V_1}}-\sin^{-1}\sqrt{\frac{E}{V_2}}$$

前述两法的结果形式不同，作为一种检验，可以用下述方法来统一。试将第二法所得的量子化条件，

等号左右方取其正切：

$$\text{左方}\quad tgk_2a = tg\left(p\pi - tg^{-1}\sqrt{\frac{E}{V_1-E}} - tg^{-1}\sqrt{\frac{E}{V_2-E}}\right)$$

$$= -\frac{\sqrt{\frac{E}{V_1-E}}+\sqrt{\frac{E}{V_2-E}}}{E}$$

$$= \frac{\sqrt{E}\left(\sqrt{V_1-E}+\sqrt{V_2-E}\right)}{E-\sqrt{(V_1-E)(V_2-E)}}$$

此结果与第一法相同。

3.7——1.3　3.8——1.4　 3.9——1.5

3.10 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

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

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

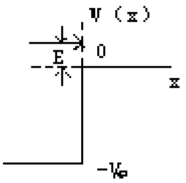
将k_1,k_2代入运算，可得

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

3.11’ 考虑粒子$(E\langle 0)$在下列势阱壁（ x ＝ 0 ）处的反射系数。

（解）本题中设想粒子从左侧入射。

在（x〈0〉区中有入射反射波



$$\Psi_1(x)=Ae^{ih_1x}+Be^{-ik_1x} \tag{1}$$

在（x>0 区）中仅有透射波

$$\Psi_2(x)=Ce^{ik_2x} \tag{2}$$

但 $k_1=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$ $\qquad k_2=\sqrt{2mE}/\hbar$

考虑在原点 0（x=0）处波函数Ψ（x）和一阶倒数Ψ′（x）的连接性，有：

$$\Psi_1(0)=\Psi_2(0) \quad 即 \quad A+B=C \tag{3}$$

$$\Psi_1'(0)=\Psi_2'(0) \quad 即 \quad (A+B)ik_1=Cik_2 \tag{4}$$

因按题意要计算反射系数 R，

$$R=\frac{反射几率波流密度|J_B|}{入射几率波密度|J_A|}$$

$$J_A=\frac{\hbar i}{2m}\left\{e^{ik_1x}\frac{d}{dx}\left(e^{-ik_1x}\right)-e^{-ik_1x}\frac{d}{dx}\left(e^{ik_1x}\right)\right\}|A|^2$$

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

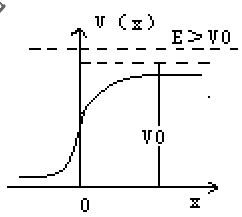
同理 $$J_B=\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2 \tag{5}$$

$R=\dfrac{|J_B|}{|J_A|}=\dfrac{|B|^2}{|A|^2}$，若求比值，可从（3）（4）消去C，得到：

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left|\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right|^2=\left(\frac{\sqrt{E+V_0}-\sqrt{E}}{\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E}}\right)^2$$

3.11 试证明对于任意势垒，粒子的反射系数和透射系数满足 R＋T＝1 。

（解）任意的势垒是曲线形的，如果V（x）没有给定，则Ψ（x）不能决定，因而无法计算各种几率流密度。但如果附图所示V（x）满足二点特性：



(1) $\lim\limits_{x\to\infty}V(x)=V_0$

(2) $\lim\limits_{x\to\infty}V(x)=0$

我们近似地认为当 $x\to\infty$ 时波函数的解是

$$\Psi(x)=Ce^{ik_2x}\left(k_2=\sqrt{2m(E-v_0)}/\hbar\right)$$

$x\to-\infty$ 时波函数的解是

$$\Psi(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}\left(k_1=\sqrt{2mE}/\hbar\right)$$

但由于粒子几率流的守恒（V（x）是实数函数）：在数量上入射几率流密度 J_A 应等于反射的 J_B 和

透射的 J_C 的和，即：

$$|J_A| = |J_B| + |J_C| \tag{1}$$

仿前题的算法，不必重复就可以写出：

$$\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2 = \frac{\hbar k_1}{m}|B|^2 + \frac{\hbar k_2}{m}|C|^2 \tag{2}$$

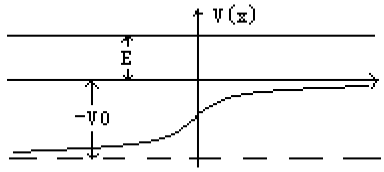
这里的（1）（2）是等效的，将（1）遍除 $|J_1|$ 得：

$$1 = \left|\frac{J_B}{J_A}\right| + \left|\frac{J_C}{J_A}\right| \quad \text{即} \quad 1 = T + R \quad \text{得证}$$

将（2）式遍除 $\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2$ 得另一种形式：

$$1 = \frac{|B|^2}{|A|^2} + \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2}$$

3.12 设 $V(x) = -\frac{V_0}{e^{\frac{x}{a}}+1}$（见附图），求反射系数 k。



（解）设能量是正值 $E>0$，要确定反射系数，我们需要将势场看成一个势垒，同时要将波函数分解成入射波和反射波两部分。为此，首先对粒子的薛氏方程式进行变换。

（1）自变量的变换：试令

$$\frac{-1}{e^{\frac{x}{a}}} = -e^{-\frac{x}{a}} = \xi \tag{1}$$

则有 $\frac{d\xi}{dx} = -\frac{\xi}{a} \cdot \frac{d\Psi}{dx} = \frac{d\xi}{dx}\cdot\frac{d\Psi}{d\xi} = -\frac{\xi}{a}\cdot\frac{d\Psi}{d\xi}$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi}\left(-\frac{\xi}{a}\frac{d\Psi}{d\xi}\right) = -\frac{\xi}{a}\left(-\frac{\xi}{a}\cdot\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \frac{1}{a}\frac{d\Psi}{d\xi}\right) = \frac{\xi^2}{a^2}\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \frac{\xi}{a^2}\frac{d\Psi}{d\xi}$$

代入薛氏方程式：$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{V_0}{e^{\frac{x}{a}}+1}\right)\Psi = 0$ （2）

得：$\xi^2\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \xi\frac{d\Psi}{d\xi} + \frac{2ma^2}{\hbar^2}\left(\mathrm{E} + \frac{V_0\xi}{\xi-1}\right)\Psi = 0$

令 $k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$，$k_1 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$

$$\xi^2\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\xi\frac{d\Psi}{d\xi}+\left(k_0^2+\frac{k_1^2\xi}{\xi-1}\right)a^2\xi=0 \qquad (3)$$

（2）波函数变换：为使微分方程式得到级数解，考察 $x\to\infty$ 时的情形，由（1）可知这相当于 $\xi=0$ 的情形，方程式（2）简化成：

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+k_0^2\Psi=0$$

它的特解 e^{ik_0x} 是或 e^{-ik_0x}，根据自变量变换式(1)，这相当于：

$$\xi^{ik_0a} \quad 或 \quad \xi^{-ik_0a} \qquad (4)$$

可设

$$\Psi（\xi）=\xi^{-ik_0a}\varphi（\xi） \qquad (5)$$

则有：

$$\frac{d\Psi}{d\xi}=\xi^{-ik_0a}\frac{d\varphi}{d\xi}-ik_0a\xi^{-ik_0a-1}\varphi；$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}=\xi^{-ik_0a}\frac{d^2\varphi}{d\xi^2}-2ik_0a\xi^{-ik_0a-1}\frac{d\varphi}{d\xi}+ik_0a（1+ik_0a）\xi^{-ik_0a-2}\varphi$$

代入（3），约去公有的 ξ^{-ik_0a}，整理后得：

$$\xi（\xi-1）\frac{d^2\varphi}{d\xi^2}+(1-2ik_0a)（\xi-1）\frac{d\varphi}{d\xi}+k_1^2a^2\varphi=0 \qquad (6)$$

该式属于“超几何微分方程式”即 Gauss 方程式，它的一般复数形式是：

$$z（z-1）\frac{d^2F}{dz^2}+[（\alpha+\beta+1）z-\gamma]\frac{dF}{dz}+\alpha\beta F=0 \qquad (7)$$

此方程式的一个特解记作

$$F（\alpha，\beta，\gamma；z）=\sum\frac{\alpha（\alpha+1）\cdots（\alpha+n-1）\beta\cdots（\beta+n-1）}{\gamma（\gamma+1）\cdots（\gamma+n-1）n!}z^n$$

将（7）与（6）对比后，就能决定 $\alpha，\beta，\gamma$ 所相应的值：（方程式（7）与 14 题的方程式（16）不同）

$$\alpha+\beta+1=1-2ik_0a$$
$$\alpha\beta=k_1^2a^2$$
$$\gamma=1-2ik_0a$$

从前两方程式能决定 α，β，得

$$\alpha=(\sqrt{k_0^2+k_1^2}-k_0）ia\equiv（k_2-k_0）ia$$
$$\beta=-(\sqrt{k_0^2+k_1^2}+k_0）ia\equiv-（k_2+k_0）ia$$

于是得到方程式（3）的特解φ（ξ）以及波函数Ψ（ξ）的解如下：

$$\Psi(\xi)=\xi^{-ik_0a}\varphi(\xi)=\xi^{-ik_0a}F\{(k_2-k_0)ia,-(k_2+k_0)ia,1-2ik_0a,\ \xi\} \qquad (8)$$

这个解不能表达入射波和反射波的特点，仍需加以变换，为此利用超几何函数有关的一个恒等式，将自变量ε转变为$\frac{1}{z}$

$$F(\alpha,\ \beta,\ \gamma;\ z)=\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}(-\frac{1}{z})^{\alpha}F\{\alpha,\ \alpha+1-\gamma,\ \alpha+1-\beta,\frac{1}{z}\}$$

$$+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}(-\frac{1}{z})^{\beta}F\{\beta,\ \beta+1-\gamma,\ \beta+1-\alpha,\frac{1}{z}\} \qquad (10)$$

将这个关系用于公式（8）得到：

$$\Psi(\xi)=\xi^{-ik_0a}\{\frac{\Gamma(1-2ik_0a)\Gamma(-2ik_0a)}{\Gamma(-(k_2+k_0)ia)\Gamma(-ik_0a-ik_2a)}$$

$$(-\xi)^{(k_0-k_2)ia}F\{(k_2-k_0)ia\ (k_2+k_0)ia,1+2k_2ai;\frac{1}{\xi}\}$$

$$+\frac{\Gamma(1-2ik_0a)\Gamma(2ik_2a)}{\Gamma((k_2-k_0)ia)\Gamma(1-ik_0a+ik_2a)}$$

$$(-\xi)^{(k_0+k_2)ia}F\{-(k_1+k_0)ia,(k_0-k_2)ia,1-2k_2ai;\frac{1}{\xi}\}$$

再根据（1）式，见个前式中ξ更换成$-e^{-\frac{x}{a}}$，得

$$\Psi(x)=(-1)^{-ik_0a}[\{\frac{\Gamma(1-2ik_0a)\Gamma(-2ik_0a)}{\Gamma(-(k_2+k_0)ia)\Gamma(1-ik_0a-ik_2a)}$$

$$e^{ik_2x}\cdot F\{(k_2-k_1)ia,\ \ (k_2+k_0)ia,1+2k_2ai,-e^{\frac{x}{a}}\}$$

$$+\frac{\Gamma(1-2ik_0a)\Gamma(2ik_2a)}{\Gamma((k_2-k_0)ia)\Gamma(1-ik_0a+ik_2a)}e^{-ik_2a}$$

$$F\{-(k_1+k_0)ia,\ \ (k_0-k_2)ia,1-2k_2ia,-e^{\frac{x}{a}}\}]$$

这是用坐标x表示的，适用于势场内各点的波函数，现在求$x\to-\infty$（即$\xi\to-\infty$）的渐进解，对于曲线形势垒来说，反射系数常在垒壁很远处进行计算，本题的情形，垒壁在$x=0$处，但若令$x\to-\infty$，则$-e^{\frac{x}{a}}\to 0$。因此（11）式中超几何函数 F 只留下常数项，前式成为

$$\Psi(x)\sim C_1e^{ik_2x}+C_0e^{-ik_2x}$$

第一项代表入射波，第二项反射波、反射系数

$$R=\left|\frac{C_2}{C_1}\right|^2，但C_1=\frac{\Gamma（1-2ik_0a）\Gamma（-2ik_0a）}{\Gamma（（k_2-k_0）ia）\Gamma（1-ik_0a-ik_2a）}$$

$$C_2=\frac{\Gamma（1-2ik_0a）\Gamma（2ik_2a）}{\Gamma（（k_2-k_0）ia）\Gamma（1-ik_0a+ik_2a）}$$

利用伽马函数恒等式

$$\Gamma（x+1）=x\Gamma（x） \qquad \Gamma（x）\Gamma（1-x）=\frac{\pi}{\sin\pi x}$$

$$\sin ix=ishx$$

$$R=\left|\frac{C_2}{C_1}\right|^2=\frac{sh\pi（k_0-k_2）a}{sh\pi（k_0+k_2）a}$$

3.13——1.14　3.14——1.13　3.15——1.6，2.7

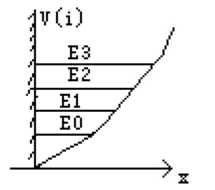
3.16 设粒子在下列势阱中运动，$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,\\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & x>0.\end{cases}$ 求粒子能级。

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

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

3.16 设质量为m的粒子在下述势阱中运动：

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



求粒子的能级。

（解）本题是在半区 $x\in(0,\infty)$ 中的一维谐振子，它的薛定谔方程式

在 x ＞ 0 的半区内与普通谐振子的相同，在负半区 $(x\langle0)$ 中 $\psi(x)=0$。

一般谐振子的函数 ψ（x）满足薛氏方程式：

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

作自变量变换　$\xi = \alpha x$　（$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$）

并将波函数变换：$\Psi(x) = e^{-\frac{\xi}{2}} u(\xi)$

得 u 的微分方程：$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - 2\xi\frac{du}{d\xi} + (\lambda - 1)u = 0 \qquad (2)$$

但 $$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (3)$$

设（2）的解是级数：$$u(\xi) = \xi^2(a_0 + a_1\xi + \ldots a_n\xi^n + \ldots) \qquad (4)$$

将（4）代入（2）知道，指标 s 的值是 s=1 或 s=0。

此外又得到相同的二个未定系数 a_n，a_{n+2} 之间的关系有二种：

s=0 时，$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)}a_n \qquad (5)$$

s=1 时，$$a_{n+2} = \frac{2n+3-\lambda}{(n+3)(n+2)}a_n \qquad (6)$$

为了使波函数ψ（x）满足标准条件，级数（4）必需中断。此外由于本题情形中应满足边界条件（波函数连续性），x=0 时ψ（x）=0，即 u（0）=0。因而必需取 s=1，它的递推式是（6），因此如果级数（4）中断，而（4）的最高幂是 n=2m，在（4）式中取 s=1，$a_0 \neq 0$，$a_1 = 0$，则在（6）式中取 n 为最高幂时：

$$a_{n+2} = 0 = \frac{2n+3-\lambda}{(n+3)(n+2)}a_n, 2n+3-\lambda = 0$$

由（3）得

$$E = \lambda \cdot \frac{\hbar\omega}{2} = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = \left(2m + \frac{3}{2}\right)h\omega \qquad (7)$$

式中的 m=0,1,2,3,4,……

（7）式即我们需求的粒子的能级。

本题的波函数是 $$\Psi(x) = \begin{cases} 0, & (x<0) \\ A_{2m+1}e^{\frac{-\xi^2}{2}}H_{2m+1}(\xi) \end{cases}$$

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

$$A_{2m+1} = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^{2m+1}(2m+1)!}}$$

是归一化常数，$H_{2m+1}(\xi)$是奇阶数厄米多项式。

3.17 设在一维无限深势阱中运动的粒子的状态用：

$$\Psi(x)=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}$$

描述，求粒子能量的可能值及相应的几率。

（解）（甲法）一维无限深势阱的本征态波函数是

$$\Psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \tag{1}$$

题给波函数可用本征函数展开：

$$\Psi(x)=\frac{2}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\left(1+\cos\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left\{2\sin\frac{\pi x}{a}+2\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left\{2\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}-\sin\frac{\pi x}{a}\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left\{\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}+\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}$$

$$=C_1\Psi_1(x)+C_2\Psi_3(x)$$

因此$\Psi(x)$ 是非本征态，它可以有二种本征态，处在$\Psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}$

态上的几率是$\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$。这时能量是$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，处在$\Psi_2(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}$

态上的几率是$\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$，这时能量是$E_2=\frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$。

（乙法）可以运用叠加原理的展开式的系数的决定法来求 C，其余同。按一般原理，将已知函数 $\Psi(x)$ 展开成算符$\hat{F}$ 的分立本 数谱$\Psi_m(x)$时，有

$$\Psi(x)=\sum_m C_m\Psi_m(x)\qquad C_m=\int\Psi_m^*(x)\Psi(x)dx$$

在本题中，有

$$C_m=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{m\pi x}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}dx$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a\sin\frac{m\pi x}{a}\left(\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}\right)dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}a}\{\frac{a}{(m-1)\pi}\sin\frac{(m-1)\pi x}{a}-\frac{a}{(m+1)\pi}\sin\frac{(m+1)\pi x}{a}$$

$$+\frac{a}{(n-3)\pi}\sin\frac{(m-3)\pi x}{a}-\frac{a}{(m+3)\pi}\sin\frac{(m+3)\pi x}{a}\}$$

$$=\frac{a}{\sqrt{2}a}\{\frac{\sin(m-1)\pi}{(m-1)\pi}-\frac{\sin(m+1)\pi}{(m+1)\pi}+\frac{\sin(m-3)\pi}{(m-3)\pi}-\frac{\sin(m+3)\pi}{(m+3)\pi}\}$$

按洛比达法则最后一式只有 $m-1\to 0$，$m-3\to 0$ 有贡献相当于 m=1，或 3，$C_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$，$C_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$，其余与甲法同。

3.18 写出动量表象中谐振子的薛定谔方程式，并求出动量几率分布。

（解）（一）主要方法是利用一维动量波函数的变换式：

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)e^{-ipx/\hbar}dx \quad (1)$$

先写出坐标表象的薛定谔方程式：

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi_n=E_n\psi_n \qquad (2)$$

遍乘 $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx/\hbar}$，再对坐标求积分，得到一种关系式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2}e^{-ipx/\hbar}dx+\frac{m\omega^2}{2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-ipx/\hbar}\psi_n(x)dx$$

$$=E_n\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\psi_n(x)e^{-ipx/\hbar}dx$$

利用分部积分，并使用 $\lim\limits_{x\to\infty}\psi_n(x)\to 0$ $\quad\lim\limits_{x\to\infty}\frac{d\psi_n(x)}{dx}\to 0$ 的边界条件，分别计算（3）各项：

$$\int_{-\infty}^{\Re}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2}e^{-ipx/h}dx=\int\frac{d}{dx}[\frac{d\psi_n(x)}{dx}]e^{-ipx/h}dx$$

$$=\frac{d\psi_n}{dx}e^{-ipx/h}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\frac{ip}{\hbar}\int\frac{d\psi_n}{dx}e^{-ipx/h}dx$$

$$=\frac{ip}{\hbar}\int dx\frac{d\psi}{dx}e^{-ipx/h}$$

$$=\frac{ip}{\hbar}\psi_n e^{-ipx/h}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\frac{ip}{\hbar}(-\frac{ip}{\hbar})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n e^{-ipx/h}dx$$

$$=-\frac{p^2}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)e^{-ipx/h}dx$$

$$=-\frac{p^2}{\hbar^2}\sqrt{2\pi\hbar}\varphi(p) \qquad (4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-ipx/h}\psi_n(x)dx=(\hbar i)^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/h}\psi_n(x)dx$$

$$=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\varphi(p)\sqrt{2\pi\hbar} \qquad (5)$$

将（4）（5）代入（3）再加整理后，得到动量表象的薛定谔方程式：

$$\frac{1}{2m}p^2\varphi_n(p)-\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dp^2}\varphi_n(p)=E_n\varphi_n(p) \qquad (6)$$

最后一式已将偏导数 $\frac{\partial^2}{\partial p^2}$ 改成导数 $\frac{d^2}{dp^2}$，（6）和（2）的形式相似，因此如果在（2）式中作以下替代，就得到（6）式： $\psi_n(x)\to\varphi_n(p)$ $\qquad \frac{h}{i}\cdot\frac{d}{dx}\to p$ $\qquad x\to hi\frac{d}{dp}$

（二）动量波函数的计算

根据动量表象的薛定谔方程式（6），先设法将（6）变形，形成为和坐标表象薛定谔方程形式一样，首先使二阶导数形式相同，将（6）遍除$m^2\omega^2$得：

$$-\frac{\hbar}{2m}\cdot\frac{d^2\varphi}{dp^2}+\frac{p^2}{2m^3\omega^2}\varphi=\frac{E_n}{m^2\omega^2}\varphi \qquad (7)$$

和（2）比较系数，发现若将动量表象式（3）中$m^2\omega$换成$m^4\omega^2=\frac{1}{\omega'^2}$，（7）式变成：

$$-\frac{\hbar}{2m}\cdot\frac{d^2\varphi}{dp^2}+\frac{m\omega'^2p^2}{2}\varphi=E'_N\varphi \qquad (8)$$

但 $E'_N=\frac{E_n}{m^2\omega^2}=m^2\omega'^2E_n$ ，这样（8）和（2）形式全同，它们的解的形式也同，但（2）的解是：

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{-\frac{a^2x^2}{2}}H_n(ax) \qquad (9)$$

因此（8）或（7）的解是：

$$\varphi_n(p)=\sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}}e^{-\frac{\beta^2 p^2}{2}}H_n(\beta p) \qquad (10)$$

但 $\boldsymbol{\beta}=\sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}}=\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}$

动量的分布，即动量几率密度是：

$$\left|\varphi_n(p)\right|^2=\frac{\beta}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}e^{-\beta^2 p^2}H_n^2(\beta p) \qquad (11)$$

本题是第一章第 15 题的特例，又因为势能的形式很特殊，所以能用类似方法求解。假使换了别种形式的势能。常要用积分方程求解。

3.19——3.4

3.20　设粒子在周期场 $V(x)=V_0\cos bx$ 中运动,写出它在 p 表象中的薛定谔方程式.

解本题的性质只在于建立方程式,并不需要解这方程式,所以不要利用周期的定期,而需要第二章第 15 习题,本章第 10 习题类似的方法.

按第二章 15 题动量表象薛定谔方程式是:(一维情形)

$$\boldsymbol{i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\frac{p^2}{2m}\varphi+\int_{p'}G(p,p')\varphi(p',t)dp'}$$

但 $G(p,p')=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{x=-\infty}^{\infty}e^{i(p-p')x/\hbar}\cos bx dx$ (1)

因为是定态方程式第一式重写作

$$\frac{p^2}{2m}\varphi+\int_{p'}G(p,p')\varphi(p',t)dp'=E\varphi: \qquad (2)$$

展开(1)得到

$$\boldsymbol{G(p,p')=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{\infty}^{\infty}\frac{1}{2}(e^{i\frac{p-p'+b\hbar}{\hbar}x}+e^{i\frac{p-p'-b\hbar}{\hbar}x})dx}$$

利用常见的一种函数定义　$\delta(\lambda)=\frac{1}{2\pi}\int_{\infty}^{\infty}e^{i\lambda x}dx$

则前式直接表示成.

$$G(p,p')=\frac{V_0}{2}\left\{\delta(p-p'+b\hbar)+\delta(p-p'-b\hbar)\right\} \qquad (3)$$

代入(2)得　$\boldsymbol{\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\frac{V_0}{2}\int\left\{\delta(p-p'+b\hbar)+\delta(p-p'-b\hbar)\right\}}\varphi(p')dp'=E\varphi(p)$

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\frac{V_0}{2}\{\varphi(p+b\hbar)+\varphi(p-b\hbar)\}=E\varphi(p) \qquad (4)$$

另一法:前法所得的方程式不易求解,另一法与本章第 10 题类似,座标表象方程式是:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V_0\cos bx]\psi=0$$

遍乘以 $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx/\hbar}$,对 x 求定积分.

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}[\int_{\infty} e^{-ipx/\hbar}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx+\frac{2mE}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\psi dx-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\int_{\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\psi\cos bxdx]=0$$

按变换式 $\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\psi(x)e^{-ipx/\hbar}dx$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-ipx/\hbar}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx=\frac{-p^2}{\hbar^2}\varphi(p)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{2mE}{\hbar^2}\int e^{-ipx/\hbar}\psi dx=E\varphi(p)\bullet\frac{2m}{\hbar^2}$$

Microsoft 公式
3.0

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\Psi(x)\cos bxdx$$

$$=\sum_n(-1)^n\frac{1}{2n!}\int_{-\infty}^{\infty}x^{2n}e^{-ipx/\hbar}\Psi(x)dx$$

$$=\sum_n(-1)^n\frac{1}{2n!}(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})^{2n}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\Psi(x)dx$$

$$=\sqrt{2\pi\hbar}\cdot\sum_n(-1)^n\frac{1}{2n!}(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})^{2n}\varphi(p)$$

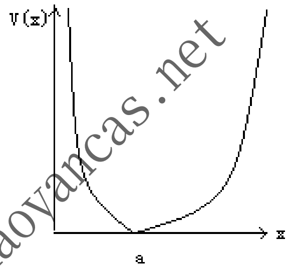
$$=\sqrt{2\pi\hbar}\cos(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})\varphi(p) \qquad (7)$$

（5）式（6）式的计算已在第 10 题证过，（7）式的算符 $\cos(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})$ 是级数算符 $\sum(-1)^n\frac{1}{2n!}(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})^n$

简写；得所求方程式：

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+V_0\cos(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})\cdot\varphi(p)=E\varphi(p) \qquad (8)$$

3.21 设势场（见附图）是：



$$V(x)=V_0(\frac{a}{x}-\frac{x}{a})^2,(a,x>0)$$

求粒子能级与波函数，证明其能级与谐振子相似。

（解）本题的解法是先将原来的薛定谔方程式变形，使其适合于用级数求解，从波函数符合标准条件的要求得出能量量子化条件，经变形后的薛氏方程式可以归属于合流超几何方程式类别，因而最后用合流超几何函数表示波函数。

（1）薛氏方程式变形：原方程式是：

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\{(E+2V_0)-V_0(\frac{x}{a})^2-V_0(\frac{a}{x})^2\}\Psi=0 \qquad (1)$$

作自变量变换 $x\to\xi$，但 $\xi=(\frac{x}{a})^2$， $\frac{d\xi}{dx}=\frac{2x}{a^2}=\frac{2}{a}\sqrt{\xi}$

将原有的一阶、二阶导数变形：

$$\frac{d\Psi}{dx}=\frac{d\xi}{dx}\frac{d\Psi}{d\xi}=\frac{2}{a}\sqrt{\xi}\frac{d\Psi}{d\xi}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}=\frac{d\xi}{dx}\cdot\frac{d}{d\xi}\frac{d\Psi}{dx}=\frac{4}{a^2}\xi\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\frac{2}{a^2}\frac{d\Psi}{d\xi}$$

将前两式代入（1），得：

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\frac{1}{2\xi}\frac{d\Psi}{d\xi}+\frac{2ma^2}{4\hbar^2}(-V_0-\frac{E+2V_0}{\xi}-\frac{V_0}{\xi^2})\Psi=0$$

用缩写文字：

$$k_0=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (2)$$

$$k_1=\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \qquad (3)$$

方程式变成：

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\frac{1}{2\xi}\cdot\frac{d\Psi}{d\xi}-(\frac{k_0^2+2k_1^2}{4\xi}-\frac{k_1^2}{4}-\frac{k_1^2}{4\xi})a^2\Psi=0 \qquad (4)$$

（2）波函数变换：微分方程式（4）不易求解，为了将因变量 Ψ 变换，先找寻（4）在 $x\to\infty$ 时的近似解，为此忽去（4）中 $\frac{1}{\xi},\frac{1}{\xi^2}$ 有关项

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}-\frac{k_1^2a^2}{4}\Psi=0 \qquad (5)$$

（5）的具有波函数标准条件的解是：$e^{-\frac{k_1 a\xi}{2}}$，可认为波函数Ψ（x）是此近似解与另一函数$f(\xi)$的积：

$$\Psi(\xi) = e^{-\frac{k_1 a\xi}{2}} f(\xi) \qquad (6)$$

求相应的一阶、二阶导数：

$$\frac{d\Psi}{d\xi} = \left(\frac{df}{d\xi} - \frac{k_1 a}{2} f\right) e^{-\frac{k_1 a\xi}{2}}$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2 f}{d\xi^2} - k_1 a \frac{df}{d\xi} + \frac{k_1^2 a^2}{4} f\right) e^{-\frac{k_1 a\xi}{2}}$$

将此二导数代入（4），消去共有的$e^{-\frac{k_1 a\xi}{2}}$，变形，并项后，得$f(\xi)$的微分方程：

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} + \left(\frac{1}{2\xi} - k_1 a\right)\frac{df}{d\xi} + \left(\frac{k_0^2 a^2 + 2k_1^2 a^2 - k_1 a}{4\xi} - \frac{k_1^2 a^2}{4\xi^2}\right) f = 0 \qquad (7)$$

（3）级数解和量子化条件：

设方程式（7）的幂级数解是：

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^{s+n} = a_0 \xi^s + a_1 \xi^{s+1} + \cdots + a_n \xi^{s+n} \cdots \qquad (8)$$

将（8）代入（7），集项整理，得：

$$[s(s-1) + \frac{s}{2} - \frac{k_1^2 a^2}{4}] a_0 \xi^{s-2} + \cdots$$

$$+\{[(s+n+2)(s+n+\frac{3}{2}) - \frac{k_1^2 a^2}{4}] a_{n+2}$$

$$+[\frac{k_0^2 a^2 + 2k_1^2 a^2 - k_1 a}{4} - k_1(s+n+1)] a_{n+1}\} \xi^{s+n}$$

$$+\cdots = 0$$

使最低幂和通项系数等于零，得到指标 s 的植和系数递推公式：

$$s = \frac{1}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{1 + 4k_1^2 a^2} \qquad (9)$$

$$a_{n+2} = \frac{k_1 a(s+n+1) - \frac{k_0^2 a^2 + 2k_1^2 a^2 - k_1 a}{4}}{(s+n+2)(s+n+\frac{3}{2}) - \frac{k_1^2 a^2}{4}} a_{n+1} \qquad (10)$$

先考察级数（8）的收敛性质，求其邻项系数比值的极限，由（10）可知

$$\lim_{n\to\infty}\left|\frac{a_{n+2}}{a_{n+1}}\right| = \frac{k_1 a}{n} \qquad (11)$$

但是这个值与指数函数$e^{k_1 a\xi} = \sum_n \frac{(k_1 a\xi)^n}{n!}$的相应的比值极限相同，因此级数$f(\xi)$收敛性质同于

$e^{k_1 a\xi}$，所以$\Psi(\xi)=e^{-\frac{k_1 a\xi}{2}}f(\xi)$性质同于

$$e^{k_1 a\xi-\frac{k_1 a\xi}{2}}=e^{\frac{k_1 a\xi}{2}} \qquad (12)$$

但该函数在$\xi\to\infty$时，有一端趋于发散，不适宜作波函数，但如果级数（8）中断而成多项式，则可以作为符合标准条件的波函数，从（10）可知若级数在第（$n+1$）项中断，则$a_{n+1}=0$，在（10）中将$n+1$换n，得中断条件：

$$k_1 a(s+n)-\frac{k_0^2a^2+2k_1^2a^2-k_1 a}{4}=0 \qquad (n=0,1,2,3\cdots)$$

利用式（3），前式改写成：

$$E_n=\frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}\{n+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\}-2V_0 \qquad (13)$$

因为n是整数，所以E_n（能级）是分立的。当a取极小的值时，前式中$\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}$可忽视。

$$E_n\sim\frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}\{n+\frac{3}{4}\}$$

这和一维谐振子相似。即使a不很小，（13）也代表等间隔能级，这也和一维谐振子能级类似。

<u>（4）波函数的计算：</u>

前已知道$f(\xi)$含有因式ξ^s，因此$f(\xi)$表示为：

$$f(\xi)=\xi^s F(\xi) \qquad (14)$$

为求$F(\xi)$所满足微分方程，可将（14）式代入$f(\xi)$的微分方程（7），容易看出：

$$\frac{df}{d\xi}=\xi^s\frac{dF}{d\xi}+s\xi^{s-1}F;$$

$$\frac{d^2f}{d\xi^2}=\xi^s\frac{d^2F}{d\xi^2}+2s\xi^{s-1}\frac{dF}{d\xi}+s(s-1)\xi^{s-2}F$$

将此一二阶导数连同（14）式代入（7）式，并项，遍除ξ^{s-1}，最后得：

$$\xi\frac{d^2F}{d\xi^2}+\{(2s+\frac{1}{2})-ak_1\xi\}\frac{dF}{d\xi}+\{\frac{k_0^2a^2+2k_1^2a^2-k_1 a}{4}-k_1 as\}F=0 \qquad (15)$$

将此式遍除$k_1 a$，变换自变量：

$$(ak_1\xi)\frac{d^2F}{d(ak_1\xi)^2}+\{(2s+\frac{1}{2})-ak_1\xi\}\frac{dF}{d(ak_1\xi)}+\{\frac{k_0^2a^2+2k_1^2a^2-k_1 a}{4k_1 a}-s\}F=0$$

（16）

这种方程式在形式上可归属于“合流超几何方程式”（Confluent hypergeometrie equation），后者的典型形式是：

$$x\frac{d^2F}{dx^2}+(\gamma-x)\frac{dF}{dx}-\alpha F=0 \tag{17}$$

合流超几何级数的特解叫“合流超几何级数”（或函数），特解有几种形式，用途多的一种特解是：

$$F(\alpha,\gamma,x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha\cdots(\alpha+n-1)x^n}{\gamma\cdots(\gamma+n-1)n!}$$

$$=1+\frac{\alpha}{\gamma}\frac{x}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{x^2}{2!}+\cdots\cdots \tag{18}$$

对照（16）和（17），我们可以将(15)式的解写作：

$$F(\xi)=F(s-\frac{k_0^2a^2+2k_1^2a^2-k_1a}{4k_1a},2s+\frac{1}{2};ak_1\xi) \tag{19}$$

根据（6）和（14）知道方程式（1）的解是

$$\Psi(x)=e^{-\frac{k_1a}{2}(\frac{x}{a})^2}\cdot(\frac{x}{a})^{2s}\cdot F(s-\frac{(k_0^2+2k_1^2)a-k_1}{4k_1},2s+\frac{1}{2};ak_1(\frac{x}{a})^2)$$

3.22——1.4，1.5　3.23——1.6　3.24——2.4　3.25——2.7　3.26——2.6　3.27——2.8，1.7

补充

3.5）设粒子处于半壁高的势场中

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

求粒子的能量本征值。求至少存在一条束缚能级的体积。

解：分区域写出 $s.eq$：

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

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

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

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

在 $x=a$ 处，波函数及其一级导数连续，得

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

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

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

若令 $$k'a=\xi, \qquad ka=\eta \quad (8)$$

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 $\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a \geq \pi/2$，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—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 $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx$，$\varepsilon \to 0^+$，得 ψ' 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
$$\psi(x) = \begin{cases} sh\,\beta x, & 0\leq x<a, \\ Ae^{-\beta x}, & x>a. \end{cases} \tag{7}$$

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

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$x\le 0$）。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 $$a\ge L/2 \tag{12}$$

即要求无限高势垒离开δ势阱较远（$a\ge L/2$）。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$\eta(1+\coth\eta)\ge 1$，所以只当$\frac{2mra}{\hbar^2}\ge 1$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

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

［7］设一谐振子处于基态，求它的$(\Delta x)^2,(\Delta p)^2$并验证测不准关系：

（解）$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x^2)} - \left(\overline{x}\right)^2$ 由对称性知道 $\overline{x} = 0, \overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2}$，同理 $\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} - \left(\overline{p}\right)^2$ 也由对称性知道 $\overline{p} = 0, \overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2}$ 对谐振子而言，应先写出归一化波函数：

$$\Psi_m(x) = A_m e^{-\frac{\alpha^2 x}{2}} \qquad \Psi_m(x) = A_m e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_m(\xi)$$

但 $$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \qquad A_m = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\, 2^m m!}} \tag{1}$$

于是 $$\overline{x^2} = \frac{1}{\alpha^3}\int_{x=-\infty}^{\infty} \left|A_m\right|^2 e^{-\xi^2} H_m^2(\xi)\xi^2 d\xi \tag{2}$$

为了计算这个积分，利用厄米多项式不同阶间的递推式：

$$\xi H_m(\xi) = \frac{1}{2}H_{m+1}(\xi) + mH_{m-1}(\xi) \tag{3}$$

此式作为已知的，不证。将前式遍乘 ξ，重复用公式

$$\xi^2 H_m(\xi) = \frac{1}{2}\xi H_{m+1}(\xi) + m\xi H_{m-1}(\xi)$$

$$= \frac{1}{2}\{\frac{1}{2}H_{m+2}(\xi) + (m+1)\ H_m(\xi)\}$$

$$+ m\{\frac{1}{2}H_m(\xi) + (m-1)\ H_{m-2}(\xi)\}$$

$$= \frac{1}{4}H_{m+2}(\xi) + (m+\frac{1}{2})\ H_m(\xi) + m(m-1)H_{m-2}(\xi) \tag{4}$$

将此式代入（2）

$$\overline{x^2} = \frac{1}{\alpha^3}\left|A_m\right|^2 \int_x \{e^{-\xi^2}[\frac{1}{4}H_m(\xi)H_{m+2}(\xi)\left(m+\frac{1}{2}\right)H_m^2(\xi) + m(m-1)H_m H_{m-2}]\}dx$$

$$= \frac{A_m^2}{4\alpha^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi)H_{m+2}(\xi)d\xi$$

$$+ \frac{A_m^2}{\alpha^3}\left(m+\frac{1}{2}\right)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_m^2(\xi)d\xi$$

$$+ \frac{A_m^2}{\alpha^3}m(m-1)\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi)H_{m-2}(\xi)d\xi$$

此式最后一式第一项。第三项都和 $Hm(\xi)$ 的正交化积分式成比例，都等于零。第二项和归一化积分成比例；可以简化

$$\overline{x^2} = \frac{1}{a^2}(m+\frac{1}{2})\cdot\frac{1}{a}A_m^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\varepsilon^2} H_m^2(\xi)d\xi$$

$$= \frac{1}{a^2}(m+\frac{1}{2}) = \frac{\hbar}{m^l\omega}(m+\frac{1}{2})$$

再计算，这可以利用波函数满足的微分方程式：

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi_m}{dx^2}+\frac{m'\omega^2x^2}{2}\psi_m=E\psi_m \qquad （m' \text{是振子质量}）$$

将此遍乘对积分

$$-\frac{\hbar}{2m'}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\frac{d^2\psi_m}{dx^2}dx+\frac{m'\omega^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*x^2\psi_m dx$$

$$=E\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_m dx$$

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(\frac{\hbar}{i})^2\frac{d^2\psi_m}{dx^2}dx=2m'E-m'^2\omega^2$$

$$\overline{x^2}=2m'(m+\frac{1}{2})\hbar\omega-m'^2\omega^2\cdot\frac{1}{a^2}$$

$$(m+\frac{1}{2})=2m'(m+\frac{1}{2})\hbar\omega-m'^2\omega^2\cdot\frac{\hbar}{m'\omega}(m+\frac{1}{2})$$

$$=m'(m+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

测不准关系中的不准度是：

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(\frac{\hbar}{i})^2\frac{d^2\psi_m}{dx^2}dx=2m'E-m'^2\omega^2$$

$$\overline{x^2}=2m'(m+\frac{1}{2})\hbar\omega-m'^2\omega^2\cdot\frac{1}{a^2}$$

$$(m+\frac{1}{2})=2m'(m+\frac{1}{2})\hbar\omega-m'^2\omega^2\cdot\frac{\hbar}{m'\omega}(m+\frac{1}{2})$$

$$=m'(m+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

测不准关系中的不准度是：

$$\delta x=\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}=\sqrt{\overline{x^2}}=\sqrt{\frac{\hbar}{m'\omega}(m+\frac{1}{2})} \qquad \delta p=\sqrt{\overline{(\Delta p)^2}}=\sqrt{\overline{p^2}}=\sqrt{m'\hbar\omega(m+\frac{1}{2})}$$

$$\delta x\cdot\delta p=(m+\frac{1}{2})\hbar \qquad \text{因 m=0，而 } \delta x\cdot\delta p=\frac{\hbar}{2}$$

[9]一维无限深势阱中求处于$\psi_n(x)$态的粒子的动量分布几率密度$|\varphi(p)|^2$。

（解）因为$\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$是已知的，所以要求动量分布的几率密度，先要求动量波函数，这可利用福利衰变换的一维公式:

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}e^{-ipx/\hbar}\sin\frac{n\pi x}{a}dx$$

利用不定积分公式

$$\int e^{ax}\sin pxdx=\frac{a\sin px-p\cos px}{a^2+p^2}e^{ax}$$

用于前一式：

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\cdot\frac{-\frac{ip}{\hbar}\sin\frac{n\pi x}{a}-\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi x}{a}}{(\frac{n\pi}{a})^2-(\frac{p}{\hbar})^2}e^{ipx/\hbar}\Big|_0^a$$

$$=\frac{2n\sqrt{a\pi\hbar^8}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}\{\frac{-1+(-1)^n e^{\frac{ipa}{\hbar}}}{2}\}$$

$$=\frac{-2n\sqrt{a\pi\hbar^3}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}e^{\frac{ipa}{2\hbar}}\cos\frac{pa}{2\hbar}\qquad \text{(n 奇数)}$$

$$=\frac{-2ni\sqrt{a\pi\hbar^2}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}e^{\frac{ipa}{2\hbar}}\sin\frac{pa}{2\hbar},\qquad \text{(n 偶数)}$$

动量几率密度分别是

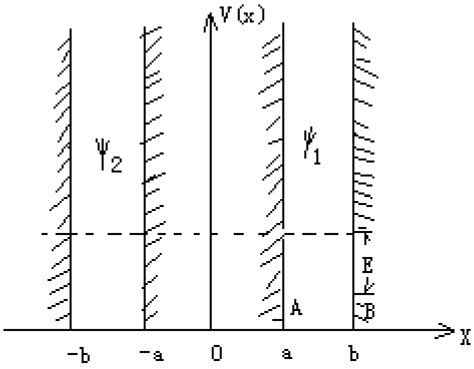
$$\frac{4n^2a\pi\hbar^2}{(a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2)^2}\cos^2\frac{pa}{2\hbar},\qquad \text{（n 奇数）}$$

$$\frac{4n^2a\pi\hbar^2}{(a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2)^2}\sin^2\frac{pa}{2\hbar},\qquad \text{(n 偶数)}$$

#

[11]设粒子处在对称的双方势阱中

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



（1）在$V_0 \to \infty$情况下求粒子能级，并证明能级是双重简并。（2）证明V_0取有限值情 况下，简并将消失。

（解）本题的势场相对于原点 0 来说是对称的，因此波函数具有字称。

设总能量是 E，又设$k = \sqrt{2mE}/\hbar$ 在区间$(-\infty, -b\ )$ (-a，a) (b，∞)之中波函数都是零，在区间(a ,b)，设波函数是：

$$\psi(x) = A\sin(ka + a) = 0 \qquad (1)$$

考虑 x=a, x=b 二连续条件：（势阱外面$\psi = 0$）

$$\begin{cases} \psi(a) = A\sin(ka + \alpha) = 0 \\ \psi(b) = A\sin(kb + \alpha) = 0 \end{cases} \qquad (2)$$

从这里得到，因而得 $ka + \alpha = n\pi$ ，$kb + \alpha = n^l\pi$,因而得 $\alpha = -ka + n\pi$或$-kb + n^l\pi$ ，n, n^l 是整数，满足边界条件的解是:

$$\psi_1(x) = a\sin[k(x-a) + n\pi] = \begin{cases} a\sin k(x-a) \\ -a\sin k(x-a) \end{cases}$$

再考虑区间$(-b,-a)$，设波函数：

$$\psi_2(x) = b\sin(kx + \beta) \qquad (5)$$

代 入$(x=-a) x=-b$ 在二点的连续条件得

$$B\sin(-ka+\beta) = 0, B\sin(-kb+\beta) = 0$$

得: $-ka+\beta = p\pi$,$-kb+\beta = -p'\pi$,但 p, p' 整数,因此区间$(-b,-a)$的波函数:

$$\psi_2(x)=B\sin[k(x+a)+p\pi]=\begin{cases} B\sin k(x+a) & (6) \\ -B\sin k(x+a) & (7) \end{cases}$$

$\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 之间要满足奇或偶宇称的要求,才能成为一组合理的解,若令 $\psi_1(-x)=\psi_2(x)$,得 A=B,相应的一组偶宇称解是:

$$\begin{cases} \psi_1(x)=A\sin k(x-a) \\ \psi_2(x)=-A\sin k(x+a) \end{cases}$$

同理令 $\psi_1(-x)=-\psi_2(x)$,得到一组奇宇称解是

$$\begin{cases} \psi_1(x)=+A\sin k(x-a) \\ \psi_2(x)=A\sin k(x+a) \end{cases} \quad (9)$$

$\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 是线性不相关的解,但却有相同的波数 k ,因而也有相同的能级 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$.能级是分立的,这可以从边界条件式 $\psi_1(a)=0,\psi_2(b)=0$ 同时满足的要求看到,这两式推得

$ka+\alpha=n\pi, kb+\alpha=n'\pi$

相减得 $k(b-a)=(n'-n)\pi=n''\pi$

n'' 是整数,可作为能级编号.

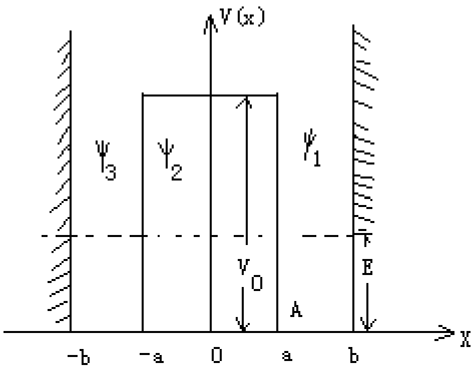
$k_{n''}=\dfrac{n''\pi}{b-a}$

因此能级是

$E_{n''}=\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2m}(\dfrac{n''}{b-a})^2$ 是二度简并的

注: 在本题中因为左右两个势阱对称,粒子在两者中都能出现, 和实际上是同一个函数,只是的取值范围不同.

考察 V_0 为有限值情形的解,先设 E< V_0 设区间 (a,b) 中的解是



$\psi_1(x) = A\sin(kx+\alpha) \quad k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

代入边界条件$\psi_1(b)=0$,的得

$\psi_1(b) = A\sin(kx+\alpha) = 0$

因而$kb+\alpha = n\pi$

$\psi_1(x) = A\sin[k(x-b)+n\pi]$

或

$$\psi_1(x) = \begin{cases} A\sin k(x-b) \\ \\ -A\sin k(x-b) \end{cases}$$

在$(-b,-a)$的对称区中的解设是

$\psi_2(x) = C\sin(kx+\gamma) \quad k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

代入边界条件$\psi_2(-b)=0$,得

$\psi_2(b) = \sin(-kb+\gamma) = 0, -kb+\gamma = n'\pi$

因而$\gamma = kb+n'\pi, \quad \psi_2(x) = C\sin[k(x+b)+n'\pi]$

或 $$\psi_2(x) = \begin{cases} C\sin k(x+b) \\ \\ -C\sin k(x+b) \end{cases} \qquad (2)$$

和$V_0=\infty$情形相同,C=A,偶宇称解是

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A\sin k(x-b) \\ \psi_3'(x) = -A\sin k(x+b) \end{cases} \qquad (3)$$

奇宇称解是

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A\sin k(x-b) \\ \psi_3'(x) = +A\sin k(x+b) \end{cases} \qquad (4)$$

在区间 $(-a,a)$ 内的解 $\psi_2(x)$ 满足薛定谔方程

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi = 0$$

但 $V_0 - E > 0$,令 $k_1{}^2 = {}^{2m(V_0-E)}/_{\hbar^2}$,知道这方程式的解可用实指数函数或双曲函数,计算法相类似.为计算方便直接设定

$(-a,a)$ 区间　偶宇称解 $\psi_2(x) = Bchk_1x$　　(5)

奇宇称解 $\psi_2{}'(x) = Bshk_1x$　　(6)

这两者都满足此区间的薛氏方程式.为确定能量量子化条件,可以建立在边界点 $x = a$ 处,波函数及其一阶导数的连续条件.使用(3)和(5)有:

$$\begin{cases} \psi_2(a) = \psi_1(a) & \text{即：} \quad Bchk_1a = A\sin k(a-b) & (7) \\ \psi_2{}'(a) = \psi_1{}'(a) & \text{即：} \quad k_1Bchk_1a = kA\cos k(a-b) & (8) \end{cases}$$

（7）和（8）相除得：

$$k_1thk_1a = kctgk(a-b)$$

将此式改用能量 E 的项来表示,得到偶宇称态的能量量子化条件：

$$\sqrt{V_0 - E}th\left\{\sqrt{2m(V_0-E)}\frac{a}{\hbar}\right\}$$

$$= \sqrt{E}ctg\left\{\sqrt{2mE}\frac{a-b}{\hbar}\right\} \qquad (9)$$

注意若使用边界点 x=-a 上的连续条件,由于对称性得不到新解.

其次求奇宇称的能量量子化条件,为此先写出 x=a 处连续条件，所用方程式是(4)和(6)

$$\begin{cases} \psi_2(a)=\psi_1(a) \quad \text{即：} \quad Bshk_1a=A\sin k(a-b) & (11) \\ \psi_2{}'(a)=\psi_1{}'(a) \quad \text{即：} \quad k_1Bchk_1a=kA\cos k(a-b) & (12) \end{cases}$$

相除得： $k_1cthk_1a=kctgk(a-b)$

改写成能量式子:

$$\sqrt{V_0-E}cth\left\{\sqrt{2m(V-E)}\frac{a}{\hbar}\right\} = \sqrt{E}ctg\left\{\sqrt{2mE}\frac{a-b}{\hbar}\right\} \quad (13)$$

（9）和（13）是不同的方程式,它们所决定的能级是不相同的,因此偶宇称波函数（3）和（5）与奇宇称波函数（4）和（6）不具有相同的能量 E,它们是非简并的.（9）（13）中 E 的分立解要用图解法,与有限深势阱类似.

第二种情形是 $E>V_0$，这种情形可不必作重复计算.因为

$$k_1{}^2=2m(V_0-E)/\hbar^2=-2m(E-V_0)/\hbar^2$$

令 $2m(E-V_0)/\hbar^2\equiv k_2{}^2$，则 $k_1=k_2i$

代入（5）（6）得 $(-a,a)$ 区间的波函数：

偶宇称解 $\quad \psi_2(x)=Bchk_2ix=B\cos k_2x \quad$ （14）

奇宇称解 $\quad \psi_2(x)=Bshk_2ix=Bi\sin k_2x \quad$ （15）

(a,b)区间的解同于（1）式的 $\psi_1(x)$，$(-b,-a)$ 区间解同于（2）式的 $\psi_2(x)$

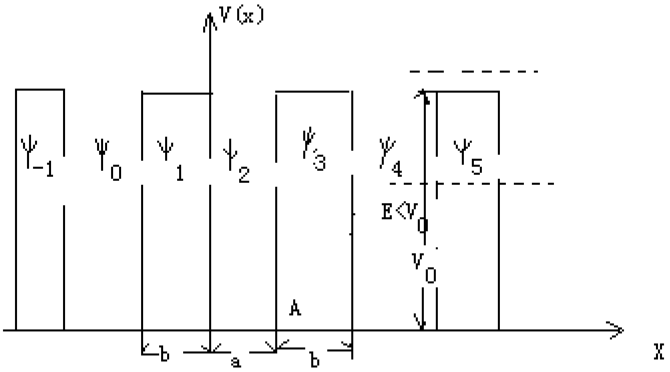
能量量子化条件是:

偶宇称: $\sqrt{V_0-E}tg\left\{\sqrt{2m(E-V_0)}\frac{a}{\hbar}\right\}=\sqrt{E}ctg\left\{\sqrt{2mE}\frac{a-b}{\hbar}\right\}$ (16)

奇宇称 $\sqrt{V_0-E}ctg\left\{\sqrt{2m(E-V_0)}\frac{a}{\hbar}\right\}=\sqrt{E}ctg\left\{\sqrt{2mE}\frac{a-b}{\hbar}\right\}$ (17)

也是不同的方程式.奇偶宇称的波函数是非简并的。

[12]设粒子在下述周期场 V(x)中运动(见附图)求它的能带。(分 $E>V_0$, $E<V_0$ 两种情况)证明当 $b\to 0$ 时,若保持 $\dfrac{mVb}{\hbar^2}=$ 常数,上述周期场变成 Dirac 梳:



(解) $E<V_0$ 情形

为求能带先要决定各个区间中的波函数,按题意粒子的薛氏方程式只有二种,在势垒之内,如区间 $(-b,0)$；$(a,a+b)$；$(2a+b,2a+2b)$。。。。。。薛氏方程为:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\psi=0$$

或 $$\frac{d^2\psi}{dx^2}-k_1^2\psi=0 \qquad （但\quad k_1^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}） \qquad （1）$$

它的解是实指数形式或双曲线函数形式,设区间 $(-b,0)$ 中的波函数是:

$$\psi_1(x)=Ae^{k_1x}+Be^{-k_1x} \qquad (2)$$

在势垒外面的区间 $(-a-b,-b)$；$(0,a)$；$(a+b,2a+b)$。。。。。。等，薛氏方程式是：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \qquad （但\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}）$$

它的解是虚指数函数或者三角函数,用任何一种都可以,下面用虚指数的:

区间 $(0,a)$ 中 $\psi_2(x)=Ce^{ikx}+De^{-ikx}$ (3)

但势能相同的区间波函数未必相同,应当依周期场 Bloch 的定理来规定,在区间 $(a,a+b)$ 的势垒内,其波函数可根据 $\psi_1(x)$ 推出 $\psi_2(x)=e^{ik(a+b)}\psi_1(x-a-b)$ (4)

但 K 是个未定参数

根据(2) $\psi_3(x)=e^{ik(a+b)}[Ae^{k_1(x-a-b)}+Be^{-k_2(x-a-b)}$ (5)

现根据所设各个区波函数写出边界点上波函数及其一阶导数之连续条件:

在 0 点 $(x=0)$ 处的连续条件是

$$\begin{cases}\psi_1(0)=\psi_2(0) & A+B=C+D \\ \psi_1'(0)=\psi_2'(0) & k_1(A-B)=ki(C-D)\end{cases}$$

在 A 点 $(x=a)$ 处的连续条件是

$$\begin{cases}\psi_2(a)=\psi_3(a)=e^{ik(a+b)}\psi_1(-b) \\ \psi_2'(a)=\psi_3'(a)=e^{ik(a+b)}\psi_1'(-b)\end{cases}$$

利用(3)(5)二式,二式写成

$$Ce^{ika}+De^{-ika}=e^{ik(a+b)}[Ae^{-k_1b}+Be^{k_2b}] \tag{8}$$

$$ik(Ce^{ika}-De^{-ika})=e^{ik(a+b)}k[Ae^{-k_1b}-Be^{k_2b}] \tag{9}$$

若从(6)(7)(5)(9)中消去各个系数,可能得到一个关于波函数 k,k_1 的约束条件,这个条件含有 E(因为 k,k_1 都用 E 的项表示),可能是需要的能带条件,从(6)(7)解 C 和 D 使其用 A,B 的项表示:

$$C=(1-\tfrac{k_1i}{k})\frac{A}{2}+(1+\tfrac{k_1i}{k})\frac{B}{2}$$

$$D=(1+\tfrac{k_1i}{k})\frac{A}{2}+(1-\tfrac{k_1i}{k})\frac{B}{2}$$

将此二式等号右方两式代入(8)(9)二式等号的左方部分,加以整理:

$$\begin{cases}[(1-\tfrac{k_1i}{k})\frac{A}{2}+(1+\tfrac{k_1i}{k})\frac{B}{2}]e^{ika}+[(1+\tfrac{k_1i}{k})\frac{A}{2}+(1-\tfrac{k_1i}{k})\frac{B}{2}]e^{-ika}=Ae^{ik(a+b)-k_1b}+Be^{ik(a+b)+k_1b} \\ [(1-\tfrac{k_1i}{k})\frac{A}{2}+(1+\tfrac{k_1i}{k})\frac{B}{2}]e^{ika}-[(1+\tfrac{k_1i}{k})\frac{A}{2}+(1-\tfrac{k_1i}{k})\frac{B}{2}]e^{-ika}=-\frac{k_1i}{k}[Ae^{ik(a+b)-k_1b}-Be^{ik(a+b)+k_1b}]\end{cases}$$

$$\begin{cases}(\cos ka+\frac{k_1}{k}\sin ka-e^{ik(a+b)-k_1b})A+(\cos ka+\sin ka-e^{ik(a+b)+k_1b})B=0 \\ (\sin ka-\frac{k_1}{k}\cos ka+\frac{k_1}{k}e^{ik(a+b)-k_1b})A+(\sin ka+\frac{k_1}{k}\cos ka-\frac{k_1}{k}e^{ik(a+b)+k_1b})B=0\end{cases}$$

要使这组关于 A,B 的方程式有非平凡解,系数的行列式应当等于零

$$\begin{vmatrix}\cos ka+\frac{k_1}{k}\sin ka-e^{ik(a+b)-k_2b}, & \cos ka-\frac{k_1}{k}\sin ka-e^{ik(a+b)+k_2b} \\ \sin ka-\frac{k_1}{k}\cos ka+\frac{k_1}{k}e^{ik(a+b)-k_2b}, & \sin ka+\frac{k_1}{k}\cos ka-\frac{k_1}{k}e^{ik(a+b)+k_2b}\end{vmatrix}=0$$

经过一些原理简单的计算,最后,前述条件简化成为下式

$$\cos K(a+b)=\cos kachk_1b+\frac{k_1^{\ 2}-k^2}{2k_1k}\sin kachk_1b$$

此式中的参数 K 理应是个实数,因 $\cos K(a+b)$ 的值只能局限在值域 $\cos K(a+b)\in(-1,1)$ 之内,这个条件就决定能带,将前式中 k_1, k_2 换成 E 的项,则能带条件是:

$$-1<\cos\sqrt{2mE}\,\frac{a}{\hbar}\bullet ch\sqrt{2m(V_0-E)}\,\frac{b}{\hbar}+\frac{V_0-2E}{2\sqrt{E(V_0-E)}}\sin\sqrt{2mE}\,\frac{a}{\hbar}\,sh\sqrt{2m(V_0-E)}\,\frac{b}{\hbar}<1$$

凡能落在此区间的能量都是可能运动的能量

其次再考虑 E>V_0 的情形,这类似于自由运动,令

$$k_1{}^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}=-\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}=(k_2 i)^2$$

则 $k_1=k_2 i$,代入(10)得到波函数约束条件

$$\cos K(a+b)=\cos ka\cos k_2 b+\frac{-k_2{}^2-k^2}{2kk_2 i}\sin ka\bullet i\sin k_2 b=\cos ka\cos k_2 b-\frac{k^2+k_2{}^2}{2kk_2}\sin ka\sin k_2 b$$

能带条件是

$$-1<\cos\sqrt{2mE}\,\frac{a}{\hbar}\bullet\cos\sqrt{2m(E-V_0)}\,\frac{b}{\hbar}-\frac{2E-V_0}{2\sqrt{(E-V_0)E}}\sin\sqrt{2mE}\,\frac{a}{\hbar}\sin\sqrt{2m(E-V_0)}\,\frac{b}{\hbar}<1$$

前述的周期性矩形势垒从原理讲是能追近于形周期垒的,为此仅需保持矩形面积不变令 $b\to0$ 则 $V_0\to\infty$.但形势垒是相当第一种情形,即 $E<V_0$ 的为此可近似地设 $V_0-E\approx V_0$ 式可以加以变形:

$$\cos\sqrt{2mE}\,\frac{a}{\hbar}\bullet ch\sqrt{2mV_0}\,\frac{b}{\hbar}+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{V_0}{E}}\sin\sqrt{2mE}\,\frac{a}{\hbar}\,sh\sqrt{2mV_0}\,\frac{b}{\hbar}$$

在此式中,取 $b\to0$, $V_0\to\infty$ 的极限,但在趋向极限过程中,保持 $\frac{mV_0 b}{\hbar^2}=\Omega$ (势垒强度)为有限量

又当 $b\to0$ 时,可令 $shsb\approx sb$, $chsb\approx1$

$$\cos K(a+b)=\cos Ka \qquad ch\sqrt{2mV_0}\,\frac{b}{\hbar}=ch\sqrt{2\Omega b}\approx1$$

$$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{V_0}{E}}\,sh\sqrt{2mV_0}\,\frac{b}{\hbar}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{V_0}{E}}\,sh\sqrt{2\Omega b}\approx\frac{1}{2}\sqrt{\frac{V_0}{E}}\sqrt{2\Omega b}=\frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}\Omega$$

(14)式代成

Microsoft 公式 3.0

$$\cos Ka=\cos\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a+\Omega\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}}\sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a$$

$$V(x)=V_0\cos bx$$

$$\hbar i\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\frac{p^2}{2m}\varphi+\int_{p'}G(p,p')\varphi(p',t)dp'$$

$$G(p,p')=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{x=-\infty}^{\infty}e^{i(p-p')x/\hbar}\cos bxdx$$

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\frac{V_0}{2}\{\varphi(p+b\hbar)+\varphi(p-b\hbar)\}=E\varphi(p)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V_0\cos bx]\psi=0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}[\int_{\infty}e^{-ipx/\hbar}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx+\frac{2mE}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\psi dx-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\int_{\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\psi\cos bxdx]=0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{2mE}{\hbar^2}\int e^{-ipx/\hbar}\psi dx=E\varphi(p)\bullet\frac{2m}{\hbar^2}\frac{-p^2}{\hbar^2}\varphi(p)$$

$$G(p,p')=\frac{V_0}{2}\{\delta(p-p'+b\hbar)+\delta(p-p'-b\hbar)\}\int_{\infty}^{\infty}\frac{1}{2}(e^{i\frac{p-pi+b\hbar}{\hbar}x}+e^{i\frac{p-pi-b\hbar}{\hbar}x})dx$$

$$\delta(\lambda)=\frac{1}{2\pi}\int_{\infty}^{\infty}e^{i\lambda x}dx$$

$$\varphi(p')dp'=E\varphi(p)$$

.即 $\cos K=\cos ka+\frac{\Omega}{k}\sin ka$

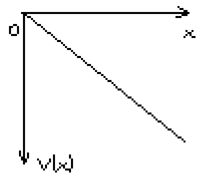
此式是间隔等于 a,势垒强度 Ω 的梳状 Dirac 周期势垒的能带公式.

#

---

[16]在 p 表象中，求解均匀 V（x）=-Fx 中粒子的能量本征函数。（设 F>0）

（解）建立动量表象中的一维薛定谔方程式。根据第二章第 15 题以及本章第 10 题的方法，薛定谔方程式用一维动量 p 作自变量时，形式是：（定态）



$$[\frac{p^2}{2m}+V(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})]\varphi(p)=E\varphi(p) \quad (1)$$

在势能这一项上，将 V 看作一个算符，V 中原来含有的 x 应更换成 $\hbar i\frac{\partial}{\partial p}$，然后将这样构成的势能算符作用到动能波函数 $\varphi(p)$ 上，因而在本题情形：

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)-\hbar iF\frac{\partial\varphi}{\partial p}=E\varphi(p) \quad (2)$$

此式容易分离变量：

$$\hbar iFd\varphi=(\frac{p^2}{2m}-E)\ \varphi dp \qquad \frac{d\varphi}{\varphi}=(\frac{p^2}{2m\hbar iF}-\frac{E}{\hbar iF})\ dp$$

积分得：

$$\ln\varphi=\frac{p^2}{6m\hbar iF}-\frac{Ep}{\hbar iF}+\text{常数}$$

（3）

$$\varphi=Ce^{\frac{p^2}{6m\hbar i}-\frac{Ep}{\hbar iF}}$$

积分常数 C 用动量波函数归一化决定：

$$\int_p\varphi^*\varphi dp=\delta(E-E')$$ （4）

这种计算是所谓“δ 函数归一化”。原因是波函数（3）实际上是平面波包，当 $p\to\pm\infty$ 时 $\varphi(p)$ 不趋近于 0，所以（3）实际上是不能归一化的，而只能令几率积分等于 δ，这样

$$\int\varphi^*(p,E)\cdot\varphi(p,E')\ dp=C^*C\int_p e^{\frac{p}{\hbar iF}(E-E')}dp$$

$$=C^*C(2\pi\hbar F)\cdot\frac{1}{2\pi}\int e^{i\frac{p}{\hbar F}(E'-E)}\cdot\frac{dp}{\hbar F}$$

$$=C^*C(2\pi\hbar F)\ \delta(E-E')$$

因而 $\qquad C=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}$

本题可参看 Davydov：Quantum Mechanics （1965）

---

[17]粒子处在 δ 势阱 $V(x)=-V_0\delta(x)$ （$V_0>0$）中，用动量表象中的薛定谔方程式，求解其束缚态的能量本征值及其相应的本征函数。

（解）（甲法）：

薛定谔方程式的确定，与第二章习题 15、本章习题 10 的方法类似，但是不能简单地用

$$V(x)=V(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})$$

来得到结果，因为本题的情形

$$V(x)=-V_0\delta(x)=-V_0\delta(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})$$

这种算符运用不便，可以用第二章 15 题方法；写下坐标表象薛氏方程式（定态）：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V(x)\ \Psi=E\Psi$$ （1）

遍乘以 $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx/\hbar}$，再对坐标积分：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_x e^{-ipx/\hbar}\frac{d^2\Psi}{dx^2}dx$$

$$+\int_x \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx/\hbar}V(x)\Psi(x)dx$$

$$=\frac{E}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_x e^{-ipx/\hbar}\Psi(x)dx$$

等号左方第二项被积函数中的$\Psi(x)$再用福里哀变换使成为p的积分。左方第一项和右方一项按逆变换变成动量波函数的项：

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_x \frac{1}{2\pi\hbar}e^{-ipx/\hbar}\int_{p'} e^{ip'x/\hbar}\varphi(p')dp'dx\cdot V(x)=E\varphi(p) \quad (2)$$

即：$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{p'}[\int_x e^{i(p'-p)x/\hbar}V(x)dx]\varphi(p')dp'=E\varphi(p)$ （3）

利用δ函数的变换性质 $\int_x f(x)\delta(x-x')dx=f(x)$，有

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar}V(x)dx$$

$$=-V_0\int_{x=-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar}\delta(x)dx$$

$$=-V_0e^{i(p'-p)x/\hbar}=-V_0$$

前式中等号左方的积分$=-\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{p'=-\infty}^{\infty}\varphi(p')dp'=$常数$A$ （3）

动量表象的薛氏方程式成为：$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+A=E\varphi(x)$ （4）

不需积分就得到动量表象的波函数：$\varphi(p)=\frac{2mA}{2mE-p^2}$ （5）

首先确定能量的本征值E（即允许的值），在本题中因为没有寻常的势阱问题中的边界条件可以利用，这只能依靠积分式（3）来解决，将式（5）代入（3），得：

$$-\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{p=-\infty}^{\infty}\frac{2mA}{2mE-p^2}dp=A \quad (6)$$

消去A，并注意到在束缚态情形$E<0$，可令$-E=E'>0$，前一式成为：

$$\frac{mV_0}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2mE'+p^2}=\frac{mV_0}{\pi\hbar}\cdot\frac{1}{\sqrt{2mE'}}\cdot tg^{-1}\frac{p}{\sqrt{2mE'}}\Bigg|_{p=-\infty}^{p=\infty}$$

$$=\frac{m}{\sqrt{2E'}}\cdot\frac{V_0}{\pi\hbar}\cdot\pi=1$$

即 $E'=\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$，$E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$ （7）

常数 A 可以将波函数（5）通过归一化计算来定

$$\int_p\varphi^2(p)\,dp=1 \qquad (2mA)^2\int_p\frac{dp}{(2mE'+p^2)^2}=1 \tag{8}$$

利用不定积分公式

$$\int_p\frac{dp}{(a^2+p^2)^2}=\frac{1}{2a^2}[\frac{p}{a^2+p^2}+\frac{1}{a}tg^{-1}\frac{p}{a}]$$

从（8）式求得：

$$A=(\frac{2}{\pi})^{\frac{1}{2}}(2mE')^{\frac{3}{4}}=\sqrt{\frac{2}{\pi}\cdot(\frac{mV_0}{\hbar})^3} \tag{9}$$

（乙法）如果我们不要求首先得到动量表象薛定谔方程式，再根据它计算能量本征函数；而是用任何方法来求得动量表象的能量本征函数，则可以先求得同一问题的坐标表象本征函数，这个函数是：（参看课本 P.72.48 式）

$$\Psi(x)=\sqrt{\frac{U_0}{2}}e^{-\frac{U_0}{2}|x|} \qquad 但 U_0=\frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

利用从坐标动量的福利哀变换

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

得：$\varphi(p)=\sqrt{\frac{U_0}{4\pi\hbar}}(\int_{x=-\infty}^{0}e^{-ipx/\hbar+U_0x/2}dx+\int_0^{\infty}e^{-ipx/\hbar-U_0x/2}dx)$

$$=\sqrt{\frac{U_0}{4\pi\hbar}}\left\{\left|\frac{e^{(-\frac{ip}{\hbar}+\frac{U_0}{2})x}}{-\frac{ip}{\hbar}+\frac{U_0}{2}}\right|_{-\infty}^{0}+\left|\frac{e^{(-\frac{ip}{\hbar}-\frac{U_0}{2})}}{-\frac{ip}{\hbar}-\frac{U_0}{2}}\right|_{0}^{\infty}\right\}$$

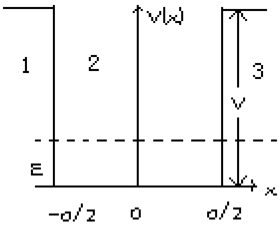
$$=\sqrt{\frac{U_0}{4\pi\hbar}}\cdot\frac{U_0}{(\frac{U_0}{2})^2+(\frac{p}{2})^2} \tag{10}$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi}\cdot(\frac{mV_0}{\hbar})^2}\cdot\frac{1}{(\frac{mV_0}{\hbar})^2+p^2}$$

（10）式与（5）式形式一样，注意（7）和（9），知道两种计算结果一致。

[18]设粒子在一维无限高势垒中运动，试求作用在势垒壁上的平均力。

（解）与经典力学中的力相对应，量子力学力是一个观察用算符 $-\nabla V(\bar{r})$（三维）或 $-\dfrac{\partial}{\partial x}V(x)$ 表示，在某位置 $\bar{r}$ 上的力由该点单值决定，它的平均值指空间所有范围内的平均值（假定空间各点上受力）



$$\bar{F}=-\iiint_{\tau}\Psi^{*}(\bar{r},t)\nabla V(r)\Psi(\bar{r},t)\,d^{2}r$$

或 $$F=-\int_{x}\Psi^{*}(x,t)\frac{\partial V}{\partial x}\Psi(x,t)\,dx$$

在如图示的对称有限深势垒的情形，因为势垒内部势能无变化，外部也无变化，故只有这势能突变点 $(-\dfrac{a}{2})$ $(\dfrac{a}{2})$ 处受力，该两点的力为无限大：

$$\frac{\Delta V}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{V_0-0}{\Delta x}\to\infty$$

此外，又发现在包括 $-\dfrac{a}{2}$（或 $\dfrac{a}{2}$）点在内的小范围中力的积分是有限值：

$$\int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}F\,dx=\int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}-\frac{\partial V}{\partial x}dx=-V_0$$

而 $$\frac{1}{V_0}\int_{+\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}-\frac{\partial V}{\partial x}dx=1$$

因此在该二点上的力满足 δ 函数的三个主要性质，所以每一点上的力表示为一个 δ 函数

$$\hat{F}(x)=V_0\delta(x-\frac{a}{2})-V_0\delta(x+\frac{a}{2})\qquad(1)$$

可以分别计算一壁的平均力，在 $x=\dfrac{a}{2}$ 处的平均力：

$$\bar{F}=\int_{x=\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}\Psi^{*}(x)\,V_0\delta(x-\frac{a}{2})\,\Psi(x)\qquad(2)$$

这里 $\Psi(x)$ 是归一化的一维有限深度（V_0）势垒中粒子的波函数。象附图那样取坐标，并假设 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$

$k'=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

并注意 $\Psi(x)$ 具有奇或偶的宇称。

（1） 奇宇称：可设Ⅰ、Ⅱ、Ⅲ三个区间的波函数依次是：

$Ae^{k' x}$，$B\sin kx$，$Ae^{-k' x}$

在点 $x=\frac{a}{2}$ 处的连续条件是

$$B\sin\frac{ka}{2}=Ae^{-\frac{k' a}{2}}，B=e^{-\frac{k' a}{2}}A/\sin\frac{ka}{2}$$

写出归一化条件：

$$A^2\{\int_{-\infty}^{\frac{a}{2}}e^{2k' x}dx+\frac{e^{-k' a}}{\sin^2\frac{ka}{2}}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sin^2 kxdx+\int_{\frac{a}{2}}^{\infty}e^{-2k' x}dx\}=1$$

得 $$A^2=\frac{e^{k' a}}{\frac{a}{2}cse^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k'}-\frac{1}{k}ctg\frac{ka}{2}}$$

$$B^2=\frac{1}{\frac{a}{2}+\frac{1}{k'}\sin^2\frac{ka}{2}-\frac{1}{k}\sin\frac{ka}{2}\cos\frac{ka}{2}} \tag{4}$$

现在根据这个结果代入平均力公式（2），就求得 $x=\frac{a}{2}$ 壁上的平均力，至于式中的波函数 Ψ（x），则用 $B\sin kx$ 或 $Ae^{-k' x}$ 都是等效的，我们有：

$$\overline{F}=V_0B^2\int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}\sin^2 kx\cdot\delta（x-\frac{a}{2}）dx=V_0B^2\sin^2\frac{ka}{2}$$

$$=\frac{V_0}{\frac{a}{2}cse^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k'}-\frac{1}{k}ctg\frac{ka}{2}} \tag{5}$$

这个结果还可以根据有限深势垒的能量量子化条件加以简化。后一个条件是根据在垒壁上波函数及其一阶导数连续条件得到的，在奇宇称情形有：

$$k'=-kctg\frac{ka}{2} \tag{6}$$

见(6)代入式（5）得到

$$\overline{F}=\frac{E}{\frac{a}{2}+\frac{1}{k'}}=\frac{E}{\frac{a}{2}+\frac{\hbar}{\sqrt{2m（V_0-E）}}} \tag{7}$$

令 $V_0\to\infty$ 就得到一维无限高势垒上右壁（$x=\frac{a}{2}$）上，$\overline{F}=\frac{2E}{a}$

（2） 偶宇称：在有限深势阱的情形，在 $x<-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}<x<\frac{a}{2}$，$x>\frac{a}{2}$ 三个区间中的波函数是：

$Ae^{+k'x}$，$B\cos kx$，$Ae^{-k'x}$

在 $x=\frac{a}{2}$ 处的波函数连续条件：

$$B\cos\frac{ka}{2}=Ae^{-k'a/2} \qquad (8)$$

归一化条件：

$$A^2\{\int_{-\infty}^{-\frac{a}{2}}e^{2k'x}dx+\frac{e^{-2k'a}}{\cos^2\frac{ka}{2}}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\cos^2 kxdx+\int_{\frac{a}{2}}^{\infty}e^{-2k'x}dx\}=1$$

$$A^2=\frac{e^{k'a}}{\frac{a}{2}\sec^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k'}+\frac{1}{k}tg\frac{ka}{2}}$$

$$B^2=\frac{1}{\frac{a}{2}+\frac{1}{k'}\cos^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k}\sin\frac{ka}{2}\cos\frac{ka}{2}} \qquad (9)$$

又根据 $x=\frac{a}{2}$ 点上波函数及其一阶导数的连续条件，得能量量子化条件 $k'=ktg\frac{ka}{2}$。平均力：

$$\overline{F}=V_0B^2\int_{a-\frac{\tau}{2}}^{a+\frac{\tau}{2}}\cos^2 kx\delta(x-\frac{a}{2})\,dx=V_0B^2\cos^2\frac{ka}{2}$$

$$=\frac{V_0}{\frac{a}{2}\sec^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k'}+\frac{1}{k}tg\frac{ka}{2}}=\frac{V_0}{(\frac{a}{2}+\frac{1}{k'})\ (1+\frac{k'^2}{k^2})}$$

$$=\frac{E}{\frac{a}{2}+\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}}$$

这个结果同于（7）。

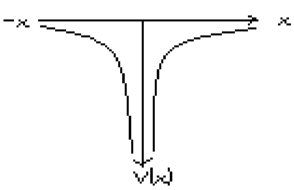
当 $V_0\to\infty$ 时，亦得到 $\overline{F}=\frac{2E}{a}$

对于 $x=-\frac{a}{2}$ 的势垒壁上，由于对称性，力的平均值是相同的。

---

[19]求解一维氢原子的波函数和能级，它的哈密顿算符是：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-\frac{e^2}{|x|}$$



（解）由于势场有对称性$V(-x)=V(x)$，所以波函数有确定的宇称，可以考察$x>0$区间波函数的性质：

（1）波函数的计算：写出薛定谔方程式：

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E+\frac{e^2}{x}]\Psi=0 \qquad (1)$$

在束缚态$E<0$的情形，可设$k=\sqrt{-2mE}/\hbar$，当$x\to\infty$时，方程式（1）成为：

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

它的特解是e^{-kx}，这就是$\Psi(x)$在$x\to\infty$时的渐进解。

此外从（1）看出微分方程式在$x=0$处有一个奇点，因此，可以设

想当波函数的解表示成级数形式时，可以含有 x 的因式，考虑上述两点我们将波函数进行如下变换：

$$\psi(x)=xe^{-kx}u(x)$$

求波函数的一阶和二阶 导数：

$$\frac{d\psi}{dx}=e^{-kx}u-kxe^{-kx}u+xe^{-kx}\frac{du}{dx}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=x\frac{d^2\psi}{dx^2}+2(1-kx)\frac{du}{dx}+(k^2x-2k)u$$

代入方程式 1 整理得到

$$x\frac{d^2u}{dx^2}+2(1-kx)\frac{du}{dx}+(\frac{2me^2}{k^2}-2k)u=0$$

这个方程式的形式与本章第 14 题的第 15 式相似，可归纳为合流超几何方程式：

$$x\frac{d^2F}{dx^2}+(\gamma-x)\frac{dF}{dx}+\alpha F=0$$

为了使自变量完全一致，可做简单变换 2kx= ，将此变换实行于 3 式：因

$$\frac{d}{dx}=2k$$

$$x\frac{d^2u}{dx^2}=\frac{\xi}{2k}(\frac{d\xi}{dx})^2\frac{d^2u}{d\xi^2}=2k\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}$$

$$\frac{du}{dx}=\frac{du}{d\xi}\frac{d\xi}{dx}=2k\frac{du}{d\xi}$$

代入 3 并且除 2k 后得到

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}+(2-\xi)\frac{du}{d\xi}+(\frac{me^2}{h^2k}-1)u=0$$

与 4 比较得

$$u(\xi)=F(\alpha,\gamma,\xi)=F(1-\frac{me^2}{h^2k},2,\xi)$$

根据 2 式，在 x>0 区间 ，束缚态的波函数写做

$$\psi(x)=xe^{-kx}u(x)=xe^{-kx}F(1-\frac{me^2}{h^2k},2,2kx)$$

2,能量量子化条件：合流超几何微分方程具有的特解 $F(\alpha,\gamma,\xi)$ 的展开形式是

$$F(\alpha,\gamma,\xi)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha(\alpha+1)\ldots\ldots(\alpha+n-1)}{\gamma(\gamma+1)\ldots\ldots(\gamma+n-1)}*\frac{\xi^n}{n!}$$

这个级数的邻项比值是

$$\lambda=\frac{\alpha+n-1}{\gamma+n-1}*\frac{\xi}{n}$$

当 n 甚大时 $\lambda=\frac{\xi}{n}$，但另一方面又知道 $e^{\xi}=\sum_{n}^{\infty}\frac{\xi^n}{n!}$ 的邻项比也是 $\frac{\xi}{n}$，

因此 $F(\alpha,\gamma,\xi)$ 与 e^{ξ} 具有相同的收敛性质，根据 2 式，如果 $u(\xi)$ 是一个无穷幂级数，则 $\psi(x)$ 具有一下函数的性质

$$\psi(x)\approx xe^{-kx}e^{\xi}=xe^{-kx+2kx}=xe^{kx}$$

这函数当 $x\longrightarrow\infty$ 是发散的，不符合波函数标准条件，因此级数 8 必须满足在某一项中断而变为多项式，假定这多项式的最高次幂为 n-1，即 ξ^n 的系数是 0，从 8 看出

$$\alpha+n-1=0$$

根据 6 有 $\alpha=1-\frac{me^2}{h^2k}$，因而

$$n=\frac{me^2}{h^2k}$$

但 $k=\frac{\sqrt{-2mE}}{h}$，代入（10）得：

$$E=\frac{-me^{h}}{2n^{2}h^{2}}\qquad（但 n=1,2,3,\cdots） \tag{11}$$

于是我们将到能量的量子化条件

最后，由于波函数具有两种宇称，因此波函数应有两种，每一种都分两个区间：

$$\Psi(x)=\begin{cases}Cxe^{-kx}\bullet F(1-\dfrac{me^{2}}{h^{2}k},2,2kx) & (x>0)\\ \pm Cxe^{kx}F(1-\dfrac{me^{2}}{h^{2}k},2,-2kx) & (x<0)\end{cases}$$

第二区间 $(x<0)$ 中的波函数前面冠以正负号，用正号时表示奇宇称解。用负号时表示偶宇称，C 则是与 k 有关的归一化常数。

第四章：力学量用算符表示

P186 15.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 ） $\left[\frac{1}{2}(AB+BA)\right]^{+}=\frac{1}{2}\left(B^{+}A^{+}+A^{+}B^{+}\right)=\frac{1}{2}(BA+AB)=\frac{1}{2}(AB+BA)$

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

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

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

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

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

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

则由（1）式，不难解得 $\quad F=F_{+}+iF_{-}$

4.1 证 $F(\hat{p})=\sum A_n\hat{p}^n$ (A_n是实数)是厄密算符

证明：此算符不能简化，可以用多次运算证明，首先假定已经证明动量是厄密算符，则

$$\iiint_{\tau}\psi^{*}\hat{p}\varphi d\tau=\iiint(\hat{p}\psi)^{*}\varphi\, d\tau$$

运用这个关系于下面的计算：

$$\iiint_{\tau}\psi^{*}\cdot F(\hat{P})\varphi d\tau\equiv\iiint_{\tau}\psi^{*}\cdot\Sigma A_n\hat{P}^{n}\varphi d\tau=\sum_{n}A_n\iiint_{\tau}\psi^{*}\cdot\hat{P}^{n}\varphi d\tau=\sum A_n\iiint\psi^{*}\cdot\hat{P}(\hat{P}^{n-1}\varphi)d\tau$$

$$=\sum A_n\iiint(\hat{P}\psi)^{*}\cdot(\hat{P}^{n-1}\varphi)d\tau=\sum A_n\iiint(P\psi)^{*}\cdot\hat{P}(\hat{P}^{n-2}\varphi)d\tau$$

$$=\sum A_n\iiint(\hat{P}\cdot\hat{P}\psi)^{*}\hat{P}(\hat{P}^{n-3}\varphi)d\tau$$

$$=\sum A_n\iiint(\hat{P}^2\psi)\bullet\hat{P}(\hat{p}^{n-3}\varphi)d\tau=\sum A_n(\hat{P}^2\psi)\bullet\hat{P}(\hat{p}^{n-4}\varphi)d\tau$$

$$=\cdots\cdots\sum A_n\iiint(\hat{P}^2\psi)\bullet\hat{P}(\hat{p}^{n-4}\varphi)d\tau$$

$$=\iiint_\tau[F(\hat{P})\psi]\bullet\varphi d\tau$$

$F(\hat{P})$满足厄密算符的定义。

4.2 证明 $\sum\limits_{m-n}A_{nm}\dfrac{\hat{p}^n x^m+x^m p^n}{2}$（$A_{nm}$实数）是厄密算符。

（证明）方法同前题，假定已经证明 $\hat{p},\hat{x}$ 都是厄密算符，即：

$$\iiint\psi^*\cdot\hat{p}\varphi d\tau=\iiint(\hat{p}\psi)^*\cdot\varphi d\tau$$

$$\iiint\psi^*\cdot\hat{x}\varphi d\tau=\iiint(x\psi)^*\cdot\varphi d\tau$$

又按题意得证算符是一维的

$$\int\psi^*\cdot\hat{p}^n\hat{x}^m\varphi dx=\int\psi^*\cdot\hat{p}(\hat{p}^{n-1}\hat{x}^m\varphi)dx=\int(\hat{p}\psi)^*\cdot(\hat{p}^{n-1}\hat{x}^m\varphi)dx$$

$$=\cdots\cdots\int(\hat{p}^n\psi)\bullet\hat{x}^m\varphi dx=\int(\hat{x}\hat{p}^n\psi)\bullet\hat{x}^{m-1}\varphi dx$$

$$=\cdots\cdots\int(\hat{x}^m\hat{p}^n\psi)^*\cdot\varphi dx$$

这证明 $\hat{p}^m\hat{x}^m$ 不是厄密算符，但满足

$$\int\psi^*\cdot(\hat{p}^n\hat{x}^m)\varphi dx=\int(\hat{x}^m\hat{p}^n\psi)^*\cdot\varphi dx$$

同理可证明

$$\int\psi^*\cdot(\hat{x}^m\hat{p}^n)\varphi dx=\int(\hat{p}^n\hat{x}^m\psi)^*\cdot\varphi dx$$

将前二式相加除2，得

$$\int\psi\bullet\frac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}\varphi dx=\int(\frac{\hat{x}^m\hat{p}^n+\hat{p}^n\hat{x}^m}{2}\psi)\bullet\varphi dx$$

因此 $\dfrac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}$ 是厄密算符，因此 $\sum\limits_{m-n}A_{nm}\dfrac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}$ 也是。

又假定用 $\hat{\mathbf{0}}^+=\hat{\mathbf{0}}$ 作为厄密算符 $\hat{0}$ 的定义，并设 $(\hat{A}\bullet\hat{B}\cdots\cdots)^+=(\cdots\hat{B}^+\bullet\hat{A}^+)$ 则本题可用较简方式来证明如下：

因为 $\hat{p}=\hat{p}^*$ $\quad\hat{x}=\hat{x}^*$

所以有 $\hat{p}^n=(\hat{p}^*)^n$ $\quad\hat{x}^m=(\hat{x}^*)^m$

$$(\hat{p}^n\hat{x}^m)^*=\{(\hat{p}^n)\bullet(\hat{x}^m)\}^*=(\hat{x}^m)^*(\hat{p}^n)^*=\hat{x}^m\hat{p}^n$$

同理有

$$(\hat{x}^m\hat{p}^n)^* = \{(\hat{x}^m)\bullet(\hat{p}^n)\}^* = (\hat{p}^n)^*(\hat{x}^m)^* = \hat{p}^n\hat{x}^m$$

相加除 2，得：

$$\{\frac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}\}^+ = \frac{\hat{x}^m\hat{p}^n+\hat{p}^n\hat{x}^m}{2}$$

这证明右方一式是厄密算符。

4.3 设 $[q,p]=i\hbar, f(q)$ 是 q 的可微函数，证明下述各式：[一维算符]

（1）$[q,p^2f(q)]=2i\hbar pf$.

（证明）根据题给的对易式及 $[q,f(q)]=0$;

$$[q,p^2f]=qp^2f-p^2fq=qp^2f-p^2qf$$

$$=qppf-p(pq)f=qppf-p(qp-i\hbar)f$$

$$=(qp-pq+\hbar i)pf=2\hbar ipf$$

（2）$[q,pf(q)p]=i\hbar(fq+pf)$（证明）同前一论题

$$[q,pfp]=qpfp-pfpq=qpfp-pf(qp-hi)$$

$$=qpfp-pfpq+hipf=qpfp-pqfp+hipf$$

$$=(qp-pq)fp+hipf=hi(fp+pf)$$

（3）$[q,f(q)p^2]=2i\hbar fp$ [证明]同前一题论据：

$$[q,fp^2]=qfpp-fppq=fqpp-fppq$$

$$=fqpp-fp(qp-\hbar i)=fqpp-fpqp+\hbar ifp$$

$$=f(qp-pq)p+\hbar ifp=2\hbar ifp$$

（4）$[p,p^2f(q)]=\frac{\hbar}{i}p^2f'$ [证明]根据题给对易式外，另外应用对易式

$$[p,f(q)]=\frac{\hbar}{i}f' \quad (f')\equiv\frac{df}{dq}$$

$$[p,p^2f]=p^2f-p^2fp=p^2(pf-fp)=p^2[p,f]=\frac{\hbar}{i}p^2f'$$

（5）$[p,pf(q)p]=\frac{\hbar}{i}pf'p$ （证明）论据同（4）：

$$[p,pfp]=p^2fp-pfp^2=p(pf-fp)p=\frac{\hbar}{i}pf'p$$

（6）$[p,f(q)p^2]=\frac{\hbar}{i}f'p^2$ （证明）论据同（4）：

$$[p,fp^2]=pfp^2-fp^2=(pf-fp)p^2=\frac{\hbar}{i}f'p^2$$

4.4 设算符 A，B 与它们的对易式[A，B]都对易。证明

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

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

(甲法）递推法，对第一公式左方，先将原来两项设法分裂成四项，分解出一个因式，再次分裂成六项，依次类推，可得待证式右方，步骤如下：

$[A,B^n]=AB^n-B^nA$

$=AB*B^{n-1}-B^{n-1}AB+B^{n-1}AB-B^nA$

$=[AB,B^{n-1}]+B^{n-1}[A,B]=AB^2*B^{n-2}-B^{n-2}AB^2+B^{n-2}AB^2-B^{n-1}AB+B^{n-1}[A,B]$

$=[AB^2,B^{n-2}]+B^{n-2}[A,B]B+B^{n-1}[A,B]$

按题目假设

$[A,B]B=B[A,B]$

因而 $[A,B^n]=[AB^2,B^{n-2}]+2B^{n-1}[A,B]$

重复运算 n-1 次以后，得

$[A,B^{n-1}]=[AB^{n-1},B]+(n-1)B^{n-1}[A,B]$

$=AB^n-BAB^{n-1}+(n-1)B^{n-1}[A,B]$

$=[AB-BA]B^{n-1}+(n-1)B^{n-1}[A,B]$

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

（乙法）数学归纳法，待证一式当 n=1 时，是明显成立的，假设当 m=k 时该式成立

现在计算$[A,B^{k+1}]$有:

$[A,B^{k+1}]=AB^{k+1}-B^{k+1}A$

$=(AB^k-B^kA)B+B^k(AB-BA)$

$=[A,B^k]B+B^k[A,B]$

利用前述的假设

$[A，B^{k+1}] = kB^{k-1}[A,B]B+B^{k}[A,B]$

但又按题目假设

$[A,B]B = B[A,B]$

$[A,B] = -[B,A]$

用于前一式得待证一式。

关于第二个公式也可按相同的步骤证明，不另列述。

但若第一式证实，则亦可从第一式推第二式，注意

$$[A，B] = -[B，A]$$

将第一式对易式中两算符对易得

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

再将文字 A，B 对易得

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

4.5 证明

$$[A,B^{n}] = \sum_{s=0}^{n-1} B^{s}[A,B]B^{n-s-1} \text{并由此证}$$

$$[q,p^{n}] = nihp^{n-1}$$

（证明）本题的证法与题四的第一法完全相同，只是条件 A，B 与[A，B]对易一点不能使用，即

$[A,B^{n}] = AB^{n}-B^{n}A = AB*B^{n-1}-B^{n-1}AB+B^{n-1}AB-B^{n-1}*BA$

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

$= [AB^{2},B^{n-2}]+B^{n-1}[A,B]B+B^{n-2}[A,B]$

$= AB^{n}-B^{n-2}AB^{2}+B^{n-2}[A,B]B+B^{n-2}[A,B]$

$= AB^{3}*B^{n-3}-B^{n-3}AB^{3}+B^{n-2}AB^{3}-B^{n-2}AB^{2}+B^{n-2}[AB]B+B^{n-1}[A,B]$

$= [AB^{3},B^{n-3}]+B^{n-2}[A,B]B^{2}+B^{n-2}[A,B]B+B^{n-1}[A,B]$

从原来的对易式经过总数 n-1 次运算后，得

$$[A,B^{n}] = \sum_{s=0}^{n-1} B^{s}[A,B]B^{n-s-1}$$

取 A=q，B=p，注意[q，p]=ih 代入前一式后，有

$$[q,p^{n}] = \sum_{s=0}^{n-1} p^{s}(hi)p^{n-s-1} = nhip^{n-1}$$

4.6 设 $F(x,p)$ 是 x,p 的整函数，证明

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

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

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

同理，

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

现在，

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

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

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

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

又

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

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

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

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

4.6 设F(x，p)是x_k，p_k的整函数，证明：

$$[p_k, F] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial F}{\partial x_k} \qquad (1)$$

$$[F, p_k] = i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k} \qquad (2)$$

整函数是指 $F[x,p] = \sum_{mn}\sum_{ki}^{123} C_{ki}^{mn} x_k^m p_i^n$，$C_{ki}^{mn}$ 是数值系数

[证明]本题照题给的表示式应当是三维的算符，其展开形式：

$$F[x,p] = \sum_{mn}\{C_{11}^{mn}x_1^m p_1^n + C_{12}^{mn}x_1^m p_2^n + C_{13}^{mn}x_1^m p_3^n + C_{21}^{mn}x_2^m p_1^n + C_{22}^{mn}x_2^m p_2^n$$

$$+ C_{23}^{mn}x_2^m p_3^n + C_{31}^{mn}x_3^m p_1^n + C_{32}^{mn}x_3^m p_2^n + C_{33}^{mn}x_3^m p_3^n\}$$

$$[p_x, F[x,p]] = [p_x, \sum_{\substack{mn\\ki}} C_{ki}^{mn} x_k^m p_i^n]$$

先证第一式 $= \sum_{\substack{mn\\ki}} C_{ki}^{mn}\{p_z x_k^m p_i^n - x_k^m p_i^n p_z\}]$

$$= \sum_{\substack{mn\\ki}} C_{ki}^{mn}\{(p_z x_k^m - x_k^m p_z)p_i^n + x_k^m(p_z p_i^n - p_i^n p_z)\}]$$

$$= \sum_{\substack{mn\\ki}} C_{ki}^{mn}\{[p_z, x_k^m]p_i^n + x_k^m[p_z, p_i^n]\} \qquad (1)$$

最后一式曲括号内第一项为 $z \neq k$ 时为 0，因为座标不同，$\boldsymbol{z = k}$ 时

$$[p_z, x_z^m] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_z}x_z^m$$

第二对易式$[p_z, p_i^n]$任何情形是零，因而⑴改写成：

$$\boldsymbol{[p_z, F(\vec{x}, \vec{p})] = \sum_{\substack{mn\\kl}} c_{kl}^{mn}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}(x_k^m)\cdot p_l^n \cdot \delta_{kz}}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_z}\sum c_{kl}^{mn} x_k^m p_l^n$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_z}F(\vec{x}, \vec{p}) \qquad (2)$$

第二式证明与前半题类似

$$[x_z, F(x,p)] = [x_z, \sum_{\substack{mn\\kl}} c_{kl}^{mn} x_k^m p_l^n]$$

$$=\sum c_{kl}^{mn}\{x_z x_k^m p_l^n - x_k^m x_l p_l^n + x_k^m x_z p_l^n - x_k^m p_l^n x_z\}$$

$$=\sum c_{kl}^{mn}\{[x_z, x_k^m]p_l^n + x_k^m[x_z, p_l^n]\} \qquad (3)$$

最后一式曲括号内$[x_z, x_k^m]=0$

$$[x_z, p_l^n]=\hbar i\frac{\partial}{\partial p_l}(p_l^n)\delta_{lz}$$

这公式的详细证明参看第3题，于是（3）式应写成

$$[x_z, F(\bar{x},\bar{p})]=\sum_{\substack{mn\\kl}} c_{kl}^{mn}x_k^m\hbar i\frac{\partial}{\partial p_l}(p_l^n)\delta_{lz}$$

$$=\hbar i\frac{\partial}{\partial p_z}\sum c_{kl}^{mn}x_k^m p_l^n$$

$$=\hbar i\frac{\partial}{\partial p_l}F(\bar{x},\bar{p})$$

这样，第二式得到了证明，这两类式子形式相似，是因为x, p是一对正则共轭量的缘故。

[10]证明 $\dfrac{[\hat{A},\hat{B}]}{i\hbar}=[A,B]$ 其中 A(p,q),B(p,q)是正则动量和坐标的函数，上式左方是相应的算符。{A,B}是经典力学中的 poisson 括弧在多变量情形

$$[A,B]\equiv\sum_i\left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\right)$$

i=1,2,3......i 自由度

（证明）本题意思是要证明等号两边式子等效，但左方是算符式，可以使用自变量$\hat{p},\hat{q}$ 间的对易关系进行变形，为了证明方便，可设定 $\hat{A},\hat{B}$ 的函数形式如下：

$$\hat{A}=\sum_{mn}C_{mn}\hat{q}^m\hat{p}^n$$

$$\hat{B}=\sum_{kl}C_{kl}\hat{q}^k\hat{p}^l$$

式中 C_{mn},D_{kl} 是指两组已知的复数，若 $\hat{A},\hat{B}$ 不能用的形式表示，则下面的证法无效，按此假设，可进行下述的变形运算：

I≡[A,B]= $\sum_{mn}\sum_{kl}C_{mn}D_{kl}\{q^m p^n q^k p^l - q^k p^l q^m p^n\}$

$$=\sum\sum C_{mn}D_{kl}\{q^m(p^n q^k)p^l - q^m(p^k q^n)p^l + q^k(q^m p^l)p^n - q^k(p^l q^m)p^n\}$$

$$=\sum_{mn}\sum_{kl}C_{mn}D_{kl}\{q^m[p^n,q^k]p^l - q^k[p^l,q^m]p^n\}$$

$$=\sum_{mn}\sum_{kl}C_{mn}D_{kl}\{q^k[q^m,p^l]p^n - q^m[q^k,p^n]p^l\}$$

最后一式中出现座标的幂、动量幂之间的对易式，这类对易式的简化并未有过，需做专门的计算；兹以 $[q^m,p^l]$ 的简化为例：

$$[q^m,p^l]\equiv q^m p^l - p^l q^m$$

试将此对易式的第一项加以连续变形，并且运用已证过的公式：

$$[p,f(q)]=-hi\frac{\partial f}{\partial q} \qquad (4)$$

$$q^m p^l=(q^m p)\bullet p^{l-1} \qquad (5)$$

利用（4）式，令 $f(q)=q^m$ 则有以下诸式：

或： $q^m p = pq^m + himq^{m-1}$ （6）

同理有 $q^{m-1}p = pq^{m-1} + hi(m-1)q^{m-2}$ （7）

依次类推……………………………………

将（6）式代入（5）有：

$$q^m p^l=(pq^m + himq^{m-1})p^{l-1}$$

$$= pq^m p^{l-2} + himq^{m-1}p^{l-1} \qquad (8)$$

将最后一式第一项分解，重复应用（6）：

$$
\begin{aligned}
q^m p^l &= p\left(q^m p\right)p^{l-2} + himq^{m-1}p^{l-1} \\
&= p\left(pq^m + himq^{m-1}\right)p^{l-2} + himq^{m-1}p^{l-1} \\
&= p^2 q^m p^{l-2} + himpq^{m-1}p^{l-2} + himq^{m-1}p^{l-1}
\end{aligned}
$$

运用式（7）于前式中的 pq^{m-1}：

$$
\begin{aligned}
q^m p^l &= p^2 q^m p^{l-2} + him\left[q^{m-1}p - hi(m-1)q^{m-2}\right]p^{l-1} \\
&\quad + himq^{m-1}p^{l-1} \\
&= p^2 q^m p^{l-2} + 2himq^{m-1}p^{l-1} \\
&\quad + h^2 m(m-1)q^{m-2}p^{l-2} \qquad (9)
\end{aligned}
$$

物 83-309 蒋

与（8）式比较，增加 h^2 的高阶次。

$$
\begin{aligned}
q^m p^l &= p^2 (pq^m + himq^{m-1})p^{l-3} \\
&\quad + 2himq^{m-1}p^{l-1} + h^2 m(m-1)q^{m-2}p^{l-2} \\
&= p^3 q^m p^{l-3} + himp\left[q^{m-1}p - hi(m-1)q^{m-2}\right]p^{l-3} \\
&\quad + 2himq^{m-1}p^{l-1} + h^2 m(m-1)q^{m-2}p^{l-2} \\
&= p^3 q^m p^{l-3} + himpq^{m-1}p^{l-2} + h^2 m(m-1)pq^{m-2}p^{l-3} \\
&\quad + 2himq^{m-1}p^{l-1} + h^2 m(m-1)q^{m-2}p^{l-2} \\
&= p^3 q^m p^{l-3} + him\left[q^{m-1}p - hi(m-1)q^{m-2}\right]p^{l-3} \\
&\quad + h^2 m(m-1)\left[q^{m-2}p - hi(m-2)q^{m-3}\right]p^{l-3} \\
&\quad + 2himq^{m-1}p^{l-1} + h^2 m(m-1)q^{m-2}p^{l-2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
q^m p^l &= p^3 q^m p^{l-3} + 3himq^{m-1}p^{l-1} \\
&\quad + 3h^2 m(m-1)q^{m-2}p^{l-2} + \\
&\quad - h^3 im(m-1)(m-2)q^{m-3}p^{l-3} \qquad (10)
\end{aligned}
$$

按同样方法连续变形 l 次，得到下式；式中假设 $m > l$ 。

$$
\begin{aligned}
q^m p^l &= p^l q^m + (hi)lmq^{m-2}p^{l-1} - (hi)^2 \bullet \frac{l(l-1)}{2!} \\
&\quad \bullet m(m-1)q^{m-2}p^{l-2} + \cdots\cdots(-1)^{\gamma-1}(hi)^{\gamma}\frac{l\cdots(l-\gamma+1)}{\gamma!}m
\end{aligned}
$$

$$\cdots(m-\gamma+1)q^{m-\gamma}p^{l-\gamma}+$$

$$\cdots(-1)^{l-1}(hi)^{l}\bullet m\cdots(m-l+1)q^{m-l}$$

或改写作：

$$[q^{m},p^{l}]=(hi)lmq^{m-1}p^{l-1}-(hi)^{l}\frac{l(l-1)}{2!}m(m-1)q^{m-2}p^{l-2}+\cdots$$

$$\cdots\cdots(-1)^{l-1}(hi)^{l}m\cdots(m-l+1)q^{m-1} \qquad (11)$$

将此式代到（3）式中，得下式：

$$[A,B]=\sum_{mn}\sum_{kl}C_{mn}D_{kl}\{q^{k}[hilmq^{m-1}p^{l-2}$$

$$+\frac{h^{2}}{2}l(l-1)m(m-1)q^{m-2}p^{l-2}+\cdots]p^{n}-q^{m}[hiknq^{k-1}p^{n-1}+$$

$$\frac{1}{2}\hbar^{2}n(n-1)k(k-1)q^{k-2}p^{n-2}+.....]p^{l}\}=$$

$\sum_{mn}\sum_{kl}C_{mn}D_{kl}\{\hbar l(lm-kn)q^{m+k-1}p^{n+l-1}+\hbar^{2}[l(l+1)m(m+1)-n(n-1)k(k-1)]q^{m+k-2}p^{n+l-2}+\hbar^{2}$以上幂$\}$将这对易式遍乘以$\hbar i$，则右方各项中，第一项将与$\hbar i$无关，第二项以后含$\hbar i$以上的幂，取极限$\hbar i\to 0$时将留下第一项

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{[\hat{A},\hat{B}]}{\hbar i}=\sum_{mn}\sum_{kl}(lm-kn)q^{m+k-1}p^{n+l-1}C_{mn}\cdot D_{kl} \qquad (12)$$

其次再考察题给公式等号右方的泊松括号，（用正则座标和正则动量表示的式子），我们论证的情形中，自由度$\varepsilon=1$，因而$p_{i}=p\quad q_{i}=q$按经典力学定义：

$$\{A,B\}=\sum_{i}(\frac{\partial A}{\partial q_{i}}\frac{\partial B}{\partial p_{i}}-\frac{\partial A}{\partial p_{i}}\frac{\partial B}{\partial q_{i}})$$

$$=\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p}-\frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q}=\frac{\partial}{\partial q}\sum_{mn}C_{mn}q^{m}p^{n}$$

$$\frac{\partial}{\partial p}\sum D_{kl}q^{k}p^{l}-\frac{\partial}{\partial p}\sum C_{mn}q^{m}p^{n}$$

$$\frac{\partial}{\partial q}\sum D_{kl}q^{k}p^{l}$$

$$=\sum_{mn}\sum_{kl}C_{mn}D_{kl}(mq^{m-1}p^{n}\cdot lq^{k}p^{l-1}-nq^{m}p^{n-1}\cdot kq^{k-1}p^{l})$$

$$=\sum_{mn}\sum_{kl}C_{mn}D_{kl}(lm-kn)q^{m+k-1}p^{n+l-1} \qquad (13)$$

两种计算的结果相同，因而题给的结果相同，因而题给的公式得到证实。

4.8 证明，若 $\frac{\partial^n}{\partial x^n}\psi$ 当 $x \to \infty$ 时并不趋于 0，则 $(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x})^{n+2}$ 不一定是厄密算符。

（证明）设 ψ,φ 是任选的两个函数，适用分步法计算下列积分

$$\int_{x=\infty} \psi^*(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}\varphi\, dx = \int \psi^*\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x})^n\varphi\, dx$$

$$= \int \psi^*\frac{h}{i}d(\frac{h}{i})^n\frac{\partial^n\varphi}{\partial x^n}\varphi\, dx$$

$$= (\frac{h}{i})^{n+1}\psi^*(x)(\frac{\partial^n\varphi}{\partial x^n})|_{-\infty}^{\infty} \qquad \int(\frac{h}{i}\frac{\partial^n\psi}{\partial x^n})^*(\frac{h}{i})^n\frac{\partial^n\varphi}{\partial x^n}\, dx$$

继续将后一积分作分步运算，共作 n 次，其结果将是：

$$\int_{x=-\infty}^{\infty}\psi^*(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}\varphi\, dx =$$

$$(\frac{h}{i})^{n+1}\{\psi^*\frac{\partial^n\varphi}{\partial x^n} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial^{n-1}\varphi}{\partial x^{n-1}} + \frac{\partial^2\varphi^*}{\partial x^2}*\frac{\partial^{n-2}\varphi}{\partial x^{n-2}}\cdots\cdots\cdots\cdots(-1)^n\frac{\partial^n\psi^*}{\partial x^n}\varphi\}_{x=-\infty}^{x=\infty}$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{h}{i}\frac{\partial^{n+2}\psi}{\partial x^{n+2}})^*\varphi\, dx$$

由此计算可知若大括号里总和为 0，则算符 $(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x})^{n+1}$ 符合厄密算符定义，但按题意 $x \to \infty$ 时，$\frac{\partial^n\psi}{\partial x^n}$ 不趋于 0，因此我们无法证明大括号里总和为 0

4.9——3.13

4.10 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：

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

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

4.11——4.1　　4.12——4.2　　4.13——4.3

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

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

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）

$$\begin{aligned}[Lx,F]&=[ypz-zpy,F]=y[p_z,F]+[y,F]p_z-z[p_y,F]-[z,F]p_y\\&\overset{(4.2题)}{=}-i\hbar y\frac{\partial F}{\partial z}+i\hbar\frac{\partial F}{\partial y}p_z+i\hbar z\frac{\partial F}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_z}p_y\\&=i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial p_y}p_z-\frac{\partial F}{\partial p_z}p_y\right)-i\hbar\left(y\frac{\partial F}{\partial z}-z\frac{\partial F}{\partial y}\right)\\&=i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial\vec{p}}\times\vec{p}\right)_x-i\hbar\left(\vec{r}\times\frac{\partial F}{\partial\vec{r}}\right)_x\end{aligned}\tag{3}$$

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）

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

将式（3）、（4）、（5）代入式（2），于是（1）式得证。

4.14——4.6
4.15——4.7，4.10
4.16——4.4
4.17——4.5

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

(c)　　$[r,p_r]=i\hbar$，

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

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

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

$$\therefore\quad p_r^+ = \frac12\left(\frac1r\vec r\cdot\vec p+\vec p\cdot\vec r\frac1r\right)^+ = \frac12\left[\vec p^{\,+}\cdot\vec r^{\,+}\left(\frac1r\right)^+ + \left(\frac1r\right)^+\vec r^{\,+}\cdot\vec p^{\,+}\right]$$

$$= \frac12\left(\vec p\cdot\vec r\frac1r+\frac1r\vec r\cdot\vec p\right) = p_{\mathrm r}$$

即 $p_{\mathrm r}$ 为厄米算符。

(b) $$p_{\mathrm r} = \frac12\left(\frac1r\vec r\cdot\vec p+\vec p\cdot\vec r\frac1r\right) = \frac12\left[\left(\frac{\vec r}{r}\cdot\vec p\right)+\left(\frac{\vec r}{r}\cdot\vec p\right)+\left(-i\hbar\nabla\cdot\frac{\vec r}{r}\right)\right]$$

$$= \frac{\vec r}{r}\cdot\vec p-\frac{i\hbar}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\vec r}{r}\right) = -i\hbar\frac{\vec r}{r}\cdot\nabla-\frac{i\hbar}{2}\left[\frac1r\nabla\cdot\vec r+\vec r\cdot\nabla\frac1r\right]$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\frac{i\hbar}{2}\left(\frac3r-\vec r\cdot\frac{\vec r}{r^3}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\frac{i\hbar}{2}\left(\frac3r-\frac1r\right)$$

$$= -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac1r\right)$$

(c) $$[r,p_r] = -i\hbar\left[r,\frac{\partial}{\partial r}+\frac1r\right] = -i\hbar\left[r,\frac{\partial}{\partial r}\right] = -i\hbar\left(r\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\partial}{\partial r}r\right)$$

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

(d) $$p_r^{\ 2} \overset{(b)}{=} -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac1r\right)^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac1r\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}\frac1r+\frac{1}{r^2}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac1r\frac{\partial}{\partial r}+\frac1r\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r^2}+\frac{1}{r^2}\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac2r\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

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

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

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

以 r^{-2} 左乘上式各项，即得

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

4.18——4.8

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$=[\vec Lp^2-\vec p(\vec L\cdot\vec p)]\cdot\vec L=L^2p^2$ 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），

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

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

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

$$\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\times\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\right]_x=\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{p}L_x+i\hbar\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\left(p_z\vec{e_z}-p_y\vec{e_y}\right)-\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{L}\right]p_z$$

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

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

类似地。可以得到 y 分量和 z 分量的公式，故（4）题得证。

4.19——4.9，4.11
4.20——4.12，4.13

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4.21 利用测不准系估计谐振子的基态能量

[解]写下一维谐振子的经典的能量公式，或算符关系式：

$$\hat{E}=\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{m\omega^2x^2}{2}=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2} \qquad (1)$$

取能量的平均值：

$$\overline{E}=\frac{1}{2m}\overline{p^2}+\frac{m\omega^2}{2}\overline{x^2}$$

在一维谐振子的情形，座标的平均值 $\overline{x}=0$，动量平均值 $\overline{p}=0$ 计算坐标和动量的“不确定度”（即均方根偏差）$\delta x,\delta p$。

按一般公式 $$(\delta x)^2=\overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}-(\overline{x})^2=\overline{x^2}$$

$$(\delta p)^2=\overline{(p-\overline{p})^2}=\overline{p^2}-(\overline{p})^2=\overline{p^2} \qquad (2)$$

因此能量平均值公式（1）可改用“不确定度”表示

$$\overline{E}=\frac{1}{2m}(\delta p)^2+\frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2 \qquad (3)$$

但根据测不准关系式：

$$\delta p\cdot\delta x\geq\frac{\hbar}{2}$$

作为估计，可以直接取其下限，即认为

$$\delta p\cdot\delta x\cong\frac{\hbar}{2} \qquad \delta p\cong\frac{\hbar/2}{\delta x}$$

将此结果代入式（3），并且计算 $\overline{E}$ 的极小值，就是所求的基态能量：

$$\overline{E}(\delta x)=\frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2+\frac{\hbar}{8m(\delta x)^2}$$

$$=\frac{m\omega^2}{2}\{\delta x-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{1}{\delta x}\}^2+\frac{\hbar\omega}{2}$$

用此取括号内值为零的条件，得

$$\overline{E}_{\min}=\frac{\hbar\omega}{2}$$

这时 $\delta x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

4.22 利用测不准关系估计类氢原子中电子的基态能量（设原子核带电 Ze）。

（解）本题原是三维问题，但作为估计，计算不需严格正确，方法同前题。

$$\hat{E}=\frac{\hat{p}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r} \qquad (1)$$

取能量的平均值，由于中心对称性，可以认为动量的平均值是零 $\overline{p}=0$，（这个平均值本是个矢量，但它的分量都是零）因此 $(\delta p)^2\cong\overline{p^2}$，此外，根据计算（第六章九题）知道在氢原子情形，$\bar{r}=3a/2$　$\overline{r^2}=3a^2$，因而

$\delta r=\frac{\sqrt{3}a}{2}\cong a$。此外 $\overline{(\frac{1}{r})}=\frac{1}{a}$，$\overline{(\frac{1}{r^2})}=\frac{2}{a^2}$，所以 $\delta(\frac{1}{r})=\frac{1}{a}$，因此为计算方便，可取

$$\delta(\frac{1}{r})=\frac{1}{\delta r},\qquad \boldsymbol{\Delta r\sim\bar{r}}$$

对能量关系式取平均值

$$\boldsymbol{\overline{E}=\frac{\bar{p}^2}{2m}-\overline{(\frac{Ze^2}{r})}=\frac{(\delta p)^2}{2m}-\frac{Ze^2}{(\delta r)}} \qquad (3)$$

利用测不准关系式，可以计算（3）的极值，但 p 与 r 之间并无已知的对易关系式，此可作一维问题处理，认为 $\delta p\cdot\delta r\geq\frac{\hbar}{2}$，并用

$$\delta p\cdot\delta r=\hbar \qquad (4)$$

则（3）式成为：$\overline{E}(\delta p)=\frac{(\delta p)^2}{2m}-\frac{Ze^2}{\hbar}(\delta p)$

$$=\frac{1}{2m}\{(\delta p)^2-\frac{2mZe^2}{\hbar}\delta p+\frac{Z^2m^2e^4}{\hbar^2}\}-\frac{Z^2me^4}{2\hbar^2}$$

$$=\frac{1}{2m}(\delta p-\frac{Zme^2}{\hbar})^2-\frac{Z^2me^4}{2\hbar}$$

当取 $\delta p=\frac{Zme^2}{\hbar}$ 时，E 有极小值

$\overline{E}_{\min}=-\frac{Z^2me^4}{2\hbar}$ 就是基态能量

4.22 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$\psi_{100}=\sqrt{\dfrac{1}{\pi a^3}}e^{-r/a}$，仅是$r$的函数。

而$\nabla=\vec{e_r}\dfrac{d}{dr}+\vec{e_\theta}\dfrac{1}{r}\dfrac{d}{d\theta}+\vec{e_\varphi}\dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{d}{d\varphi}$，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：

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

而$H=\dfrac{p^2}{2u}-\dfrac{ze^2}{r}$，如果只考虑基态，它可写为$H=\dfrac{p_r{}^2}{2u}-\dfrac{ze^2}{r}$，$p_r=-i\hbar\left(\dfrac{d}{dr}+\dfrac{1}{r}\right)$

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

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

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

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

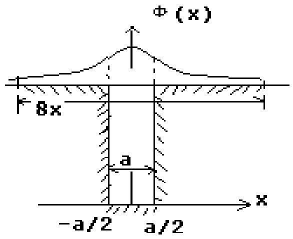
基态能量，$\boldsymbol{E\sim-mz^2e^4/2\hbar^2=-ze^2/2a}$

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

4.23 没找到答案

4.24 在一维对称势阱中，粒子至少存在一种束缚态（见 3.1 节）在给定势阱深度V_0情况下，减少势阱宽度a，使$a^2<<\dfrac{\hbar}{mV_0}$，粒子动量不确定度$\delta p=\sqrt{mV_0}$位置不确定度$\delta x=a$，因而下列关系似乎存在$\delta p\cdot\delta x=\sqrt{mV_0}a<<\hbar$，这与测不准确关系矛盾，错误何在？

（解）在一维有限深（V_0）势阱的问题中，以势阱中点作为原点时，至少有一个偶宇称的束缚定态，其能量 E 决定于条件：$\sqrt{E}\lg\frac{\sqrt{2mEa}}{2\hbar}=\sqrt{V_0-E}$



因此这个基态能级 E 与 a,V_0 有关，a 甚小时，E 也甚小，座标不确定度 δx 不能简单的用势阱宽度 a 来估计，估计值只需正确到数量级，势阱两边的波函数是

$$\psi(x)=Ce^{kix}\quad (x<-\frac{a}{2})$$

$$\psi(x)=Ce^{-kix}\quad (x>\frac{a}{2})$$

可设波宽度扩展到振幅 $\frac{1}{e}$ 处，即 $Ce^{-k'\cdot(\frac{\delta x}{2})}\le Ce^{-1}$，得

$$\delta x\ge\frac{2}{k'}=\sqrt{\frac{2}{m(V_0-E)}}\hbar\approx\sqrt{\frac{2}{mV_0}}\hbar \qquad a\text{ 小时}\quad V_0-E\approx V_0$$

因此 $\delta x\delta p\ge\sqrt{\frac{2}{mV_0}}\hbar\cdot\sqrt{mV_0}=\sqrt{2}\hbar\ge\frac{\hbar}{2}$

这与测不准不相矛盾，题给论点的错误，在于随意地估计小几率波的范围。

4.25 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：

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

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

$$\boldsymbol{p_i}=\left\langle\Psi\left|\hat{p}_i\right|\Psi\right\rangle=\frac{u}{i\hbar}\langle\Psi|[x_i,H]\Psi\rangle=\frac{u}{i\hbar}\left(\langle\Psi|x_iH|\Psi\rangle-\langle\Psi|Hx_i|\Psi\rangle\right)$$

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

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。

4.26 证明对任何两个波函数ψ，φ，满足下述施瓦茨的不等式：

$$|(\psi,\varphi)| \le \sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$$

（证明）本题有一定的证明法，它和海森伯的测不准关系式的普遍证法相类似，首先，寻找一个含有ψ，φ的复平方式子，令这个式子大于零，经过试探性计算，知道采取下式有效：

$$I = |\psi - \lambda\varphi|^2 = \iiint(\psi^* - \lambda^*\varphi^*)(\psi - \lambda\varphi)d\tau \ge 0$$

此式中的λ尚待选择，将前式展开写成标识和形式：

$$I = (\psi,\psi) - \lambda(\psi,\varphi) - \lambda^*(\varphi,\psi) + \lambda^*\lambda(\varphi,\varphi) \qquad (1)$$

前式中第一，四二项恒为正，二，三两项符号不定，我们这样来选取λ，使它能使I的二个异号项抵消，由于λ未定，这种选择是可能的：

$$I = (\psi,\psi) - \lambda(\psi,\varphi) - \lambda^*[(\varphi,\psi) - \lambda(\varphi,\varphi)] \ge 0 \qquad (2)$$

选取方括号内项为零，得$\lambda = \dfrac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}$，于是：$\lambda^* = \dfrac{(\varphi,\psi)^*}{(\varphi,\varphi)^*} = \dfrac{(\psi,\varphi)}{(\varphi,\varphi)}$

代入（2）得：$I = (\psi,\psi) - \dfrac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}(\psi,\varphi) \ge 0$ （3）

此式即待证的一个不等式。本题也可以在一开始就假设下式成立：

$\left|\psi - \dfrac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}\right|^2 \ge 0$将它展开后稍加变形，使能待证。

4.27——4.16

4.28 求证力学量x与$F(p_x)$的测不准关系：

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta F)^2}} \ge \frac{\hbar}{2}\frac{\partial F}{\partial p_x}$$

（证明）根据（课本）测不准的普遍公式，若$\hat{A},\hat{B}$为任两个力学算符，$\Delta A,\Delta B$为它们的偏差，$\delta A,\delta B$为不确定度，则：

$$\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta B)^2} \ge \frac{1}{4}\left|\overline{[\hat{A},\hat{B}]}\right|^2$$

或$\boldsymbol{\delta A\delta B \ge \dfrac{1}{2}\left|\overline{[\hat{A},\hat{B}]}\right|}$ （1）

本题中$\hat{A} = x, \hat{B} = F(P_x)$因此，有关的测不准关系写成：

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta F)^2}}\geq\frac{1}{2}\left|\overline{[x,F(P_x)]}\right| \qquad (2)$$

在本章第（11）题的第二个公式已指出

$$[x,F(p_x)]=\hbar i\frac{\partial F}{\partial p_x}$$

代入（2），就得到待证的公式。

4.29——6.1

4.29 证明在 $\hat{\boldsymbol{L}}_z$ 的本征态下，$\overline{L_x}=\overline{L_y}=0$。（提示：利用 $L_yL_z-L_zL_y=i\hbar L_x$，求平均。）

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

∵ $[\mathrm{L_y},\mathrm{L_z}]=\mathrm{L_yL_z}-\mathrm{L_zL_y}=i\hbar L_x$， $[\mathrm{L_z},\mathrm{L_x}]=\mathrm{L_zL_x}-\mathrm{L_xL_z}=i\hbar L_y$，

$$\therefore\quad \overline{\boldsymbol{L}_x}=\frac{1}{i\hbar}\left(\langle\Psi|L_yL_z|\Psi\rangle-\langle\Psi|L_zL_y|\Psi\rangle\right)=\frac{1}{i\hbar}\left(\langle\Psi|L_yL_z|\Psi\rangle-\langle\Psi|L_zL_y|\Psi\rangle\right)$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\left(m\hbar\langle\Psi|L_y|\Psi\rangle-m\hbar\langle\Psi|L_y|\Psi\rangle\right)=0$$

同理有：$\overline{L_y}=0$。

附带指出，虽然 $\hat{l}_x$，$\hat{l}_y$ 在 $\hat{l}_x$ 本征态中平均值是零，但乘积 $\hat{l}_x\hat{l}_y$ 的平均值不为零，能够证明：$\overline{l_xl_y}=\frac{1}{2}m\hbar^2 i=-\overline{l_xl_y}$，说明 $\hat{l}_x\hat{l}_y$ 不是厄密的。$\hat{l}_x^2$，$\hat{l}_y^2$ 的平均值见下题。

4.30 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

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

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

可得算符关系 $i\hbar L_x{}^2=i\hbar L_xL_x=(L_yL_z-L_zL_y)L_x=L_y(L_zL_x)-L_zL_yL_x$

$$=L_y(L_xL_z+i\hbar L_y)-L_zL_yL_x=i\hbar L_y{}^2+L_yL_xL_z-L_zL_yL_x$$

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

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

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

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

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

（补白）若需要严格论证 l_x^2 与 l_y^2 的相等关系，可设

$$\hat{l}_+ \equiv \hat{l}_x + i\hat{l}_y \qquad \hat{l}_- \equiv \hat{l}_x - i\hat{l}_y$$

于是有 $\hat{l}_x = \frac{1}{2}(\hat{l}_+ + \hat{l}_-) \qquad \hat{l}_y = \frac{i}{2}(\hat{l}_- - \hat{l}_+)$

求其符 $\hat{l}_x^2$ 的平方，用 $\hat{l}_+\hat{l}_-$ 来表示：

$$\hat{l}_x^2 = \frac{1}{4}(\hat{l}_+\hat{l}_+ + \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_-\hat{l}_-)$$

$$\hat{l}_y^2 = \frac{1}{4}(\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+ - \hat{l}_+\hat{l}_+ - \hat{l}_-\hat{l}_-)$$

再求它们在态 Y_{im} 中的平均值，在表示式中用标乘积符号时是

$$\hat{l}_x^2 = (Y_{im}, \frac{1}{4}(\hat{l}_+\hat{l}_+ + \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_-\hat{l}_-)Y_{im}) \qquad (1)$$

$$\hat{l}_y^2 = (Y_{im}, \frac{1}{4}(\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+ - \hat{l}_+\hat{l}_+ - \hat{l}_-\hat{l}_-)Y_{im}) \qquad (2)$$

或都改写成积分形式如下，积分是对空间立体角取范围的：

$$\bar{l}_x^2 = \frac{1}{4}\iint_\Omega (Y^*{}_{im}(\hat{l}_+\hat{l}_+ + \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_-\hat{l}_-)Y_{im} d\Omega \qquad (3)$$

$$\bar{l}_y^2 = \frac{1}{4}\iint_\Omega (Y^*{}_{im}(\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+ - \hat{l}_+\hat{l}_+ - \hat{l}_-\hat{l}_-)Y_{im} d\Omega \qquad (4)$$

按角动量理论：$\hat{l}_+ Y_{im} = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar Y_{i,m+1}$

$$\hat{l}_- Y_{im} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar Y_{i,m-1} \qquad (5)$$

和正交归一化条件：$\iint Y^*{}_{i'm'} Y_{im} d\Omega = \delta_{i',i',m',m}$ （6）

将运算公式（5）使用于（3）式的各项，得结果如下：

$$\iint Y^*{}_{im}\hat{l}_+\hat{l}_+ Y_{im} d\Omega = 常数 \times \iint Y^*{}_{im} Y_{i,m+2} d\Omega = 0$$

$$\iint Y^*{}_{im}\hat{l}_-\hat{l}_- Y_{im} d\Omega = 常数 \times \iint Y^*{}_{im} Y_{i,m-2} d\Omega = 0$$

$$\iint Y^*{}_{im}\hat{l}_+\hat{l}_- Y_{im} d\Omega = (l+m)(l-m+1)\hbar^2$$

$$\iint Y^*{}_{im}\hat{l}_-\hat{l}_+ Y_{im} d\Omega = (l-m)(l+m+1)\hbar^2$$

注意上述每一个积分的被积函数都要使用（5）的两个式子作重复运算，
再代进积分式中，如：

$$\hat{l}_+\hat{l}_-Y_{lm} = \hat{l}_+\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar Y_{l,m-1}$$

$$= \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar \cdot \hat{l}_+ Y_{l,m-1}$$

$$= \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar\sqrt{[l-(m-1)][(l+(m-1)+1]}\hbar \cdot Y_{l,m}$$

将它们代入（3）就得到前一法（考虑l_x, l_y对称）得到相同的结果。

$$\bar{l}_x^2 = \frac{1}{4}[(l+m)(l-m+1)\hbar^2 + (l-m)(l+m+1)\hbar^2]$$

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

又从（4）式看出，由于$\hat{l}_+\hat{l}_+, \hat{l}_-\hat{l}_-$没有贡献，（3）（4）应有相同的结果。第二种方法运用角动量一般理论，这在第四章中并没有准备知识，所以用本法解题不符合要求，只作为一种参考材料。

4.30——6.2
4.31——6.5，6.9，6.14

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

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

（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$\frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}(\mathbf{1}\quad\mathbf{0}\quad-\mathbf{1})\mathbf{C}_1\begin{pmatrix}\mathbf{1}\\\mathbf{0}\\\mathbf{0}\end{pmatrix}=\frac{\boldsymbol{C_1}}{\sqrt{\mathbf{2}}}$，$L_x$取0的几率为$|C_1|^2/2$；

L_x取$\hbar$的振幅为$\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}(\mathbf{1}\quad\sqrt{\mathbf{2}}\quad\mathbf{1})\mathbf{C}_1\begin{pmatrix}\mathbf{1}\\\mathbf{0}\\\mathbf{0}\end{pmatrix}=\boldsymbol{C_1}/\mathbf{2}$，相应的几率为$|C_1|^2/4$；

L_x取$-\hbar$的振幅为$\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}(\mathbf{1}\quad-\sqrt{\mathbf{2}}\quad\mathbf{1})\mathbf{C}_1\begin{pmatrix}\mathbf{1}\\\mathbf{0}\\\mathbf{0}\end{pmatrix}=\boldsymbol{C_1}/\mathbf{2}$，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。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$\frac{3}{8}|C_2|^2$；

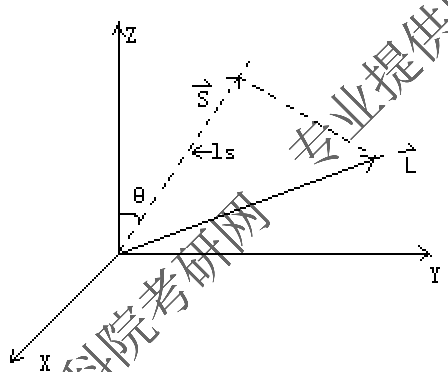
v）$\lambda=-2$，$b=-2a$，$c=\sqrt{6}a$，$d=-2a$，$e=a$，本征矢为$\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\-2\\\sqrt{6}\\-2\\1\end{pmatrix}$，在$C_2Y_{20}$态下，测得$L_x=-2\hbar$的几率为$\frac{3}{8}|C_2|^2$。

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

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：

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

4.32 求证在$\hat{\boldsymbol{l}}_z$的本征态下，角动量沿着与z轴成θ的角度的方向上的分量的平均值是：$m\hbar\cos\theta$。



（解）角动量$\hat{\vec{l}}$沿着与z成θ解的方向（此方向用单位矢$\vec{S}$表示，它不是唯一的，因由方位角φ给定），有一投影$\hat{\boldsymbol{l}}'$，它的解析式是：

$$\vec{s}=\vec{i}\sin\theta\cos\varphi+\vec{j}\sin\theta\sin\varphi+\vec{k}\cos\theta$$

$$\begin{aligned}\hat{l}'=\vec{l}\cdot\vec{s}&=(\vec{i}\hat{l}_x+\vec{j}\hat{l}_y+\vec{k}\hat{l}_z)\cdot(\vec{i}\sin\theta\cos\varphi+\vec{j}\sin\theta\sin\varphi+\vec{k}\cos\theta)\\&=\sin\theta\cos\varphi\hat{l}_x+\sin\theta\sin\varphi\hat{l}_y+\cos\theta\hat{l}_z\end{aligned}\qquad(1)$$

计算在$\hat{l}_z$的本征态Y_{im}中角动量投影$\hat{\boldsymbol{l}}'$的平均值：

$$\overline{\boldsymbol{l}'}=\iint_{\Omega} Y_{im}{}^*(\sin\theta\cos\varphi\hat{l}_x)Y_{im}d\Omega+\iint Y_{im}{}^*(\sin\theta\sin\varphi\cdot\hat{l}_y)Y_{im}d\Omega+\iint Y_{im}{}^*(\sin\theta\cdot\hat{l}_z)Y_{im}d\Omega \qquad (2)$$

式中$d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi$　根据（29）题的结论，$\hat{l}_z$本征态下$\overline{\boldsymbol{l}_x}=\boldsymbol{0}$，$\overline{l_y}=0$故前一式

第一，二两个积分无贡献，由于：$\hat{l}_z Y_{im}=m\hbar Y_{im}$，因而$\overline{\boldsymbol{l}'}=\boldsymbol{m\hbar\cos\theta}$ （3）

4.33 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：　$\varphi_1=a\psi_1=\dfrac{1}{\sqrt{(\psi_1,\psi_1)}}\psi_1$

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

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

$\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3$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）。

4.33 设属于某能级 E 的三个简并态$(\Psi_1\Psi_2\Psi_3)$彼此线性无关但不正交，试找出三个正交归一化的波函数，它们是否仍为简并？

（解）用 Schmidt 法

选　$\boldsymbol{\varphi_1=\Psi_1/\sqrt{\int_\tau \Psi_1{}^*\Psi_1 d\tau}}$　　（1）则Ψ_1被归一化了。

选　$\boldsymbol{\varphi_2'=\Psi_2-(\int_\tau \Psi_2\varphi_1{}^*d\tau)\varphi_1}$　　（2）则

$\boldsymbol{\int_\tau \varphi_2'\varphi_1{}^*d\tau=\int\varphi_1{}^*\Psi_2 d\tau-(\int\Psi_2\varphi_1{}^*d\tau)(\int\varphi_1{}^*\varphi_1 d\tau)=0}$　故φ_3',φ_1正交。

使 $\varphi_2=\varphi_2^{'}\Big/\sqrt{\int\varphi_3^{'}*\varphi_2^{'}d\tau}$ 则 φ_2,φ_1 为正交归一组。

设 $\varphi_3^{'}=\Psi_3-(\int\Psi_3\varphi_1*d\tau)\varphi_1-(\int\Psi_3\varphi_2*d\tau)\varphi_2$ （3）则

$$\int\varphi_3^{'}\varphi_1*d\tau=\int\Psi_3\varphi_1*d\tau-(\int\Psi_3\varphi_1*d\tau)(\int\varphi_1*\varphi_1 d\tau)-(\int\Psi_3\Psi_2*d\tau)(\int\varphi_2\varphi_1*d\tau)=0$$

$$\int\varphi_3^{'}\varphi_2*d\tau=\int\Psi_3\varphi_2*d\tau-(\int\Psi_3\varphi_1*d\tau)(\int\varphi_1\varphi_2*d\tau)-(\int\Psi_3\varphi_2*d\tau)(\int\varphi_2\varphi_2*d\tau)=0$$

故 $\varphi_3^{'}$ 与 φ_1,φ_2 都能正交。

选 $\varphi_3=\varphi_3^{'}\Big/\sqrt{\int\varphi_3^{'}*\varphi_3^{'}d\tau}$

这样选的 $(\varphi_1\varphi_2\varphi_3)$ 是正交归一化组。将 $\hat{H}$ 算符作用于（1）式：

$$\hat{H}\varphi_1=\hat{H}\Psi_1/\sqrt{\int_\tau\Psi_1*\Psi_1 d\tau}=E\varphi_1$$

同理 $\hat{H}$ 作用于（2）式：

$$\hat{H}\varphi_2^{'}=\hat{H}\Psi_2-(\int\Psi_2\varphi_1*d\tau)\hat{H}\varphi_1=E\{\Psi_2-(\int\Psi_2\varphi_1*d\tau)\varphi_1\}=E\varphi_2^{'},$$

$$\hat{H}\varphi_2=E\varphi_2$$

同理有 $\hat{H}\varphi_3=E\varphi_3$，因而 $(\Psi_1\Psi_2\Psi_3)$ 仍有共同的能量本征值，简并不消失。

4.34 设任何一个厄密矩阵能被一个么正矩阵对角化，由此证明两个矩阵被同一个么正矩阵对角化的条件是它们彼此对易。

证明： 充分性：设 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0$，又设 $\hat{S}$ 是一个足以使 $\hat{A}$ 对角化的么正算符，则

$$(\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}=A_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta} \qquad (1)$$

再求 $[\hat{A},\hat{B}]$ 的变换矩阵元 $(\hat{S}[\hat{A},\hat{B}]\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}=(\hat{S}\hat{A}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}-(\hat{S}\hat{B}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}$

由于 $[\hat{A},\hat{B}]=0$ 此式左方不论 α,β 为何值都为零，右方可利用矩阵积的元素的展开法则：

$$(\hat{F}\cdot\hat{G})=\sum_\gamma(F)_{\alpha\gamma}(G)_{\gamma\beta}$$

$$0=(\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}\cdot\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}-(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1}\cdot\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}=\sum_\gamma(\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\alpha\gamma}\cdot(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\gamma\beta}-\sum_\gamma(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\gamma}\cdot(\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\gamma\beta} \qquad (2)$$

利用⑴式于⑵，则可以写成

$$\sum_\gamma[\delta_{\alpha\gamma}A_{aa}(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\gamma\beta}-(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\gamma}\delta_{\gamma\beta}A_{\beta\beta}]=0$$

不为零的项是：（因为矩阵元是数，可以对易）

$$A_{aa}(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}-(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}A_{\beta\beta}=0$$

即： $(A_{aa}-A_{\beta\beta})(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}=0$ (3)

此式成立的条件是：$\alpha\neq\beta$ 时，$(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}=0$

$\alpha=\beta$ 时，$(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}\neq 0$

故 $(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}$ 是对角矩阵的元素，$(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})$ 是对角矩阵，而 $\hat{S}$ 是能同时将 $\hat{A},\hat{B}$ 对角化的么正变换算符。

对易关系 $[A,B]=0$ 必要性的证明：

设 $\hat{S}$ 能同时将 $\hat{A},\hat{B}$ 对角化，则有：

$$(\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\boldsymbol{S}}^{-1})_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}A_{aa} \quad (4)$$

$$(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\gamma\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}B_{aa} \quad (5)$$

试对 $[\hat{A},\hat{B}]$ 进行变换，有：

$$(\hat{S}(\hat{A},\hat{B})\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}=(\hat{S}\hat{A}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}-(\hat{S}\hat{B}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}$$

$$=(\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}\cdot\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}-(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1}\cdot\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}$$

写成展开式，再将(4)(5)代入：

$$(\hat{S}(\hat{A},\hat{B})\hat{S}^{-1})_{\alpha\beta}=\sum_{\gamma}(\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\alpha\gamma}\cdot(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\gamma\beta}-\sum_{\gamma}(\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1})_{\alpha\gamma}\cdot(\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1})_{\gamma\beta}$$

$$=\sum_{\gamma}(\delta_{\alpha\gamma}A_{\alpha\alpha}\cdot\delta_{\gamma\beta}B_{\gamma\gamma}-\delta_{\alpha\gamma}B_{\alpha\alpha}\cdot\delta_{\gamma\beta}A_{\gamma\gamma})=0$$

$\sum$ 后面 γ 不论取 α,β 或其它值，这个矩阵元永远是零，这说明矩阵 $\hat{S}[\hat{A},\hat{B}]\hat{S}^{-1}$ 的一切元素是零，这必需是 $[\hat{A},\hat{B}]=0$。

4.35 证明（1）若一个 N 阶矩阵与所有 N 级对角矩阵对易，则必为对角矩阵。
（2）若它与所有 N 阶矩阵对易则必为常数矩阵。

（证明）若矩阵 $\hat{A}$ 与一切具有相同阶的对角矩阵 $\hat{B}$ 对易，则有：

（1）$(A\ \ B)_{mn}=(BA)_{mn}$，因 B 是对角矩阵，所以它的不为 0 的元是 B_{mn} 或 B_{nn} 形式，前一式为

$$A_{mn}B_{nn}=B_{mm}A_{mn}$$

移项 $A_{mn}(B_{mm}-B_{nn})=0$

但 $m\neq n$，而 $B_{mm}\neq B_{nn}$，得 $A_{mn}=0$，即（A）的非对角矩阵元为 0，其对角矩阵可以不是零，因而（A）也是对角矩

阵。

（2） 设 $\hat{A}$ 与一切同阶矩阵 $\hat{B}$ 对易，则 $\hat{A}$ 也应与一切对角矩阵 $\hat{B}$ 对易，按前一小题，$\hat{A}$ 必然是对角矩阵，其对角元素是 A_{mm} 形式。

又另一方面 $\hat{A}$ 又与一切非对角矩阵 $\hat{C}$ 对易而 $C_{mn} \neq 0$，我们又有:

$$(\hat{A}\hat{C})_{mn} = (\hat{C}\hat{A})_{mn}$$

即 $$A_{mm}C_{mn} = C_{mn}A_{nn}$$

移项得 $$(A_{mm} - A_{nn})C_{mn} = 0$$

但 $C_{mn} \neq 0$, 而 $A_{mm} = A_{nn}$, 即 A 的各个对角矩阵元彼此相等，所以 $\hat{A}$ 又是常数矩阵（对角位置元素相等的特殊对角矩阵）。

4.36——3.14

4.36 厄密算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$，满足 $\hat{A}^2 = \hat{B}^2 = 1$ 和 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$, 求

（1） 在 $\hat{A}$ 表象中，$\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的矩阵形式，并求 $\hat{B}$ 的本征函数表示式。

（2） 在 $\hat{B}$ 表象中，$\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的矩阵形式，并求 $\hat{A}$ 的本征函数表示式。

（3） 从 $\hat{A}$ 表象到 $\hat{B}$ 表象的幺正变换矩阵 $\hat{S}$。

（证明） （1）按题给的三个条件，设算符 A 的本征矢量是 $|\Psi>$ 本征值是 λ，则有：

$$\hat{A}|\Psi> = \lambda|\Psi>$$

重复运算得: $$\hat{A}^2|\Psi = \lambda^2|\Psi>$$

可见算符 $\hat{A}^2$ 的本征值是 λ^2，并与 $\hat{A}$ 有共同本征矢 $|\Psi>$。按题意 $\hat{A}^2 = \hat{I}$，而 $\lambda^2 = 1$。此外，又因为 $\hat{A}^3 = \hat{A}, \hat{A}^4 = \hat{A}^2 \cdots\cdots$，所以 $\hat{A}$ 的本征值只会有两个，即 $\lambda = 1, \lambda = -1$。

在 $\hat{A}$ 表象中，用 $\hat{A}$ 的本征矢作基矢，而 $\hat{A}$ 的矩阵为对角的，对角矩阵元是本征值，因而：

$$[\mathrm{A}]=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad (1)$$

在 $\hat{A}$ 表象中 $\hat{B}$ 的矩阵不能直接设定，可假设它是：

$$[B]=\begin{bmatrix} b_1 & b_3 \\ b_2 & b_4 \end{bmatrix} \qquad (2)$$

利用$\hat{A}\ \hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，代入（1）（2）得到：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} b_1 & b_3 \\ b_2 & b_4 \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} b_1 & b_3 \\ b_2 & b_4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2b_1 & 0 \\ 0 & -2b_4 \end{bmatrix}=0$$

由此得到$b_1=0, b_4=0,$而（2）式得到简化：

$$[B]=\begin{bmatrix} 0 & b_2 \\ b_3 & 0 \end{bmatrix} \qquad (3)$$

再利用条件$\hat{B}^2=\hat{I},$有：

$$\begin{bmatrix} 0 & b_2 \\ b_3 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & b_2 \\ b_3 & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_2b_3 & 0 \\ 0 & b_2b_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

得 $\quad b_2b_3=1 \qquad [B]=\begin{bmatrix} 0 & b_2 \\ \dfrac{1}{b_2} & 0 \end{bmatrix} \qquad (4)$

此外因为 B 是厄密算符，它还需满足条件：

$[B]=[B^+]$ 即 $\begin{bmatrix} 0 & b_2 \\ \dfrac{1}{b_2} & 0 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{+1/b_2^*} \\ \mathbf{b_2^*} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$ 得到$|b_2|=1 \qquad (5)$

所以满足（4）（5）的最后的解是：

$$[B]=\begin{bmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{bmatrix} \qquad (6)$$

这里的δ是任何实数，代表一个不确定的相位因子。

最后求$\hat{B}$在$\hat{A}$表象中的本征矢和本征值，本征矢单列矩阵$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$：写下本征方程式（矩阵形式）有：

$$\begin{bmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$$

即 $\begin{cases} c_2e^{i\delta}=\lambda c_1 \\ c_1e^{-i\delta}=\lambda c_2 \end{cases} \qquad (7)$

将（7）的两式等号左右方相乘，立刻得到本征值：

$$\lambda^2=1, \lambda=+1,-1$$

将本征值代入（7）式，得

$$\begin{cases} c_2 e^{i\delta} = c_1 \\ c_1 e^{-i\delta} = c_2 \end{cases}$$

这两式不独立，因而取最简单的解，即取$\delta = 0$,而$c_1 = c_2$，加归一化条件$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$,得$c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

对于另一本征值$\lambda = -1$，代入（7）得到：

$$\begin{cases} c_2 e^{i\delta} = -c_1 \\ c_1 e^{-i\delta} = -c_2 \end{cases}$$

也取$\delta = 0$,得$c_1 = -c_2$，与前一情形相同，加归一化条件 $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$,得$c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$所求的两个 B 的本征矢是：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad 和 \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix};$$

与$\delta = 0$相应的$\hat{B}$矩阵是：

$$[\hat{B}] = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad (8)$$

相位因子δ可取 0 以外的的值，但这时，[B]以及相应的本征矢随着更改，例如取$\delta = \frac{\pi}{2}$时，

$$[\hat{\boldsymbol{B}}] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{0} & \boldsymbol{i} \\ -\boldsymbol{i} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix}$$

本征矢 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$， $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$

（2）在$\hat{B}$表象中，$\hat{B}$是对角矩阵，而$\hat{A}$则是反对角矩阵，$\hat{B}, \hat{A}$的本征值也是$\lambda = \pm 1$,本征矢和前一情形一样，只是$\hat{A}, \hat{B}$互换角色而已。

（3）表象变换：寻求一个从$\hat{A}$表达到$\hat{B}$表象的变换

[s]=$\begin{bmatrix} s_1 & s_2 \\ s_3 & s_4 \end{bmatrix}$.对算符$\hat{A}$来说，在自身表象中矩阵是$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

而在$\hat{B}$表象中成为$\begin{bmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{bmatrix}$，按照表象变换理论假设算符$\hat{L}$在 A 表象中表示为$\hat{L}$，在$\hat{B}$表象中为$\hat{L}'$，变换算符为$\hat{S}$，则$\hat{L}' = \hat{S}^+ \hat{L} \hat{S}$，或$\hat{L}' = \hat{S}^{-1} \hat{L} \hat{S}$。因此对算符$\hat{A}$来说有：

$$\hat{A}' = \hat{S}^{+}\hat{A}\hat{B} \qquad (9)$$

因为 S 是么正算符，它的矩阵之间要受到限制：$S^{+}S = I$，即

$$\hat{S}_{ij}^{+}\hat{S}_{jk} = \hat{\delta}_{ik}$$

即：

$$\begin{bmatrix} S_1^* & S_3^* \\ S_2^* & S_4^* \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} S_1 & S_2 \\ S_3 & S_4 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} |S_1|^2 + |S_2|^2 & S_1^* S_2 + S_2^* S_4 \\ S_2^* S_1 + S_4^* S_3 & |S_2|^2 + |S_4|^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

任何二阶的么正矩阵的元素之间要有这种限制，它等效于三个独立方程式：

$$\begin{cases} |S_1|^2 + |S_3|^2 = 1 & (10) \\ |S_2|^2 + |S_4|^2 = 1 & (11) \\ S_1^* S_3 + S_3^* S_4 = 0 & (12) \end{cases}$$

`式（10）的通解是 $S_1 = e^{i\alpha}\cos\theta, S_2 = e^{i\alpha}\sin\theta$

式（11）的通解是：$S_1 = e^{i\alpha}\cos\varphi, S_2 = e^{i\alpha}\sin\varphi$

将以上的解代入（12）又发现 $\cos(\theta-\varphi) = 0$，即 $\theta = \frac{\pi}{2} + \varphi$

因此得到二阶么正矩阵元素的通解：

$$[S] = \begin{bmatrix} e^{i\alpha}\cos\theta & e^{i\beta}\sin\theta \\ e^{i\alpha}\sin\theta & -e^{i\beta}\cos\theta \end{bmatrix} \qquad (11)$$

将（11）式用于（9）式，得：

$$\begin{bmatrix} e^{-i\alpha}\cos\theta & e^{-i\alpha}\sin\theta \\ e^{-i\beta}\sin\theta & -e^{-i\beta}\cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{i\alpha}\cos\theta & e^{i\beta}\sin\theta \\ e^{i\alpha}\sin\theta & -e^{i\beta}\cos\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{bmatrix}$$

将等号左方简化，并与右方对比各矩阵元：

$$\begin{bmatrix} \cos 2\theta & e^{i(\beta-\alpha)}\sin 2\theta \\ e^{i(\alpha-\beta)}\sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{bmatrix} \qquad (12)$$

它的合乎要求的普遍解答是

$$\theta = \frac{\pi}{4}, \beta - \alpha = \delta \qquad (13)$$

第二个解仅仅是将未定的相位因子 α, β, δ 之间定下一个关系，将（14）代入（11）到下述的变换矩阵，保留两个未定相因子：

$$S=\frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & e^{i\delta}\\ 1 & -e^{i\delta}\end{bmatrix}$$

式中的α值仍可以取任意值，要验证这矩阵是否符合变换的要求，可将它代入（9）式等号右方。

4.37 设$\hat{K}=\hat{L}\hat{M},\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1,\varphi$为$\hat{K}$的本征矢，即$\hat{K}\varphi=\lambda\varphi,\lambda$为本征值，试证明$\mu\equiv\hat{L}\varphi,\nu\equiv\hat{M}\varphi$也是K的本征矢，相应的本征值分别为$\lambda-1,\lambda+1.$

（证明） $\hat{K}=\hat{L}\hat{M}$ （1）

左乘 M，利用对易式：

$$\hat{M}\hat{K}=\hat{M}\hat{L}\hat{M}=(\hat{L}\hat{M}-1)\hat{M}$$

将前式作用于φ：

$$\hat{M}\hat{K}\varphi=\hat{L}\hat{M}\hat{M}\varphi-\hat{M}\varphi$$

即 $\lambda\hat{M}\varphi=\hat{K}\hat{M}\varphi-\hat{M}\varphi$

$$\hat{K}(\hat{M}\varphi)=(\lambda+1)\hat{M}\varphi \qquad (2)$$

将（1）左乘$\hat{L}$，利用对易式

$$\hat{L}\hat{K}=\hat{L}\hat{L}\hat{M}=\hat{L}(\hat{M}\hat{L}+1)$$

将前式作用于φ：

$$\hat{L}(\hat{K}\varphi)=(\hat{L}\hat{M})(\hat{L}\varphi)+\hat{L}\varphi$$

即 $\lambda\hat{L}\varphi=\hat{K}\hat{L}\varphi+\hat{L}\varphi$

利用本征方程式得

$$\hat{K}(\hat{L}\varphi)=(\lambda-1)\hat{L}\varphi$$ 证毕

附带指出：如果将本题中关于$\hat{L}$，$\hat{M}$的对易条件要改成反对易条件，$(\hat{L},\hat{M})=\hat{L}\hat{M}+\hat{M}\hat{L}=1,$其它条件不变，我们也能证明$\nu$或$\mu$仍是$\hat{K}$的本征矢，但相应的本征值则是$\lambda-1$和$1-\lambda$。

［２６］证明以下诸式：

（１） $\det(\hat{A}\hat{B})=\det\hat{A}\cdot\det\hat{B}$

（证明）设$\hat{A},\hat{B}$是阶数n的矩阵，由它们形成的行列式记作$\det\hat{A}$和$\det\hat{B}$。设$\hat{A}$的矩阵元记作a_{ij}，$\hat{B}$的矩阵元记作b_{ij}，按行列式理论，$\hat{A}$的行列式的值是：

$$\det \hat{A} = \sum (-1)^{rl} a_{1j1} a_{2j2} \ldots\ldots a_{njn} \qquad (1)$$

式中 rl 是排列 $(j_1 j_2 \ldots\ldots j_n)$ 中的逆序数（逆序数指这种排列相对于正常排列 $(1,2,3,\ldots\ldots n)$ 发生的编号逆转），（1）式可改写为下式：

$$\det \hat{A} = \sum (-1)^{r} a_{i11} a_{i22} \ldots\ldots a_{inn} \qquad (2)$$

但 r 是 $(i_1, i_2, \ldots\ldots i_n)$ 的逆序数。

如果将（1）的每一指标加以变更，可得（1）（2）的结合形式：

$$\det \hat{A} = \sum (-1)^{r+rl} a_{i1j1} a_{i2j2} \ldots\ldots a_{injn} \qquad (3)$$

同理另一行列式写作

$$\det \hat{B} = \sum (-1)^{s+sl} a_{k1l1} a_{k2l2} \ldots\ldots a_{kn\ln} \qquad (4)$$

但 s, s^l 分别是排列 $(k_1 \ldots\ldots k_n)$ 和 $(\ell_1 \ldots\ldots \ell_n)$ 的逆序数，取二者乘积：

$$\det \hat{A} \cdot \det \hat{B} = \sum_{i,j} \sum_{i,j} (-1)^{r+rl+s+sl} a_{i1j1} \ldots\ldots a_{injn} \cdot b_{k1l1} \ldots\ldots b_{kn\ln} \qquad (5)$$

若在求和式中选取 $j_1 = k_1, \ldots\ldots j_n = k_n$ 则

$$r^l = s, (-1)^{rl+s} = (-1)^{2s} = 1$$

（5）式成为 $$\det \hat{A} \cdot \det \hat{B} = \sum_{i,j} \sum_{i,j} (-1)^{r+sl} (a_{i1j1} b_{j1l1}) \cdot (a_{i2j2} b_{j2l2}) \ldots\ldots (a_{injn} b_{jn\ln}) \qquad (6)$$

再计算 $\det(AB)$，它是矩阵积 A B 的行列式的值，按矩阵乘法设 $[\hat{A}\hat{B}] = [\hat{C}]$ 是 $[\hat{C}]$ 的矩阵元是：

$$C_{il} = \sum_j a_{ij} b_{jl} \qquad (7)$$

$[A, B]$ 的行列式的值是：

$$\det[AB] = \sum_{ij} (-1)^{r+sl} (\sum_{j1} a_{i1j1} b_{j1l1}) \cdot (\sum_{j2} a_{i2j2} b_{j2l2}) \ldots\ldots (\sum_{jn} a_{injn} b_{jn\ln}) \qquad (8)$$

r 是排列 $(i_1 i_2 \ldots\ldots i_n)$，$s^l$ 是排列 $(\ell_1 \ldots\ldots \ell_n)$ 的逆序数，（8）与（6）的形式结构是相同的，这证明

$$\det(\hat{A}\hat{B}) = \det \hat{A} \cdot \det \hat{B}$$

（2）证 $\det(\hat{S}^{-1} \hat{A} \hat{S}) = \det \hat{A}$

（证明）本题是一个么正变换后的算符 $\hat{A}^t = \hat{S}^{-1} \hat{A} \hat{S}$ 的矩阵的行列式，与原来算符 $\hat{A}$ 的矩阵的行列式之间的相等关系。本题利用前一题的结论加以推广；先将积的行列化成行列的积：

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

因为$\det(\hat{A})$等都是数值而不是算符或矩阵，因而遵守对易律

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

再将行列式积化成积的行列，进注意单位矩阵的行列式恒等于 1，有

$$I=\det(\hat{s}^{-1}\hat{s})\cdot\det(\hat{A})=1\cdot\det(\hat{A})$$

（3）证$Tr(\hat{A}\hat{B})=Tr(\hat{B}\hat{A})$

（证明）Tr 是 Trace (或 Spur)即“径迹”的符号，按定义它等于矩阵的对角线矩阵元的和数：

$$Tr(\hat{A})=\sum_i a_{ii}$$

但[$\hat{A}\hat{B}$]是矩阵[$\hat{A}$][$\hat{B}$]的积，[$\hat{A}\hat{B}$]的矩阵元是

$$[\hat{A}\hat{B}]_{il}=\sum_j a_{ij}b_{jl}$$

因而 $Tr(\hat{A}\hat{B})=\sum_{ji}a_{ij}b_{ji}=\sum_{ij}a_{ji}b_{ij}=Tr(\hat{A}\hat{B})$

---

(4)证$Tr(\hat{A}\hat{B}\hat{C})=Tr(\hat{C}\hat{A}\hat{B})=Tr(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$

[证明]三个矩阵的积（三个算符）的径迹具有一般表示式

$$Tr(\hat{A}\hat{B}\hat{C})=\sum_{ik}a_{ij}b_{jk}c_{ki}$$

矩阵（$\hat{A}\hat{B}\hat{C}$）的对角线元素要求各个组成矩阵元最前一个指标（足码）与最后一个指标相同，其余的指标则需要衔接，满足这两条件的矩阵元都属于对角线矩阵元，但发现矩阵轮换时，以上二条件能满足：

$$Tr(\hat{A}\hat{B}\hat{C})=\sum_{ki}b_{jk}c_{ki}a_{ij}=Tr(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$$

式子得证。

$$Tr(\hat{A}\hat{B}\hat{C})=\sum_{ij}c_{ki}a_{ij}b_{jk}=Tr(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$$

（5）证$Tr(\hat{S}^{-1}\hat{A}\hat{S})=Tr(\hat{A})$

[证明] $Tr(\hat{S}^{-1}\hat{A}\hat{S})=\sum_{jk}s_{ij}^{-1}a_{jk}s_{ki}$，将矩阵元组成因子轮换。$Tr(\hat{S}^{-1}\hat{A}\hat{S})=\sum_{jk}a_{jk}s_{ki}s_{ij}^{-1}=$

有问题

（补白）

以上的（2）题表示矩阵$\hat{A}$么正变换（表象变换属此）后，行列式值不变。（5）则表示么正变换不变更径

迹。径迹在对角表象中代表本征值总和，这两小题表示幺正变换的两项性质。

4.38 设有矩阵 A,B,C,S 等，证明

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

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

$\det A$ 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 $\det A=\sum\limits_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)a_{1i_1}a_{2i_2}\cdots a_{ni_n}$，

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

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

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

$$\begin{aligned}\therefore\ \det C=\det(AB)&=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)C_{1i_1}C_{2i_2}\cdots C_{ni_n}\\&=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)\sum_{j_1\cdots j_n}a_{1j_1}b_{j_1i_1}a_{2j_2}b_{j_2i_2}\cdots a_{nj_n}b_{j_ni_n}\\&=\sum_{j_1\cdots j_n}a_{1j_1}a_{2j_2}\cdots a_{nj_n}\left[\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)b_{j_1i_1}b_{j_2i_2}\cdots b_{j_ni_n}\right]\\&=\sum_{j_1\cdots j_n}P(j_1\cdots j_n)a_{1j_1}a_{2j_2}\cdots a_{nj_n}\left[\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)P(j_1\cdots j_n)b_{j_1i_1}b_{j_2i_2}\cdots b_{j_ni_n}\right]\\&=\det A\cdot\det B\end{aligned}$$

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

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

（3）$Tr(AB)=\sum\limits_{ik}a_{ik}b_{ki}=\sum\limits_{ik}b_{ki}a_{ik}=Tr(BA)$

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

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

4.39——3.11

4.40 设 λ 是一个小量，算符 $\hat{A}$ 的逆 $\hat{A}^{-1}$ 存在，求证：

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=A^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2A^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}A^{-1}+\lambda^3A^{-1}\hat{B}A^{-1}\hat{B}A^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\cdots$$

（证明）如果将 $\hat{A},\hat{B}$ 看作普通的数并设 $\lambda\cdot\dfrac{B}{A}<1,$ 则上述式子是容易证明的，但事实上 $\hat{A},\hat{B}$ 为算符，故不能直接用级数处理，一种简单的证法是将算符（$\hat{A}-\lambda\hat{B}$) 左乘该式左方得 I，再右乘该式右方得：

$$(A^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\cdots)(\hat{A}-\lambda\hat{B})$$

$$=\quad A^{-1}(\hat{A}-\lambda\hat{B})+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}(\hat{A}-\lambda\hat{B})+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}(\hat{A}-A\hat{B})+\cdots\cdots$$

$$(\lambda^{n-1}\cdot\hat{A}^{-1}\hat{B}\cdots\cdots\hat{B}\hat{A}^{-1})(\hat{A}-\lambda\hat{B})$$

（n-1 个 $\hat{B}$）

$$=\quad\hat{I}-\lambda(\hat{A}^{-1}\hat{B}-\hat{A}^{-1}\hat{B})+\lambda^2(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}-\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B})\cdots\cdots+$$

$$-\lambda^{n-1+1}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\cdots\hat{A}^{-1}\hat{B}+\lambda^n\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\cdots\hat{A}^{-1}\hat{B}+\cdots\cdots=\hat{I}$$ 得证。

（n 个 B）　　　　　　　　（n 个 B）

另一种更明白的书写方式是将待证一式等号右方写成算符幂级数。在遍乘以 $\hat{A}(1-\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B})$ 所得展开式中，相邻的同幂项互相抵消：

$$\hat{O}=\hat{A}^{-1}\left\{1+\lambda\cdot\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\cdots+(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1})^{n-1}+(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1})^n+\cdots\right\}$$

右乘以 $\hat{A}(1-\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B})$：

$$\hat{O}\hat{A}(1-\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B})=\hat{A}^{-1}\left\{1+\lambda\hat{B}\hat{A}^{-2}+\cdots\cdots(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1})^{n-1}+(\lambda\hat{B}A^{-1})^n+\cdots\cdots\right\}\cdot\hat{A}(1-\lambda\hat{A}^{-1}B)$$

$$=\hat{I}\cdots\cdots\hat{A}^{-1}(\lambda\hat{B}A^{-2})^{n-1}\cdot\hat{A}(-\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B})\cdot\hat{A}^{-1}\hat{A}+\hat{A}(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1})^n\hat{A}\cdots\cdots=\hat{I}$$

4.40 证明 $e^{\hat{L}}\hat{A}e^{-\hat{L}}=\hat{A}+(\hat{L},\hat{A})+\dfrac{1}{2!}(\hat{L}(\hat{L},\hat{A}))+\dfrac{1}{3!}(\hat{L}(\hat{L}(\hat{L},\hat{A})))+\cdots\cdots$

(证明)第一法（二项式定理法）：首先对被证一式等号右方的通项导出一个表示式，其形式类似于二项式定理的通项：

$$(\hat{L},\hat{A})=\hat{L}\hat{A}-\hat{A}\hat{L}$$

$$(\hat{L}(\hat{L},\hat{A}))=\hat{L}(\hat{L}\hat{A})-(\hat{L}\hat{A})\hat{L}=\hat{L}(\hat{L}\hat{A}-\hat{A}\hat{L})-(\hat{L}\hat{A}-\hat{A}\hat{L})\hat{L}$$

$$=\hat{L}^2\hat{A}-2\hat{L}\hat{A}\hat{L}+\hat{A}\hat{L}^2$$

从这里看出这种展开式的运算是和二项式定理的展开相同的，它的通项是：

$$(\hat{L}(\hat{L}\cdots(\hat{L}\hat{A})\cdots))=\hat{L}^n\hat{A}-n\hat{L}^{n-1}\hat{A}\hat{L}+\cdots(-1)^r\frac{n\cdots(n-r+1)}{r!}\hat{L}^{n-r}\hat{A}\hat{L}^r+\cdots\hat{A}\hat{L}^n$$ 。

这个通项展成的级数的每一项形式上是 $\hat{L}$ 的齐次幂，将通项除以 n!

$$\frac{(\hat{L}(\hat{L}\cdots(\hat{L}\hat{A})\cdots))}{n!}=\frac{1}{n!}\hat{L}^n\hat{A}-\frac{1}{(n-1)!1!}\hat{L}^{n-1}\hat{A}\hat{L}\cdots\cdots(-1)^r\frac{1}{(n-r)!r!}\hat{L}^{n-r}\hat{A}\hat{L}^r+\cdots \quad (1)$$

再将原式左方展开：

$$e^{\hat{L}}\hat{A}e^{-\hat{L}}=(1+\hat{L}+\cdots+\frac{1}{(n-r)!}\hat{L}^{n-r}+\cdots\cdots)\hat{A}(1-\hat{L}+\cdots(-1)^r\frac{1}{r!}\hat{L}^r+\cdots\cdots)$$

$$=\sum_n\left\{\frac{1}{n!}\hat{L}^n\hat{A}-\frac{1}{(n-1)!}\hat{L}^{n-1}\hat{A}\hat{L}+\cdots\cdots(-1)^r\frac{1}{(n-r)!r!}\hat{L}^{n-r}\hat{A}\hat{L}^r\cdots\cdots\right\} \quad (2)$$

这个级数的通项是指 $\hat{L}^n$ 的齐次式，共有（n+1）项，对此展开式（1）（2）发现二者相同，因而公式得证。

第二法（泰勒级数法）：

我们先设 $\hat{A}(\lambda)\equiv e^{\lambda\hat{L}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{L}}$ 然后对它求对 λ 的各阶导数，并注意算符 $\hat{L}$ 与 $e^{\lambda\hat{L}}$ 是对易的，$-\hat{L}$ 与 $e^{-\lambda\hat{L}}$ 也对易，于是有：

$$\frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda}=\hat{L}e^{\lambda\hat{L}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{L}}+e^{\lambda\hat{L}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{L}}(-L)=\hat{L}\hat{A}(\lambda)-\hat{A}(\lambda)\hat{L}=(\hat{L},\hat{A}(\lambda))$$

$$\frac{d^2\hat{A}(\lambda)}{d\lambda^2}=\frac{d}{d\lambda}\left\{\hat{L}\hat{A}(\lambda)-\hat{A}(\lambda)\hat{L}\right\}$$

$$=\hat{L}\frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda}-\frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda}\hat{L}$$

$$=\hat{L}(\hat{L},\hat{A}(\lambda))-(\hat{L},\hat{A}(\lambda))\hat{L}$$

$$=(\hat{L}(\hat{L},\hat{A}(\lambda)))$$

可循此类推，假定 n 阶导数是：

$$\frac{d^n\hat{A}(x)}{d\lambda^n}=(\hat{L}(\hat{L}\cdots\cdots(\hat{L},\hat{A}(\lambda))\cdots)$$

（含有 n 个 $\hat{L}$，一个 $\hat{A}(\lambda)$） （3）

将此式再求导一次：

$$\frac{d^{n+1}\hat{A}(\lambda)}{d\lambda^{n+1}}=\frac{d}{d\lambda}(\hat{L}(\hat{L}\cdots(\hat{L},\hat{A}(\lambda))\cdots)$$

$$=(\hat{L}(\hat{L}\cdots\frac{d}{d\lambda}(\hat{L},\hat{A}(\lambda))\cdots)$$

$$=(\hat{L}(\hat{L}\cdots(\hat{L}(\hat{L},\hat{A}(\lambda)))\cdots)$$

（含有 n+1 个 $\hat{L}$，一个 $\hat{A}(\lambda)$）　　（4）

但 n=1 适用，而根据数学归纳法，n=2,3,⋯都适用，故（3）是普遍规律。

$\hat{A}(0)=\hat{A}$，当 λ 是一个任意参数时将 $\hat{A}(\lambda)$ 在 $\lambda=0$ 附近展成泰勒级数：

$$\hat{A}(\lambda)=\hat{A}+\frac{d\hat{A}(0)}{d\lambda}\lambda+\frac{1}{2!}\frac{d\hat{A}^2(0)}{d\lambda^2}\lambda^2+\cdots\cdots\frac{1}{n!}\frac{d\hat{A}^n(0)}{d\lambda^n}\lambda^n+\cdots\cdots$$

$$\hat{A}(\lambda)=\hat{A}+\frac{\lambda}{1!}(\hat{L},\hat{A})+\frac{\lambda^2}{2!}(\hat{L},(\hat{L},A))+\cdots\cdots+\frac{\lambda^n}{n!}(\hat{L}(\hat{L}\cdots(\hat{L},\hat{A})\cdots) \quad （4）$$

另一方面，在等式

$$\hat{A}(\lambda)=e^{\lambda\hat{L}}\hat{A}e^{-\lambda\hat{L}}$$

中令 $\lambda=1$，得

$$\hat{A}(1)=e^{\hat{L}}\hat{A}e^{-\hat{L}}$$

再在（4）式中也令 $\lambda=1$,得

$$\hat{A}(1)=e^{\hat{L}}\hat{A}e^{-\hat{L}}=\hat{A}+\frac{1}{1!}(\hat{L},\hat{A})+\cdots+\frac{1}{n!}(\hat{L}(\hat{L}\cdots(\hat{L},\hat{A})\cdots)\cdots\cdots$$

命题得证。

O.f.A.Messiah,Quantum Mcchanics Vo II.　Chap　VIII　P.339.

4.41——3.4
4.42——3.1
4.43——3.5
4.44——3.6
4.45——3.7
4.46——3.9

第五章：　对称性及守恒定律

P248 设粒子的哈密顿量为 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(r)$。

（1） 证明 $\frac{d}{dt}\overline{(\vec{r}\cdot\vec{p})}=\overline{p^2}/\mu-\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$。

（2） 证明：对于定态 $2\overline{T}=\overline{r\cdot\nabla V}$

（证明）（1） $\vec{r}\cdot\vec{p}=\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z$，运用力学量平均值导数公式，以及对易算符的公配律：

$$\frac{d}{dt}\overline{(\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}},\hat{H}]}$$

$$[\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}},\hat{H}]=[\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z,\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+V(x,y,z)]$$

$$=[\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z,\frac{1}{2\mu}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2+\hat{p}_z{}^2)+V(x,y,z)]$$

$$=[\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z,p_x{}^2+p_y{}^2+p_z{}^2]\frac{1}{2\mu}+[xp_x+yp_y+zp_z,V(x,y,z)] \qquad (2)$$

分动量算符仅与一个座标有关，例如 $p_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$，而不同座标的算符相对易，因此（2）式可简化成：

$$[\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}},\hat{H}]=\frac{1}{2\mu}[\hat{x}\hat{p}_x,\hat{p}_x^2]+\frac{1}{2\mu}[\hat{y}\hat{p}_y,\hat{p}_y^2]+\frac{1}{2\mu}[\hat{z}\hat{p}_z,\hat{p}_z^2]$$

$$+[\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z,V(x,y,z)]$$

$$=\frac{1}{2\mu}[\hat{x}\hat{p}_x,\hat{p}_x^2]+\frac{1}{2\mu}[\hat{y}\hat{p}_y,\hat{p}_y^2]+\frac{1}{2\mu}[\hat{z}\hat{p}_z,\hat{p}_z^2]+[\hat{x}\hat{p}_x,V]+[\hat{y}\hat{p}_y,V]+[\hat{z}\hat{p}_z,V] \qquad (3)$$

前式是轮换对称式，其中对易算符可展开如下：

$$[\hat{x}\hat{p}_x,\hat{p}_x^2]=\hat{x}\hat{p}_x^3-\hat{p}^2\hat{x}\hat{p}_x$$

$$=\hat{x}\hat{p}_x^3-\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x^2+\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x^2-\hat{p}^2\hat{x}\hat{p}_x$$

$$=[\hat{x},\hat{p}_x]\hat{p}_x^2+\hat{p}_x[\hat{x},\hat{p}_x]\hat{p}_x$$

$$=\hbar i\hat{p}_x^2+\hbar i\hat{p}_x^2=2\hbar i\hat{p}_x^2 \qquad (4)$$

$$[\hat{x}\hat{p}_x,V]=\hat{x}\hat{p}_x\hat{V}-\hat{V}\hat{x}\hat{p}_x=\hat{x}\hat{p}_x\hat{V}-\hat{x}\hat{V}\hat{p}_x=\hat{x}[\hat{p}_x,V]$$

$$=\hbar i\hat{x}\frac{\partial\hat{V}}{\partial x} \qquad (5)$$

将（4）（5）代入（3），得：

$$[\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}},\hat{H}]=\frac{\hbar i}{\mu}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)+\hbar i\{x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}\}$$

$$=\hbar i\{\frac{\hat{p}^2}{\mu}+\vec{r}\cdot\nabla V\}$$

代入（1），证得题给公式：

$$\frac{d}{dt}(\overline{\vec{r}\cdot\vec{p}})=\frac{\hat{p}^2}{\mu}-\overline{\vec{r}\cdot\nabla V} \qquad (6)$$

（2）在定态ψ之下求不显含时间t的力学量$\hat{A}$的平均值，按前述习题2的结论，其结果是零，令$\hat{A}=\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}$

则$\frac{d}{dt}\overline{\vec{r}\cdot\vec{p}}=\iiint_\tau\psi^*(\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})\psi d\tau=\frac{\overline{p^2}}{\mu}-\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}=0 \qquad (7)$

但动能平均值 $\bar{T}\equiv\iiint_\tau\psi^*\frac{\hat{p}^2}{2\mu}\psi d\tau=\frac{\overline{p^2}}{2\mu}$

由前式 $\boldsymbol{\bar{T}=\frac{1}{2}\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}}$

P249 设粒子的势场$V(x,y,z)$是x,y,z的n次齐次式证明维里定理（Virial theorem）

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

式中V是势能，T是动能，并应用于特例：

（1）谐振子 $\bar{V}=\bar{T}$

（2）库仑场 $\bar{V}=-2\bar{T}$

（3）$V=Cr^n, n\bar{V}=2\bar{T}$

（解）先证明维里定理：假设粒子所在的势场是直角坐标(x,y,z)的n次齐次式，则不论n是正、负数，势场用直角坐标表示的函数，可以表示为以下形式，式中V假定是有理函数（若是无理式，也可展开成级数）：

$$V(x,y,z)=\sum_{ijk}C_{ijk}x^iy^jz^k \qquad (1)$$

此处的i, j, k暂设是正或负的整数，它们满足：

$$i + j + k = n \quad （定数）$$

C_{ijk}是展开式系数，该求和式可设为有限项，即多项式。

根据前一题的结论：

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

现在试行计算本题条件下$\vec{r} \cdot \nabla V$的式子及其定态下平均值。

$$\vec{r} \cdot \nabla V = x\frac{\partial V}{\partial x} + y\frac{\partial V}{\partial y} + z\frac{\partial V}{\partial z}$$

$$= (x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z})\sum C_{ijk} x^i y^j z^k$$

$$= x\sum iC_{ijk} x^{i-1} y^j z^k + y\sum jC_{ijk} x^i y^{j-1} z^k + z\sum kC_{ijk} x^i y^j z^{k-1}$$

$$= (i + j + k)\sum_{ijk} C_{ijk} x^i y^j z^k$$

$$= nV(x, y, z)$$

这个关系在数学分析中称 Euler 的齐次式定理。再利用（2）即得：

$$2\overline{T} = n\overline{V} \qquad （3）$$

本证明的条件只要$\vec{r} \cdot \nabla V$不显含时间（见前题证明）故是一个普遍的证明。现将其直接用于几种特例，并另用（2）式加以验证。

（1）谐振子：$V = \frac{\mu}{2}(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2 + \omega_3 z^2)$

直接看出$n = 2$，根据（3）式知道

$$2\overline{T} = 2\overline{V}，即 \quad \overline{T} = \overline{V}$$

也可以根据前一题的结论，即（2）式直接来验证前一结论

$$r \cdot \nabla V = x\frac{\partial V}{\partial x} + y\frac{\partial V}{\partial y} + z\frac{\partial V}{\partial z}$$

$$= x \cdot \mu\omega_1 x + y \cdot \mu\omega_2 y + z \cdot \mu\omega_3 z$$

$$= \mu(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2 + \omega_3 z^2) = 2V$$

$\overline{\vec{r} \cdot \nabla V} = 2\overline{V}$，由（3）式可知$\overline{T} = \overline{V}$

（2）库仑场 $V = \dfrac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$

直接看出Ｖ是x, y, z的$n=-1$次齐次式，按（３）式有：

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

但这个结论也能用（３）式验证，为此也利用前一题结论（２）有：

$$\vec{r}\cdot\nabla V=x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}$$

$$=x\cdot\frac{-x}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}+y\cdot\frac{-y}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}+z\cdot\frac{-z}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}$$

$$=-\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}=-V \qquad \overline{\vec{r}\cdot\nabla V}=-\overline{V}$$

代入（２）式，亦得到　　$2\overline{T}=-\overline{V}$

（３）场$V(x,y,z)=Cr^n=C(x^2+y^2+z^2)^{\frac{n}{2}}$

直接看出Ｖ是x, y, z的n次齐次式，故由（３）式得：

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

仍根据（２）式来验证：

$$\vec{r}\cdot\nabla V=x\frac{\partial V}{\partial x}+y\frac{\partial V}{\partial y}+z\frac{\partial V}{\partial z}$$

$$=x\cdot\frac{n}{2}(x^2+y^2+z^2)^{\frac{n}{2}-1}\cdot(2x)+y\cdot\frac{n}{2}(x^2+y^2+z^2)^{\frac{n}{2}-1}\cdot(2y)+z\cdot\frac{n}{2}(x^2+y^2+z^2)^{\frac{n}{2}-1}\cdot(2z)$$

$$=n(x^2+y^2+z^2)^{\frac{n}{2}}=n\overline{V}$$

由（２）得　　$2\overline{T}=n\overline{V}$，结果相同。

本小题对于n为正、负都相适，但对库仑场的奇点$r=0$除外。

P260 求海森伯表象中自由粒子的座标的算符。

（解）根据海森伯表象（绘景）的定义可导得海森伯运动方程式，即对于任何用海氏表象的力学算符$\hat{A}(t)$应满足：

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{1}{\hbar i}[\hat{A},\hat{H}] \qquad (1)$$

又对于自由粒子，有$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}$（$\hat{p}$不随时间$t$变化）

令 $\hat{A}(t)=\hat{x}(t)$ 为海氏表象座标算符；代入（1）

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{\hbar i}[\hat{x}(t),\frac{\hat{p}^2}{2\mu}]$$

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{2\mu\hbar i}[\hat{x}(t),\hat{p}^2] \qquad (2)$$

但 $[\hat{x}(t),\hat{p}^2]=\hat{x}\hat{p}^2-\hat{p}^2\hat{x}$

$$=\hat{x}\hat{p}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{p}\hat{x}$$

$$=[\hat{x},\hat{p}]\hat{p}+\hat{p}[\hat{x},\hat{p}]=2\hbar i\hat{p} \qquad (3)$$

代入（2），得： $\dfrac{d\hat{x}(t)}{dt}=2\hbar i\hat{p}\dfrac{1}{2\mu\hbar i}=\dfrac{\hat{p}}{\mu}$

积分得 $\hat{x}(t)=\dfrac{\hat{p}}{\mu}t+C$

将初始条件 $t=0$ 时，$\hat{x}(t)=\hat{x}(0)$ 代入得 $C=x(0)$，因而得到一维座标的海氏表象是：

$$\hat{x}(t)=\frac{\hat{p}}{\mu}t+\hat{x}(0)$$

P260 求海森伯表象中中谐振子的坐标与动量算符。
解：用薛氏表象时，一维谐振子的哈氏算符是：

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\frac{\mu\omega^2x^2}{2} \qquad (1)$$

解法同于前题，有关坐标 $\hat{x}(t)$ 的运动方程式是：

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{\hbar i}[\hat{x}(t),\frac{\hat{p}^2(t)}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2\hat{x}^2(t)}{2}] \qquad (2)$$

将等式右方化简，用前一题的化简方法：

$$\frac{1}{\hbar i}[\hat{x},\frac{p^2}{\partial\mu}+\frac{\mu\omega^2x^2}{2}]=\frac{1}{2\mu\hbar i}[\hat{x},\hat{p}^2]+\frac{\mu\omega^2}{2\hbar i}[\hat{x},\hat{x}^2]=\frac{\hat{p}(t)}{\mu}$$

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt}=\frac{1}{\mu}\hat{p}(t) \qquad (3)$$

但这个结果却不能直接积分（与前题不同，$\hat{p}$ 与 t 有关），为此需另行建立动量算符的运动方程式：

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt}=\frac{1}{\hbar i}[\hat{p}(t),\frac{\hat{p}^2(t)}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2x^2(t)}{2}]$$

化简右方 $\frac{1}{hi}[p(t),\frac{\mu\omega^2x^2(t)}{2}]=\frac{\mu\omega^2}{2hi}\{\hat{p}\hat{x}^2-\hat{x}^2\hat{p}\}$

$$=\frac{\mu\omega^2}{2hi}\{\hat{p}\hat{x}\hat{x}-\hat{x}\hat{p}\hat{x}-\hat{x}\hat{x}\hat{p}\}$$

$$=\frac{\mu\omega^2}{2hi}\{[\hat{p},\hat{x}]\hat{x}-\hat{x}[\hat{p},\hat{x}]\}=-\mu\omega^2\hat{x}^2(t)$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt}=-\mu\omega^2\hat{x}(t) \quad (4)$$

将⑶对时间求一阶导数,并与⑷式结合,得算符 $\hat{x}(t)$ 的微分方程式:

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt^2}+\omega^2\hat{x}(t)=0 \qquad (5)$$

这就是熟知的谐振动方程式，振动角频率 ω，它的解是：

$$\hat{x}(t)=\hat{A}\cos\omega t+\hat{B}\sin\omega t \qquad (6)$$

$\hat{A}$，$\hat{B}$ 待定算符，将它求导，并利用⑶：

$$\hat{p}(t)=\mu\omega(\hat{B}\cos\omega t-\hat{A}\sin\omega t) \qquad (7)$$

将 t=0 代入：x(0)=A　P（0）= $\mu\omega$ B，最后得解：

$$\begin{cases}\hat{x}(t)=\hat{x}(0)\cos\omega t+\dfrac{1}{\mu\omega}\hat{p}(0)\sin\omega t & (8)\\[2ex] p(t)=p(0)\cos\omega t-\mu\omega x(0)\sin\omega t) & (9)\end{cases}$$

在初时刻 t=0，海森伯表象的算符与薛定谔表象中的算符的形式是相同的，因为前式中：

$$\hat{x}(0)=\hat{x}$$

$$\hat{p}(0)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

c.f.P.Roman.Advanced　Quantum Theory: § 1.1.p.47-48　Addison-Wesley

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

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

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

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

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

5.1 证明力学量 $\hat{A}$（不显含 t）的平均值对时间的二次微商为：

$$\hbar^2\frac{d^2}{dt^2}\overline{A}=-\overline{[[\hat{A},\hat{H}],\hat{H}]} \qquad （\hat{H}\text{ 是哈密顿量}）$$

（解）根据力学量平均值的时间导数公式，若力学量 $\hat{A}$ 不显含 t，有

$$\frac{d\overline{A}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{A},\hat{H}]} \qquad （1）$$

将前式对时间求导，将等号右方看成为另一力学量 $\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}]$ 的平均值，则有：

$$\frac{d^2\overline{A}}{dt^2}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}],\hat{H}]}=-\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[\hat{A},\hat{H}],\hat{H}]} \qquad （2）$$

此式遍乘 $\hbar^2$ 即得待证式。

5.2 证明，在不连续谱的能量本征态（束缚定态）下，不显含 t 的物理量对时间 t 的导数的平均值等于零。

（证明）设 $\hat{A}$ 是个不含 t 的物理量，ψ 是能量 $\hat{H}$ 的公立的本征态之一，求 $\hat{A}$ 在 ψ 态中的平均值，有：

$$\overline{A}=\iiint_\tau \psi^*\hat{A}\psi d\tau$$

将此平均值求时间导数，可得以下式（推导见课本§5.1）

$$\frac{d\overline{A}}{dt}=\frac{1}{\hbar i}\overline{[\hat{A},\hat{H}]}\equiv\frac{1}{\hbar i}\iiint_\tau \psi^*(\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A})\psi d\tau \qquad （1）$$

今 ψ 代表 $\hat{H}$ 的本征态，故 ψ 满足本征方程式

$$\hat{H}\psi=E\psi \qquad （E\text{ 为本征值}） \qquad （2）$$

又因为 $\hat{H}$ 是厄密算符，按定义有下式（ψ 需要是束缚态，这样下述积分存在）

$$\iiint_\tau \psi^* \hat{H}(\tilde{A}\psi)d\tau = \iiint(\hat{H}\psi)^*(\hat{A}\psi)d\tau \qquad (3)$$

（题中说力学量导数的平均值，与平均值的导数指同一量）
（2）（3）代入（1）得：

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{1}{\hbar i}\iiint\psi^*\hat{A}(\hat{H}\psi)d\tau - \frac{1}{\hbar i}\iiint(\hat{H}\psi)^*(\hat{A}\psi)d\tau$$

$$= \frac{E}{\hbar i}\iiint\psi^*\hat{A}\psi d\tau - \frac{E^*}{\hbar i}\iiint\psi^*\hat{A}\psi d\tau$$

因 $E = E^*$，而 $\frac{d\overline{A}}{dt} = 0$

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

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

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

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

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

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

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

5.3 证明，对于一维波包有：$\frac{d}{dt}\overline{x^2} = \frac{1}{\mu}(\overline{xp} + \overline{px})$

（解）一维波包的态中，势能不存在故

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} \qquad \text{（自由波包）}$$

依据力学量平均值时间导数公式：

$$\frac{d}{dt}\overline{x^2}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{x}^2,\hat{H}]}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{x}^2,\frac{\hat{p}_x^2}{2\mu}]}$$

$$=\frac{1}{2\mu\hbar i}[\hat{x}^2,\hat{p}_x^2] \qquad (2)$$

但 $[\hat{x}^2,\hat{p}_x^2]=\hat{x}^2\hat{p}_x^2-\hat{p}_x^2\hat{x}^2$

$$=(\hat{x}\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x)+(\hat{x}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x\hat{x})$$

$$+(\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x\hat{x}-\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x\hat{x})+(\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x\hat{x}-\hat{p}_x\hat{p}_x\hat{x}\hat{x})$$

$$=\hat{x}[\hat{x},\hat{p}_x]\hat{p}_x+\hat{x}\hat{p}_x[\hat{x},\hat{p}_x]+[\hat{x},\hat{p}_x]\hat{p}_x\hat{x}+\hat{p}_x[\hat{x},\hat{p}_x]\hat{x} \qquad (3)$$

因 $[\hat{x},\hat{p}_x]=\hbar i$

$$[\hat{x}^2,\hat{p}_x^2]=2\hbar i(\hat{x}\hat{p}_x+\hat{p}_x\hat{x}) \qquad (4)$$

代入（2）式，得到待证的一式。

5.4 多粒子系若不受外力，则其哈密顿算符可表成：$\hat{\boldsymbol{H}}=\sum_i\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}\boldsymbol{m}_i}\hat{\vec{\boldsymbol{p}}}_i{}^2+\sum_{\substack{i,j\\i<j}}\boldsymbol{V}[/\vec{\boldsymbol{r}}_i-\vec{\boldsymbol{r}}_j/]$ (1)

证明：总动量 $\hat{\vec{p}}=\sum_i\hat{\vec{p}}_i$ 为守恒。 (2)

证明：待证一试是矢量算符，可以证明其 x 分量的守恒关系，即为足够按力学量守恒条件这要求：

$$[\hat{p}_x,\hat{H}]=0 \qquad (3)$$

$$[\hat{p}_x,\hat{H}]=[\sum_i\hat{p}_{ix},\sum_i\frac{1}{2m_i}\hat{p}_i{}^2+\sum_{i,j}V(/\vec{r}_i-\vec{r}_j/)]$$

$$=[\sum_i\hat{p}_{ix},\sum_i\frac{1}{2m_i}\hat{p}_i{}^2]+[\sum_i\hat{p}_{ix},\sum_{i,j}V(/\vec{r}_i-\vec{r}_j/)]$$

$$=[\hat{p}_{1x}+\hat{p}_{2x}\dots\hat{p}_{ix}\dots,\quad\frac{1}{2m_i}(\hat{p}_{1x}{}^2+\hat{p}_{1y}{}^2+\hat{p}_{1z}{}^2)+\dots+\frac{1}{2m_i}(\hat{p}_{ix}{}^2+\hat{p}_{iy}{}^2+\hat{p}_{iz}{}^2)\dots]$$

$$+[\hat{p}_{1x}+\hat{p}_{2x}\dots\hat{p}_{ix}\dots,\quad V(/\vec{r}_1-\vec{r}_2/)+V(/\vec{r}_2-\vec{r}_3/)\dots V(/\vec{r}_i-\vec{r}_j/)+\dots] \qquad (4)$$

第一个对易式中，因为：$[\hat{p}_{ix},\hat{p}_{jx}{}^2]=0$ ， $[\hat{p}_{ix},\hat{p}_{jy}{}^2]=0$ ，$[\hat{p}_{ix},\hat{p}_{jz}^2]=0$

故整个 $[\sum_i\hat{p}_{ix},\sum_i\frac{1}{2m_i}\hat{p}_i{}^2]=0$

至于第二个对易式中，其相互势能之和有以下的形式

$$\sum_{i,j} \boldsymbol{V}[/\vec{r}_i - \vec{r}_j /] = \sum_{\substack{i,j \\ i<j}} \boldsymbol{V}(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j}\{V(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j) + V(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j)\}$$

又⑷式的第二对易式又能用分配律写成许多对易式之和，由于不同粒子的坐标算符和动量算符永远能够对易，⑷式又能简化成：

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = \sum_i [\hat{p}_{ix}, \sum_j \hat{V}(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j)]$$

$$= \sum_i \sum_j [\hat{p}_{ix}, \frac{1}{2}\{\hat{V}(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j) + \hat{V}(x_j - x_i, y_j - y_i, z_j - z_i)\}] \qquad (6)$$

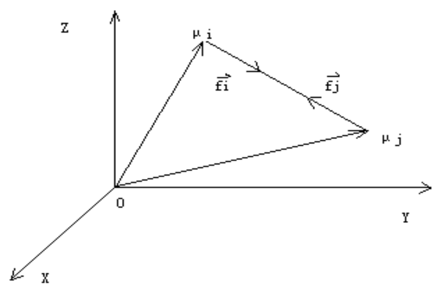
再运用对易式（第四章 11 题） $[\hat{p}_{ix}, F(x_i)] = \frac{\hbar}{i}[\frac{\partial}{\partial x_i}, F(x_i)] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial V(x_i)}{\partial x_i}$

代入上式得：

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = \sum_i \sum_j [[\hat{p}_{ix}, \frac{1}{2}[\hat{V}(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j)] + \sum_i \sum_j [\hat{p}_{ix}, \frac{1}{2}[\hat{V}(x_j - x_i, y_j - y_i, z_j - z_i)]]$$

$$= \sum_i \sum_j \frac{\hbar}{2i}\frac{\partial V}{\partial x_i} - \sum\sum \frac{\hbar}{2i}\frac{\partial V}{\partial x_i} = 0$$

满足⑶式，故⑵式得征。



5.5 多粒子系如所受外力矩为 0，则总动量 $\hat{\vec{L}} = \sum \hat{l}_i$ 为守恒。

证明：与前题类似，对粒子系，外力产生外力势能和外力矩，内力则产生内力势能 $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$，但因为内力成对产生，所以含内力矩为 0，因此若合外力矩为零，则总能量中只含内势能：

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu_i}\hat{p}_i^{\ 2} + \sum_{i,j} V[\vec{r}_i - \vec{r}_j] \qquad (1)$$

要考察合力矩是否守恒，可以计算 $[\hat{\vec{L}}, \hat{H}]$ 的分量看其是否等于零。

$$[\hat{\vec{L}}_x, \hat{H}] = [\sum_i (y_i p_{iz} - z_i p_{iy}), \sum_i \frac{1}{2\mu_i}\hat{p}_i^{\ 2} + \sum_{i,j} V[\vec{r}_i - \vec{r}_j]]$$

$$= \sum_i \frac{1}{2\mu_i}[(y_i p_{iz} - z_i p_{iy})(\hat{p}_{ix}^{\ 2} + \hat{p}_{iy}^{\ 2} + \hat{p}_{iz}^{\ 2}) - (\hat{p}_{ix}^{\ 2} + \hat{p}_{iy}^{\ 2} + \hat{p}_{iz}^{\ 2})(y_i p_{iz} - z_i p_{iy})]$$

$$+ \sum_i \sum_j [(y_i p_{iz} - z_i p_{iy}) V(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j) - V(x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j)(y_i p_{ix} - z_i p_{iy})]$$

$$=\sum_i \frac{1}{2\mu_i}[(y_i p_{iz}\hat{p}_{ix}{}^2-\hat{p}_{ix}{}^2 y_i p_{iz})+(y_i p_{iz}\hat{p}_{iy}{}^2-\hat{p}_{iy}{}^2 y_i p_{iz})+(y_i p_{iz}\hat{p}_{iz}{}^2-\hat{p}_{iz}{}^2 y_i p_{iz})$$
$$+(\hat{p}_{ix}{}^2 z_i p_{iy}-z_i p_{iy}\hat{p}_{ix}{}^2)+(\hat{p}_{iy}{}^2 z_i p_{iy}-z_i p_{iy}\hat{p}_{iy}{}^2)+(\hat{p}_{iz}{}^2 z_i p_{iy}-z_i p_{iy}\hat{p}_{iz}{}^2)] \qquad (3)$$
$$+\sum_i\sum_j[(y_i p_{ix}V-Vy_i p_{ix})+(Vz_i p_{iy}-z_i p_{iy}V)]$$

因为 $[p_{ix}{}^2, p_{iy}]=[p_{iz}{}^2, p_{iz}]=[p_{iz}, p_{ix}{}^2]=[p_{iz}{}^2, p_{iy}]=0$

因而⑶可以化简：

$$[\hat{\hat{L}}_x,\hat{H}]=\sum_i\frac{1}{2\mu_i}\{[0+[y_i,\hat{p}_{iy}{}^2]\hat{p}_{iz}+0+0+0+[\hat{p}_{iz}{}^2,z_i]p_{iy}\}+\sum_i\sum_j\{[p_{iz},y_iV]+[z_iV,p_{iy}]\}$$

用对易关系：

$$[\hat{\hat{L}}_x,\hat{H}]=\sum_i\frac{1}{2\mu_i}\{2\hbar\ ip_{iy}p_{iz}-2\hbar ip_{iz}p_{iy}\}+\sum_i\sum_j\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z_i}[y_iV]-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y_i}[z_iV]\}$$

$$=\frac{\hbar}{i}\sum_{i,j}\{y_i\frac{\partial V}{\partial z_i}-z_i\frac{\partial V}{\partial y_i}\} \qquad (4)$$

最后一式第一求和式用了$[y_i, p_{iy}{}^2]=2\hbar ip_y$等，第二求和式用了：$[p_x, f(x)]=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x}$

最后的结果可用势能梯度[内力]表示，因内力合矩为零，故有

$$[\hat{\hat{L}}_x,\hat{H}]=\frac{\hbar}{i}\sum_{i,j}\vec{r}_i\times\nabla_iV=\frac{\hbar}{i}\sum_{i,j}\vec{r}_i\times\vec{f}_i=0$$

同理可证 $[\hat{\hat{L}}_y,\hat{H}]=0 \qquad [\hat{\hat{L}}_z,\hat{H}]=0$

因此$\hat{\hat{L}}$是个守恒量。

5.6 证明：对经典力学体系，若 A，B 为守恒量，则{A，B}即泊松括号也为守恒量，但不一定是新的守恒量，对于量子体系若$\hat{A}$，$\hat{B}$是守恒量，则$\{\hat{A},\hat{B}\}$也是守恒量，但不一定是新的守恒量。

[证明]先证第一总分，设q_i 为广义坐标，p_i为广义动量，A{ q_i ，p_i}和B{ q_i ，p_i }是任意力学量, i=1,2,3,⋯ ε 为坐标或动量编号，s自由度，则经典Poisson括号是：（前半题证明c.f.Goldstein：Clessical Mechanlcs）

$$\{A,B\}\equiv\sum_i\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}$$

在经典力学中，力学量 A 随时间守恒的条件是 $\frac{d}{dt}A\{p_i,q_i\}=0$

或写作：$\frac{dA}{dt}=\frac{\partial A}{\partial t}+\sum_i\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial q_i}{\partial t}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial p_i}{\partial t}=0$

将哈密顿正则方程式组：$\frac{dq_i}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_i}$ $\frac{dp_i}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$

代入前一式得 $\frac{dA}{dt}=\frac{\partial A}{\partial t}+\sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}=\frac{\partial A}{\partial t}+\{A,H\}=0$

因此，若力学量 A，B 不显示含时间 t,则这两涵数随时间守恒的条件是：

$\{A,H\}=0$ (2)

$\{B,H\}=0$ (3)

假定以上两条件都适合，我们来考察{A，B}是否也是守恒的？为此只需要考察下式能否成立：

$\{\{A,H\},H\}=0$ (4)

为了考察前一式，可令：$I\equiv\{A,\{B,H\}-B,\{A,H\}\}$ (5)

将此式用泊松括号的定义展开得：

$$I\equiv\sum_i\{\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial q_i}\}\sum_k\{\frac{\partial B}{\partial q_K}\frac{\partial H}{\partial p_K}-\frac{\partial B}{\partial p_K}\frac{\partial H}{\partial q_K}\}$$

$$-\sum_k\{\frac{\partial B}{\partial q_K}\frac{\partial}{\partial p_K}-\frac{\partial B}{\partial p_K}\frac{\partial}{\partial q_K}\}\sum_i\{\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\}$$

仔细地展开前一式的各项，将发现全部有关 H 的二阶导数都抵消，只留下 H 的一阶导数的项，化简形式如下：

$$I=\sum_i\{F(A,B)\frac{\partial H}{\partial p_i}+G(A,B)\frac{\partial H}{\partial q_i}\} \quad (6)$$

式中 F，G 都含 A 和 B 的导数，为了确定这两个待定系数，可令 H 等于特殊函数 p_i (这不失普遍性，F 与 H 无关)，代入⑸式后有

$$I=\{A,\{B,p_i\}\}-\{B,\{A,p_i\}\}$$
$$=\{A,\frac{\partial B}{\partial q_i}\}-\{B,\frac{\partial A}{\partial q_i}\}=\frac{\partial}{\partial q_i}\{A,B\}$$

前式中$\{B,p_i\}$的值可在⑴中，作替代 A—>B，B—> p_i 得到，$\{A,p_i\}$求法类似。再在⑹式中，令 H= p_i，得：

I=F（A，B）因而得： $F(A,B)=\frac{\partial}{\partial q_i}\{A,B\}$

同理令 H= q_i 得：$G(A,B)=-\frac{\partial}{\partial p_i}\{A,B\}$

将所得的 F 和 G 代入⑹，并将这结果再和⑸等同起来，得到：
{A，{B，H}}—{B，{A，H}}

$$=\sum_i\{\frac{\partial}{\partial q_i}\{A,B\}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial}{\partial p_i}\{A,B\}\frac{\partial H}{\partial q_i}\}=\{\{A,B\},H\}$$

这个式子说明：如果（2），（3）满足，（4）式就成立即{A,B}守恒。

在量子力学体系情形，$\hat{A},\hat{B}$ 守恒的条件是

$$[\hat{A},\hat{H}]=0 \qquad\qquad [\hat{B},\hat{H}]=0$$

再考察 $I=[[\hat{A},\hat{B}]\hat{H}]=[\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A},\hat{H}]$

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

将此式加减 $\hat{A}\hat{B}\hat{H}+\hat{B}\hat{H}\hat{A}$ 后得到：

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

若 $\hat{A}$， $\hat{B}$ 是守恒量，前一式等号右方 $[\hat{A},\hat{H}]=0$，$[\hat{B},\hat{H}]=0$，左方 $[[\hat{A},\hat{B}]\hat{H}]=0$

所以 $[\hat{A},\hat{B}]$ 也是守恒量，所以量子体系的情形也有类似的结论。在量子体系情形，若 $\hat{A},\hat{B}$ 是守恒量，则 $\hat{A},\hat{B},\hat{H}$ 有共同本征态，在此态中测得 $\hat{A},\hat{B}$ 的值为确定值 A_0 和 B_0（初始时刻的值），$[\hat{A},\hat{B}]$ 的值为 0。

5.7——3.2，3.3

5.8 $D_x(a)=\exp\left\{-a\frac{\partial}{\partial x}\right\}=\exp\{-iaP_x/\hbar\}$ 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：$\boldsymbol{D_x(a)\psi(x)=\psi(x-a)=e^{ik(x-a)}\phi_k(x-a)=e^{-ika}\cdot e^{ikx}\phi_k(x)=e^{-ika}\psi(x)}$ 证毕

5.8 证明周期场中的 Bloch 波函数（§3.4）

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

是 $\hat{D}_x(a)$ 的本征函数，相应的本征值是 e^{ika} 。

（证明）$\hat{D}_x(a)$ 是位移算符，它的本征态具有空间的移动（或平移）的对称性，假使 $\psi(x)$ 是这种态，则

$$\hat{D}_x(a)\psi(x)=\lambda\psi(x)$$

同时 $\psi(x)$ 是有运动对称性的： $\psi(x+a)=\psi(x)$

将 $D_x(a)$ 作用于 Bloch 函数：

$$\hat{D}_x\psi(x)=\psi(x+a)=e^{ik(x+a)}\Phi_k(x+a)=e^{ika}e^{ikx}\Phi_k(x)=e^{ika}\psi(x)$$

5.9——6.7

5.9 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

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

5.10——2.12
5.11 5.12 答案没找到
5.13——3.10
5.14——3.16

5.14 验证积分方程式

$$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+i[\hat{A},\int_o^t B(\tau)d\tau]$$

有下列解：$\hat{B}(t)=e^{i\hat{A}t}B(0)e^{-i\hat{A}t}$ （$\hat{A}$ 与时间无关）

（证明）根据第四章第 40 习题，有：

$$e^{\hat{L}}\hat{A}'e^{-\hat{L}}=\hat{A}'+[\hat{L},A']+\frac{1}{\varepsilon!}[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}']]+\ldots\ldots \qquad (2)$$

因此令题给一式中的 $i\hat{A}t=\hat{L}$ ，题给一式 $\hat{B}(0)=\hat{A}'$ （前式中的）

则 $\hat{B}(t)=\hat{B}(0)+[i\hat{A}t,\hat{B}(0)]+\frac{1}{2!}[i\hat{A}t,[i\hat{A}t,\hat{B}(0)]]+\ldots\ldots$

$$=\hat{B}(0)+(it)[\hat{A},\hat{B}(0)]+\frac{(it)^2}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}(0)]]+\ldots\ldots \qquad (3)$$

将（3）积分：$\int_0^t \hat{B}(\tau)d\tau = \frac{1}{i}\{B(0)(it) + \frac{(it)^2}{2!}[\hat{A},\hat{B}(0)] + \frac{(it)^2}{3!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}(0)]] + ...\}$　（4）

将（4）代入（1）式右方：

$$\hat{B}_0 + i[A, \int_0^t \hat{B}(\tau)d\tau] = B_0 + [iAt, \hat{B}(0)] + \frac{1}{2!}[i\hat{A}t, [i\hat{A}t, \hat{B}(0)]] + ... = \hat{B}(t)$$

题得证。

5.15——参考 7.17

5.15 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：

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

势能在两个参照系中的表示式有下列关系

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

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

$$w(x,t) = w'(x',t') \quad （6）$$

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

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

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

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

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

将（7'）代入（8）式，可得

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

（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。

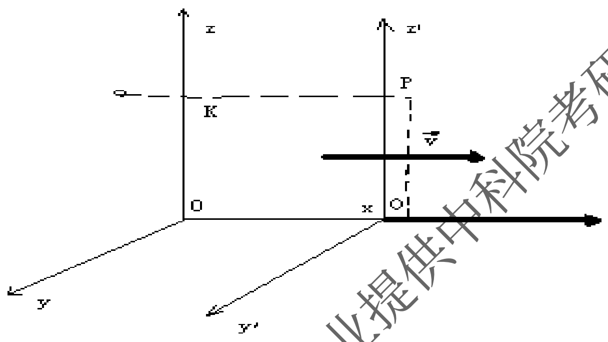
5.15 证明在伽利略变换下薛定谔方程具有不变性，即设惯系 K′ 以速度 v 相对于惯性系 K（沿 x 轴正方向）运动时，空间任何一点，两座标系中的坐标满足：

$$\begin{cases} x=x'+vt' \qquad y=y' \qquad z=z' \\ t'=t \end{cases} \tag{1}$$

势能在 K′ K 两坐标系中的表示式有下列关系

$$V'(x',t')=V'(x-vt,t)=V(x,t) \tag{2}$$

证明若在 K′ 中薛定谔方程式是



$$\hbar i\frac{\partial\psi'}{\partial t'} = (-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V')\psi'$$ 则在 K′ 中：$$\hbar i\frac{\partial\psi}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V)\psi$$

其中：$\psi(x,t) = e^{i(\frac{v}{\hbar}x-\frac{v^2}{2\hbar}t)} \times \psi'(x-vt,t)$ (3)

[证明]从伽利略变换定义可知，在⑴式中当 t=0 时，x=x′，t=t′，因此在时刻 t=0 一点的波函数 $\psi(x,t)$ 与 $\psi'(x',t')$ 相重合，这个关系和§5.1⑵的海森伯，薛定谔表象变换:

$$\varphi(\vec{r},t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(\vec{r},0)$$

为普遍起见,我们假设 K,K′ 间的变换用一未知的么正算符 $\hat{U}(x,t)$ 表示。关于这一点也可以用变换前后的几率相等来解释 $|\psi(x,t)|^2 = |\psi(x',t')|^2$。

$\psi'(x',t')=\hat{U}(x,t)\psi(x,t)$ (4)

逆变换 $\psi(x,t)=\hat{U}^{-1}(x,t)\psi'(x',t')$ (5)

从⑴知道：$\frac{\partial}{\partial x'}=\frac{\partial x}{\partial x'}\bullet\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}$ $\frac{\partial}{\partial t'}=\frac{\partial t}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial x}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}$ (6)

已知在 K′ 描写态的波函数$\psi'(x',t')$满足：

$$\hbar i\frac{\partial\psi'}{\partial t'}=-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\psi'(x',t')+V(x',t')\psi'(x',t') \quad (7)$$

将⑷和⑹的关系代入；并注意势能 V（x,t）是变换的不变量

$$\hbar i(\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x})\hat{U}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\hat{U}\psi(x,t)+\hat{V}(x,t)\hat{U}\psi(x,t)$$

展开得：$\hbar i(\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}\psi+\hat{U}\frac{\partial\psi}{\partial t}+v\frac{\partial\hat{U}}{\partial x}\psi+v\hat{U}\frac{\partial\psi}{\partial x})$

$$=-\frac{\hbar}{2\mu}(\hat{U}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+2\frac{\partial\hat{U}}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\psi)+\hat{V}\cdot\hat{U}\cdot\psi \quad (8)$$

式子⑻中的变换算符没有单一解，但是，假定象题中指定的，要求另一座标系 K 中，薛定谔方程式有完全相同的形式，即下式成立的话：

$$\hbar i\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x,t)\psi(x,t) \quad (9)$$

那末⑻式中$\hat{U}$需要受到限制，即⑻必需化简为⑼，为此比较⑻式左右方$\psi,\frac{\partial\psi}{\partial x}$的系数，容易看出，下面二式满足时⑻化为⑼的形式：

$$\begin{cases}\hbar i(\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}+v\frac{\partial\hat{U}}{\partial x})=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\hat{U}}{\partial x^2} & (10)\\ \hbar iv\hat{U}=\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\partial U}{\partial x} & (11)\end{cases}$$

将（11）积分，得到：

$$\hat{U}(x,t)=\hat{c}(t)e^{-\frac{\mu vi}{\hbar}x} \quad (12)$$

$\hat{c}(t)$是个与 t 有关的算符，再将（12）代入（10），得到：$\frac{\partial\hat{c}(t)}{\partial t}=\frac{\mu v^2 i}{2\hbar}\hat{c}(t)$

积分得：$\hat{c}(t)=\hat{c}(0)e^{\frac{\mu v^2 i}{2\hbar}t}$ $\hat{U}(x,t)=\hat{c}(0)e^{i(\frac{\mu v^2}{2\hbar}t-\frac{\mu v}{\hbar}x)}$

逆变换是：$\hat{U}^{-1}=\hat{U}^{+}(x,t)=\hat{c}(0)^{-1}e^{i(\frac{uv}{\hbar}x-\frac{uv^{2}}{2\hbar}t)}$

5.15 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

$$V^{'}\left(x^{'},t^{'}\right)=V^{'}\left(x^{'}-\upsilon t,t\right)=V(x,t)\qquad（2）$$

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 $\psi^{'}$ 的意义完全相同。

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

$\left|\psi^{'}\left(x^{'},t^{'}\right)\right|^{2}=w^{'}\left(x^{'},t^{'}\right)$，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 $w(x,t)=w^{'}\left(x^{'},t^{'}\right)$ （6）

从（1）式有 $w^{'}(x-\upsilon t,t)=w(x,t)$ （6’）

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

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

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

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

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

将（7'）代入（8）式，可得

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

（9）

选择适当的$S(x,t)$，使得（9）$\rightarrow$（4），

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

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

从（10）可得 $S=\frac{m\upsilon}{\hbar}x+f(t)$ 。（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 $f(t)=-\frac{m\upsilon^2}{2\hbar}t+C$。

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

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

代入（7'）式，最后得到波函数的变换规律：

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

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

$$P'=P-m\upsilon$$

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

据此，K 系和 $K^{'}$ 系中相应的平面波波函数为

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

（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。

5.16——2.1
5.17——2.2

5.17 设 Hamilton 量 $H=\frac{P^2}{2u}+V(\vec{r})$。证明求和规则 $\sum_n (E_n-E_m)|x_{nm}|^2=\hbar^2/2u$

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

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

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

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

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

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

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

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

不难得出，对于 Y,Z 分量，亦有同样的结论，证毕。

5.18——2.4

5.18 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。

5.19——2.5

5.19）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。

5.20——2.6
5.21——2.7
5.22——2.8
5.23——2.9
5.24——2.10
5.25 没找到答案

补充：

1.粒子系处在下列外场中，指出哪些力学量（动量，能量，角动量，宇称）是守恒量。

(1)自由粒子
(2)无限的均匀柱对称场
(3)无限均匀平面场
(4)中心力场
(5)均匀交变场
(6)椭球场

[解]要判断哪些力学量守恒,需要将力学量 $\hat{p},\hat{l},\hat{H},\hat{P}$ [宇称量]等表示成适宜的形式,再考察 $[\hat{A},\hat{H}]$ 等是否是零,但 $\hat{A}$ 是该力学量,若该交换式是零就说明 $\hat{A}$ 是个守恒量,下面各种场的分析中，$\hat{\vec{p}},\hat{\vec{l}}$ 的分量或其平方，$\hat{H},\hat{P}$ 等逐个立式考虑,

(1)[自由粒子] $\hat{V}=0$ $\quad\quad \hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2\mu}$

[a] $[\hat{p}_x,\hat{H}]=[\hat{p}_x,\dfrac{1}{2\mu}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2+\hat{p}_z{}^2)]=0$

同理 $\quad [\hat{p}_y,\hat{H}]=0 \quad\quad [\hat{p}_z,\hat{H}]=0$

[b] $[\hat{l}_x,\hat{H}]=[\dfrac{\hbar}{i}(\hat{y}\hat{p}_x-\hat{z}\hat{p}_y),\dfrac{1}{2\mu}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2+\hat{p}_z{}^2)]=\dfrac{1}{2\mu}(\hat{p}_y\hat{p}_x-\hat{p}_z\hat{p}_y)=0$

同理 $[\hat{l}_y,\hat{H}]=0 \quad\quad [\hat{l}_z,\hat{H}]=0$

[c]设 $\hat{P}$ 为宇称，对任意波涵数 $\psi(\vec{r},t)$

$$\hat{P}\hat{H}\psi=\hat{P}\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})\}\psi(\vec{r},t)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2}+\frac{\partial^2}{\partial(-y)^2}+\frac{\partial^2}{\partial(-z)^2})\psi(-\vec{r},t)$$

$$=\hat{H}\psi(-\vec{r},t)=\hat{H}\hat{P}\psi(\vec{r},t)$$

$$\hat{P}\hat{H}=\hat{H}\hat{P} \qquad 或 \qquad [\hat{P},\hat{H}]=0$$

此外 H 不显含时间，故总的说 $\hat{p},\hat{l},\hat{H},\hat{P}$ 守恒。

⑵[无限均匀柱对称场]

柱对称场若用柱面座标 (R,φ,z) 表示势能时,形式为 V(R),是对称的哈氏算符,凡以 z 轴为对称轴的柱面上各点，势能 V(R)相同。

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\{\frac{1}{R}[\frac{\partial}{\partial R}(R\frac{\partial}{\partial R})]+\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial(z)^2}\}+V(R)$$

[a]动量算符 $\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial R}-\frac{\sin\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi})$，

$$\hat{p}_y=\frac{\hbar}{i}(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial R}+\frac{\cos\varphi}{R}\frac{\partial}{\partial\varphi})，$$

$$\hat{p}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$

直截代入相应的对易式，得：

$[\hat{p}_x,\hat{H}]\neq 0 \qquad [\hat{p}_y,\hat{H}]\neq 0 \qquad [\hat{p}_z,\hat{H}]=0$

[b]角动量分量 $\hat{l}_x=\frac{\hbar}{i}\{-z\sin\varphi\frac{\partial}{\partial R}-\frac{z}{R}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}+R\cos\varphi\frac{\partial}{\partial z}\}$

$$\hat{l}_y=\frac{\hbar}{i}\{z\cos\varphi\frac{\partial}{\partial R}-\frac{z}{R}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}-R\cos\varphi\frac{\partial}{\partial z}\}$$

$$\hat{l}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

直截代入相应的交换式，得：

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

[c] $\hat{P}\hat{H}\psi(\vec{r},t)=\hat{P}\{\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+V(\hat{r})\}\psi(\vec{r},t)=\{\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+V(-\hat{r})\}\psi(-\vec{r},t)$

柱面对称性的表示式 $V(\vec{r})=V(-\vec{r})$

故前式成为 $\hat{P}\hat{H}\psi(\vec{r},t)=\hat{H}\hat{P}\psi(\vec{r},t)$ $[\hat{P},\hat{H}]=0$

此外 $\hat{H}$ 也不显含时间 t，总的说来 $\hat{p}_z,\hat{l}_z,\hat{H},\hat{P}$ 四力学量守恒。Z 是柱面对称轴方向的座标。

⑶[无限均匀的平面场]

均匀平面场在一平面内势能不为零,并且处处相等,而与该点的座标无关,记作 V_0.

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\hat{V}_0=\frac{1}{2\mu}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2)+\hat{V}_0$$

[a] $[\hat{p}_x,\hat{H}]=[\hat{p}_x,\frac{1}{2\mu}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2)+\hat{V}_0]$

$$=[\hat{p}_x,\frac{1}{2\mu}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2)+(\hat{p}_x,\hat{V}_0)]=0$$

同理 $[\hat{p}_y,\hat{H}]=0$

[b]角动量 $\hat{\vec{l}}$ 系沿着 z 轴,故 $\hat{l}_x=0$,$\hat{l}_y=0$，$\hat{l}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x$

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

$$[\hat{l}_z,\hat{H}]=[\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x,\frac{1}{2\mu}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2)+\hat{V}_0]$$

$$=\frac{1}{2\mu}(\hbar i\hat{p}_y\hat{p}_x-\hbar i\hat{p}_x\hat{p}_y)=0$$

$[\hat{\vec{l}}_z,\hat{H}]=0$

[c] $\hat{P}\hat{H}\psi=\hat{P}\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2})+V_0\}\psi(x,y,t)$

$$=\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2}+\frac{\partial^2}{\partial(-y)^2})+V_0\}\psi(-x,-y,t)=\hat{H}\hat{P}\psi$$

$[\hat{P},\hat{H}]=0$

$\hat{H}$ 不显含 t,总起来说 $\hat{\vec{p}},\hat{\vec{l}}_z,\hat{H},\hat{P}$ 守恒.

本题和三维自由场类似,差别在于均匀二维势场,但它不影响力学量的守恒.

⑷[中心力场]

这种场的势能 V(r),哈氏算符

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})-\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}\}+V(r) \qquad (1)$$

动量算符如下:

$$\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\hbar}{i}\{\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\}$$

$$\hat{p}_y=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\hbar}{i}\{\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\} \qquad (2)$$

$$\hat{p}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\hbar}{i}\{\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\}$$

由于$\frac{\partial}{\partial x}$等不能与$\hat{H}$中所含 V(r)对易,因而各分量$\hat{p}_x$等都不和$\hat{H}$对易,即$[\hat{p}_x,\hat{H}]\neq 0$等式成立，

$$\hat{p}^2=-\hbar^2\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})-\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\}$$

$=-\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})$ 和 V（r）对易，也不与$\hat{H}$对易。即$[\hat{p}^2,\hat{H}]\neq 0$

[b]角动量算符是：

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

$$\hat{l}^2=-\hbar^i\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\} \qquad (3)$$

$\hat{\vec{l}}$及其分量仅与角度(θ,φ)有关，与 r 无关，因而$\hat{l}_x$等和$\hat{l}^2$和势能 V（r）对易直接看出：（见课本 113 页）

$[\hat{l}_z,\hat{l}^2]=0$

直接代入能证：$[\hat{l}_x,\hat{l}^2]=0$ $\qquad$ $[\hat{l}_y,\hat{l}^2]=0$

$$[\hat{l}_z,\hat{H}]=\{-\hbar i\frac{\partial}{\partial\varphi},-\frac{\hbar^2}{2\mu}\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})-\frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{l}^2\}\}=0$$

同理关于$\hat{l}_x$，$\hat{l}_y$。

$$[\hat{l}^2, H] = \{l^2, -\frac{\hbar^2}{2\mu}\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{l}^2\}\} = 0$$

[c]中心力场是球对称势场，即在同一球面上势能相等（等势面球形）$V(-\vec{r}) = V(\vec{r})$

对任意波函数$\psi(\vec{r},t)$，有

$$\hat{P}\hat{H}(\vec{r})\psi(\vec{r},t) = \hat{P}\{\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r})\}\psi(\vec{r},t)$$

$$= \{\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(-\vec{r})\}\psi(-\vec{r},t) = \{\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r})\}\psi(-\vec{r},t) = \hat{H}\hat{P}\psi(\vec{r},t),$$

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0$$

中心力场的守恒量是$\hat{\vec{l}}, \hat{l}^2, \hat{H}, \hat{P}$。

(5)[均匀交变场]

这种势场可以是三维的，但既是均匀的，则势能不应依赖于座标，而只依赖于时间，例如写成标量场形式

$$V = V_0 \cos\omega t$$

这样，在每一个指定时间 t 就是一个空间中的均匀场，其性质就和三维自由粒子场相仿。$\hat{\vec{k}}, \hat{\vec{l}}, \hat{H}, \hat{P}$守恒量。但若这种场是矢量场，例如一个电场沿 z 轴，随时间作交变，这样对称性要减低。

$V = V_0 \cos\omega t \bullet \vec{k}$ （$\vec{k}$ 沿 z 轴单位矢）

则守恒量是 $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{l}_x, \hat{H}, \hat{P}$

(6)[椭球场]

这种势场的对称性,在于场的等势面是一群椭球面,因而势场写作:

$$V(\vec{r}) = (\frac{x}{a})^2 + (\frac{y}{b})^2 + (\frac{z}{c})^2$$

这可以用直角坐标形式的算符来讨论:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + \{(\frac{x}{a})^2 + (\frac{y}{b})^2 + (\frac{z}{c})^2\}$$

动量算符是：$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ ，$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$ ，$\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$

另两个轮换对称。

由于直角坐标与其共轭动量不对易，即$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$等

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = [\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + \{(\frac{x}{a})^2 + (\frac{y}{b})^2 + (\frac{z}{c})^2\}]$$

一式中$[\hat{p}_x,\hat{x}^2]\neq 0$，所以动量不守恒，同理

$$[\hat{l}_x,\hat{H}]=[\frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}),-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})+\{(\frac{x}{a})^2+(\frac{y}{b})^2+(\frac{z}{c})^2\}]$$

此式之中$\hat{l}_x$与$\hat{T}$，$\hat{V}$两部分都不能够对易，因而角动量也不守恒。

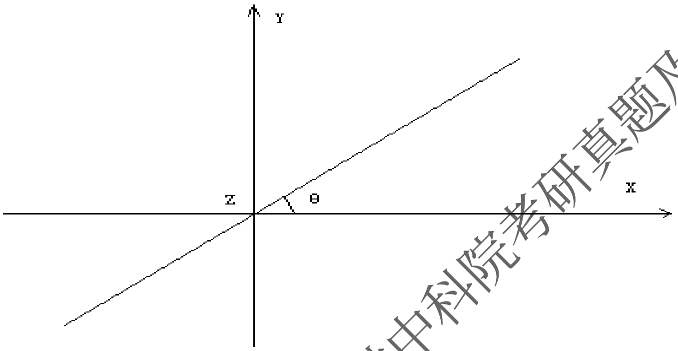
椭球形势场中粒子的守恒只会有$\hat{H}$和$\hat{P}$两种。

c.f.D.特哈尔：量子力学习题集：§3。31 题 p154—p。160。

2.对于平面转子（转动惯量 I），设：$\psi(\varphi,0)=A\sin^2\varphi$

（1） 试求$\psi(\varphi,t)$

[解]平面转子的定位坐标是转角φ，这种坐标相当于球面极坐标中 r=常数，$\theta=\frac{\pi}{2}$，$\varphi=$自变量的情形。



首先推出哈氏算符，在经典力学中，若刚体对旋转轴转动惯量 I，角动量（相当于$\hat{l}_x$）$\hat{l}_x$和动量 T 的关系是 T=$\frac{1}{2I}l_x^{\ 2}$，转子的势能是零，又在球面极座标中导得$l_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$，故转子哈氏算符：$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ ⑴

根据本章§5.1 的⑵状态的波函数采用海森伯表象时记作$\varphi(\vec{r},0)$，采用薛定谔表象时是$\psi(\vec{r},0)$,则二者有函数变换关系是：

$$\varphi(\vec{r},t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(\vec{r},0) \qquad (2)$$

本题是该公式的典型用法的示例，本题情形，所用变换算符不显含时间，根据⑴式有：

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}=e^{\frac{i\hbar t/\hbar}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}} \qquad (3)$$

将⑶式运算于题给的海森伯表象波函数

$$\psi(\vec{r},t)=\varphi(\varphi,t)=e^{\frac{i\hbar t/\hbar}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}}(\frac{1-\cos 2\varphi}{2})$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\frac{\hbar it}{2I})^n(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})^n(\frac{1-\cos 2\varphi}{2})$$

注意到： $\frac{\partial}{\partial\varphi}\cos 2\varphi=2\cos(2\varphi+\pi)=-2\sin 2\varphi$

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\cos 2\varphi=-2^2\cos 2\varphi$$

$$\frac{\partial^{2n}}{\partial\varphi^{2n}}\cos 2\varphi=2^{2n}\cos(2\varphi+n\pi)=(-4)^n\cos 2\varphi$$

$$\psi(\varphi,t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\frac{-2\hbar it}{I})^n(\frac{1-\cos 2\varphi}{2})=\frac{1}{2}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\frac{-2\hbar it}{I})^n\frac{\cos 2\varphi}{2}$$

$$=\frac{1}{2}-\{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\frac{-2\hbar it}{I})^n\}\bullet\frac{\cos 2\varphi}{2}$$

$$=\frac{1}{2}\{1-e^{\frac{-2\hbar it}{I}}\cos 2\varphi\}----------(4)$$

(4)还是非归一化的波函，要将$\psi(\vec{r},t)$归一化，应乘常数$\sqrt{\frac{4}{3\pi}}$。

第六章 中心力场

P307　1.证明下列关系式：

相对动量　$\vec{p}=\mu\dot{\vec{r}}=\frac{1}{M}\left(m_2\vec{p}_1-m_1\vec{p}_2\right)$　（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 $T=\frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1}+\frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2}=\frac{\vec{P}^2}{2M}+\frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu}$　（4）

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

P308　2. 同上题，求坐标表象中 $\vec{p}$ 、$\vec{P}$ 和 $\vec{L}$ 的算符表示

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

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。

P308 质量分别为 m_1,m_2 的两个粒子组成的体系，质心座标 $\vec{R}$及相对座标 $\vec{r}$ 为：

$$\vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2} \qquad (1)$$

$$r\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \qquad (2)$$

试求总动量 $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$ 及总角动量 $\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2$ 在 $\vec{R}$，$\vec{r}$ 表象中的算符表示。

1. [解] （a）合动量算符 $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$。根据假设可以解出 $\vec{r}_1$，$\vec{r}_2$

令 $m \equiv m_1 + m_2$ ：

$$\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1}\vec{r} \qquad (3)$$

$$\vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1}{m_2}\vec{r} \qquad (4)$$

设各个矢量的分量是 $\vec{r}_1(x_1, y_1, z_1)$，$\vec{r}_2(x_2, y_2, z_2)$，$\vec{r}(x, y, z)$ 和 $\vec{R}(X, Y, Z)$。为了计算动量的变换式先求对 x_1，x_2 等的偏导数：

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{m}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \qquad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial X}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_2}{m}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} \qquad (6)$$

关于 $\frac{\partial}{\partial y_1}$，$\frac{\partial}{\partial y_2}$，$\frac{\partial}{\partial z_1}$，$\frac{\partial}{\partial z_2}$ 可以写出与（5）（6）类似的式子，因而：

$$\hat{P}_x = (\hat{\vec{p}}_1 + \hat{\vec{p}}_2)_x = \hat{p}_{1x} + \hat{p}_{2x} = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\frac{m_1}{m}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{m}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial X}$$

$$\hat{P} = \vec{i}\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial X} + \vec{j}\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial Y} + \vec{k}\,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial Z} = \frac{\hbar}{i}\nabla_R$$

(b)总角动量 $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{l}}_1 + \hat{\vec{l}}_2 = \frac{\hbar}{i}(\vec{r}_1 \times \nabla_1 + \vec{r}_2 \times \nabla_2)$

$$\hat{\vec{L}}_x = \frac{\hbar}{i}(\vec{r}_1 \times \nabla_1 + \vec{r}_2 \times \nabla_2)_x$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(y_1\frac{\partial}{\partial z_1} - z_1\right) + \frac{\hbar}{i}\left(y_2\frac{\partial}{\partial z_2} - z_2\frac{\partial}{\partial y_2}\right)$$

利用（3），（4），（5），（6）：

$$\hat{L}_x=\frac{\hbar}{i}\{(Y-\frac{m_2}{m}y)(\frac{m_1}{m}\frac{\partial}{\partial Z}-\frac{\partial}{\partial z})$$

$$-(Z-\frac{m_2}{m}z)(\frac{m_1}{m}\frac{\partial}{\partial Y}-\frac{\partial}{\partial y})$$

$$+(Y+\frac{m_1}{m}y)(\frac{m_2}{m}\frac{\partial}{\partial Z}+\frac{\partial}{\partial z})$$

$$-(Z+\frac{m_1}{m}z)(\frac{m_2}{m}\frac{\partial}{\partial Y}+\frac{\partial}{\partial y})\}$$

$$=\frac{\hbar}{i}\{\frac{m_1}{m}(Y\frac{\partial}{\partial Z}-Z\frac{\partial}{\partial Y})-(Y\frac{\partial}{\partial z}-Z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$-\frac{m_1m_2}{m}(y\frac{\partial}{\partial Z}-z\frac{\partial}{\partial Y})+\frac{m_2}{m}(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$+\frac{m_2}{m}(Y\frac{\partial}{\partial Z}-Z\frac{\partial}{\partial Y})+(Y\frac{\partial}{\partial z}-Z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$+\frac{m_1m_2}{m_2}(y\frac{\partial}{\partial Z}-z\frac{\partial}{\partial Y})+\frac{m_1}{m}(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})\}$$

$$=\frac{\hbar}{i}\{(Y\frac{\partial}{\partial Z}-Z\frac{\partial}{\partial Y})+(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y})\}$$

$$=(\frac{\hbar}{i}\vec{R}\times\nabla_R+\frac{\hbar}{i}\vec{r}\times\nabla_r)_x$$

因而 $\hat{L}=\frac{\hbar}{i}\vec{R}\times\nabla_R+\frac{\hbar}{i}\vec{r}\times\nabla_r$

P332 证明 $\sum_{m=-1}^{m=1}Y^*{}_{lm}(\theta,\varphi)Y^{lm}(\theta,\varphi)=$ **常数(与θ,φ无关)** 由此证明能级上满布电子的情况下，电荷分布是各向同性的。

（证明）题给的关系式是“球谐函数加法定理”，设想原来有一叁考系（xyz），以原点为中心的单位球面上有二点：

$p_1(1,\theta_1,\varphi_1)$ $p_2(1,\theta_2,\varphi_2)$

考察下述谐函数积的总和工：

$$I \equiv \sum_{m=-1}^{m=1} Y_{lm}(\theta_1\varphi_1)Y_{lm}(\theta_2\varphi_2) \qquad (1)$$

能够证明，若将参考系施行一次旋转 $\hat{R}$ 后，对新座标来说该总和仍是不变的。按么正变换理论，若座标系 x,y,z 被旋转成为 x', y', z'，原来的一个函数 $\varphi_{lm}(\theta'\varphi')$ 就被变成

$$\varphi_{lm}(\theta'\varphi') = \hat{R}\varphi_{lm}(\theta,\varphi) = \sum_{mm'} D^{1}_{m} l_m \varphi_{lm}{}^{1}(\theta,\varphi) \qquad (2)$$

$D^{l}_{m}lm$ 是一系列变换系数(用 $Wignet$ 代表文),它与旋转过的角度(例如用欧勒角 α, β, r 表求)有关.(2)式又存在逆变换

$$\psi_{lm}(\theta,\varphi) = \hat{R}_{-1}\psi_{lm}(\theta,\varphi) = \sum_{mm'} D^{l}_{m'm}\psi_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (3)$$

当座标系进行变换时，总和工被变换成的结果，可用（3）代入（1）得到

$$I = \sum_{m=-1}^{l} \{\hat{R}^{-1}Y_{lm}(\theta_1\varphi_1)\}\{\hat{R}^{-1}Y_{lm}(\theta_2'\kappa_2')\} = \sum_{m1}\sum_{m2}\{\Sigma D^{l}_{mm2} D^{l}_{mm1}\}$$

$$Y^{*}_{lm1}(\theta_1'\varphi_1')Ylm_2(\theta_2'\varphi_2') \qquad (4)$$

因为旋转 B 是一种么正变换，它应满足 $\hat{R}\hat{R}^{+} = \hat{I}$，因而

$$\sum_{m} D^{l*}_{mm2} D^{l}_{mm1} = \delta_{m1m2} \qquad (5)$$

结果有：

$$I = \sum_{m=-1}^{1} Y^{*}{}_{lm}(\theta_1\varphi_1)Y_{lm}(\theta_2\varphi_2) = \sum_{m=-1}^{1} Y^{*}{}_{lm}(\theta_1'\varphi_1')Y_{lm}(\theta_2'\varphi_2') \qquad (6)$$

即I对旋转是守恒的。现在我们这样来选择这种旋转 $\hat{R}$，使转后的座标系里，P_1点在Z^1轴上，P_2点则在X^1 0 z^1 座标面上，根据公式（课本）

$$(p \bullet 30): Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(l-m)!(2l+1)}{(l+m)!4\pi}} P^{m}_{1}(\varpi\theta)^{ei\varphi}$$

再利用 $P^{m}_{1}(\omega\theta) = (\omega\theta)^m \dfrac{dm}{d(\omega\theta)^m} P_1(\omega\theta)$

得 $Y_{lm}(\theta_1'',\varphi_1) = Y_{lm}(0,\varphi_1') = \sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi^2}}\sigma om$ 又 $Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)$

$$Y_{lm}(\theta_{2'},0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \bullet \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P^{m}_{1}(\varpi\theta_2')$$

于是有：
$$I=\sum_{m=-1}^{1}Y^*{}_{lm}(\theta_1'\varphi_1')Y_{lm}(\theta_2'\varphi')$$
$$=\sum_m \varpi mo\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\bullet\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\bullet\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_1^m(\varpi\theta_2')$$

$$=\frac{2l+1}{4\pi}P_1^0(\varpi\theta_2'),\text{得}\theta_2'\text{改为}\theta,\text{得公式:}$$

$$\frac{2l+1}{4\pi}P_1(\varpi\theta)=\sum_{m-1}^{1}Y^*{}_{lm}(\theta_1',\varphi_1)Y(\theta_2,\varphi_2) \quad (7)$$

这里$\theta=\theta_2'$代表$\overline{OP_1},\overline{OP_2}$两个位置矢量间的夹角,这是个普遍公式.再将前式中的$\theta(\theta_2')$令之等于零得到待证公式:(这时$\theta_1=\theta_2,\varphi_1=\varphi_2$)

$$\frac{2l+1}{4\pi}=\sum_{m=-1}^{1}Y^*{}_{lm}(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad (8)$$

依据以上结论，假写我们要计算有心力场中电子在核周围形成的电荷密度分布，就可以按几率密度一样计算(§6.3,P.222 几率密度随角度的变化一段)

径向电荷密度

$$q.\frac{d\omega}{d\Omega}\infty|Y_{lm}(\theta,\varphi)|=\text{常量}$$

$d\omega$是指在方位(θ,φ)上单位立体角内电子出现的总几率q是电子电荷,可见电荷分布是各向同性的

P338——5.5

6.1——5.1
6.2——5.24
6.3——5.27
6.4——5.7
6.5——5.16

6.5 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：$\vec{r}\to\overrightarrow{-r}$（$\boldsymbol{r\to -r,\theta\to\pi-\theta,\varphi\to\pi+\varphi}$）。

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

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

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）

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

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

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

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

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 $\hbar/2$。

6.6——5.19

6.7 求出氢原子基态波函数在动量表象中的表示式。利用所得结果，计算 $\overline{p}_x^2$。用 x 表象中的氢原子波函数计算 $\overline{x}^2$,并验证测不准关系式。

解：本题是三维问题，氢原子基态波函数用坐标表象时写作：

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}} \qquad (1)$$

但 $a \equiv \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是玻尔半径，将（1）代入三维的坐标，动量波函数变换式，此式是：

$$\varphi(\hat{\bar{p}}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_\tau \psi(\bar{r}) e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}/h} d^3 x \qquad (2)$$

为使计算简单，可选择 z 轴与动量 $\bar{p}$ 的瞬时方向重合，这样

$$\bar{p}\cdot\bar{r} = pr\cos\theta$$

将（2）中的 $\psi(r)$ 用（1）式代入，进行积分，积分的次序是 φ，θ，r：

$$\varphi(p)=\frac{1}{\pi^2(2\hbar a)^{3/2}}\iiint_{\varphi\theta\, r} e^{-\frac{r}{a}-ipr\cos\theta/\hbar}\, r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi$$

$$=\frac{1}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\iint_{\theta\, r}(e^{-\frac{r}{a}-ipr\cos\theta/\hbar}\sin\theta d\theta)r^2dr$$

$$=\frac{1}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\int_r\frac{\hbar}{ipr}(e^{-\frac{r}{a}+\frac{ipr}{\hbar}}-e^{-\frac{r}{a}-\frac{ipr}{\hbar}})_0^{\pi}rdr$$

$$=\frac{1}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\int\frac{\hbar}{ip}(e^{-\frac{r}{a}+\frac{ipr}{\hbar}}-e^{-\frac{r}{a}-\frac{ipr}{\hbar}})\ rdr$$

$$=\frac{1}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\cdot\frac{\hbar}{ip}\{\frac{1}{(-\frac{r}{a}-\frac{ip}{\hbar})^2}-\frac{1}{(-\frac{r}{a}-\frac{ip}{\hbar})^2}\}$$

$$=\frac{(2a\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a^2p^2+\hbar^2)^2} \qquad (3)$$

其次为了验证氢原子的测不准关系，需要计算座标动量的平均值，计算与坐标有关的平均值时，用$\psi(\bar r)$为波函数，反之计算动量平均值时，可用动量波函数$\varphi(\bar p)$：测不准关系的验证，是通过一个指定方向（如 x 轴）的分量间关系：

$$\bar x=\iiint_\tau|\psi(\bar r)|^2xd^2r=\frac{1}{\pi a^2}\iiint_{r\theta\varphi}e^{-\frac{2r}{a}}(r\sin\theta\cos\varphi)\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi=0$$

$$\bar x^2=\iiint_\tau|\psi(\bar r)|^2x^2d^2r=\frac{1}{\pi a^2}\iiint_{r\theta\varphi}e^{-\frac{2r}{a}}r^2\sin^2\theta\cos^2\varphi\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi$$

$$=\frac{1}{\pi a^2}\int_{r=0}e^{-\frac{2r}{a}}r^4dr\int_{\theta=0}^{\pi}\sin^3\theta d\theta\int_{\varphi=0}^{2\pi}\cos^2\varphi d\varphi$$

$$=\frac{1}{\pi a^3}\int_{r=0}e^{-\frac{2r}{a}}r^4dr\cdot\int_{\theta=0}^{\pi}(\frac{\sin3\theta}{4}+\frac{3}{4}\sin\theta)d\theta\times\int_{\varphi=0}^{2\pi}(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cos2\varphi)d\varphi$$

$$=\frac{1}{\pi a^3}\cdot\frac{4!}{(\frac{2}{a})^5}\cdot\frac{8}{6}\cdot\pi=a^2 \qquad (4)$$

在计算动量有关平均值时，可采用动量相空间的球面极坐标参考系，设动量相空间直角坐标为p_x，p_y，p_z则球面极座标用r^l,θ^l,φ^l表示，$r^l=p$

$$p_x=p\sin\theta^l\cos\varphi^l \qquad p_y=p\sin\theta^l\sin\varphi^l \qquad p_z=p\cos\theta^l$$

$$\overline{p}_x = \iiint |\varphi(p)|^2 p_x r^l = \frac{(2a^3)\hbar^5}{\pi^2}$$

$$\times \iiint_{r^l\theta^l\varphi^l} \frac{p}{(a^2p^2+\hbar^2)\psi} \sin\theta^l \cos\varphi^l \cdot p^2 \sin\theta^l dpd\theta^l d\varphi^l$$

$$= \frac{(2a^3)\hbar^5}{\pi^2} \int_{r=0}^{\infty} \frac{p^3 dp}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}$$

$$\times \int_{\theta^l}^{\pi} \sin^2\theta^l d\theta \int_{\varphi^l=0}^{2\pi} \cos\varphi^l d\varphi \qquad (5)$$

$$\overline{p}_x^2 = \iiint |\varphi(p)|^2 p_x^2 d^3 r^l$$

$$= \frac{(2a^3)\hbar^5}{\pi^2} \int_{r=0}^{\infty} \frac{p^4 dp}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}$$

$$\times \int_{\theta=0}^{\pi} \sin^3\theta^l d\theta^l \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos^2\varphi^l d\varphi^l \qquad (6)$$

与 p 有关的积分可用替代 $ap = \hbar tg\xi$ 入(6)式的第一道积分，得：

$$\int_0^{\infty} \frac{p^4 dp}{(a^2p^2+\hbar^2)^4} = \frac{1}{a^5\hbar^3} \int_{\xi=0}^{\frac{\pi\infty}{2}} \sin^4 \cos^2\xi d\xi$$

$$= \frac{1}{16a^5\hbar^3} \int_{\xi=0}^{\pi^2} (1 - \frac{\cos 2\xi}{2} - \cos 4\xi + \frac{\cos 6\xi}{2}) d\xi$$

$$= \frac{\pi}{64} \frac{1}{a^5\hbar^3}$$ 代入（6）得：

$$\overline{p}_x^2 = \frac{\pi}{64} \frac{1}{a^5\hbar^3} \cdot \frac{8^3\hbar^5}{\pi^2} \cdot \frac{1}{4} \int_{\theta=0}^{\pi} (3\sin\theta^l - \sin 3\theta^l) d\theta^l$$

$$\times \frac{1}{2} \int_{\varphi^l=0}^{2\pi} (1 - \cos 2\varphi^l) d\varphi^l$$

$$= \frac{\hbar^2}{32a^2\pi} \cdot \left| -3\cos\theta^l + \frac{1}{3}\cos 3\theta^l \right|_0^{\pi} \cdot \pi = \frac{\hbar^2}{3a^2}$$

代入测不准关系式：

$$\delta x \cdot \delta p_x = \sqrt{\overline{x}^2 - (\overline{x})^2} \cdot \sqrt{\overline{p}_x^2 - (\overline{p}_x)^2}$$

$$= a \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{3}a} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2}$$

6.8 在动量表象中写出氢原子的能量本征方程式，并证明角动量的各个分量均为守恒量。

解：（一）建立动量表象的能量本征方程式，势能$V(r)=-\frac{e^2}{r}$

先写下坐标表象的薛氏方程式（直角坐标还是球面极座标不分）：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\bar{r})-\frac{e^2}{r}\psi(\bar{r})=E\psi(\bar{r})$$

遍乘$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}$，并对坐标积分：

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}(-\frac{\hbar^2}{2\mu})\iiint_\tau e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}\nabla^2\psi(\bar{r})d^3x-\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_\tau\frac{e^2}{r}e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}\psi(\bar{r})d^3x$$

$$=\frac{E}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_\tau e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}\psi(\bar{r})d^3x \qquad (1)$$

等号左方第一积分用二次分部积分中的$\psi(\bar{r})$加以下述福里哀变换，就得到动量表象的能量本征方程：

$$\psi(r)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_p e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}\varphi(\bar{p})d^3p' \qquad (2)$$

得：$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi(\bar{p})+\iiint_p G(\bar{p},\bar{p}')\varphi(\bar{p}')d^3p'=E\varphi(p) \qquad (3)$$

式中 $$G(\bar{p},\bar{p}')=\frac{-e^2}{(2\pi\hbar)^2}\iiint_\tau\frac{1}{r}e^{i(\bar{p}'-\bar{p})\cdot\bar{r}/\hbar}d^3x \qquad (4)$$

（二）核$G(\bar{p},\bar{p}')$的计算：

先作（4）式类似的计算，假设$-\frac{e^2}{r}$是个坐标表象的波函数，它的相应的动量表象函数是$G(\bar{p})$，则正逆两种变换是：

$$G(\bar{p})=\frac{-e^2}{(2\pi\hbar)^2}\iiint_\tau\frac{1}{r}e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}d^3x \qquad (5)$$

$$-\frac{e^2}{r}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_p G(\bar{p})e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}/\hbar}d^3p \qquad (6)$$

将拉普拉斯算符 $\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

作用于两边，得：

$$4\pi e^2\delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}(-\frac{\vec{p}^2}{\hbar^2})\iiint_p G(p)e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}d^3p \qquad (7)$$

根据（7）式写出它的逆变换式，并且与（5）式对比，有：

$$-\frac{p^2}{\hbar^2}G(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint_\tau 4\pi e^2\delta(\vec{r})e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}d^3x = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}e^2$$

$$G(\vec{p}) = -\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}}e^2\frac{1}{p^2} \qquad (8)$$

将（4）（5）二式比较知道 $G(\vec{p},\vec{p}^{\,l})$ 只需在 $G(\vec{p})$ 中作置换 $\vec{p}\to\vec{p}-\vec{p}^{\,l}$，

再乘 $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$

$$G(\vec{p},\vec{p}^{\,l}) = \frac{1}{2\pi^2\hbar}\frac{-e^2}{\left|p-p^l\right|^2} \qquad (9)$$

因此我们最后得到动量表象的三维能量本征方程式，专用于库仑场。

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi(\vec{p}) + \iiint_p \frac{e^2}{2\pi^2\hbar\left|\vec{p}-\vec{p}^{\,l}\right|^2}\varphi(\vec{p}^{\,l})d^3p = E\varphi(\vec{p}) \qquad (10)$$

（三）动量表象中，角动量分量守恒的证明。

有两面种方法，或用直角坐标表示角动量算符，或用球面极座标表示，用前者较为简单，要证明角动量分量（例如 $\vec{l}_x$）是守恒量，其必要条件是它可以和哈密顿 $\hat{H}$ 算符对易，即：

$$\left[\hat{L}_x,\hat{H}\right] = 0 \qquad (11)$$

这里，用动量表象书写时，可以用直角坐标表标表象的式子加以适宜的置换来得到这种置换是：

$$x\to\hbar i\frac{\partial}{\partial p_x} \qquad y\to\hbar i\frac{\partial}{\partial p_y} \qquad z\to\hbar i\frac{\partial}{\partial p_z}$$

因而得到

$$\hat{l}_x = \hbar i(\frac{\partial}{\partial p_y}p_z - \frac{\partial}{\partial p_z}p_y) \qquad (12)$$

至于 $\hat{l}_y$，$\hat{l}_z$ 的动量表象依类似方法。（10）式中的哈氏算符可从（10）看出：

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\iiint_p (\ )\frac{d^3 p^l}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2} d^3 p \qquad (13)$$

右方第二项是“积分算符”，当它运算于$\Phi(\bar{p})$时，就相当于将$\Phi(\bar{p}^l)$

填入括号（ ）。设想对易算符$\left[\hat{L}_x, \hat{H}\right]$作用在一个任意的动量表象的

波函数$\Phi(\bar{p}^l)$上面：

$$I \equiv [\hat{l}_x, \hat{H}]\Phi(\bar{p}) \qquad (14)$$

假使能证明 I=0，则因为$\Phi(p)$任意，我们便证明了（11），将（13）

代入（14）

$$I = \hat{l}_x\hat{H}\Phi - \hat{H}\hat{l}_x\Phi = \hat{l}_x\{\frac{\hat{p}^2}{2\mu}\Phi - \frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\iiint_p \Phi\frac{d^3 p^l}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2}\}$$

$$-\{\frac{\hat{p}^2}{2\mu}\hat{l}_x\Phi - \frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\iiint\frac{\hat{l}_x\Phi}{\left|p-p^l\right|^2}d^3p^l\}$$

$$=\frac{1}{2\mu}\{\hat{l}_x\hat{p}^2\Phi - \hat{p}^2\hat{l}_x\Phi\}$$

$$-\frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\{\hat{l}_x\iiint\frac{\Phi}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2}d^3p^l - \iiint\frac{\hat{l}_x\Phi}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2}d^3p^l\} \qquad (15)$$

分别计算动能与势能这两部分的对易算符,先计算动能部分的：

$$\frac{1}{2\mu}\{\hat{l}_x\hat{p}^2\Phi - \hat{p}^2\hat{l}_x\Phi\}$$

$$=\frac{\hbar i}{2\mu}\{(\frac{\partial}{\partial p_y}p_z + \frac{\partial}{\partial p_z}p_y)(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)\Phi$$

$$-(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)(\frac{\partial}{\partial p_y}\hat{p}_z - \frac{\partial}{\partial p_z}\hat{p}_y)\Phi\}$$

$$=\frac{\hbar i}{2\mu}\{\frac{\partial}{\partial p_y}(\hat{p}_z\hat{p}_x^2+\hat{p}_z\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^3)\Phi$$

$$-\frac{\partial}{\partial p_z}(\hat{p}_y\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^3+\hat{p}_y\hat{p}_z^2)\Phi$$

$$-(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)p_z\frac{\partial\Phi}{\partial p_y}+(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)\hat{p}_y\frac{\partial\Phi}{\partial p_z}\}$$

$$=\frac{\hbar i}{2\mu}\{p_z(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)\frac{\partial\Phi}{\partial p_y}$$

$$+2\hat{p}_z\hat{p}_y\Phi-\hat{p}_y(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)\frac{\partial\Phi}{\partial p_z}$$

$$-(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)\hat{p}_z\frac{\partial\Phi}{\partial p_y}$$

$$-2\hat{p}_y\hat{p}_z\Phi+(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)\hat{p}_y\frac{\partial\Phi}{\partial p^2}\}=0 \qquad (16)$$

这证明了动能部份，是和角动量分量相能相对易的。

其次计算（15）式中与势能有关部分的对易式，即（15）式第二个大括号内一式，能够证明，括号内两项相抵消，为此从第二项开始变形：

$$\iiint_{p^l}(\hat{l}_x\Phi)\cdot\frac{d^3p^l}{\left|p-p^l\right|^2})=\iiint_{p^l}\hat{l}_x(\Phi\cdot\frac{1}{\left|p-p^l\right|^2})d^3p^l$$

$$-\iiint_{p^l}(l_x\frac{1}{\left|p-p^l\right|^2})\Phi d^3p^l$$

$$=\iiint\hbar i(\frac{\partial}{\partial p^l{}_y}p_z^l-\frac{\partial}{\partial p^l{}_z}p_y^l)(\Phi\cdot\frac{1}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2})d^3p^l$$

$$-\iiint[\hbar i(\frac{\partial}{\partial p^l{}_y}p_z^l-\frac{\partial}{\partial p^l{}_z}p_y^l)\frac{1}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2}]\Phi d^3p^l$$

$$=\hbar i\iiint_{p_xp_yp_z}\frac{\partial}{\partial p^l{}_y}\frac{p_z^l\Phi(p_x^l,p_y^l,p_z^l)}{(p_x-p_x^l)^2+(p_y-p_y^l)^2+(p_z-p_z^l)^2}dp_x^ldp_y^ldp_z^l$$

$$-\hbar i\iiint_{p_xp_yp_z}\frac{\partial}{\partial p_z}\frac{p_y^l\Phi(p_x^lp_y^lp_z^l)}{(p_x-p_x^l)^2+(p_y-p_y^l)^2+(p_z-p_z^l)^2}dp_x^ldp_y^ldp_z^l$$

$$dp_x^l\cdot dp_y^l\cdot dp_z^l-\hbar i\iiint[p_z^l\frac{\partial}{\partial p_y^l}\frac{1}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2}$$

$$-p_y^l\frac{\partial}{\partial p_z^l}\frac{1}{\left|\bar{p}-\bar{p}^l\right|^2}]\Phi dp_x^ldp_y^ldp_z^l \qquad (17)$$

前一式的第一二个积分分别为对分动量 p_y 和 p_z 进行积分后，分别代入

积分限 $p_y(-\infty,\infty)$， $p_z(-\infty,\infty)$，如果 $\Phi(p_x p_y p_z)$ 是个三维

的平方可积函数，即当 $p_x, p_y, p_z \to \pm\infty$ 时 $\Phi \to 0$，则在代入分限

后被积函数也趋于零，只剩下三个积分：

$$\iiint_{p^l}(\hat{l}_x\Phi)\cdot\frac{d^3p^l}{\left|p-p^l\right|^2}$$

$$=-\hbar i\iiint_{p^l}-2\cdot\frac{p_z^l(p_y-p_y^l)-p_y^l(p_z-p_z^l)}{\left|p-p^l\right|^4}\Phi(p_x^l p_y^l p_z^l)d^3p^l$$

$$=2\hbar i\iiint_{p^l}\frac{p_z^l p_y-p_z^l p_y^l-p_y^l p_z-p_y^l p_z^l)}{\left|p-p^l\right|^4}\Phi(p_x^l p_y^l p_z^l)d^3p^l$$

$$=2\hbar i\iiint\frac{p_z^l p_y-p_z p_y-p_y^l p_z+p_y p_z)}{\left|p-p^l\right|^4}\Phi(p_x^l p_y^l p_z^l)d^3p^l$$

$$=2\hbar i\iiint_{p^l}\frac{-p_y(p_z-p_z^l)+p_z(p_y-p_y^l)}{\left|p-p^l\right|^4}\Phi(p_x^l p_y^l p_z^l)d^3p^l$$

$$=\iiint_{p^l}\hbar i(p_y\frac{\partial}{\partial p_z}-p_z\frac{\partial}{\partial p_y})\frac{1}{\left|p-p^l\right|^2}\Phi(p_x^l p_y^l p_z^l)d^3p^l$$

$$=\ \hbar i(p_y\frac{\partial}{\partial p_z}-p_z\frac{\partial}{\partial p_y})\iiint_{p^l}\frac{1}{\left|\vec{p}-\vec{p}^l\right|^2}\Phi(p_x^l p_y^l p_z^l)d^3p^l$$

$$=\ \hat{l}_x\iiint_{p^l}\frac{1}{\left|\vec{p}-\vec{p}^l\right|^2}\Phi d^3p^l \qquad (18)$$

(18)式最前一式和最一式的关系相当于（15）式第二部分为零。

$$I=[\hat{l}_x,\hat{H}]\Phi(\vec{p})=0$$

因为 $\Phi(p)$ 是任意函数，因而 $[\hat{l}_x,\hat{H}]=0$ 说明 $\hat{l}_x$ 是守恒量。同理

可以证明 $\hat{l}_y$， $\hat{l}_z$ 在动量表象的有心力问题中也是守恒的。

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

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

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

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

$T = E - V < 0$是经典不允许区。由上式解出为$r > 2a$。
因此，电子处于经典不允许区的几率为

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

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

6.10 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）的能谱

（b）u 原子（muonic atom）能谱

（c）u 子偶素（muonium，指$u^+ - u^-$束缚体系）的能谱

解：由氢原子光谱理论，能级表达式为：

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

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

6.10 根据氢原子光谱理论，讨论（1）“电子偶素”（指e^+—e^-的束缚态）的能级。（2）μ介原子的能谱。（3）μ介子素（指μ^+-e^-束缚态）的能谱。
解：（1）电子偶素（氤 positronium）指低温时超导现象中的导电媒介，即正负电子对，按类氢原子理论，氢的能级是由折合质量计算的，在正常氢原子情形，设质子质量 m，则折合质量μ

$$\mu = \frac{mM}{m+M}$$

但

$$m = 0.51me\nu / c^2, M = 938.3me\sigma / c^2$$

$$E_n = -\frac{\upsilon e\sigma}{2\hbar^2 n^2} = \frac{-e^2}{2a}(n = 1,2,3,\cdots)$$

$$\mu = 0.9995m$$

在电子偶素情形，可用正电子代替氢核的质子，折合质量

$$\overline{\mu} = \frac{m^2}{m \div m} = \frac{m}{2} \qquad E_n^1 = -\frac{\mu^1 e^4}{2\hbar^2 n^2}(n = 1,2,3\cdots)$$

$$\mu^1 = 0.5m = 0.5\mu \qquad E_n^1 = 0.5En$$

（2）μ介原于是被氢核荐的μ⁻介子构成的原子，这种原子的折合质量是

$$\mu'' = \frac{m^{\mu} M}{m_{\mu} + M} 但 m_{\mu} = 105.7me\upsilon / c^2$$

$$\mu'' = 0.9m_{\mu} \qquad \mu^n = 207\mu$$

$$E''_n(\mu介原子能级) = -\frac{\mu'' e^4}{2\hbar^2 n^2} = +207E_n$$

（1）　μ介子素是正电μ介子与电子结合成的体系（μ^+—e^-束缚态），折合质量：

$$\mu''' = \frac{nm_{\mu}}{m + m_{\mu}} = \frac{m}{1 + \frac{m}{m_{\mu}}} = \frac{m}{1 + \frac{1}{207}} = 0.995m$$

$$E'''(\mu介于素能级) = -\frac{\mu''' e^4}{2\hbar^2 n^2} = 0.995E_n$$

基特尔等著：力学（伯克利物理学教程第一卷）中译本，第九章，ρ.396—397.科学出版社（1979）

6.11——5.8
6.12——5.9
6.13——5.12

6.13 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

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

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

将 $\psi_{100}(Z,r)$ 按新原子的能量本征态作线形展开：

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

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

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

因此，本题所求的几率为

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

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

展开时保留到第三项

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

例如， $Z=10$， $p_{100}\approx 0.9932$；

$Z=30$， $p_{100}\approx 0.9992$。

6.14——5.17

6.14 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 $\Delta r=\left[\left\langle r^2\right\rangle-\langle r\rangle^2\right]^{1/2}$

解：类氢原子中电子波函数 ψ_{nlm} 可以表示为

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

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

决定。$l=n-1$ 时，$n_r=0$。

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

代入（2）式，容易求得 $r_{几}=n^2a_0/Z$ （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 $\left\langle r^\lambda\right\rangle$ 之间有递推关系（Kramers 公式）

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

（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

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

依次再取 $\lambda=1,2$，得到

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

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

因此，r 的涨落

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

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

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

6.15——5.18
6.16——5.20

6.16 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

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

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

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

$u(r)$ 满足径向方程

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

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

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

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

将 l 换成 $l^{'}$，即得价电子的能级：

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

通常令 $\quad l^{'}=l+\Delta_l$ （7）

$$n^{'}=n_r+l+\Delta_l+1=n+\Delta_l \tag{8}$$

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 $\Delta_l \approx -\lambda\Big/\left(l+\frac{1}{2}\right)$ （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 $l' = -\frac{1}{2}+\left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1-\frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2}$ （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）。

6.17 证明一个球方势阱(半径a,深度V_0)恰好具有一条$l\neq0$的能级的条件是：V_0与a应满足

$$j_{l-1}\left(\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a\right)=0$$

（解）是有限深势阱问题，则薛定谔方程为

$$R_1''+\frac{2}{r}R_1'+\{k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\}R_1=0 \qquad (r<a)\cdots\cdots(1)$$

$$R_2''+\frac{2}{r}R_2'+\{-[k'^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\}R_2=0 \qquad (r>a)\cdots\cdots(2)$$

（1） 的解需满足 r=0 处有限，它的特解是

$$R_1(r)=A_{kl}j_l(kr) \qquad (3)$$

（2） **的解需满足$r=\infty$处趋近于零,特介是$R_2(r)=B_{k'l}h_l(ik'r)$** （4）

要使波函数及其一阶导数在 r=a 这个势能突点上连续，应有

$$\begin{cases} R_1(a)=R_2(a) \quad 即\ A_{kl}j_l(ka)=B_{k'l}h_l(ik'a) & (5)\\ \dfrac{dR_1(a)}{dr}=\dfrac{dR_2(a)}{dr} \quad 即\ A_{kl}\dfrac{d}{ar}j_l(ka)=B_{k'l}\dfrac{d}{dr}h_l(ik'a) & (6)\end{cases}$$

为了运算的方便（主要利用球贝塞耳函数j，和球Hankel函数h_1的一阶导数公式）(6)，(5) 两边相除，并加上相同的 $(l+1)\frac{1}{a}$ 得：

$$\frac{j_1^1(ka)}{j_1(ka)}+\frac{l+1}{a}=\frac{h_1^1(ik'a)}{h_1(ik'a)}+\frac{l+1}{2}$$

此式等效于：

$$\frac{d}{dr}en\{(kr)^{1+1}j_1(kr)\}_{1=0}=\frac{d}{dr}en\{(il'r)^{1+1}h_1(ik'r)\}_{r=0} \qquad (7)$$

从课本附录六的公式得

$$\frac{d}{dx}(x^{1+1}jl)=x^{1+1}j_{1-1}(l>0)$$

$$\frac{d}{dx}(h^{1+1}hl)=x^{1+1}h_{1-1}(l>0)$$

（7）式成为 $\frac{kj_{1-1}(ka)}{j_1(ka)}=\frac{ik'h_{1-1}(ik_1{}'a)}{h_1(ik_x{}'a)}$ （8）

按照题意，若势阱的深度V_0，宽度（并径a）的大小恰足以产生一个束缚能级，那就表示势阱深V_0正好和能级E相等，而E则依赖于a，所以：E= V_0

的条件使波数 $k'=\sqrt{\frac{2\mu(V_0-E)}{\hbar_2}}=0$

从（8）看来，等式右方因含有因数k_1而等于零，一般 $h_{1-1}(ik'a)=h_{1-1}(0)\neq\infty$

因而等式左方为零 $j_{1-1}(ka)=j_{1-1}(\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}a)=0$

解此方程得到所需的 E

6.18 采用平面极坐标，求出轴对称谐振子势场中，粒子能量的本征值本征函数，讨论简并度。

（解）本题是有精确解的二维问题，和图示的极坐标(r,φ),势能$V(r)=\frac{\mu\omega^2r^2}{2}$

定态的薛定谔方程式是：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial\psi}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-\frac{\mu\omega^2r^2}{2}]\psi=0 \qquad (1)$$

用分离变量代换 $\psi(r,\varphi)=R(r)\Phi(\varphi)$ （2）

方程（1）可分离为不同自变量的二部分：

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-\frac{\mu\omega^2r^2}{2})r^2+\frac{1}{\phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}=0$$

令 $\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-\frac{\mu\omega^2r^2}{2})r^2=-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}=m^2(常量)$ （3）

前式相当于两个方程式：前式中常量m^2是正数，否则$\Phi(\varphi)$将不符波函数要求：

$$\begin{cases} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial R}{\partial r})+\{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-\frac{\mu\omega^2 r^2}{2})-\frac{m^2}{r^2}\}R=0 & \textbf{(4)} \\ \frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}+m^2\Phi=0 & \textbf{(5)} \end{cases}$$

（5）的解是 $\boldsymbol{\Phi(\varphi)=Ce^{im\varphi}}$

为符合单值要求 $e^{im\varphi}=e^{im(\varphi+2x\pi)}m$是整数

现再处理主程式（4），作常数替代

$$k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \qquad a=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

（4）式变成$\boldsymbol{\frac{\partial^2 R}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial R}{\partial r}+(k^2-\frac{m^2}{r^2}-a^4r^2)R=0}$ （6）

（6）有 r=0，r=∞的奇点，试求其奇点的近似解，在 r=0 附近方程式近似为

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{m^2}{r^2}R=0$$

这个方程容许R=r²形式的解，代入后得$8=m,-m$，但r^{-m}在$r=0$点发散故合理的解$r^{|m|}$

在无限远入（6）的近似形式

$$\frac{d^2R}{dr^2}-a^4r^2R=0\text{它的近似解}R=e^{-\frac{a^2r^2}{2}}$$

因此可以合理地假设（6）的解是：

$$R(r)=r^{|m|}e^{-\frac{a^2r^2}{2}} \qquad (7)$$

将（7）代入（6）经过一番整理后，得到$u(r)$满足的方程式如下

$$r\frac{d^2u}{dr^2}+(2|m|+1-2a^2r^2)\frac{du}{dr}+[k^2-2(|m|+1)a^2]u=0 \qquad (8)$$

作自变量交换 ξ=a²r²代入（8）式，其中

$$\frac{du}{dr}=+2a\sqrt{\delta}\frac{du}{d\delta} \qquad \frac{d^2u}{d\delta}+4a^2\delta\frac{d^2u}{d\delta}+2a^2\frac{du}{d\delta}$$

代入（8）式，经过简化后得到：

$$\delta\frac{d^2u}{d\delta}+(|m|+1-\delta)\frac{du}{d\delta}+(\frac{k^2}{4a^2}-\frac{|m|}{2}-\frac{1}{2})u=0 \qquad (9)$$

此方程式中的$|m|$代表磁量子数的绝对值，（9）式与合流超几何方程式完全一致，后者一般形式是：

$$\delta\frac{d^2u}{d\delta^2}+(v-\delta)\frac{du}{d\delta}-a^1u=0 \qquad (10)$$

（9）中的a^1本应照习惯写法，写作a，为了避免与（8）式中的a混淆，改为加撇，（10）的解是：

$$F(a,r,\delta)=\sum_{v=0}^{o}\frac{a'(a'+1)\cdots(a'+v-1\delta^r)}{r(r+1)\cdots(r+v-1)v!} \qquad (11)$$

因而 $u(r)=F(\frac{|m|}{2}+\frac{1}{2}-\frac{k^2}{4a^2},|m|+1,a^2r^2)$ （12）

完整的径向波函数是

$$\psi(r,\varphi)=R(r)e^{lm\varphi}$$

$$=\text{常数}\delta^{m^{e-\frac{a^2r^2}{2}}}F(\frac{|m|}{2}+\frac{1}{2}-\frac{k^2}{4a^2},|m|+1,a^2r^2) \qquad (13)$$

由于合流超几何级数收敛性质和e^i相似，故其无穷级数形式不适于作为波函数的解，欲使其能作为

波函数的一个因式，这个级数要中断，设最高幂 p,由（11）可知a^{ξ}+p=0

$$\frac{m}{2}+\frac{1}{2}-\frac{\kappa^2}{4a^2}+p=0$$

即$\kappa^2=4a^2(\frac{|m|}{2}+\frac{1}{2}+p)=2a^2+(|m|+1+2p)$

因 $\kappa^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ 用磁量子数 m 表示 E：

$$E=\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu}=\frac{\hbar^2}{\mu}a^2(|m|+1+2p)=\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\mu\omega}{\hbar}(|m|+1+2p)$$

得到所需能级： $E=(|m|+2p+1)\hbar\omega$ （15）

n 是能量量子数，当 n 给定时，与该能量相对应的不同态的数目（简并度δ）可依 n 奇数或偶数分别讨论，列表如下：

	n 奇数	n 偶数
P 取值	0，1，2，……$\frac{n-1}{2}$	0，1，2，……$\frac{n}{2}$
$\lvert m\rvert$ 取值	n,n-2,n-4,……1	n,n-2,n-4,……0
简并度δ	n+1	n+1

因为$|m|\neq0$时，每一种$|m|$的值都对应二种态 m 和-m，因此当 n 为奇数时，m 的取值（即能量相同

的不同态）是

$2\times(1+\frac{n-1}{2})=m+1$ 种，当 n 为偶数时 $|m|\neq 0$ 的态又有 $\frac{n}{2}$ 种，因此 m 的不同取值也是有 $1+2\times\frac{n}{2}$=n+1 种，总的说来，简并度是 n+1.

6.19 设粒子在无限长的园筒内运动，筒半径是 a，求粒子的能量。

解：用柱面极座标 (r,φ,z) 其意义见附图，设波函数是 $\psi(r,\varphi,z)$ 则薛氏方程式是：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial\psi}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V]=0 \qquad (1)$$

$$V(r,\varphi,z)=\begin{cases}0\ (r<a)\\ \infty\ (r>a)\end{cases} \qquad (2)$$

第一次分离变量试用 $\psi=F(r,\varphi)Z(z)$

（2）代入（1），当 r<a 时，经变形后可得：

$$\frac{1}{F}\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial F}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2F}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{Z}\frac{\partial^2Z}{\partial z^2}\}=-\frac{2\mu E}{\hbar^2} \qquad (3)$$

此式明显可以分离变量，设与 z 方向运动有关的能量是 E_1，与坐标 r，φ 有关的能量（横向）是 E_2，并令 $E=E_1+E_2$，（3）式成为：

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2Z}{\partial z^2}=-\frac{2\mu E_1}{\hbar^2} \qquad (4)$$

$$\frac{1}{F}\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial F}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2F}{\partial\varphi^2}\}=-\frac{2\mu E_2}{\hbar^2} \qquad (5)$$

令 $\sqrt{\frac{2\mu E_1}{\hbar^2}}$，则（4）写作

$$\frac{d^2Z}{dz^2}+\kappa^2Z=0 \qquad (6)$$

（6）的解是前进的德布罗意波 $Z(z)=Ae^{ikz}$ （7）

将（5）再一次分离变量，令 $F(r,\varphi)=R(r)\varphi(\varphi)$

代入（5），遍乘 $\frac{r^2}{R\Phi}$ 得：

$$\frac{1}{R}\cdot\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}\}+\frac{2\mu E_2}{\hbar^2}r^2=0 \qquad (8)$$

此式能分离变量，令：

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2\mu E_2}{\hbar^2}r^2=-\frac{1}{\phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}=m^2 \qquad (常量)$$

可得：

$$\frac{1}{\phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}+m^2=0 \qquad (9)$$

$$r\frac{\partial R}{\partial r}+\frac{\partial^2 R}{\partial r^2}+(k^2-\frac{m^2}{r^2})R=0 \qquad (10)$$

（9）的解同于有心力场 $\Phi(\varphi)=Be^{\pm im\varphi}$ （11）

考虑 $\Phi(\varphi)$ 的单值性条件，而 m 必须是整数 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$

方和式（10）是非标准型的贝塞耳（Besel）方程式，若作自变量的变换

$\rho=k^{'}r$

则在代入（10）式，消去共有的 $k^{'2}$ 后得标准型贝塞耳（Besel）方程式

$$\delta|m|\neq0\frac{n}{2}2\times(1+\frac{n-1}{2})=m+1\frac{n}{2}$$

$$\psi(r,\varphi,z)$$

$$V(r,\varphi,z)=\begin{cases}0\ (r<a)\\ \infty\ (r>a)\end{cases}$$

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial R}{\partial r})+\frac{2\mu E_2}{\hbar^2}r^2=\frac{1}{\phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}+m^2=0$$

$$E=E_1+E_2\kappa=\sqrt{\frac{2\mu E_1}{\hbar^2}}\frac{r^2}{R\Phi}$$

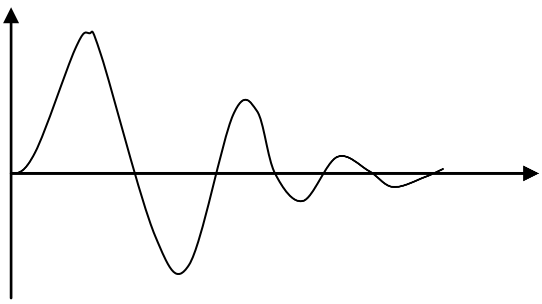
$$\frac{d^2Z}{dz^2}+\kappa^2Z=0Z(z)\Phi(\varphi)=Be^{\pm im\varphi}m=0,\pm1,\pm2,\cdots\rho=k^{'2}r$$

$$r\frac{\partial R}{\partial r}+\frac{\partial^2R}{\partial r^2}+(k^2-\frac{m^2}{r^2})R=0\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V]=0$$

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2Z}{\partial z^2}=-\frac{2\mu E_1}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+(1-\frac{m^2}{\rho^2})R=0 \qquad (13)$$

m（整）是方程所含的一个参数。方程式的



特解就是 m 阶的贝塞耳函数

$$R(r)=J_m(r)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{\upsilon}\frac{(\frac{r}{2})^{m+2}}{\upsilon!(m+\upsilon)!} \qquad (14)$$

园筒中粒子的波函数完整表示式是：

$$\psi(r,\varphi,z)=A'J_m(k'V)e^{\pm i\infty\varphi+ikx} \qquad (15)$$

求粒子的能量：粒子的能量来自二种运动，沿 z 方向的纵向运动是自由运动，其能量 E_1，从波函数（7）看来 E_1 具有连续值，粒子的横向运动的能量 E_2，即与座标 ρ，φ 有关的能量可以用边界条件决定，按题意粒子局限于 $\rho\le a$ 范围内，因而

$$R(\rho)=0\ (r=a)$$

即能值 E_2 应满足：

$$J_m(\sqrt{\frac{2\mu E_2}{\hbar^2}}a)=0 \qquad (16)$$

按阶数 $m=k'\lambda$ 绘得的以自变量 $\boldsymbol{r=k'\rho}$ 为横轴的贝塞而函数的曲线是波动曲线，它与 r 轴有一系列交点（$\boldsymbol{r_1,r_2,r_3,}\cdots\cdots$）用图解法求得这些点，即超越方程

$$J_m(k'a)=0$$

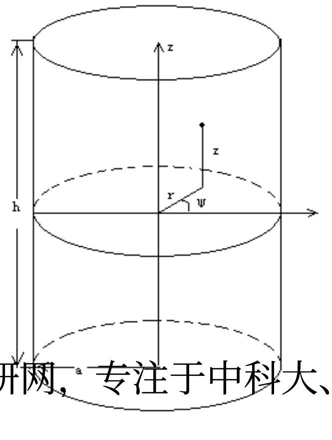
的诸根，可得量子化能级：

$$E_2=\frac{\hbar^2}{a^2}\cdot\frac{r_1^2}{2\mu},\frac{\hbar^2}{a^2}\frac{r_2^2}{2\mu},\cdots\cdots\frac{\hbar^2}{a^2}\frac{r_n^2}{2\mu},\cdots$$

总能量则仍是连续取值的：

$$E=E_1+E_2=E_1+\frac{\hbar^2}{a^2}\frac{r_N^2}{2\mu}$$

6.20 粒子在半径为 a，高为 h 的圆筒中运动，在筒内



粒 子 是

自由的，在筒壁及筒外势能是无限，求粒子能量的本征值。

（解）本题与 16 题有一部分类似，粒子位置用柱面极座标(r,φ,z)表示，薛氏方程式：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial\psi}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2uE}{\hbar^2}\psi=0 \qquad (1)$$

$$V(r,\varphi,z)=\begin{cases}0 & (r<0,|z|<h/2)\\ \infty & (r\geq a,|z|\geq h/2)\end{cases}$$

第一次用$\Psi=F(r,\varphi)Z(z)$代入（1）分离变量；变形后有：

$$\frac{1}{F}\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\frac{\partial E}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 F}{\partial\varphi^2}\}+\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}=-\frac{2\mu E}{\hbar^2} \qquad (2)$$

令$E=E_1+E_2$，其中E_1纵向运动（沿z）能量，E_2是沿横向运动的能量，（2）分写成

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}=-\frac{2\mu E_1}{\hbar^2}$$

或 $$\frac{d^2Z}{dz^2}+k^2Z=0 \qquad (3)$$

$$\frac{1}{Fr}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial E}{\partial r})+\frac{1}{r^2F}\frac{\partial^2 F}{\partial\varphi^2}=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

或 $$\frac{r}{F}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial F}{\partial r})+k'^2r^2=-\frac{\partial^2 F}{\partial\varphi^2}\frac{1}{F} \qquad (4)$$

式中：$k^2=\dfrac{2\mu E_1}{\hbar^2}$ $\qquad k'^2=\dfrac{2\mu E_2}{\hbar^2}$ （5）

因粒子沿 z 方向是束缚运动，故可以设定（3）的解为：

$$Z(z)=Ae^{ikz}+A'e^{-ik'z} \qquad (6)$$

代入$z=\dfrac{h}{2}$ $\quad Z(\dfrac{h}{2})=0$，又$Z(-\dfrac{h}{2})=0$，得

$$\begin{cases}Ae^{ikh/2}+A'e^{-ikh/2}=0\\ Ae^{-ikh/2}+A'e^{ikh/2}=0\end{cases}$$

将此二式相加得$A+A'=0$ 相减得$A-A'=0$，得到两种可能的特解

$$Z(z)=A\sin kz \qquad Z(z)=A\cos kz \qquad (7)$$

又 $Z(h/2)=Z(-h/2)=0$

得 $A\sin kh/2=0 \qquad \frac{kh}{2}=n\pi \qquad k=\frac{2n\pi}{h}$

代入（5）得能量量子化条件

$$E_1=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}=\frac{2}{\mu}(\frac{\hbar\pi n}{a})^2 \qquad （8）$$

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

再将（4）式分离变量，令 $F(r,\varphi)=R(r)\phi(\varphi)$ 代入（4）得：

$$\frac{r}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial R}{\partial r})+k'^2r^2=-\frac{}{\phi}\frac{\partial^2\phi}{\partial\varphi^2}=m^2$$

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2\phi}{\partial\varphi}++m^2\phi=0 & (9.)\\ \dfrac{\partial^2R}{\partial r^2}+\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial R}{\partial r}+(k'^2-\dfrac{m^2}{r^2})R=0 & (10)\end{cases}$$

（9）的解是

$$\phi(\varphi)=Be^{im\varphi} \qquad （但 m=0,\pm1,\pm2\cdots\cdots） \qquad （11）$$

用自变量替代 $\rho=k'r$ 于（10），得贝塞耳方程式：

$$\frac{\partial^2R}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial R}{\partial\rho}+(1-\frac{m^2}{\rho^2})R=0 \qquad （12）$$

代边界条件于（12）的解得

$$R(r)=J_m(\rho)=J_m(k'r)=0 \qquad （13）$$

和 15 题一样，超越方程式（13）可以有一系列分列的根

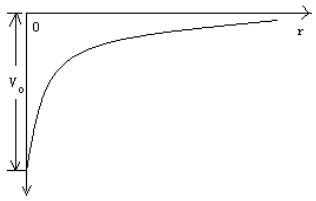
$r_1,r_2,r_3,r_4,\cdots\cdots$ 相应的能量

$$E_1=\frac{\hbar^2}{a^2}\frac{1}{2\mu}r_1^2 \quad , \quad \frac{\hbar^2}{a^2}\frac{1}{2\mu}r_2^2 \quad , \quad \frac{\hbar^2}{a^2}\frac{1}{2\mu}r_3^2\cdots\cdots \qquad （14）$$

结合纵向运动的分立能级（8），得；粒子的量子化能级是：

$$E_n=\frac{2}{\mu}(\frac{\hbar\pi n}{h})^2+\frac{1}{2\mu}(\frac{\hbar r_n}{a})^2 \qquad （15）$$

6.21 设 $V(r)=-V_0e^{-\frac{r}{a}}$ $(V_0>0)$ 求基态（$l=0$）的波函数。



（解）将势能代入有心力场的径向薛定谔方程式：

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0 e^{-\frac{r}{a}})-\frac{l(l+1)}{r^2}\}R=0 \qquad (1)$$

对于基态 $l=0$（1）简化为

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial R}{\partial r})+\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}e^{-\frac{r}{a}}\}R=0 \qquad (2)$$

先按一般有心力场那样，作因变量变换

$$R(r)=\frac{1}{r}x(r) \qquad (3)$$

得 $$\frac{d^2x}{dr^2}+\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}e^{-\frac{r}{a}}\}x=0 \qquad (4)$$

这个方程式可能变换成贝塞耳方程式，为此，先作自变量变换：

$$\boldsymbol{\xi=e^{-\frac{r}{2a}}} \qquad (5)$$

则有 $\dfrac{d\xi}{dr}=-\dfrac{\xi}{2a}$

$$\frac{dx}{dr}=\frac{d\xi}{dr}\frac{dx}{d\xi}=-\frac{1}{2a}\xi\frac{dx}{d\xi}$$

$$\frac{d^2x}{dr^2}=\frac{d\xi}{dr}\cdot\frac{d}{d\xi}(\frac{dx}{dr})=\frac{\xi}{4a^2}(\xi\frac{d^2x}{d\xi^2}+\frac{dx}{d\xi})$$

代入（4）中，先设 $b^2\equiv\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}$ $\quad b^2\equiv\dfrac{2\mu V_0}{h^2}$ （4）式成为

$$\frac{\xi}{4a^2}(\xi\frac{d^2x}{d\xi^2}+\frac{\partial x}{\partial\xi})+(k^2+b^2\xi^2)x=0$$

或 $$\frac{d^2x}{d\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{dx}{d\xi}+(4a^2b^2+\frac{4a^2k^2}{\xi^2})x=0 \qquad (6)$$

再作自变量变换：$\rho=2ab\xi$，代入（6）后，得：

$$\frac{d^2x}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{dx}{d\rho}+(1+\frac{4a^2k^2}{\xi^2})x=0 \qquad (7)$$

这是一般的贝塞耳方程式，它的参数是 $2aki$（虚数），它的解写作

$$x(\rho)=J_\upsilon(\rho)=J_\upsilon(2ab\xi)$$

或 $$\boldsymbol{R(r)=\frac{x(\rho)}{r}=J_{\upsilon}(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0}e^{-\frac{r}{2a}})}\qquad（8）$$

贝塞耳函数的阶数

$$\nu=2ak\,i=2a\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\,i$$

如果能量是负的即 $E<0$ 则 ν 是实数，又如果 ν 不是整数，虽然(7)容许解 $\frac{1}{r}J_{-\nu}(\rho)$ 但在原点 $r\to 0$ 时可能发散，因而（8）则能够证明当 $r\to 0$ 时是收敛的。 $p=0$ 时 $R(r)$ 有限，即要求

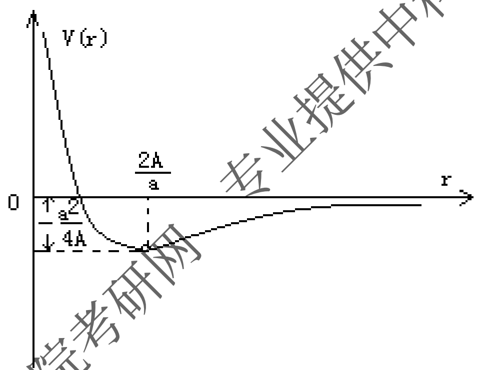
$$J_{\upsilon}(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0}e^{-\frac{r}{2a}})=0$$

当 V_0 和 a 为给定时，从前式可求得 ν 的值，如设此值为 ν_0，则相应的基态能量是：$E_0=-\frac{\hbar^2}{8\mu a^2}\nu_0$

相应的基态波函数是：

$$\psi_0(r,\theta,\varphi)=\frac{A}{r}J_{\upsilon_0}(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0}\cdot e^{-\frac{r}{2a}})$$

6.22 设 $V(r)=-\frac{a}{r}+\frac{A}{r^2}(a和A>0)$，求粒子的能量本征值。



（解）本题的势场和库仑场问题求解。

首先，有心力场的径向波函数 R 应满足径向薛定谔方程式：

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\}R=0\qquad（1）$$

将势场 $V(r)$ 代入：

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR}{dr})+\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu a}{\hbar^2 r}-[\frac{2\mu A}{\hbar^2}+l(l+1)]\frac{1}{r^2}\}R=0\qquad（2）$$

作代替 $R(r)=\frac{x(r)}{r}$ 代入（2）

$$\frac{d^2x}{dr^2}+\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu a}{\hbar^2 r}-[\frac{2\mu A}{\hbar^2}+l(l+1)]\frac{1}{r^2}\}x=0$$

另一方面根据课本§6.3 库仑场 $V(r)=-\frac{e^2}{r}$ 的以 $x(r)$ 为因变量的波方程式是下述形式，式中角量子数写作 l' 以便和（3）区别：

$$\frac{d^2x}{dr^2}+\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r}-\frac{l'(l'+1)}{r^2}\}x=0 \qquad (4)$$

这样（3）和（4）数学形式完全一致，二者之间的差异在于常数系数方面，由于（4）的解是已知的，因此（3）的解就可直接依类此写出。

比较（3）和（4），得系数的对应关系：

$$\begin{cases} e^2=a & (5) \\ \frac{2\mu A}{\hbar^2}+l(l+1)=l'(l'+1) & (6) \end{cases}$$

从（6）中的 l'，得

$$l'=\pm\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}-\frac{1}{2} \qquad (7)$$

根据课本（§6.3，P.218）氢原子的薛定谔方程式（4），在求解径向波函数 $R(r)$ 或 $x(r)$ 时，为使波函数满足标准条件，得到能量量子化公式：

$$E_n=-\frac{e^2}{2a_0}\cdot\frac{1}{n^2}=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} \qquad n=1,2,3,\cdots\cdots \qquad (8)$$

式中的 n 是主量子数，它和角量子数的关系是：

$n=n_r+l'+1$ （$n_r=0,1,\cdots\cdots$ 整数）

根据（5）（7）二式求得本题中粒子能级：

$$E_n=-\frac{\mu a^2}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{(\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}+\frac{1}{2}+n_r)^2} \qquad (9)$$

描写粒子态的波函数可依（5），（7）二式对比下述公式得到：氢原子径向波函数

$$R_{nl'}(r)=N_{nl}e^{-\frac{\xi}{2}}\xi^l \quad F(-n+l+1,\,2l+2,\,\xi)$$

$$\xi=\frac{2r}{na_0} \quad （a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\text{ 玻耳半径}）$$

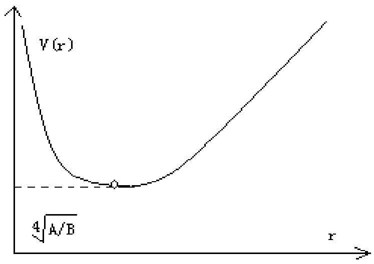
在本题的势场$V(r)=-\frac{a}{r}+\frac{A}{r^2}$中粒子的径向波函数：

$$R_{nl'}(r)=N_{nl}e^{-\frac{\xi'}{2}}\xi^{l'}F(-n+l'+1,2l'+2,\xi')$$

$\xi'=\frac{2r'}{na_0'}$ （$a_0'=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$玻耳半径），$l'=\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}-\frac{1}{2}$

6.23 设$V(r)=Br^2+\frac{A}{r^2}$（附图），其中 A、B>0，求粒子能量本征值。

（解）根据本题给定的势场知道，它的形式和三维各向同性谐振子相似，粒子的薛定谔径向方程式可以化成和三维谐振子的方程式同形式。



根据题意，径向方程式是：

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-Br^2-\frac{A}{r^2})-\frac{l(l+1)}{r^2}\}R=0$$

或 $$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-Br^2)-[\frac{2\mu A}{\hbar^2}+l(l+1)]\frac{1}{r^2}\}R=0$$

（1）

根据课本§6.4，势能是$V(r)=\frac{\mu\omega^2r^2}{2}$的三维各向同性谐振子的径向方程式是：

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-\frac{\mu\omega^2r^2}{2})-\frac{l'(l'+1)}{r^2}\}R=0 \qquad (2)$$

二者间常数系数间的对应关系是：

$$\begin{cases} B=\frac{\mu\omega^2}{2} & (3) \\ \frac{2\mu A}{\hbar^2}+l(l+1)=l'(l'+1) & (4) \end{cases}$$

从（4）式可解出l'，得

$$l'=\pm\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}-\frac{1}{2} \qquad (5)$$

根据§6.4，方程式（2）中，当$r\to\infty$时可以有解：

$$R(r)=e^{-\frac{\beta^2x^2}{2}} \qquad (\beta\equiv\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar^2}})$$

（按课本中曾用同一文字α代表$\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar^2}}$，又代表$F(\alpha,\gamma;\zeta)$中的第一参数，今将第一种代表法改用$\beta$以避免混淆）

当 $r \to 0$ 时，又有近似解： $R(r) \sim r^{l'}$

因此，对于合适于 r 的一切取值的特解 $R(r)$ 的形式，可设为：

$$R(r) = C r^{l'} e^{-\frac{\beta^2 r^2}{2}} u(r) \qquad (6)$$

式中的 u(r)满足微分方程式：

$$u'' + \frac{2}{r}(l'+1-\beta^2 r^2)u' + \left[\frac{2\beta^2 E}{\hbar\varpi} - 2\beta^2(l'+\frac{3}{2})\right]u = 0$$

这个方程式可以变形成合流超几何方程，它的解合流超几何数：

$$u(r) = F(\alpha,\gamma;\zeta) = F(\frac{l'}{2}+\frac{3}{4}-\frac{E}{2\hbar\omega},\frac{l'}{2}+\frac{3}{2};\beta^2\gamma^2) \qquad (7)$$

用类比法，可以将式（6）（7）用到本题情形。因得结论：在势场

$$V(r) = B r^2 + \frac{A}{r^2}$$

中运动的粒子，具有下述向波函数；

$$R(r) = C r^{l'} e^{-\frac{\beta^2 r^2}{2}} \cdot F(\frac{l'}{2}+\frac{3}{4}-\frac{E}{2\hbar\omega}, l'+\frac{3}{2}; \frac{2\mu B r^2}{\hbar^2}) \qquad (8)$$

在能量本征值方面，三维各向同性谐振子的能级，是以 $F(\alpha,\gamma;\zeta)$ 的级数在某一最高幂项 n 中断的条件下得到的

$$E_n = (2n + l' + \frac{3}{2})\hbar\omega \qquad (9)$$

因此本题的能级可仿照（9）写出：

$$E_n = (2n+1+\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 + \frac{2\mu A}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{2B}{\mu}}\hbar$$

$$n = 0,1,2,3,\cdots\cdots$$

6.24——5.3
6.25——5.6
6.26——5.7
6.27——5.8
6.28——5.9
6.29——5.11

第七章：粒子在电磁场中的运动

P367——7.1，7.2

证明在磁场 $\vec{B}$ 中，带电粒子的速度算符的各分量，满足下述的对易关系：

$$[\bar{v}_x,\bar{v}_y]=\frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\hat{\mathrm{B}}_z \qquad (1)$$

$$[\bar{v}_y,\bar{v}_z]=\frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\hat{\mathbf{B}}_x \qquad (2)$$

$$[\bar{v}_z,\bar{v}_x]=\frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\hat{\mathbf{B}}_y \qquad (3)$$

[证明]根据正则方程组：

$$\hat{v}_x=\dot{x}=\frac{\partial H}{\partial p_x}\ ,\ \hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\bar{p}-\frac{q}{c}\bar{A}\right)^2+q\Phi$$

$$\hat{v}_x=\frac{1}{\mu}\left(\hat{p}_x-\frac{q}{c}\hat{A}_x\right)$$

同理 $\hat{v}_y=\frac{1}{\mu}\left(\hat{p}_y-\frac{q}{c}\hat{A}_y\right)$

$\hat{\bar{p}}(\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z)$是正则动量，不等于机械动量，将所得结果代入（1）的等号左方：

$$[\bar{v}_x,\bar{v}_y]=\frac{1}{\mu^2}\left[\hat{p}_x-\frac{q}{c}\hat{A}_x,\hat{p}_y-\frac{q}{c}\hat{A}_y\right]$$

$$=\frac{1}{\mu^2}[\hat{p}_x,\hat{p}_y]-\frac{q}{\mu^2 c}[\hat{p}_x,\hat{A}_y]-\frac{q}{\mu^2 c}[\hat{A}_x,\hat{p}_y]+\frac{q^2}{\mu^2 c}[\hat{A}_x,\hat{A}_y] \qquad (4)$$

正则动量与梯度算符相对应，即 $\hat{\bar{p}}=\frac{\hbar}{i}\nabla$ ，因此 $[\hat{p}_x,\hat{p}_y]=0$

又 $\hat{\bar{A}}$ 仅与点的坐标有关 $[\hat{A}_x,\hat{A}_y]=0$

$$[\bar{v}_x,\bar{v}_y]=-\frac{q}{\mu^2 c}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},A_y\right]-\frac{q}{\mu^2 c}\left[A_x,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right] \qquad （因 \hat{\bar{B}}=\hat{\nabla}\times\bar{A}）$$

$$=\frac{q}{\mu^2 c}\cdot\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=\frac{iq\hbar}{\mu^2 c}B_z$$

其余二式依轮换对称写出。

P368 证明在规范变换下

$$\rho=\psi^*\psi \qquad (1)$$

$$\bar{j}=\frac{1}{2\mu}\left[\psi^*\hat{\bar{p}}\psi-\psi\hat{\bar{p}}\psi^*\right]-\frac{q}{\mu c}\bar{A}\psi^*\psi \qquad (2)$$

$$\mu\bar{\vec{v}}=\left(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)$$ （机械动量的平均值）都不变　　　（3）

（证明）如课本证明，要规范变换下，若将体系的波函数作以下变换（P368　20 式）

$$\psi \longrightarrow e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi \quad (4)$$

则薛定谔方程形式不变，将（4）代入（1）式等号右方，设变换后几率密度：

$$\rho'=\left(e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi\right)^*\left(e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi\right)=e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^*\cdot e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi=\psi^*\psi$$

$$\rho'=\rho$$

又设变换后几率流密度是 j'，将（4）代入（2）式右方，同时又代入

$$\vec{A}\to\vec{A}+\nabla f(\vec{r},t)$$

$$\vec{j}'=\frac{1}{2\mu}\left[e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^*\vec{p}e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi-e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi\vec{P}e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^*\right]-\frac{q}{\mu c}\left[\vec{A}+\nabla f(\vec{r},t)\right]e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^*e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi \quad (5)$$

注意到算符的对易关系

推广到三维：$\left(\hat{\vec{p}},\nabla\mathbf{F}(\vec{r})\right)=\frac{\hbar}{i}\nabla\cdot\mathbf{F}(\vec{r})$　　（6）

令 $\mathbf{F}(\vec{r})=e^{\frac{iqf}{\hbar c}}$ 则有：

$$\vec{p}e^{\frac{iqf}{\hbar c}}-e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\vec{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla e^{\frac{iqf}{\hbar c}}=\frac{q}{c}(\nabla f)e^{\frac{iqf}{\hbar c}}$$

$$\vec{p}e^{\frac{iqf}{\hbar c}}=e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p}+\frac{q}{c}\nabla f\right) \quad (7)$$

$$\vec{p}e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}=e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\nabla f\right) \quad (8)$$

将（7）(8)代入（5）式等号右方第一项第二项，（5）式成为：

$$\vec{j}=\frac{1}{2\mu}\left[e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^*e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p}+\frac{q}{c}\nabla f\right)\psi-e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\nabla f\right)\psi\right]-\frac{q}{\mu c}\left(\vec{A}+\nabla f\right)\psi\psi^*$$

$$=\frac{1}{2\mu}\left(\psi^*\vec{p}\psi-\psi\vec{p}\psi^*\right)-\frac{q}{\mu c}\vec{A}\psi\psi^*=\vec{j} \quad (9)$$

在证明第 3 式时，设变换后的 v 是 v' 。写出右方平均值的显式，用（4）的波数变换，和 $(4)'$ 的矢势的变换式：

$$\mu\bar{v}' = \left(\bar{p}' - \frac{q}{c}A'\right) = \iiint \psi^{*'} \left(\hat{\bar{p}}' - \frac{q}{c}\hat{A}'\right)\psi' d\tau$$

$$= \iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* \left(\hat{\bar{p}} - \frac{q}{c}\left(\hat{\bar{A}} + \nabla f\right)\right) e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi d\tau$$

$$= \iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* \hat{\bar{p}} e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi d\tau - \frac{q}{c}\iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* \left(\hat{\bar{A}} + \nabla f\right) e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\psi d\tau$$

前式第一个积分可重复用（7）式，得：

$$\mu\bar{v}' = \iiint e^{-\frac{iqf}{\hbar c}}\psi^* e^{\frac{iqf}{\hbar c}}\left(\hat{\bar{p}} + \frac{q}{c}\nabla f\right)\psi d\tau - \frac{q}{c}\iiint \psi^* \left(\hat{\bar{A}} + \nabla f\right)\psi d\tau$$

$$= \iiint \psi^* \left(\hat{\bar{p}} - \frac{q}{c}\bar{A}\right)\psi d\tau = \mu\bar{v}'$$

命题得证

P382——7.4
7.1——3.13
7.2——3.12

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

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

去电磁场的标势和矢势为

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

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

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

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

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

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

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

亦即，对于$\psi(x)$来说，H 和 F 式等价：

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

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

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

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

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

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

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

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

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

7.1）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函数。

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

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

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

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

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

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

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

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

7.1 设带电粒子相互的均匀电场$\vec{E}$和均匀磁场$\vec{B}$中运动，求其能谱及波函数（取磁场方向为 z 轴，电场方向为 x 轴方向）

[解] 为使能量本征方程能够求得，可以这样选择矢势，使

$$A_x=0 \qquad \boldsymbol{A_y=Bx} \qquad A_z=0$$

设电场$\vec{E}$的大小是ε,选择标势$V(\vec{r})$，使场沿着 x 轴

$$-\frac{dV}{dx}=\varepsilon q\,, \qquad V=-\varepsilon qx$$

哈密顿算符是：

$$\boldsymbol{\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\{\hat{p}_x{}^2+(\hat{p}_y{}^2-\frac{q}{c}Bx)+p_z{}^2\}-\varepsilon qx=\frac{1}{2\mu}\{\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2-\frac{2qB}{c}p_yx+\left(\frac{q}{c}B\right)^2x^2+p_z{}^2\}-\varepsilon qx}$$

（1）

$\hat{H}$中不出现 y 和 z，因此

$$[\hat{H},\hat{p}_y]=0 \qquad [\hat{H},\hat{p}_z]=0$$

可以依照本章中§7。2 均匀磁场中带电粒子的运动的解法，先求能量本征函数，由于$\hat{p}_y$，$\hat{p}_z$守恒，波函数包括这两个算符的本征函数作为其构成因子：

$$\boldsymbol{\psi(x,y,z)=X(x)e^{i(p_yy+p_zz)/\hbar}} \qquad (2)$$

代入能量本征方程式：

$$\boldsymbol{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{2qBi}{c\hbar}\frac{\partial}{\partial y}x\psi+[\frac{2pq\varepsilon}{\hbar^2}x-(\frac{qB}{c\hbar})^2x^2]\psi=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi}$$

整理，并约去同因式$e^{i(p_yy+p_zz)/\hbar}$后，得到 ***X*（*x*）**的本征方程

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2\mu}[\frac{q^2B^2}{c^2}x^2-2(\frac{qBp_y}{e}+\mu\varepsilon q)x+p_y{}^2+p_z{}^2]\}X(x)=EX(x)$$

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\mu}{2}(\frac{qB}{c\mu})^2(x-\frac{cp_y}{qB}-\frac{\mu\varepsilon c^2}{qB^2})+[\frac{p_y{}^2+p_z{}^2}{2\mu}+\frac{1}{2\mu}(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B})^2]\}X(x)=EX(x)$$

（3）

或者简写作

$$\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\mu}{2}\omega^2(x-x_0)^2+E_0\}X(x)=EX(x)$$

式中 $\omega\equiv\frac{qB}{c\mu}, x_{0=}\frac{cp_y}{Bq}+\frac{\mu q\varepsilon}{qB^2}$ ， $E_0=\frac{{p_y}^2+{p_z}^2}{2\mu}-\frac{1}{2\mu}(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B})^2$

方程式（3）明显的是一个沿 x 方向振动的谐振子的定态薛定谔方程式，它的固有频率是ω，振动中心在$x=x_0$一点上，同时具有能量本征值： $E-E_0$

其中E_0是有关于 y、z 方向的分能量，按一维谐振子理论，它的能级是

$$E-E_0=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega=(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar qB}{\mu c} \qquad (4)$$

它的本征函数写作

$$X(x)=C_ne^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}(x-x_0)^2}H_n[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}(x-x_0)] \qquad （5）$$

这个运动电荷的总能量 E 是：

$$E=E_0+(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar qB}{\mu c}=\frac{{p_y}^2+{p_z}^2}{2\mu}-\frac{1}{2\mu}(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B})^2+(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar qB}{\mu c} \qquad （6）$$

7.2 设带电粒子在均匀磁场$\vec{B}$及三维各向同性谐振子场$V(r)=\frac{1}{2}\mu{\omega_0}^2r^2$中运动，求能谱公式。

[解] 本题采用柱面座标时，可以像第 4 题那样，将本征函数表示成合流超几何级数，因而决定能量本征值，解法也类似。

粒子座标为 (ρ,φ,z)

令 $A_\varphi=\frac{1}{2}B\rho, A_\rho=0, A_z=0$

此外应将谐振子的弹性力场写成柱面形成：

$$V(\rho,z)=\frac{1}{2}\mu{\omega_0}^2(\rho^2+z^2)$$

根据本章习题 4 中合 算符公式（2）再添上前述附加项：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}]+\frac{ic\hbar B}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{2\mu}(\frac{qB}{2c})^2\rho^2+\frac{1}{2}\mu{\omega_0}^2(\rho^2+z^2)$$

$$=\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{1}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]+\frac{ic\hbar B}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial\varphi}+(\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}+\frac{\mu{\omega_0}^2}{2})\rho^2\}+\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\mu{\omega_0}^2}{2}z^2\}$$

$$=\hat{H}_1(\rho,\varphi)+\hat{H}_2(z)$$

（1）

哈氏算符的两面部分$\hat{H}_1$与ρ,φ有关，第二部分$\hat{H}_2(z)$与 z 有关，这二者是对易，因此能量本征值

也分二部分，可以分别计算，也可有分离变量法将本征函数分为二部分：

$$\psi(\rho,\varphi,z)=c(\rho,\varphi)Z(\varphi) \qquad (2)$$

得到：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}[\frac{\partial^2 C}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial C}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2 C}{\partial\varphi^2}]+\frac{ic\hbar B}{2\mu c}\frac{\partial C}{\partial\varphi}+(\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}+\frac{\mu\omega_0{}^2}{2})\rho^2 C=E_{1C}$$

（3） （3）

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}+\frac{\mu\omega_0{}^2}{2}Z=E_2 Z$$

式左方的哈氏算符 $\hat{H}_1(\rho,\varphi)$ 可以和 $\hat{l}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 对易，因此 $c(\rho,\varphi)$ 可以和这个算符的本征函数有共同因式可设

$$C(\rho,\varphi)=e^{im\varphi}R(\rho) \qquad (4)$$

但 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots\cdots$ 将（4）代入（3）得：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}[\frac{\partial^2 R}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial R}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}R]-\frac{q\hbar Bm}{2\mu c}R+(\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}+\frac{\mu\omega_0{}^2}{2})\rho^2 R=E_1 R$$

整理后写成：

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+[(\frac{mBq}{\hbar c}+\frac{2\mu E_1}{\hbar^2})-(\frac{q^2B^2}{4c^2\hbar^2}+\frac{\mu^2\omega_0^2}{4c^2\hbar^2})\rho^2-\frac{m^2}{\rho^2}]R=0 \qquad (5)$$

这个方程式和第 4 题的方程式（5）是相似的，其中，本题方程式（5）的 $\frac{2\mu E_1}{\hbar^2}$ 相当于第 4 题（5）式的得 $\frac{2\mu E}{\hbar^2}-k^2$，此外（5）式多出一项

$$\frac{\mu^2\omega_0^2}{\hbar^2}\rho^2 R$$

这是谐振子弹性力场势能，第四题的径向方程式是：

$$\frac{d^2R}{d\varphi^2}+\frac{1}{\rho}\frac{dR}{d\varphi}+[(\frac{mBq}{\hbar c}+\frac{2\mu E_1}{\hbar^2})-\frac{q^2B^2}{4c^2\hbar^2}\rho^2-\frac{m^2}{\rho^2}]R=0 \qquad (5)'$$

$(5)'$ 通过交换，得到合流超几何方程式（从略）以及能级公式

$$\begin{aligned}E&=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}+\frac{\hbar qB}{\mu c}\left\{n+\frac{1}{2}+\frac{|m|-m}{2}\right\}\\&=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}+\frac{2\hbar^2}{\mu}\gamma\left\{n+\frac{1}{2}+\frac{|m|-m}{2}\right\}\end{aligned} \qquad (6)$$

式子的第一项是 z 方向运动的能量，第二项代表与(ρ,φ)有关横向能量，它与

$$\gamma = \frac{qB}{2hc}$$

成正比，将（5）与$(5)'$比较，令

$$\gamma^{\ell 2} = \gamma^2 + \frac{\mu^2\omega_0^2}{\hbar^2} = \left(\frac{qB}{2c\hbar}\right)^2 + \frac{\mu^2\omega^2}{\hbar^2}$$

得到本题的能级如下：

$$E = \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 + \frac{2\hbar^2}{\mu}\gamma^{\ell}\left\{n + \frac{1}{2} + \frac{|m| - m}{2}\right\} \qquad (7)$$

这各能量公式的第一项是 z 向运动的方程式的决定的一维谐振自的能级，在公式（7）中

$$k = 0,1,2,\cdots\cdots$$
$$h = 0,1,2,\cdots\cdots$$
$$m = 0,\pm1,\pm2,\cdots\cdots$$

第八章：自旋

P399　　2——6.19 3——6.19

4——6.20，6.21

5——6.25

6——6.22

P402　　9——6.20，6.30

11——6.14

12——6.15

13——6.16

P402 证明找不到一种表象，在其中（1）三个泡利矩阵均为实矩阵或（2）二个是纯虚矩阵，另一个为实矩阵。

（证明）根据角动量定义：

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

又根据第八章问题（1）的结论

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$$

不论采取任何表象上述两组式子满足，从（1）看出若有两个算符在角动量表象中纯虚数（每一元素为虚）如 $\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y$，而 $\hat{\sigma}_z$ 为实矩阵，则可设

$$\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}ai & bi\\ ci & di\end{bmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}a'i & b'i\\ c'i & d'i\end{bmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_z=\begin{bmatrix}m & n\\ p & q\end{bmatrix}$$ ，a,b…… 都是实数。

代入（1）得

$$\begin{bmatrix}a'a+b'c-aa'-bc' & a'b+b'd-ab'-bd'\\ c'a+d'c-ca'-dc' & c'b+d'd-cb'-dd'\end{bmatrix}=2i\begin{bmatrix}m & n\\ p & q\end{bmatrix}$$

这要求 $\hat{\sigma}_z$ 是纯虚矩阵，与假设违背，又从（4）看出，如果 $\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$ 全部是实数矩阵，则这一条法则也违背，故是不可能的。

P425　1——6.39
2——6.39
3——6.40
5——6.42，6.43

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

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

8.1 在 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{z}}$ 表象中，求 $\hat{\sigma}_x$ 的本征态

（解）设泡利算符 σ^2，σ_x，的共同本征函数组是：

$$x_{\frac{1}{2}}(s_z)\quad 和\ x_{-\frac{1}{2}}(s_z)\qquad (1)$$

或者简单地记作 α 和 β，因为这两个波函数并不是 $\hat{\sigma}_x$ 的本征函数，但它们构成一个完整系，所以任何自旋态都能用这两个本征函数的线性式表示（叠加原理），$\hat{\sigma}_x$ 的本征函数可表示：

$$\chi=c_1\alpha+c_2\beta \qquad (2)$$

c_1,c_2 待定常数，又设 $\hat{\sigma}_x$ 的本征值 λ，则 $\hat{\sigma}_x$ 的本征方程式是：

$$\hat{\sigma}_x\chi=\lambda\chi \qquad (3)$$

将（2）代入（3）：

$$\hat{\sigma}_x(c_1\alpha + c_2\beta) = \lambda(c_1\alpha + c_2\beta) \qquad (4)$$

根据本章问题 6（P．264），$\hat{\sigma}_x$ 对 $\hat{\sigma}_z$ 表象基矢的运算法则是：

$$\hat{\sigma}_x\alpha = \beta \qquad \hat{\sigma}_x\beta = \alpha$$

此外又假设 $\hat{\sigma}_x$ 的本征矢（2）是归一花的，将（5）代入（4）：

$$c_1\beta + c_1\alpha = \lambda c_1\alpha + \lambda c_2\beta$$

比较 α, β 的系数（这二者线性不相关），再加的归一化条件，有：

$$\begin{cases} c_1 = \lambda c_2 & -------------(6a) \\ c_2 = \lambda c_1 & -------------(6b) \\ |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 & -------------(6c) \end{cases}$$

前二式得 $\lambda^2 = 1$，即 $\lambda = 1$，或 $\lambda = -1$

当时 $\lambda = 1$，代入（6a）得 $c_1 = c_2$,再代入(6c)，得：

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta} \qquad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta}$$

δ 是任意的相位因子。

当时 $\lambda = -1$，代入（6a）得

$$c_1 = -c_2$$

代入(6c)，得：

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta} \qquad c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta}$$

最后得 $\hat{\sigma}_x$ 的本征函数：

$$x_1 = \frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) \qquad \text{对应本征值 1}$$

$$x_2 = \frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta) \qquad \text{对应本征值-1}$$

以上是利用寻常的波函数表示法，但在 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}^2$ 共同表象中，采用 s_z 作自变量时，既是坐标表象，同时又是角动量表象。可用矩阵表示算符和本征矢。

$$\alpha = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \chi = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \qquad （7）$$

$\hat{\sigma}_x$ 的矩阵已证明是

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

因此 $\hat{\sigma}_x$ 的矩阵式本征方程式是：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \qquad (8)$$

其余步骤与坐标表象的方法相同，$\hat{\sigma}_x$ 本征矢的矩阵形式是：

$$x_1 = \frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad x_2 = \frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

8.2——6.12

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) 方向的单位矢量.

解：在 δ_z 表象中，$\vec{\delta}$ 的矩阵表示为

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

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

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

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

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

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

对于 $\lambda = 1$，代回（3）式，可得

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

归一化本征函数用 (θ,φ) 表示，通常取为

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

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

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

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

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

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

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

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

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

（解） 方法类似前题，设 $\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$ 算符的本征矢是：

$$x=c_1\alpha+c_2\beta \tag{1}$$

它的本征值是 λ。又将题给的算符展开：

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{n}=\sin\theta\cos\varphi\hat{\sigma}_x+\sin\theta\sin\varphi\hat{\sigma}_y+\cos\theta\hat{\sigma}_z \tag{2}$$

写出本征方程式：

$$(\sin\theta\cos\varphi\hat{\sigma}_x+\sin\theta\sin\varphi\hat{\sigma}_y+\cos\theta\hat{\sigma}_z)(c_1\alpha+c_2\beta)=\lambda(c_1\alpha+c_2\beta) \tag{3}$$

根据问题（6）的结论，$\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y$ 对 $\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}^2$ 的共同本征矢 α，β，运算法则是

$$\hat{\sigma}_x\alpha=\beta \quad , \quad \hat{\sigma}_x\beta=\alpha \quad , \quad \hat{\sigma}_y\alpha=i\beta \quad ,$$

$$\hat{\sigma}_y\beta = i\alpha \quad , \quad \hat{\sigma}_z\alpha = \alpha \quad , \quad \hat{\sigma}_z\beta = -\beta \tag{4}$$

将这些代入（3），集项后，对此两边 α ， β 的系数：

$$\begin{cases} \cos\theta c_1 + (\sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi) = \lambda c_1 \\ (\sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi) - \cos\theta c_2 = \lambda c_2 \end{cases} \tag{5}$$

或
$$\begin{cases} (\cos\theta - \lambda)c_1 + \sin\theta e^{-i\varphi}\cdot c_2 = 0 \\ \sin\theta e^{i\varphi}\cdot c_1 - (\cos\theta + \lambda)c_2 = 0 \end{cases} \tag{6}$$

（6）具有非平凡解（平凡解 $c_1 = 0$ ， $c_2 = 0$ ）条件是久期方程式为零，即

$$\begin{vmatrix} \cos\theta - \lambda & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta - \lambda \end{vmatrix} = 0 \text{ 它的解 } \lambda^2 = 1 \tag{7}$$

$\lambda = 1$ 时，代入（6）得：

$$c_2 = tg\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\cdot c_1 \tag{8}$$

（1） 的归一化条件是：

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

将（8）代入（9），得：

$$c_1 = e^{i(\delta-\varphi)}\cos\frac{\theta}{2} \qquad c_2 = e^{i\delta}\sin\frac{\theta}{2}$$

归一化本征函数是：

$$\chi_1 = e^{-i\delta}\left\{e^{-i\varphi}\cos\frac{\theta}{2}\alpha + \sin\frac{\theta}{2}\beta\right\} \tag{10}$$

$\lambda = -1$ 时， c_1, c_2 的关系是：

$$c_2 = -ctg\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\cdot c_1$$

归一化本征函数是：

$$\chi_2 = e^{i\delta}\left\{-e^{-i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\alpha + \cos\frac{\theta}{2}\beta\right\} \tag{11}$$

δ 是任意的相位因子。

本题用矩阵方程式求解：运用矩阵算符：

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad , \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad , \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{12}$$

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{n} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix} \tag{13}$$

本征方程式是：

$$\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_2 \\ c_2 \end{bmatrix} = \lambda\begin{bmatrix} c_2 \\ c_2 \end{bmatrix} \tag{14}$$

$\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$ 的本征矢是：

$$1 = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{i(\delta-\varphi)} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\delta} \end{bmatrix} \quad ,\ 2 = \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2}e^{i(\delta-\varphi)} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\delta} \end{bmatrix} \tag{15}$$

补白：本征矢包含一个不定的 相位因式 $e^{i\delta}$，由于 δ 可以取任意值，因此 χ_1,χ_2 的形式是多式多样的，但（15）这种表示法是有普遍意义的。

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），

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

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

8.3 在自旋态下 $\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$，求 $\overline{\Delta s_x^2}$ 和 $\overline{\Delta s_y^2}$

（解）$\overline{\Delta s_x^2}$ 是 $\hat{s}_x^2$ 的均方偏差

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

$\overline{\Delta s_y^2}$ 是，$\hat{s}_y^2$ 的均方偏差

$$\overline{\Delta s_y^2} = \overline{s_y^2} - (\overline{s_y})^2$$

$$\hat{s}_x^2\chi_{\frac{1}{2}}(s_z) = \frac{\hbar^2}{4}\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)$$

$$\overline{s_x^2} = \chi_{\frac{1}{2}}(s_z)\hat{s}_x^2\chi_{\frac{1}{2}}(s_z) = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{s_x} = \chi_{\frac{1}{2}}(s_z)\hat{s}_x\chi_{\frac{1}{2}}(s_z) = \chi_{\frac{1}{2}}(s_z)\frac{\hbar}{2}\chi_{-\frac{1}{2}}(s_z)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_z) = 0$$

因此$\overline{\Delta s_x^2} = \frac{\hbar^2}{4}$在$\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)$态下，$\hat{s}_x, \hat{s}_y$对称，因而$\overline{\Delta s_y^2} = \frac{\hbar^2}{4}$

8.4 设矩阵ABC满足$A^2 = B^2 = C^2 = 1$，$\boldsymbol{BC - CB = iA}$

(1) 求证$AB + BA = AC + CA = 0$

(2) 在A表象中，求出B，C得矩阵（设无简并）。

【解】将$BC - CB = iA$式左乘B，利用$B^2 = 1$，得

$$C - BCB = iBA$$

同式右乘B，利用$B^2 = 1$，得

$$BCB - C = iAB$$

相加得$AB + BA = 0$，同样，将C左乘、右乘前述一式，可得

$$AC + CA = 0$$

在用A表象时，A的本征矢ψ是基矢，它满足本征方程式：

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi \qquad (1)$$

但λ是本征值，从复用$\hat{A}$运算于（1）得：

$$\hat{A}(\hat{A}\psi) = \lambda\hat{A}\psi = \lambda^2\psi$$

但$A^2\psi = 1\cdot\psi$，所以$\lambda^2 = 1 \quad \lambda = 1,-1$；假定$\hat{A}$没有简并态，$\hat{A}$仅有两个本征值，

在$\hat{A}$自身表象中，其矩阵是对角的，矩阵元是本征值 1 和-1

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad （2）$$

设B的矩阵 $B = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$，将它代入等式$AB + BA = 0$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = 0$$

简化为$\begin{bmatrix} 2a & 0 \\ 0 & -2d \end{bmatrix} = 0$，得$\begin{matrix} a = 0 \\ d = 0 \end{matrix}$

因此 B 是反对角矩阵：

$$B=\begin{bmatrix}0 & b\\ c & 0\end{bmatrix} \qquad (3)$$

代入条件 $\hat{B}^2=1$，有：

$$\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \boldsymbol{b}\\ \boldsymbol{c} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \boldsymbol{b}\\ \boldsymbol{c} & \mathbf{0}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{bc} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \boldsymbol{bc}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{1} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{1}\end{bmatrix}$$

得 $bc=1$ 　 即 $c=\frac{1}{b}$

得到含有一个待定常数的矩阵

$$B=\begin{bmatrix}0 & b\\ \frac{1}{b} & 0\end{bmatrix}$$

关于另一矩阵 C 也有类似的计算，由于 C 满足 $C^2=1$ 和 $AC+CA=0$，因此 C 的矩阵（含有一个未定常数的）写作：

$$C=\begin{bmatrix}0 & e'\\ \frac{1}{e'} & 0\end{bmatrix} \qquad (5)$$

待定常数 b 和 e 之间尚需满足题给的约束条件 $BC-CB=iA$，将它列成矩阵：

$$\begin{bmatrix}0 & b\\ \frac{1}{b} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & e'\\ \frac{1}{e'} & 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}0 & e'\\ \frac{1}{e'} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & b\\ \frac{1}{b} & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}i & 0\\ 0 & -i\end{bmatrix}$$

即 $\frac{b}{e'}-\frac{e'}{b}=i$，或 $\boldsymbol{b^2-e'^2=be'i}$

解出 e 用 b 的项表示：

$$e'=(\pm\frac{\sqrt{3}}{2}+\frac{i}{2})b=e^{\frac{\pi}{6}}b$$

或 $\quad e'=be^{\frac{5\pi i}{6}}$

8.5 矩阵 AB 满足 $A^2=0$，$AA^+ + A^+A=1$，$B=A^+A$

（1） 证明 $B^2=B$

（2） 在 B 表象中求出 A 的矩阵。

【解】（1）依第二条件 $AA^+ + A^+A=1$，将 A^+A 运算于此式，注意一切满足结合律，故：

$$A^+A(AA^+ + A^+A)=A^+A$$

$$A^+A^2A^+ + (A^+A)(A^+A)=A^+A$$

因 $A^2=0$，$A^+A^2A^+=0$，前式求为 $B^2=B$。

（1）在 B 表象中，基矢 ψ 是 B 的本征矢【本征函数】，满足

$$\hat{B}\psi=\lambda\varphi$$

λ 是本征值　　$\hat{B}(\hat{B}\psi)=\lambda\,(\hat{B}\psi)$　　$\hat{B}^2\psi=\lambda^2\psi$

故 ψ 也是 $\hat{B}^2$ 的本征函数，本征值是 λ^2，根据（1）结论 $B^2=B$，故

$$\hat{B}^2\psi=\hat{B}\psi \qquad \lambda^2\psi=\lambda\psi \qquad \lambda\,(\lambda-1)=0$$

所以合理的本征值只有二个 $\lambda=1$，$\lambda=0$，算符 B 在自身表象中是对角矩阵，因本征值有二个，矩阵阶数是二，其对角矩阵元是本征值 1，0。

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\mathbf{1} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}$$

设 $\hat{A}$ 在 $\hat{B}$ 表象中的矩阵是 $A=\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}$ 根据题给的第一条件

$$\hat{A}^2=0 \qquad \begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a^2+b\cdot c & a\cdot b+b\cdot d\\ c\cdot a+d\cdot c & c\cdot b+d^2\end{bmatrix}=0 \qquad (1)$$

$$AA^++A^+A=1 \qquad \begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \qquad (2)$$

$$A^+A=B\ \text{给出} \qquad \begin{bmatrix}\boldsymbol{a}^* & \boldsymbol{c}^*\\ \boldsymbol{b}^* & \boldsymbol{d}^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a} & \boldsymbol{b}\\ \boldsymbol{c} & \boldsymbol{d}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{1} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix} \qquad (3)$$

从最后一式可得　$a^*a+c^*c=1$　（4）

$a^*b+c^*d=0$　（5）

$b^*a+d^*c=0$　（6）

$b^*b+d^*d=0$　（7）

最后一式（7）是表示两个复平方之和为零，即

$$|b|^2=0 \qquad |d|^2=0$$

这只能是 $b=0$，$d=0$。

将这式子代入（2）：

$$\begin{bmatrix}a^* & 0\\ c^* & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & c\\ 0 & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}a^* & c^*\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & 0\\ c & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

得诸关系式：$2a^*a+c^*c=1$ （8） $a^*c=0$ （9）

$ac^*=0$ （10） $c^*c=1$ （11）

从最后一式得 $c=e^{i\delta}$ 【δ 任意相位】又从另外三式都推得 $a=0$ 所求的矩阵是：

$$A=\begin{bmatrix}0 & 0\\ e^{i\delta} & 0\end{bmatrix}$$

本题中 B 的不为零元素也可以在矩阵右下角，这时 A 的不为零元素就在右上角。

8.6 一个具有两个电子的原子，处于自旋单态（s=0）。证明自旋轨道耦合作用 $\boldsymbol{\xi(\mathrm{r})\vec{s}\cdot\vec{L}}$ 对能量无贡献。

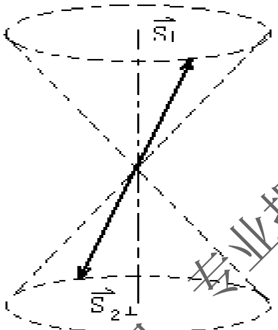
[解]、整个原子的角动量看作每一个电子角动量矢量和，此外每一电子角动量又包括轨道运动和自旋。

$$\hat{\vec{J}}=\hat{\vec{j}}_1+\hat{\vec{j}}_2,\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{l}}_1+\hat{\vec{l}}_2,\hat{\vec{S}}=\hat{\vec{s}}_1+\hat{\vec{s}}_2,\hat{\vec{j}}_1=\hat{\vec{l}}_1+\hat{\vec{s}}_1,\hat{\vec{j}}_2=\hat{\vec{l}}_2+\hat{\vec{s}}_2 \qquad (1)$$

整个体系的哈氏算符是：

$$\boldsymbol{\hat{H}=\hat{H}_0+\xi(\mathrm{r})\vec{s}\cdot\vec{L}}$$ （此式中 r 是电子相对位矢）

将自旋轨道相互作用算符用角动量算符表示，由于：



$$\boldsymbol{\hat{\vec{J}}=\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}}}$$

$$\boldsymbol{\hat{\vec{J}}^2=(\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}})\cdot(\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}})=\hat{\vec{L}}^2+\hat{\vec{S}}^2+2\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}}$$

$$\boldsymbol{\hat{H}=\hat{H}_0+\frac{1}{2}\xi(\mathrm{r})(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2)} \qquad (2)$$

原子的状态可以用（$\hat{L}^2,\hat{J}^2,\hat{J}_Z$）的共同本征函数 Ψ_{L,J,J_Z} 表示，将算符（2），运算于这个本征函数，可以求的能量贡献（修正量）

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\hat{H}\Psi_{L,J,J_z}}&\boldsymbol{=\{\hat{H}_0+\frac{1}{2}\xi(\mathrm{r})\{\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2\}\}\Psi_{L,J,J_z}}\\&\boldsymbol{=\hat{H}_0\Psi_{L,J,J_z}+\frac{1}{2}\xi(\mathrm{r})\{J(J+1)\hbar^2-L(L+1)\hbar^2-S(S+1)\hbar^2\}\Psi_{L,J,J_z}}\end{aligned} \qquad (3)$$

但当原子处在自旋的单重态时， $\boldsymbol{\vec{\mathrm{s}}_1=-\vec{\mathrm{s}}_2,\vec{S}=0}$

总自旋量子数 s=0，有从（1）式的关系看出

$$\boldsymbol{\vec{\mathrm{J}}=\vec{\mathrm{j}}_1+\vec{\mathrm{j}}_2=\vec{\mathrm{l}}_1+\vec{\mathrm{s}}_1+\vec{\mathrm{l}}_2+\vec{\mathrm{s}}_2=\vec{\mathrm{l}}_1+\vec{\mathrm{l}}_2=\vec{\mathrm{L}}}$$

因此 J=L，（3）式成为：

$$\hat{H}\psi_{L,J,J_Z}=\hat{H}_0\Psi_{L,J,J_Z}$$

所以，轨道自旋的耦合作用对能量本征值没有影响，因 $\hat{H}_0$ 不含 $\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}$

8.7 设两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的相互作用为：

$$V(r)=V_O(r)+V_T(r)S_{12}$$

第一项为中心力，第二项为张量力的证明：

（1） 宇称 π 、总自旋 $\vec{S}^2$ 、总角动量 $\hat{J}^2$ 及总的 z 向分角动量 $\hat{\boldsymbol{J}}_z$ 均为守恒量，但 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{S}$ 不是守恒量。

（2） 在自旋单态下，张量力为零。

（解）题中张量力（本章中问题 13.P283）如下：

$$S_{12}=\frac{3(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{r}_1)(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{r}_2)}{r^2}-(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)=\frac{6(\vec{S}\cdot\vec{r})^2}{r^2}-2\hat{S}^2 \qquad (1)$$

但 $\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$。（前一公式的来源不在本题中讨论）

（1） （a）宇称 π：体系的哈密顿算符包括两粒子的能量和势能

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_1^2}{2\mu_1}+\frac{\hat{p}_2^2}{2\mu_2}+V_O(r)+V_T(r)\left\{\frac{6(\vec{S}\cdot\vec{r})}{r^2}-2S^2\right\} \qquad (2)$$

按[*] §5．3（P。176）一体系若具有空间反射不变性，则其宇称是守恒的，即

$$[\pi,\hat{H}]=0 \qquad (3)$$

在本题的情形，这条件是成立的，注意，粒子的动能可能梯度表示。

(2)式用坐标显示为：

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{H}}=&-\frac{1}{2\mu_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right)-\frac{1}{2\mu_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2^2}\right)\\&+V_O(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)+V_T(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)\left\{\frac{6[\hat{\vec{S}}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)]^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|^2}-2\hat{S}^2\right\}\end{aligned} \qquad (4)$$

当参考系发生空间反射时，

$\boldsymbol{x_1\to -x_1, x_2\to -x_2, y_1\to -y_1, y_2\to -y_2, z_1\to -z_1, z_2\to -z_2, r_1-r_2\to r_2-r_1}$ 。 但 $|\vec{\boldsymbol{r}}_1-\vec{\boldsymbol{r}}_2|$ 不变，此外总的自旋角动量 $\vec{S}$ 依赖与自旋坐标 s_{z1} 和 s_{z2}，与空间坐标 $\vec{r}_1,\vec{r}_2$ 无关，因而 $\vec{\boldsymbol{S}},[\vec{\boldsymbol{S}}\cdot(\vec{\boldsymbol{r}}_1-\vec{\boldsymbol{r}}_2)]^2$ 也不随空间反射而变更，又因为

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}=\frac{\partial^2}{\partial(-x_1)^2}$$

等，所以动能部分也不随反射而变化，所以（4）式整个不随反射变化，若$(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{z1},s_{z2})$是任意函数，我们有：

$$\hat{\pi}\hat{H}\Psi=\hat{H}\hat{\pi}\Psi$$

即 $[\hat{\pi},\hat{H}]=0,\hat{\pi}$ 是守恒量

（b）总自旋平方算符$\hat{S}^2$：

自旋和一切轨道运动的量都能对易，只需检验$\hat{S}^2$与 $(\vec{S}\cdot\vec{r})^2$的对易性：

$$\begin{aligned}(\vec{S}\cdot\vec{r})^2&=\hat{S}_x^2(x_1-x_2)^2+\hat{S}_y^2(y_1-y_2)^2+\hat{S}_z^2(z_1-z_2)^2\\&+2\hat{S}_x\hat{S}_y(x_1-x_2)(y_1-y_2)\\&+2\hat{S}_y\hat{S}_z(y_1-y_2)(z_1-z_2)\\&+2\hat{S}_z\hat{S}_x(z_1-z_2)(x_1-x_2)\end{aligned}$$

因$[\hat{S}^2,\hat{S}_x]=0$等，又$[\hat{S}^2,\hat{S}_x^2]=0$等，因此有：

$$[\hat{S}^2,\hat{H}]=0 \tag{6}$$

（c）总角动量分量$\hat{J}_Z$ ：

总角动量分量$\hat{J}_Z$与轨道运动部分的诸力学算符相对易，这在第六章中心力场和第四章§4.1都有过讨论，只需证明$\hat{J}_Z$与$\hat{H}$的势能部分的对易性就足够。

又 $$\hat{J}_z=\hat{L}_z+\hat{S}_z=\hat{l}_{1z}+\hat{l}_{2z}+\hat{s}_{1z}+\hat{s}_{2z}$$

只与角度有关，与相对矢径$\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$无关，所以$\hat{J}_Z$与一切与$\vec{r}$有关的算符对易

$$\begin{aligned}[\hat{J}_Z,\hat{H}]&=[\hat{J}_Z,\hat{V}(r)]\\&=[\hat{J}_Z,\hat{V}_o(r)+\hat{V}_T(r)\hat{S}_{12}]\\&=[\hat{J}_Z,\hat{V}_T(r)\hat{S}_{12}]\\&=[\hat{J}_Z,\hat{V}_T(r)\{\frac{6(\vec{S}\cdot\vec{r})^2}{r^2}-2\hat{S}^2\}]\\&=\frac{6\hat{V}_T(r)}{r^2}[\hat{J}_Z,(\vec{S}\cdot\vec{r})^2]-2V_T(\vec{r})[\hat{J}_Z,\hat{S}^2]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[\hat{J}_Z,(\vec{S}\cdot\vec{r})^2]&=\hat{J}_Z\cdot(\vec{S}\cdot\vec{r})^2-(\vec{S}\cdot\vec{r})^2\cdot\hat{J}_Z\\&=\hat{J}_Z(\vec{S}\cdot\vec{r})^2-(\vec{S}\cdot\vec{r})\hat{J}_Z(\vec{S}\cdot\vec{r})+(\vec{S}\cdot\vec{r})\hat{J}_Z(\vec{S}\cdot\vec{r})-(\vec{S}\cdot\vec{r})^2\hat{J}_Z \qquad (7)\\&=[\hat{J}_Z,(\vec{S}\cdot\vec{r})](\vec{S}\cdot\vec{r})-(\vec{S}\cdot\vec{r})[\hat{J}_Z,(\vec{S}\cdot\vec{r})]\end{aligned}$$

最后一式说明，$[\hat{J}_Z,(\vec{S}\cdot\vec{r})^2]$归结为较简单的$[\hat{J}_Z,(\vec{S}\cdot\vec{r})]$的运算

$$
\begin{aligned}
[\hat{J}_Z,(\vec{S}\cdot\vec{r})] &= [L_z+S_z, S_x(x_1-x_2)+S_y(y_1-y_2)+S_z(z_1-z_2)] \\
&= [\hat{L}_z, x_1-x_2]\hat{S}_x+[L_z, y_1-y_2]\hat{S}_y+[L_z, z_1-z_2]\hat{S}_z \\
&\quad +[\hat{S}_z,\hat{S}_x](x_1-x_2)+[\hat{S}_z,\hat{S}_y](x_1-x_2)
\end{aligned}
$$

再注意到：

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}_z, x_1-x_2] &= [\hat{l}_{1z}+\hat{l}_{2z}, x_1-x_2] \\
&= [\hat{l}_{1z}, x_1]-[\hat{l}_{2z}, x_2]
\end{aligned}
$$

运用两个业已证明过的对易式（第四章）

$$[\hat{l}_\alpha,\hat{x}_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hbar i x_\gamma \qquad [\hat{S}_\alpha,\hat{S}_\beta]=\hbar i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{S}_\gamma$$

$$
\begin{aligned}
[\hat{J}_z,(\vec{S}\cdot\vec{r})] &= [\hat{l}_{1z}, x_1]\hat{S}_x-[\hat{l}_{2z}, x_2]\hat{S}_x+[\hat{l}_{1z}, y_1]\hat{S}_y-[\hat{l}_{2z}, y_2]\hat{S}_y \\
&\quad +[\hat{S}_z,\hat{S}_x](x_1-x_2)+[\hat{S}_z,\hat{S}_y](y_1-y_2) \\
&= \hbar i(y_1-y_2)\hat{S}_x-\hbar i(x_1-x_2)\hat{S}_y+\hbar i(x_1-x_2)\hat{S}_y \\
&\quad -\hbar i(y_1-y_2)\hat{S}_x=0
\end{aligned}
\tag{8}
$$

将此结果代入（7）式，得到

$$[\hat{J}_z,(\vec{S}\cdot\vec{r})^2]=0$$

所以最终得到：

$$[\hat{J}_z,\hat{H}]=0 \qquad （\hat{J}_z 是守恒量 ） \tag{9}$$

（d）总角动量平方 $\hat{J}^2$：

前一步骤出发，再计算 $\hat{J}_z^2$ 与$(\vec{S}\cdot\vec{r})$的对易关系

$$
\begin{aligned}
[\hat{J}_z^2,(\vec{S}\cdot\vec{r})] &= \hat{J}_z^2(\vec{S}\cdot\vec{r})-(\vec{S}\cdot\vec{r})\hat{J}_z^2 \\
&= \hat{J}_z^2(\vec{S}\cdot\vec{r})-\hat{J}_z(\vec{S}\cdot\vec{r})\hat{J}_z+\hat{J}_z(\vec{S}\cdot\vec{r})\hat{J}_z-(\vec{S}\cdot\vec{r})\hat{J}_z^2 \\
&= \hat{J}_z[\hat{J}_z,(\vec{S}\cdot\vec{r})]+[\hat{J}_z,(\vec{S}\cdot\vec{r})]\hat{J}_z
\end{aligned}
\tag{10}
$$

现在将（8）代入（10），立即又有

$$[\hat{J}_z^2,(\vec{S}\cdot\vec{r})]=0$$

我 们 在 （ c ） 一 小 题 中 计 算 $[\hat{J}_z,(\vec{S}\cdot\vec{r})]$ 时 全 部 用 了 直 角 坐 标 ， 因 此 坐 标 $(x_1\ y_1\ z_1, x_2\ y_2\ z_2)$有轮换的对称，（10）式也是如此，因而应该也有下式：

$$[\hat{J}_x^2,(\vec{S}\cdot\vec{r})]=0, \qquad [\hat{J}_y^2,(\vec{S}\cdot\vec{r})]=0 \tag{11}$$

将（10）和（11）的两式相加，得

$$[\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2,(\vec{S}\cdot\vec{r})]=[\hat{J}^2,(\vec{S}\cdot\vec{r})]=0 \tag{12}$$

从而也得到交换式

$$[\hat{J}^2, \hat{H}] = 0 \qquad （\hat{J}^2 \text{是守恒量}）$$

（e）$\hat{L}^2, \hat{\vec{S}}$ 这两算符不能是守恒量，因为它们不和$(\vec{S}\cdot\vec{r})$对易。

（2）最后证明，在双电子体系的单态中，张量力等于零。

设第一电子的态用$\alpha(1), \beta(1)$表示，第二电子用$\alpha(2), \beta(2)$表示，在单态的情形，体系总自旋的本征值 S=0，自旋波函数是反对称的，写作

$$\chi = \{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\}/\sqrt{2} \qquad (13)$$

在此态中求张量力势能算符的平均值$\overline{V}$，这计算式只有一项

$$\overline{V} = \chi^+\{V_T(r)[\frac{6(\vec{S}\cdot\vec{r})^2}{r^2} - 2\hat{S}^2]\}\chi \qquad (14)$$

将此式分别计算

$$\chi^*(\vec{S}\cdot\vec{r})\chi = \frac{\hbar}{4}\{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\}\{(x_1 - x_2)(\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) + (y_1 - y_2)(\sigma_{1y} - \sigma_{2y})$$
$$+ (z_1 - z_2)(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\}\cdot\{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\}$$

在以上运算式中，$\hat{\sigma}_{1x}, \hat{\sigma}_{1y}, \hat{\sigma}_{1z}$等只能运算号，$\alpha(1), \beta(1)$；$\hat{\sigma}_{2x}$……….而运算于 $\alpha(2), \beta(2)$，再注意到

$$\hat{\sigma}_x\alpha = \beta, \hat{\sigma}_x\beta = \alpha; \hat{\sigma}_y\alpha = i\beta,$$
$$\hat{\sigma}_y\beta = -i\alpha; \hat{\sigma}_z\alpha = \alpha, \hat{\sigma}_z\beta = -\beta$$

前式成为：

$$\frac{\hbar}{4}\{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\}\{(x_1 - x_2)[\beta(1)\beta(2) - \alpha(1)\alpha(2) + \alpha(1)\alpha(2) - \beta(1)\beta(2)]$$
$$+ (y_1 - y_2)[\beta(1)\beta(2)i + \alpha(1)\alpha(2)i - \alpha(1)\alpha(2)i - \beta(1)\beta(2)i]$$
$$+ (z_1 - z_2)[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2) + \alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]\} = 0$$

又 $\chi^* S^2\chi = \chi^* S(S+1)\chi = \chi^*\cdot 0(0+1)\chi = 0$

（S 是总自旋量子数）

将以上两部分计算结果代入（14），知道$\overline{V} = 0$。

8.8 自旋为 s 的两个粒子所具有的，对称和反对称的自旋波函数各有几个？$s = \frac{1}{2}, s = \frac{3}{2}$情况下，对称和反对称自旋态各有几个？

[解] 自旋为 s 指的是自旋角量子数是 s（它和轨道运动中的 l 相当），在轨道运动中，角量子数给定后（l）,角动量 z 分量的本征值 m$\hbar$ 有 2l+1 种不同值：

$$m\hbar = -l\hbar, -(l-1)\hbar, \dots\dots -\hbar, 0, \hbar \dots\dots (l-1)\hbar, l\hbar$$

推广到自旋的情形若自旋角量子数为 s（不一定是 1/2，例如原子核的自旋），则自旋磁量子数有 2s+1 种值

$$m_s = -s\hbar, \dots\dots s\hbar$$

但 s 可以是整数，也可以是半整数。

自旋的不同态用 m_s 来区别，第一电子的自旋波函数记作 $\chi_{m_s}(s_{z1})$ 或 $\chi_{m_s}(1)$，第二电子的自旋波函数记作 $\chi_{m_s'}(s_{z2})$ 或 $\chi_{m_s'}(2)$

$$m_s, m_s' \text{是（} -s, -s+1, \dots\dots s-1, s \text{）}$$

中任意两个。

描写两电子体系的波函数是个别电子波函数的相乘积或其线性式，根据§8.4 的理论，要使体系的波函数 χ 成为总自旋 $\hat{S}^2, \hat{S}_Z$ 的本征态，χ 只有三种形式的归一化波函数：

（1） $\chi = \chi_{ms}(1)\chi_{ms}(2)$ 非简并情形 共计 2s+1 种

（2） $\chi = \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{ms}(1)\chi_{m's}(2) + \chi_{ms}(2)\chi_{m's}(1)]$ 简并情形

这种波函数种数等于 2s+1 文字中选择不同 2 种文字的种数计有 $\dfrac{(2s+1)2s}{2}$ 种。

以上二类对称自旋波函数的总数目 n=(2s+1)+(2s+1)s=(2s+1)(s+1)

(3) $\chi = \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{ms}(1)\chi_{m's}(2) - \chi_{ms}(2)\chi_{m's}(1)]$

这种波函数还是反对称的，波函数总数目和（2）相同，计有 $\dfrac{(2s+1)2s}{2}$ 种。自旋角量子数 s 指定时，可能的合成自旋波函数的总数目有：

$$n = 2s + 1 + (2s+1)s + (2s+1)s = (2s+1)^2$$

8.9——6.13
8.10——6.17

8.10 满足下列条件的 n 维矩阵,称为 SU_n 矩阵

$$U^+U = UU^+ = 1 \qquad \det U = 1$$

试求 SU_2 的一般表示式。

【解】设:

$$U = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \text{则} U^+ = \begin{bmatrix} a^* & b^* \\ c^* & d^* \end{bmatrix}$$

代入题给的第一个条件

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a^* & b^* \\ c^* & d^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

化成等效的条件 $\begin{cases} aa^* + bb^* = 1----(1) \\ ac^* + bd^* = 0----(2) \\ ca^* + db^* = 0----(3) \\ cc^* + dd^* = 1----(4) \end{cases}$

同理，代入第二个条件

$$\begin{bmatrix} a^* & b^* \\ c^* & d^* \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} a^*a + b^*b = 1----(1) \\ a^*b + c^*d = 0----(2) \\ b^*a + d^*c = 0----(3) \\ b^*b + d^*d = 1----(4) \end{cases}$$

前列出的八个方程式并非完全独立。

容易看出（2）与(3)是复共轭，(6)（7）也是复共轭式，；因此只有六个不相关方程式，因

$$a^*a = aa^* = |a|^2$$

等，又（1）（5）相减，(1)（8）相减，得两个关系式：

$$|b|^2 = |c|^2 \qquad (9)$$

$$|a|^2 = |d|^2$$

(10)

根据（1）：$|a|^2 + |b|^2 = 1$，因此在不失普遍性的情况下，可以设定以下形式：

$$|a|^2 = \cos^2\omega \qquad a = \cos\omega\ e^{i\alpha} \qquad （11）$$

$$|b|^2 = \sin^2\omega \qquad b = \sin\omega\ e^{i\beta} \qquad (12)$$

式中ω必是实数，而α，β任意实数得相因子，根据（9）和（10），同样可设：

$$c = \sin\omega\ e^{i\gamma} \quad （13）$$

$$d = \cos\omega\ e^{i\delta} \quad （14）$$

这四个元素满足（1）（4）（5）（8）和（9）（10），但对于（2）或（3），对于（6）或（7）这两个条件的满足，给初相位α，β，γ，δ一些限制，将a, b, c, d的表达式代入(2)得：

$$e^{i(\alpha-\gamma)} + e^{i(\beta-\delta)} = 0 \qquad （15）$$

如果使用（3）、(6)、(7)诸式，实际上得不到新的关系，又将（15）遍乘$e^{i(\alpha+\beta)}$得：

$$e^{i(\gamma+\delta)}+e^{i(\beta+\gamma)}=0 \qquad (16)$$

其次我们使用题给得第三个独立条件$\det U=1$，有

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}=ad-bc=\cos^2\omega e^{i(\alpha+\delta)}-\sin^2\omega e^{i(\beta+\gamma)}=1 \qquad (17)$$

将（16）的关系代入（17）得：

$$e^{i(\alpha+\delta)}\{\cos^2\omega+\sin^2\omega\}=1$$

即 $e^{i(\alpha+\beta)}=1$

因而有 $e^{i\delta}=e^{-i\alpha}$

又从（16）得 $e^{i(\beta+\gamma)}=-e^{i(\alpha+\delta)}=-1$，

$$-e^{i\beta}=e^{-i\gamma} \qquad (19)$$

由此看来$e^{i\alpha}$，$e^{i\beta}$，$e^{i\gamma}$，$e^{i\delta}$只有两个独立，我们若选用$e^{i\alpha}$和$e^{i\beta}$表示各元素，有

$$U=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \cos\omega\ e^{i\alpha} & \sin\omega\ e^{i\beta} \\ -\sin\omega\ e^{-i\beta} & \cos\omega\ e^{-i\alpha} \end{bmatrix}$$

8.11——6.18
8.12——6.24
8.13——6.25
8.14——6.26

8.15 自旋为$\hbar/2$，内禀磁矩为μ_0的粒子，在一个空间分布均匀但随时间改变的磁场$\vec{B}(t)$中运动，证明粒子的波函数可以表示成空间函数与自旋函数的积，写出它们满足的波动方程式。

【解】薛定谔方程式被推广为：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=[\frac{1}{2\mu}(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2+\phi e-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}]\psi \qquad (1)$$

H_0与自旋无关，$-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$与空间坐标无关，所以可以令

$$\Psi(x,y,z,t)=\varphi(xyzt)\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix}$$

代入前式，注意$\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$仅与自旋有关，代入后：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\cdot\left\{\varphi\ (xyzt)\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}\right\}=\{\frac{1}{2\mu}(\mu-\frac{e}{c}A)^2+e\Phi-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\}\varphi\ (xyzt)\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}$$

即
$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}\cdot\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}+i\hbar\varphi\cdot\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=\{H^0-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\}\varphi\cdot\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi\cdot\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}+i\hbar\varphi\cdot\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=H^0\varphi\cdot\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\varphi\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}\qquad(2)$$

将最后一式遍除 $\varphi\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}$；得

$$\hbar i\frac{\partial\varphi}{\partial t}\Big/\varphi+\hbar i\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}\Big/\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=H^0-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$$

将与自旋、轨道运动部分分别等同，得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=H^0\varphi,\qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=-\mu_0\sigma\cdot B\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}$$

8.16 同上题，设 $\vec{B}$ 沿 z 轴方向，在 $t=0$ 时，自旋波函数

$$\begin{bmatrix}a(0)\\b(0)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}e^{-i\alpha}\cos\delta\\e^{i\alpha}\sin\delta\end{bmatrix}$$

求 $\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}$ 它是自旋沿什么方向的本征态，在这个态下 $\vec{S}_x$，$\vec{S}_y$，$\vec{S}_z$ 是多少。

【解】设波函数是

$$\Psi(x,y,z,s_z,t)=\varphi(xyzt)\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}\qquad(1)$$

由于方程式可以分离变量，所以，除 $\Psi(xyzt)$ 部分因 ϕ 未知而不能决定外自旋部分满足前题的（3）式，本题因 $\vec{B}$ 沿 z 轴

$$B_x=0\qquad B_y=0\qquad B_z=B$$

所以
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}=-\mu_0(\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z)\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}=-\mu_0B\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}\qquad(2)$$

此式相当于：
$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial a}{\partial t} = -\mu_0 Ba & (3) \\ i\hbar\dfrac{\partial b}{\partial t} = \mu_0 Bb & (4) \end{cases}$$

按题意匀强磁场 B 是时间的函数 $B(t)$，因而有解

$$a(t) = a_0 e^{\frac{\mu_0}{\hbar} i\int_0^t B(t)dt}$$

$$b(t) = b_0 e^{-\frac{\mu_0}{\hbar} i\int_0^t B(t)dt}$$

再代入初条件，决定了常数

$$a_0 = \cos\delta\ e^{-i\alpha} \qquad b_0 = \sin\delta\ e^{i\alpha}$$

$$\chi = \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\delta\ e^{i\{\frac{\mu_0}{\hbar}\int B(t)dt-\alpha\}} \\ \sin\delta\ e^{-i\{\frac{\mu_0}{\hbar}\int B(t)dt-\alpha\}} \end{bmatrix} \qquad (5)$$

按本章习题（2）：凡自旋矢量沿方向 $\vec{n}(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ 的态，其波函数表示为

$$\chi_1 = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{i(\delta-\varphi)} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\delta} \end{bmatrix} \qquad \chi_2 = \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2} e^{i(\delta-\varphi)} \\ -\cos\frac{\theta}{2} e^{i\delta} \end{bmatrix} \qquad (6)$$

（6）式中 δ 任意取值，若取 $\delta = \frac{\theta}{2}$，将（5）（6）对比，发现自旋方向

$$\theta = 2\delta \qquad \varphi = 2(\alpha - \frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(t)dt)$$

再求此态之中，$\bar{\alpha}_x$ 等的平均值，为此用自旋态的平均值计算式：

$$\bar{S}_x = \chi^+ \hat{S}_x \chi = [a^*(t), b^*(t)]\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}[a^*(t), b^*(t)]\begin{bmatrix} b(t) \\ a(t) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}(a^* b + b^* a)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sin\delta\cos\delta\ \{e^{-2i\{\frac{\mu_0}{\hbar}\int B(t)dt-\alpha\}} + e^{2i\{\frac{\mu_0\int B(t)dt-\alpha}{\hbar}}\}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sin 2\delta\ \cdot\cos\left(\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(t)dt - 2\alpha\right)$$

$$\bar{S}_y = -\frac{\hbar}{2}\sin 2\delta\ \cdot\sin\{\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(t)dt - \alpha\}$$

$$\overline{S}_z = \frac{\hbar}{2}(a^* a - b^* b) = \frac{\hbar}{2}\cos 2\delta$$

8.17 与上题类似，设磁场大小不变，但磁场在 xy 平面内，以下规律变化：

$$B_x = B\cos\omega\, t \qquad B_y = B\sin\omega\, t \qquad B_z = 0$$

求粒子自旋波函数。

【解】亦用前题关于自旋的方程式：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t)\end{bmatrix} = -\mu_0 B(\sigma_x \cos\omega\, t + \sigma_y \sin\omega\, t)\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t)\end{bmatrix} \qquad (1)$$

即 $$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t)\end{bmatrix} = -\mu_0 B\begin{bmatrix} 0 & \cos\omega\, t - i\sin\omega\, t \\ \cos\omega\, t + \sin\omega\, t & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t)\end{bmatrix}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t)\end{bmatrix} = -\mu_0 B\begin{bmatrix} 0 & e^{-i\omega\, t} \\ e^{i\omega t} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t)\end{bmatrix}$$

这相当于下述两个方程式

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar i}{\mu_0 B}\dot{a}(t) = b(t)e^{-i\omega\, t} & (2) \\ -\dfrac{\hbar i}{\mu_0 B}\dot{b}(t) = a(t)e^{i\omega\, t} & (3) \end{cases}$$

再将每方程式对时间求导一次，得：

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar i}{\mu_0 B}\ddot{a}(t) = \{\dot{b}(t) - i\omega\, b(t)\}e^{-i\omega\, t} & (4) \\ -\dfrac{\hbar i}{\mu_0 B}\ddot{b}(t) = \{\dot{a}(t) + i\omega\, a(t)\}e^{i\omega\, t} & (5) \end{cases}$$

有可能从（2）（3）（4）中消去变量 $b(t)$，为此将（3）式中的 $\dot{b}(t)$ 和(2)式中的 $b(t)$ 分别用 $a(t)$ 的项表示，代入（4），得

$$-\frac{\hbar i}{\mu_0 B}\ddot{a}(t) = \{\frac{\mu\, B_i}{\hbar}a(t)e^{i\omega\, t} - \frac{\hbar\omega}{\mu\, B}a(t)e^{i\omega\, t}\}e^{-i\omega\, t}$$

即得到齐此方程式：

$$\ddot{a}(t) + i\omega\, \dot{a}(t) + \frac{{\mu_0}^2 B^2}{\hbar^2}a(t) = 0 \qquad (6)$$

此式的特征代数方程式是：

$$\lambda^2 + i\omega\, \lambda + \frac{{\mu_0}^2 B^2}{\hbar^2} = 0 \qquad (7)$$

解此方程式得：

$$\boldsymbol{\lambda_1,\lambda_2=-\frac{i\omega}{2}\pm\frac{i}{2}\sqrt{\omega^2+\frac{4\mu_0{}^2B^2}{\hbar^2}}} \quad (8)$$

因而 $a(t)$ 的解是：

$$a(t)=c_1e^{\lambda_1 t}+c_2e^{\lambda_2 t}=e^{-\frac{i\omega t}{2}}\{c_1e^{\frac{i\Omega t}{2}}+c_2e^{-\frac{i\Omega t}{2}}\} \quad (9)$$

式中
$$\Omega=\sqrt{\omega^2+\frac{4\mu_0{}^2B^2}{\hbar^2}} \quad (10)$$

关于 $b(t)$ 的方程式是：

$$\ddot{b}(t)-i\omega\,b(t)+\frac{\mu_0{}^2B^2}{\hbar^2}b(t)=0 \quad (11)$$

类似地可一一求得解是：

$$b(t)=c_3e^{\lambda_3 t}+c_4e^{\lambda_4 t}=e^{\frac{i\omega t}{2}}\{c_3e^{\frac{i\Omega t}{2}}+c_4e^{-\frac{i\Omega t}{2}}\} \quad (12)$$

（9）和（12）中含有积分常数 c_1，c_2，c_3，c_4 这些由初条件 $a(0)$，$b(0)$ 和 $\dot{a}(0)$，$\dot{b}(0)$ 等四个条件来决定。

8.18 设自旋为 $1/2$ 的粒子在磁场 $B(t)$ 中运动，求证在海森伯表象中自旋时间的变化率是：

$$\boldsymbol{\frac{d}{dt}\vec{S}(t)=\frac{g_e e}{2mc}\vec{S}\times\vec{B}}$$

式中 m 粒子质量，e 电荷，g_e 为自旋的 g 因子（对电子 $g_e=-2$）设 $\vec{B}=B\vec{k}$ 是沿 z 轴方向常磁场，求解 $\bar{s}(t)$。

【解】根据第五章公式（23）海森伯运动方程式，任何力学算符的海氏表象 $\bar{s}(t)$ 要满足：

$$\boldsymbol{\frac{d\hat{\bar{F}}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\bar{F}},\hat{H}\right]} \quad (1)$$

在考虑自旋情形，粒子的哈密尔顿算符：

$$\boldsymbol{\hat{H}=\frac{1}{2m}\{\hat{\bar{P}}-\frac{e}{c}\hat{\bar{A}}\}^2+e\Phi-\mu_0\hat{\bar{\sigma}}\cdot\hat{\bar{B}}} \quad (2)$$

令 $\hat{F}=\hat{s}$，注意到 $\hat{H}=\hat{H}_0-\mu_0\hat{\bar{\sigma}}\cdot\hat{\bar{B}}$，$\hat{H}_0$ 部分与自旋无关，于是有：

$$\frac{1}{\hbar i}[\hat{\vec{s}},\hat{H}]=\frac{1}{\hbar i}[\hat{\vec{s}},\hat{H}_0-\mu_0\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}}]$$
$$=\frac{1}{\hbar i}\{\hat{\vec{s}}(\hat{H}_0-\mu_0\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}})-(\hat{H}_0-\mu_0\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}})\hat{\vec{s}}\}$$
$$=\frac{-\mu_0}{\hbar i}\{\hat{\vec{s}}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}})-(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}})\hat{\vec{s}}\}$$
$$=-\frac{\mu_0}{\hbar i}[\hat{\vec{s}},\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}}]$$
$$=-\frac{\mu_0}{2i}[\hat{\vec{\sigma}},\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}}] \qquad (3)$$

最后一式是矢量对易式，应就每一分量进行计算：

$$-\frac{\mu_0}{2i}[\hat{\sigma}_x,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}}]=-\frac{\mu_0}{2i}[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_x\hat{B}_x+\hat{\sigma}_y\hat{B}_y+\hat{\sigma}_z\hat{B}_z]$$
$$=-\frac{\mu_0}{2i}\{\hat{\sigma}_x(\hat{\sigma}_x\hat{B}_x+\hat{\sigma}_y\hat{B}_y+\hat{\sigma}_z\hat{B}_z)-(\hat{\sigma}_x\hat{B}_x+\hat{\sigma}_y\hat{B}_y+\hat{\sigma}_z\hat{B}_z)\hat{\sigma}_x\}$$
$$=-\frac{\mu_0}{2i}\{(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x)\hat{B}_y+(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x)\hat{B}_z$$
$$=-\mu_0\{\vec{\sigma}_z\hat{B}_y-\vec{\sigma}_y\hat{B}_z\}$$
$$=-\mu_0(\hat{\vec{B}}\times\hat{\vec{\sigma}})_x$$

同理可证 $-\frac{\mu_0}{2i}[\hat{\sigma}_y,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}}]=-\mu_0(\hat{\vec{B}}\times\hat{\vec{\sigma}})_y$

$$-\frac{\mu_0}{2i}[\hat{\sigma}_z,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}}]=-\mu_0(\hat{\vec{B}}\times\hat{\vec{\sigma}})_z$$
$$\frac{d}{dt}\vec{s}(t)=\frac{g_e e}{2mc}(\hat{\vec{s}}\times\hat{\vec{B}})$$

求 $s(t)$ 的解，设 B 沿 z 轴，

$$B_x=0 \qquad B_y=0 \qquad B_z=B$$
$$\frac{d}{dt}(\hat{s}_x\vec{i}+\hat{s}_y\vec{j}+\hat{s}_z\vec{k})=\frac{g_e e}{2mc}\{(\hat{s}_x\vec{i}+\hat{s}_y\vec{j}+\hat{s}_z\vec{k})\times\hat{B}\vec{k}\}----(4)'$$

令 $\frac{g_e eB}{2mc}=\omega$，得 $\begin{cases}\dfrac{d\vec{s}_x}{dt}=\omega\,\hat{s}_y & (5)\\ \dfrac{d\vec{s}_y}{dt}=-\omega\,\hat{s}_x & (6)\end{cases}$

将第一式求导：$\frac{d^2\hat{s}_x}{dt^2}=\omega\frac{d\hat{s}_y}{dt}$

结合（6）消去 $\frac{d\hat{s}_y}{dt}$，得 $\frac{d^2\hat{s}_x}{dt^2}+\omega^2\hat{s}_x=0$

它的解是 $\hat{s}_x = \hat{s}_0 \cdot \cos(\omega t+\alpha)$ (7)

代入（5）得 $\hat{s}_y = -\omega \hat{s}_0 \cdot \sin(\omega t+\alpha)$ (8)

从$(4)'$得到有关s_x的方程是

$$\frac{d\hat{s}_z}{dt}=0 \qquad \hat{s}_z = 常数 = s_{0z}$$

$$\hat{\vec{s}} = \hat{s}_0\cos(\omega\cdot t+\alpha)\vec{i} - \omega\hat{s}_0\sin(\omega t+\alpha)\vec{j} + s_{0z}\vec{k}$$

在计算中产生的ω是自旋角动量绕磁场方向$\vec{k}$的进动角速度。

8.19——6.27
8.20——6.28
8.21——6.29
8.22——6.23
8.23——6.32

8.23 令 $\hat{\Lambda}_l^+ = \dfrac{l+1+\vec{\sigma}\cdot\vec{l}}{2l+1}$ ，$\hat{\Lambda}_l^- = \dfrac{l-\vec{\sigma}\cdot\vec{l}}{2l+1}(\hbar-1)$ ，$\hat{\Lambda}_l^+ + \hat{\Lambda}_l^- = 1$

证明：

$$\hat{\Lambda}_l^+\phi_{ljmj} = \begin{cases} \phi_{ljmj} & (j=l+\frac{1}{2}) \\ 0 & (j=l-\frac{1}{2}) \end{cases}$$

$$\hat{\Lambda}_l^-\phi_{ljmj} = \begin{cases} 0 & (j=l+\frac{1}{2}) \\ \phi_{ljmj} & (j=l-\frac{1}{2}) \end{cases}$$

（证明）本题的$\hat{\Lambda}_l^+,\hat{\Lambda}_l^-$是两个带有相加的常数分子的算符

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{l} = \hat{\sigma}_x\hat{l}_x + \hat{\sigma}_y\hat{l}_y + \hat{\sigma}_z\hat{l}_z$$

根据总角动量理论内，前两算符可变形如下：

$$\begin{cases} \hat{\Lambda}_l^+ = \dfrac{l+1}{2l+1} + \dfrac{1}{2l+1}\vec{\sigma}\cdot\vec{l} = \dfrac{1}{2l+1} + \dfrac{1}{2l+1}\cdot(\hat{j}^2-\hat{l}^2-\hat{s}^2) & (1) \\ \hat{\Lambda}_l^- = \dfrac{1}{2l+1} - \dfrac{1}{2l+1}\vec{\sigma}\cdot\vec{l} = \dfrac{1}{2l+1} - \dfrac{1}{2l+1}\cdot(\hat{j}^2-\hat{l}^2-\hat{s}^2) & (2) \end{cases}$$

假设$l>m$，试将（1）式运算于合成角动量的本征态ϕ_{ljmj}（$\hat{l}^2,\hat{j}^2$共同本征态），首先，

对于 $j=l+\dfrac{1}{2}$ 有：

$$
\begin{aligned}
\hat{\Lambda}_l^+\phi_{ljmj} &= \left\{\frac{l+1}{2l+1}+\frac{1}{2l+1}\cdot(\hat{j}^2-\hat{l}^2-\hat{s}^2)\right\}\begin{bmatrix} a\mathrm{Y}_{l,m} \\ b\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{2l+1}\begin{bmatrix} a\left\{(l+1)+j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right\}\mathrm{Y}_{l,m} \\ b\left\{(l+1)+j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right\}\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{2l+1}\begin{bmatrix} a\left\{(l+1)+l(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})-l(l+1)-\frac{3}{4}\right\}\mathrm{Y}_{l,m} \\ b\left\{(l+1)+l(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})-l(l+1)-\frac{3}{4}\right\}\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{bmatrix} \qquad (3) \\
&= \frac{1}{2l+1}\begin{bmatrix} (2l+1)a\mathrm{Y}_{l,m} \\ (2l+1)b\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{bmatrix} \\
&= \phi_{ljmj}
\end{aligned}
$$

式中 $a\equiv\sqrt{\dfrac{l+m+1}{2l+1}}$；$b\equiv\sqrt{\dfrac{l-m}{2l+1}}$。

其次，可对于 $j=l-\dfrac{1}{2}$ 的本征态计算：

$$
\hat{\Lambda}_l^+\phi_{l,j,m,j} = \{\frac{l+1}{2l+1}+\frac{1}{2l+1}(\hat{j}^2-\hat{l}^2-\hat{s}^2)\}\begin{bmatrix} -bY_{l,m} \\ aY_{l,m+1}\end{bmatrix}
$$

$$
=\frac{1}{2l+1}\begin{bmatrix} -b\{l+1+(l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})-l(l+1)-\frac{3}{4}\}Y_{l,m} \\ a\{l+1+(l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})-l(l+1)-\frac{3}{4}\}Y_{l,m+1}\end{bmatrix}=0
$$

又因为 $\Lambda_l^+ + \Lambda_l^- = 1$，所以

$$
\hat{\Lambda}_l^-\phi_{l,j,m,j} = (1-\hat{\Lambda}_l^+)\phi_{l,j,m,j} = \begin{cases} 0 & (j=j+\frac{1}{2}) \\ \phi_{l,j,m,j} & (j=l-\frac{1}{2}) \end{cases}
$$

8.24——6.33
8.25——6.35
8.26——6.35，6.36
8.27——6.43
8.28——6.44
8.29——6.47
8.30——6.45
8.31——6.48
8.32——6.49

P453—— 9.1
P454——3.3
9.1——6.4
9.2——6.8
9.3——6.2
9.4——6.17
9.5——6.18
9.6——6.5
9.7——6.6
9.8——6.15
9.9——6.19
9.10——6.20
9.11——6.9
9.12——6.14
9.13——6.5，6.9

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

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

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

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

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

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］

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

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

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

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

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

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 $b = 1/\sqrt{2}$。

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

同理，将 $\lambda = 0, -1$ 分别代入（2），可求得

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

第十章 定态微扰论

P499——8.1

P515——8.23

P515 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

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

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

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：

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

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

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

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

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

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

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

分块矩阵

（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：

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

$E_{35}=E_3^{(0)}+9e\varepsilon a$。

10.1 设非简谐振子的 Hamilton 量表为 $H=H_0+H'$

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2u}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}u\omega^2x^2, \quad H'=\beta x^3 \text{（}\beta\text{ 为实常数）}$$

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

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

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

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

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

计算一级微扰：$E_n^{(1)}=\left\langle\psi_n\middle|H'\middle|\psi_n\right\rangle=\beta\left\langle\psi_n\middle|x^3\middle|\psi_n\right\rangle=0$。

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

计算二级微扰，只有下列四个矩阵元不为0：

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

$$\left\langle\psi_{n-1}\middle|\beta x^3\middle|\psi_n\right\rangle=\frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3}\cdot3n\sqrt{n}=H'_{n-1,n}$$

$$\left\langle\psi_{n+1}\middle|\beta x^3\middle|\psi_n\right\rangle=\frac{\beta}{2\sqrt{2}\alpha^3}\cdot3(n+1)\sqrt{n+1}=H'_{n+1,n}$$

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

计算 $|H'_{kn}|^2$：$|H'_{n-3,n}|^2=\dfrac{n(n-1)(n-2)\beta^2}{8\alpha^6}$，$|H'_{n-1,n}|^2=9n^3\beta^2/8\alpha^6$

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

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

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

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

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

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

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

10.1 设非简谐振子的哈密顿量为：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2 \qquad （\beta\text{为常数}）$$

取 $\hat{H}_0=-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2$ ， $H'=\beta x^2$， 试用定态微扰论求其能量及能量本征函数。

（解）一级能量本征值修正量：本题是一维、无简并的，按本章§9.1公式 $\sum_k^{(1)}=W_{kk}$ ，从§3.3 知道一维谐振子波函数是：

$$\psi_k(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^k\cdot k!}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}H_k(\alpha x) ,$$

但 $\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ （1）

$$E_k^{(1)}=\int_x\psi_k^*\left(\beta x^3\right)\psi_k dx$$

$$=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^k k!}\int_{x=-\infty}^{x=\infty}\beta x^3e^{-\alpha^2x^2}H_k^2(\alpha x)dx \qquad （2）$$

但根据§3.3，一维谐振子波函数中的厄密多项式是有宇称的（或奇或偶），因而 $H_n^2(\alpha x)$ 必定是个偶函数。（2）式中被积函数就应是奇函数，又因积分限等值异号，结果有：

$$E_k^{(1)}=0$$

一级波函数修正值：据§9.1 公式[12b]

$$\psi_k=\psi_k^0+\sum{}'\frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}\psi_n^{(0)} \qquad （3）$$

$$E_k^{(0)}=(k+\frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (3)'$$

微扰矩阵元 $H'_{nk}=\lambda W_{nk}$ 要涉及厄密多项式相乘积的积分，为此利用关于 $\psi_k^{(0)}$ 的一个递推公式（ $p.90$，问题 2）：

$$x\psi_n^{(0)}=\frac{1}{\alpha}(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}^{(0)}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}^{(0)}) \qquad （4）$$

将此式遍乘x，再重复使用（4）

$$x^2\psi_n^{(0)}=\frac{1}{\alpha}(\sqrt{\frac{n}{2}}x\psi_{n-1}^{(0)}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}x\psi_{n+1}^{(0)})$$

$$=\frac{1}{\alpha^2}[\sqrt{\frac{n}{2}}(\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2}^{(0)}+\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n^{(0)})$$

$$+\sqrt{\frac{n+1}{2}}(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_n^{(0)}+\sqrt{\frac{n+2}{2}}\psi_{n+2}^{(0)})$$

$$=\frac{1}{\alpha^2}\{\sqrt{\frac{n(n-1)}{4}}\psi_{n-2}^{(0)}+(n+\frac{1}{2})\psi_n^{(0)}$$

$$+\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\psi_{n+2}^{(0)}\} \qquad (5)$$

再将此式遍乘x，重复使用（4）式

$$x^3\psi_n^{(0)}=\frac{1}{\alpha^2}\{\sqrt{\frac{n(n-1)}{4}}x\psi_{n-2}^{(0)}$$

$$+(n+\frac{1}{2})x\psi_n^{(0)}+\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\psi_{n+2}^{(0)}\}$$

$$=\frac{1}{\alpha^3\sqrt{8}}\{\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3}^{(0)}+3n\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)} \qquad （6）$$

$$+3(n+1)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}^{(0)}\}$$

利用公式（6）来计算微扰矩阵元W_{nk}：

$$W_{nk}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\beta x^2\psi_k dx$$

将（6）式中的n换成k代入前一式，并注意$\psi_n^{(0)}$是正交归一化的，即

$$\int\psi_n^{0*}(x)\psi_k^{(0)}(x)dx=\delta_{nk}$$

$$W_{nk}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^{(0)}\cdot\beta\cdot\frac{1}{\sqrt{8}a^3}\{\sqrt{k(k-1)(k-2)}\psi_{n-3}^{(0)}$$

$$+3k\sqrt{k}\psi_{k-1}^{0}+3(k+1)\sqrt{k+1}\psi_{k+1}^{0}$$

$$+\sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}\psi_{k+3}^{(0)}\}dx$$

$$=\frac{\beta}{\sqrt{8}\alpha^2}\{\sqrt{k(k+1)(k-2)}\delta_{n,k-3}+3k\sqrt{k}\delta_{n,k-1}$$

$$+3(k+1)\sqrt{k+1}\delta_{n,k+1}$$

$$+\sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}\delta_{n,k+2}\} \qquad (7)$$

k是固定指标，故W_{nk}只有当n取下述四值时不为零，即

$n = k-3$， $k-1$， $k+1$， $k+3$ (8)

但要注意，当n取用一个值时，就不能再取其他值，所以n取定后W_{nk}的非零值是（7）式中某个δ的系数。（3）的求和是式只有四项。

$$E_k^{(0)} - E_n^{(0)} = (k+\frac{1}{2})\hbar\omega - (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$
$$= (k-n)\hbar\omega$$

有：$E_k^{(0)} - E_{k-2}^{(0)} = 3\hbar\omega$ ， $E_k^{(0)} - E_{k-1}^{(0)} = \hbar\omega$ ，

$$E_k^{(0)} - E_{k+1}^{(0)} = -\hbar\omega \quad , \quad E_k^{(0)} - E_{k+3}^{(0)} = -3\hbar\omega \qquad (9)$$

将（7）和（9）所决定的诸值代入（3）

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \sum{}' \frac{H'_{nx}}{E_k^0 - E_k^{(0)}}\psi_n^{(0)} = \psi_k^{(0)} + \frac{H'_{k-2,k}}{E_k^{(0)} - E_{k-2}^{(0)}}\psi_{k-3}^{(0)}$$
$$+ \frac{H'_{k-1,k}}{E_k^{(0)} - E_{k+3}^{(0)}}\psi_{k+3}^{(0)}$$

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \cdot\frac{\beta}{\sqrt{8}a^3\hbar\omega}\{\frac{1}{3}\sqrt{k(k-1)(k-2)}\psi_{n-3}^{(0)}$$
$$+3k\sqrt{k}\psi_{k-1}^0 - 3(k+1)\sqrt{k+1}\psi_{k+1}^0$$
$$-\frac{1}{3}\sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}\psi_{k+3}^{(0)}\} \qquad (10)$$

二能级量本征值修正量：按二级近似式是

$$E_k = E_k^{(0)} + H'_{kk} + \sum_n \frac{(H'_{nk})^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \qquad (11)$$

其中$H'_{kk} = \lambda W_{kk} = 0$，二级修正量是个数量的和，它也用（7）式来计算，并也包括四个项：

$$E_k = (k+\frac{1}{2})\hbar\omega + \frac{H'^2_{k-3,k}}{E_k^{(0)} - E_{k-3}^{(0)}} + \frac{H'^2_{k-1,k}}{E_k^{(0)} - E_{k-1}^{(0)}}$$
$$+ \frac{H'^2_{k+1,k}}{E_k^{(0)} - E_{k+1}^{(0)}} + \frac{H'^2_{k+3,k}}{E_k^{(0)} - E_{k+3}^{(0)}}$$
$$= (k+\frac{1}{2})\hbar\omega + \frac{\beta^2}{8\alpha^6}\cdot\frac{1}{\hbar\omega}\{\frac{1}{3}k(k-1)(k-2)$$
$$+9k^2 - 9(k+1)^2 - \frac{1}{3}(k+1)(k+2)(k+3)\}$$

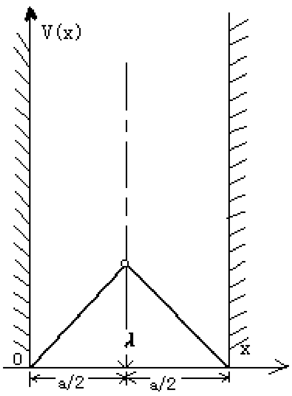
$$= (k+\frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{\beta^2}{8\alpha^6\hbar\omega}(30k^2 + 30k + 1)$$

10.2——8.10
10.3——8.11
10.4——8.36
10.5——8.14
10.6——8.6

10.7 一维无限深势阱（$0<x<a$）中的粒子受到微扰：

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

的作用，求基态能量的一级修正。



（解）本题是一维无简并问题，无微扰时的能量本征函数

$$\psi_k^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi x}{a} \qquad (1)$$

能量本征值

$$E_k^{(0)}=\frac{k^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \qquad (2)$$

对基态 $k=1$，计算能量的一级修正量时，因微扰 $H^{/}$ 是分段连续的，因而要求两个积分式的和

$$H^{/}=\int_0^{\frac{a}{2}}\psi_0^* H^{/}\psi_0 dx+\int_{\frac{a}{2}}^{a}\psi_0^* H^{/}\psi_0 dx$$

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

$$=\frac{2\lambda}{a^2}\{\int_0^{\frac{a}{2}}(1-\cos\frac{2\pi x}{a})xdx+\int_{\frac{a}{2}}^{a}(1-\cos\frac{2\pi x}{a})(a-x)dx\} \qquad (3)$$

利用定积分公式：

$$\int_x x\cos px=\frac{x}{p}\sin px+\frac{1}{p^2}\cos px \qquad (4)$$

代入（3）；得

$$E_{11}^{(1)}=H_{11}^{/}=\lambda(\frac{1}{2}+\frac{2}{\pi^2})$$

附带地指出：对于本题的粒子的激发态能量的一级修正量计算，可以用同样步骤得到，第 K 个激发态的一级修正：

$$E_{11}^{(1)}=\frac{2\lambda}{a^2}\{\int_0^{\frac{a}{2}}(1-\cos\frac{2k\pi x}{a})xdx+\int_{\frac{a}{2}}^{a}(1-\cos\frac{2k\pi x}{a})(a-x)dx\}$$

$$=\lambda\{\frac{1}{2}+[1-(-1)^k](\frac{1}{k\pi})^2\}$$

10.7 一维无限深势阱$\left(0<x<a\right)$中的粒子，受到微扰$H^{'}$作用

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

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

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

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

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

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

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

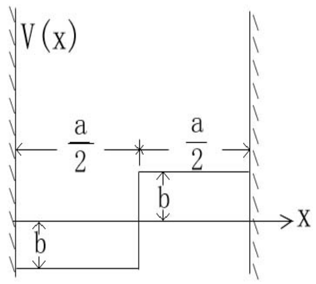
$$v=\pi-\frac{\pi x}{a},\quad x=a-\frac{av}{\pi},\quad dx=\frac{-a}{\pi}dv。$$

代入上式完成积分，

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

10.8 在一维无限深势阱$V(x)=\begin{cases}0(0<x<a)\\ \infty(x>a\quad x<0)\end{cases}$中运动的粒子，受到微扰$H'$的作用，

$$H'(x)=\begin{cases}-b(0<x<\dfrac{a}{2})\\ b(\dfrac{a}{2}<x<a)\end{cases}$$，讨论粒子在空间几率分布的改变。



（解）一维无限深势阱的波函数的形式与所选择的参考系的原点有密切关系，若选取势阱一端作为原点则能量的本征函数可以是形式简单的，作如此选择时，若无微扰，则能量的本征函数：

$$\psi_k^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi x}{a}\quad（k=1, 2, 3, \cdots\cdots）\qquad(1)$$

能量的本征值： $E_k^{(0)}=\dfrac{k^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$

本题主要计算本征函数的近似值，计算微扰距阵元：

$$H'_{nk}=\int_0^{a/2}\psi_\pi^{(0)}*(-b)\psi_k^{(0)}dx+\int_{a/2}^{a}\psi_\pi^{(0)}*(b)\psi_k^{(0)}dx$$

$$=-\frac{2b}{a}\int_0^{a/2}\sin\frac{k\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx+\frac{2b}{a}\int_{a/2}^{a}\sin\frac{k\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}dx$$

$$=\frac{b}{a}\int_0^{a/2}\{\cos\frac{(k+n)\pi x}{a}-\cos\frac{(k-n)\pi x}{a}\}dx+\frac{b}{a}\int_{a/2}^{a}\{\cos\frac{(k-n)\pi x}{a}-\cos\frac{(k+n)\pi x}{a}\}dx$$

$$=\frac{b}{\pi}\left|\frac{\sin\frac{(k+n)\pi x}{a}}{k+n}-\frac{\sin\frac{(k-n)\pi x}{a}}{k-n}\right|_0^{a/2}+\frac{b}{\pi}\left|\frac{\sin\frac{(k-n)\pi x}{a}}{k-n}-\frac{\sin\frac{(k+n)\pi x}{a}}{k+n}\right|_{a/2}^{a}$$

$$=\frac{2b}{\pi}\{\frac{\sin(k+n)\frac{\pi}{2}}{k+n}-\frac{\sin(k-n)\frac{\pi}{2}}{k-n}\}\qquad（3）$$

最后一式的值与 k, n 的奇偶有关，但要注意到，k+n 与 k-n=（k+n）-2n 的奇偶性是相同的，此外，若设 p 是个任意整数（奇偶不论），则有：

$$\sin(2p+1)\frac{\pi}{2}=(-1)^p\qquad(p=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

因此（3）式可归成二种情形

（1） 若 k+n=奇数，令 k+n=2p+1，则有

$$p=\frac{k+n-1}{2}$$ 因此

若 k+n=奇数，有

$$H'_{nk}=\frac{2b}{\pi}(\frac{1}{k+n}-\frac{1}{k-n})(-1)^{\frac{k+n-2}{2}}=\frac{4bn}{\pi(n^2-k^2)}(-1)^{\frac{k+n-2}{2}}\qquad（4）$$

若 k+n=偶数，显然有 $H'_{nk}=0$ (5)

无简并的微扰中，波函数一级修正量是：

$$\psi_k^{(1)}=\sum_{\substack{n\\n=k}}\frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}\psi_n^{(0)}$$

其中 $E_k^{(0)}-E_n^{(0)}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}[k^2-n^2]$ （6）

考虑到（4）（5）的结果，连同（6）式代入 $\psi_k^{(1)}$ 的公式，得最后结果为两个无穷级数如下：

k 为奇数时 $\psi_k^{(1)}=\sum_{n=0,2,\cdots}\frac{8\mu a^2bn}{\hbar^2\pi^3(k^2-n^2)^2}(-1)^{\frac{n+k+1}{2}}\cdot\psi_n^{(0)}$

k 为偶数时 $\psi_k^{(1)}=\sum_{n=1,3,\cdots}\frac{8\mu a^2bn}{\hbar^2\pi^3(k^2-n^2)^2}(-1)^{\frac{n+k+1}{2}}\cdot\psi_n^{(0)}$

10.10 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

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

Ze 为核电荷，试把非点电荷效应看成微扰，

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

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

$$e^{-2Zr/a}\approx1$$

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

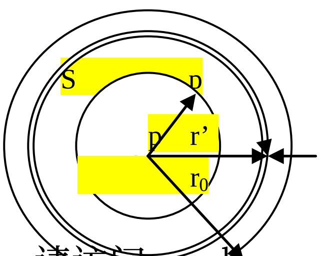
其中 $$E_{1s}^{(0)}=-\frac{Z^2e^2}{2a}$$

为类氢离子的基态能级。

10.10 实际原子核不是一个点电荷，它有一定大小，可以视为一个均匀分布的球，测量表明，电荷分布半径

$R=r_{0p}Z^{\frac{1}{3}}$ $\qquad r_{0p}=1.64\times10^{-23}$厘米

试用微扰论估计这种（非点电荷）效应对原子的 1s 能级的修正（设 1s 电子波函数近似取为类氢原子的 1s 在态波函数。）



（解）根据电学原理，本题的困难在于确立正确的微扰算符，首先假定全部电荷 Ze 集中在一个几何点（r=0）所算得的基态能

量是零级近似（最粗略的）。这时不论 r 的大小如何 $r\in(0,\infty)$ 电势用下式表示：

$$V(r)=\frac{Ze}{r} \qquad (1)$$

表示。(这里不考虑电荷正负性)

但若要精确求核的电势能，用一个半径r_0，具有总电荷Ze的均匀带电球来代表核，这时球所产生的电势 $v(r)$ 就复杂些，按电学原理，点P的势能随着它在球面外还是球面内而有不同的计算式，设一点的位矢是 $\vec{r}$ 。

（a） 在球内 $r<r_0$：依电学原理整个球对 P(r)一点所生电荷由二部分构成，过 P 作一球面 S,S 内小球所生电势与全部集中在中心 O 处的电势相同，小球的体电荷为 $Ze(\frac{r}{r_0})^3$,所生电势

$$v_1=Ze(\frac{r}{r_0})^3\cdot\frac{1}{r}=Ze\frac{r^2}{r_0^3} \qquad (2)$$

在球面S外面的厚度 r_0-r 的球壳形电荷对P点产生的电势则需分层计算，将SS_0这个厚球壳壳分割成同心的薄球壳，每个薄球壳半径r'，厚度dr'，(但r'>r）这薄球壳对P所生电势就和该球壳的电荷在中心O处所产生的电势一样，设电荷密度为 ρ ，则：

薄球壳对 P 的电势

$$dv_2=\frac{4\pi r'^2\,dr'\cdot\rho}{r'}=4\pi r'\,dr'\cdot\rho$$

整个厚球壳（SS_0）电荷对P点的电势

$$v_2=\int_{r_1=r}^{r_0}dv_2=4\pi\rho\int_{r'=r}^{r'=r_0}r'dr'=2\pi\rho(r_0^2-r^2)$$

$$=2\pi\frac{Ze}{\frac{4}{3}\pi r_0^2}(r_0^2-r^2)$$

$$=\frac{3}{2}Ze(\frac{3}{r_0}-\frac{r^2}{r_0^3})\cdots\cdots(3)$$

因此，在球面S_0之内，一点 $P(\vec{r})$ 的电势是：

$$v(r)=v_1(r)+v_2(r)=\frac{Zer^3}{r_0^3}+\frac{3Ze}{2}(\frac{1}{r_0}-\frac{r^2}{r_0^2})$$

$$=\frac{Ze}{2}(\frac{3}{r_0}-\frac{r^2}{r_0^3}) \qquad (4)$$

(b)在球外$r>r_0$:根据电学原理，在球外任一点P'(r)处的电势，就和全部球形电荷（半径r_0）

集中在中心）处所产生的一样，即

$$v(r)=\frac{Ze}{r} \qquad (4)$$

根据（1）（3）（4）可确立微扰算符为：（加负号因电子电荷-e 为负）

$$H'=\lambda W=\begin{cases}-\frac{Ze^2}{2}(\frac{3}{r_0}-\frac{r^2}{r_0^3})-(-\frac{Ze^2}{r})(r<r_0)\\ 0 \qquad (r>r_0)\end{cases} \qquad (5)$$

其次根据这个微扰来计算基态（1s）原子的一级能量修正，假设这种原子的基态能级和氢原子一样，即纵使原子是多电子的，但也可忽去内层电子的屏蔽效应，无微扰能级是：

$$E^{(0)}=-\frac{Ze^2}{2a}\cdots\cdots(6)$$

波函数和基态氢原子一样是：

$$\psi_{00}^{(0)}=\sqrt{\frac{Z}{\pi a^3}}e^{-\frac{Zr}{a}}\cdots\cdots(7)$$

按无简并微扰论：

$$H_{00}^{'}=\iiint_\tau \psi_{00}^{(0)^*}H'\psi_{100}d\tau$$
$$=(\sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}})^2\iiint_\tau e^{-\frac{2Zr}{a}}\cdot\frac{Ze^2}{r}(1-\frac{3}{2}\frac{r}{r_0}+\frac{1}{2}\frac{r^3}{r_0^3})r^2drd\Omega$$
$$=\frac{Z^4e^2}{\pi a^3}\int_0^{r_0}e^{-\frac{2Zr}{a}}[1-\frac{3}{2}\frac{r}{r_0}+\frac{1}{2}\frac{r^3}{r_0^3}]rdr\cdot\iint_\Omega d\Omega\cdots\cdots(8)$$

根据题意原子核所折合的球体是 10^{-13}cm的数量级，而玻尔半径 $a\sim0.5\times10^{-8}cm$，二者相差 10^5 倍，因而当 $r<r_0$ 时，$\frac{r}{a}$ 是个极小的数量，在（8）的积分式中近似地有：

$$e^{-\frac{2Ze}{a}}\approx1$$

于是（8）式近似地成为：

$$H_{00}^{'}=\frac{Z^4e^2}{\pi a^3}\int_{r=0}^{r_0}[1-\frac{3}{2}\frac{r}{r_0}+\frac{1}{2}\frac{r^3}{r_0^3}]rdr\cdot4\pi$$
$$=\frac{4Z^4e^2}{a^3}\left|\frac{r^2}{2}-\frac{1}{2}\frac{r^3}{r_0}+\frac{1}{10}\frac{r^5}{r_0^3}\right|_0^{r_0}$$
$$=\frac{2}{5}\frac{4Z^4e^2r_0^2}{a^3}\cdots\cdots(9)$$

10.9——8.8

10.10——8.16

10.11——8.16

10.12——8.17
10.13——8.19
10.14——8.22
10.15——8.25
10.16——8.24
10.17——8.33
10.18——8.34
10.19——8.39

10.20 设在H^0表象中，$\hat{H}$ 的矩阵为：

$$H=\begin{bmatrix} E_1^{(0)} & 0 & a \\ 0 & E_2^{(0)} & b \\ a^* & b^* & E_3^{(0)} \end{bmatrix} \quad E_1^{(0)}<E_2^{(0)}<E_3^{(0)} \qquad (1)$$

试用微扰论求能量的二级修正。

（解）本题的意义在于：并不知道无微扰算符 $\hat{H}_0$，微扰 $\hat{H}'$ 和总的（一级近似）哈氏算符 $\hat{H}$ 的形式，也不知道零阶近似波函数 $\psi_n^{(0)}$ 的形式，知道的是在 $\hat{H}^0$ 表象中 $\hat{H}=\hat{H}^0+\hat{H}'$ 的矩阵。但仅仅根据这矩阵的具体形式，按习惯用代表文字（本课本内）的涵义，可以知道几点：

（1）能量本征值是分立的（因为用分立矩阵表示，若是连续能量本征值，不能用此表示法），无微扰能量本征值有三个 $E_1^{(0)}E_2^{(0)}E_3^{(0)}$，本征函数 $\psi_1^{(0)},\psi_2^{(0)},\psi_3^{(0)}$。因 $\hat{H}^0\psi_1^{(0)}=E_1^{(0)}\psi_1^{(0)}$，$H_{11}^0=\int_\tau \psi_1^{(0)}\hat{H}^0\psi_1^{(0)}d\tau=E_1^{(0)}$

（2）微扰算符的的矩阵是

$$H'=\begin{bmatrix} H_{11}' & H_{12}' & H_{13}' \\ H_{21}' & H_{22}' & H_{23}' \\ H_{31}' & H_{32}' & H_{33}' \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a^* & b^* & 0 \end{bmatrix} \qquad (2)$$

根据无简并微扰论，一级能量修正量是：H_{kk}

从（2）中看出，对角位置的矩阵元全是零，因此一级修正量

$$E_1^{(0)}=E_2^{(0)}=E_3^{(0)}=0$$

又二级能量公式是：

$$E_k^{(2)}=\sum_{\substack{n \\ n\neq k}}\frac{(H_{nk}')^2}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}$$

所需的矩阵元 H_{nk}' 已经直接由式（2）表示出，毋需再加计算，因而有：

$$E_1^{(2)}=\sum_n \frac{(H'_{n1})^2}{E_1^{(0)}-E_n^{(0)}}=\frac{(H'_{21})^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{(H'_{31})^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}=\frac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}$$

$$E_2^{(2)}=\sum_n \frac{(H'_{n2})^2}{E_2^{(0)}-E_n^{(0)}}=\frac{(H'_{12})^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{(H'_{32})^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}=\frac{|b|^2}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}$$

$$E_3^{(2)}=\sum_n \frac{(H'_{n3})^2}{E_3^{(0)}-E_n^{(0)}}=\frac{(H'_{23})^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{(H'_{13})^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}$$

$$=\frac{|a|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|b|^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

10.21 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 为实数）

用微扰论求解能级修正（准到二级近似），并与严格解（把 H 矩阵对角化）比较。

解：（1）由 H' 表达式可见，微扰哈密顿的矩阵元为

$$H'_{11}=H'_{22}=a，\quad H'_{12}=H'_{21}=b$$

代入能量的微扰论二级近似公式

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

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

（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$\left(a-E\right)$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。

[15]一体系在无微扰时有两条能级，其中一条时二重简并，在H_0表象中

$$H_0=\begin{pmatrix}E_1^{(0)}&0&0\\0&E_1^{(0)}&0\\0&0&E_1^{(0)}\end{pmatrix}\qquad E_2^{(0)}>E_1^{(0)}\tag{1}$$

在计及微扰后哈密顿量表示为：

$$H=\begin{pmatrix}E_1^{(0)}&0&a\\0&E_1^{(0)}&b\\a^*&b^*&E_2^{(0)}\end{pmatrix}\tag{2}$$

（1） 用微扰论求 H 本征值准到二级近似。

（2） 把$\hat{H}$严格对角化，求 H 的精确本征值，然后

（解）（1）将 H，H'比较知道

$$H'=H-H_0=\begin{pmatrix}0&0&a\\0&0&b\\a^*&b^*&0\end{pmatrix}\tag{3}$$

本题的微扰矩阵（3）是简并的波函数（零级）计算得来的，若像无简并微扰论那样计算二级能量修正是可能的，但近似程度差，从（3）看出一级能量修正为零，准确到二级修正量的能量本征值是：

$$E_1=E_1^{(0)}+\frac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}},E_1^{'}=E_1^{(0)}+\frac{|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}},$$

$$E_2=E_2^{(0)}+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

但若将（2）看作准确的包括微扰的算符看待，则又能用分立表象本征函数的矩阵解法，设定一个本征矢（三个元素的单列矩阵）和一个本征值λ，方程式是

$$\begin{pmatrix}E_1^{(0)}&0&a\\0&E_1^{(0)}&b\\a^*&b^*&E_2^{(0)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix}$$

即$$\begin{pmatrix}E_1^{(0)}-\lambda&0&a\\0&E_1^{(0)}-\lambda&b\\a^*&b^*&E_2^{(0)}-\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix}=0$$

久期方程式是：

$$(E_1^{(0)}-\lambda)^2(E_2^{(0)}-\lambda)-(|a|^2+|b|^2)(E_1^{(0)}-\lambda)=0$$

变形：$(\lambda-E_1^{(0)})[\lambda^2-(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})\lambda+E_1^{(0)}E_2^{(0)}-|a|^2-|b|^2]=0$

$$\lambda_1=E_1^{(0)}\qquad \lambda_2,\lambda_3=\frac{E_1^{(0)}+E_2^{(0)}}{2}\pm\sqrt{\frac{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}{4}+|a|^2-|b|^2}$$

$$=\frac{E_1^{(0)}+E_2^{(0)}}{2}\pm\frac{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}{2}\{1+\frac{2(|a|^2+|b|^2)}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}-\frac{2(|a|^2+|b|^2)^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^4}+\cdots\cdots\}$$

$$\lambda_2=E_1^{(0)}+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}-\frac{(|a|^2+|b|^2)^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^3}+\cdots\cdots$$

$$\lambda_3=E_2^{(0)}-\frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{(|a|^2+|b|^2)^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^3}+\cdots\cdots$$

可以和前一种近似解比较（与前题类似）其误差

$$\Delta E_1=\Delta E_1^{'}<\frac{|b^2|}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

$$\Delta E_2 < \frac{(|a|^2 + |b|^2)^2}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}$$

10.22——8.41

10.23 设在 H_0 表象中，H_0 的矩阵表示为：

$$H_0 = \begin{pmatrix} 2\varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 2\varepsilon_2 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & 2\varepsilon_3 & 0 & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & 2\varepsilon_n \end{pmatrix}$$

是 $n \times n$ 矩阵，$\varepsilon_i \neq \varepsilon_j$，又设微扰 $H^{'}$ 表示成

$$H^{'} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & \cdots\cdots -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & \cdots\cdots -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & \cdots\cdots -1 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots -1 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots -1 \end{pmatrix}$$

即所有元素都是—1，求 $H = H_0 + H^{'}$ 本征值和本征函数。

（提示）久期方程式为：

$$\Delta \equiv \begin{vmatrix} \lambda_1 + 1 & 1 & 1 & 1\cdots\cdots \\ 1 & \lambda_2 + 1 & 1 & 1\cdots\cdots \\ 1 & 1 & \lambda_3 + 1 & 1\cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix} = 0$$

其中 $\lambda_i = E - 2\varepsilon_j$ 化简后得到

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda_i} + 1 = 0 \quad 即 \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{E - 2\varepsilon_i} = -1$$

用图解法或数字计算法是很方便的。

（解）提示部分已完成了解题的第一步骤，有两种证法。

第一法：现在从行列式（3）开始，鉴于该行列式除掉对角线元素有不同矩阵元以外，其余部分元素全是 1，因而可以用列之间的相减运算，使这个行列式变形，使它成为除边缘行、边缘列，以及对角线以外，其余元素都是 0 的行列，试保持第一列不动，将第二、三、四、``````n 列分别减去第一列元素，结果是：

$$\begin{vmatrix} \lambda_1+1 & -\lambda_1 & -\lambda_1 & -\lambda_1 & \cdots\cdots & -\lambda_1 \\ 1 & \lambda_2 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 1 & 0 & \lambda_3 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \lambda_4 & \cdots\cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\cdots & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & \lambda_n \end{vmatrix}$$

再将整个行列式依第一行展开成 n 个 $(n-1)$ 阶的子行列式：

$$(\lambda_1+1)\begin{vmatrix} \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & 0 & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix} + \lambda_1\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & \lambda_3 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & \lambda_4 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & 0 & \lambda_5 & 0 & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix}$$

$$-\lambda_1\begin{vmatrix} 1 & \lambda_3 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & \lambda_4 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & 0 & \lambda_5 & 0 & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix} + \lambda_1\begin{vmatrix} 1 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & 0 & \lambda_5 & 0 & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix}$$

$$\cdots\cdots(-1)^{n-1}\lambda\begin{vmatrix} 1 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 1 & 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & \cdots\cdots & 0 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 \end{vmatrix}$$

第一个行列式不动，在第二行列式中第一行不动，但从其余各行减去第一行。在第三行列式中使第二行不动，其余各行减去第二行，依次类推……到最后一个，变成以下形状：

$$(\lambda_1+1)\begin{vmatrix} \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} + \lambda_1\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}$$

$$-\lambda_1\begin{vmatrix} 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & 0 & \cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots \end{vmatrix} - \cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$+(-1)^{n-1}\lambda_1\begin{vmatrix} 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & \cdots\cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots 0 \end{vmatrix}$$

根据行列式性质，若将任两行对调位置，并且适当变更符号，则行列式值不变，在前式中第一行列式不变，第二个也不变，第三个的一二行对调……则全部化成为角化行列式，就能计算各行列式的值，结果是：

$$\Delta=(\lambda_1+1)\lambda_2\lambda_3\lambda_4\cdots\cdots\lambda_5+\lambda_1\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n+\cdots+\lambda_1\lambda_2\lambda_3+\cdots\lambda_{n-1}$$

$$=\lambda_1\lambda_2\lambda_3\cdots\lambda_n\{1+\frac{1}{\lambda_1}+\frac{1}{\lambda_2}+\cdots\cdots+\frac{1}{\lambda_n}\}$$

$$=\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n\{1+\sum_i^n\frac{1}{\lambda_i}\}$$

第二法：从行列式（3）开始，将第一行减去第二行，但第二行以下全部不动并用$\Delta(k,n)$代表对角元素是$(\lambda_k+1,\cdots\lambda_n+1)$，其余元素是 1 的那种行列式，从（3）看出$\Delta=\Delta(1,n)$，它变形为：

$$\Delta(1,n)=\begin{vmatrix} \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & 1 & \cdots\cdots & 1 \\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & 1 & \cdots\cdots & 1 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix}$$

$$=\lambda_1\begin{vmatrix} \lambda_2+1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \lambda_3+1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \lambda_4+1 & \cdots & 1 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix}+\lambda_2\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \lambda_3+1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & \lambda_4+1 & \cdots & 1 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \end{vmatrix}$$

将第二行列式的第一行不动，第二行起每行都减去第一行，结果有：

$$\Delta(1,n)=\lambda_1\Delta(2,n)+\lambda_2\begin{vmatrix}1 & 1 & 1 & 1 & \cdots\cdots & 1\\ 0 & \lambda_3 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0\\ 0 & 0 & \lambda_4 & 0 & \cdots\cdots & 0\\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots\end{vmatrix}$$

$$=\lambda_1\Delta(2,n)+\lambda_2\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n$$

重复运用上述递推式：

$$\Delta(1,n)=\lambda_1\{\lambda_3\Delta(3,n)+\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n\}+\lambda_2\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n$$

$$=\lambda_1\lambda_2\Delta(3,n)+\lambda_1\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n+\lambda_2\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n$$

$$=\lambda_1\lambda_2\{\lambda_2\Delta(4,n)+\lambda_4\lambda_5\cdots\lambda_n\}$$

$$+\lambda_1\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n+\lambda_2\lambda_3\lambda_4\cdots\lambda_n$$

$$=\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n\{1+\sum_i\frac{1}{\lambda_i}\}$$

证得相同结论。因此本题的本征方程式成为：

$$\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n\{1+\sum_i\frac{1}{\lambda_i}\}=0 \tag{4}$$

或 $$(E-2\varepsilon_1)(E-2\varepsilon_2)\cdots(E-2\varepsilon_n)\{1+\sum_n\frac{1}{E-2\varepsilon_n}\}=0 \tag{5}$$

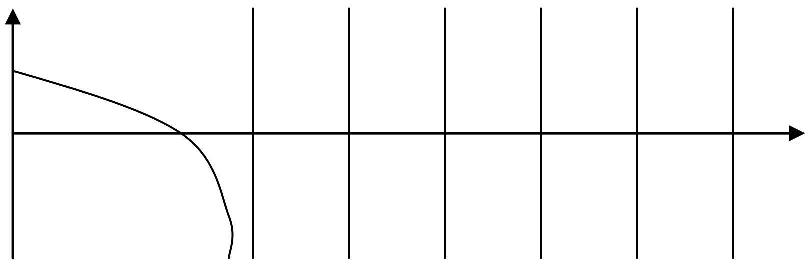
（5）是能量本征值的 n 次方程式：

$$E^n+A_1E^{n-1}+A_2E^{n-2}\cdots A_n=0$$

这是高次方程式，关于 $\varepsilon_1,\varepsilon_2\cdots$ 等题目又无任何提示，只能用些图解法解题在不失普遍性的

约定下，设 $\varepsilon_1>\varepsilon_2>\varepsilon_3\cdots>\varepsilon_n$ 画以下曲线：

$$f(E)=1+\frac{1}{E-2\varepsilon_1}+\frac{1}{E-2\varepsilon_2}+\cdots\cdots+\frac{1}{E-2\varepsilon_n}$$



这种曲线的一般形式见附图 $x=2\varepsilon_1,2\varepsilon_2,-2\varepsilon_n$ 等位置是 $f(E)$ 曲线的各条渐近线，各条曲线

与 $x=E_1,E_2,\cdots E_n$ 就是所求的本征值，这种方法对数字问题有效。除图解法外，

还可以用数字近似算法。求得 E 后再求本征函数。

设本征函数是：$\begin{pmatrix} C_1 \\ C_1 \\ \vdots \\ C_1 \end{pmatrix}$代入本征方程式，可得一组线性方程式

$$\sum_{j=1}^{n}\{(E-2\varepsilon_j)\delta_{ij}+1\}C_j=0 \qquad (6)$$

或写作： $C_i(E-2\varepsilon_i)+\sum_{j=1}^{n}C_j=0$ （但 $i=1,2,\cdots\cdots n$）

即 $C_i=\dfrac{-\sum_{j=1}^{n}C_j}{E-2\varepsilon_i}$ （7）

取前一式的复共轭式，得：

$$C_i^*=\frac{-\sum_j C_j^*}{E-2\varepsilon_i}$$

将前两等式相乘，并对 i 求总和，并且利用本征矢正交归一化条件：

$$\sum_i C_i^*C_i=\sum_i\frac{\sum_j C_j^*\sum_k C_k}{(E-2\varepsilon_i)^2}=\sum_i\frac{(\sum_j C_j)^2}{(E-2\varepsilon_i)^2} \qquad (8)$$

但 $\sum C_i^*C_i=1$，∴ 因而 $\sum_j C_j=\dfrac{1}{\sqrt{\sum_i\dfrac{1}{(E-2\varepsilon_i)^2}}}$ 代入（7）

$$C_i=\frac{\dfrac{1}{(E-2\varepsilon_i)}}{\sqrt{\sum_i\dfrac{1}{(E-2\varepsilon_i)^2}}}$$ 于是求得了本征矢 $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix}$

10.24 设 H 的矩阵表示为：

$$\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 2\varepsilon_4-1 \end{pmatrix}$$

试利用前题结论及微扰法，计算$\hat{H}$的本征值。

（提示）试选：$H^{'}=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}$

则$H_0=H-H^{'}=?$

（解）由提示得知，若如此选择微扰$H^{'}$,则无微扰哈氏算符是：

$$H_0=\begin{pmatrix}2\varepsilon_1-1&-1&-1&-1\\-1&2\varepsilon_2-1&-1&-1\\-1&-1&2\varepsilon_3-1&-1\\-1&-1&-1&2\varepsilon_4-1\end{pmatrix}$$

若将H_0看作前题中的H，则按前题结论H_0的本征值将决定于一方程式：

$$(E^{(0)}-2\varepsilon_1)(E^{(0)}-2\varepsilon_2)(E^{(0)}-2\varepsilon_3)(E^{(0)}-2\varepsilon_4)$$
$$\{1+\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{(E^{(0)}-2\varepsilon_i)}\}=0$$

即：$\frac{1}{(E^{(0)}-2\varepsilon_1)}+\frac{1}{(E^{(0)}-2\varepsilon_2)}+\frac{1}{(E^{(0)}-2\varepsilon_3)}+\frac{1}{(E^{(0)}-2\varepsilon_4)}=-1$

它是个普通的关于$E^{(0)}$的四次方程式，它的根$E^{(0)}=E_1^{(0)},E_2^{(0)},E_3^{(0)},E_4^{(0)}$

一般情形下不相等，按无简并微扰法，根据题给的矩阵$\hat{H}^{'}$，可知能级近似值是：

$$\boldsymbol{E_1^{(0)},E_2^{(0)},E_3^{(0)}+\frac{1}{E_3^{(0)}-E_4^{(0)}},E_4^{(0)}+\frac{1}{E_4^{(0)}-E_3^{(0)}}}$$

第十一章：量子跃迁

P552——10.2，10.3

11.1——10.1

11.2 具有电荷 q 的离子，在其平衡位置附近作一维简谐振动，在光的照射下发生跃迁，入射光能量密为 $\rho(\omega)$，波长较长，求：

（1）跃迁选择定则。

（2）设离子处于基态，求每秒跃迁到第一激发态的几率。

解：本题是一维运动，可以假设电磁场力的方向与振动方向一致。

（1）跃迁选择定则：

为确定谐振子在光照射下的跃迁选择定则，先计算跃迁速率，因为是随时间作交变的微扰，可以用专门的公式（12）

$$W_{k'k}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\left|\vec{r}_{k'k}\right|^2\rho(\omega_{k'k}) \tag{1}$$

式中 $\left|\vec{r}_{k'k}\right|^2$ 应理解为谐振子的矢径的矩阵元的平方和，但在一维谐振子情形，$\left|\vec{r}_{k'k}\right|$ 仅有一项 $\left|x_{k'k}\right|^2$

$$W_{k'k}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\left|x_{k'k}\right|^2\rho(\omega_{k'k}) \tag{2}$$

根据谐振子的无微扰能量本征函数来计算这矩阵元

$$\boldsymbol{x_{k'k}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{k'}^{(0)*}x\psi_k^{(0)}(x)dx} \tag{3}$$

式中 $\boldsymbol{\psi_k^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}k!2^k}}H_k(dx)}$，$a=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$

要展开（3）式，可以利用谐振子定态波函数的递推公式：

$$x\psi_k^{(0)}=\frac{1}{\alpha}\left\{\sqrt{\frac{k}{2}}\psi_{k-1}^{(0)}+\sqrt{\frac{k+1}{2}}\psi_{k+1}^{(0)}\right\} \tag{4}$$

代入（3），利用波函数的正交归一化关系：

$$\int_x\psi_m^{(0)*}\psi_n^{(0)}dx=\delta_{mn}$$

$$\boldsymbol{x_{k'k}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{k'}^{(0)*}\cdot\frac{1}{\alpha}\left\{\sqrt{\frac{k}{2}}\psi_{k-1}^{(0)}+\sqrt{\frac{k+1}{2}}\psi_{k+1}^{(0)}\right\}dx=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k}{2}}\delta_{k',k-1}+\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k+1}{2}}\delta_{k',k+1}} \tag{5}$$

由此知道，对指定的初态 k 来说，要使矢径矩阵元（即偶极矩阵元）不为零，末态 k' 和初态 k 的关系必需是：

$$k'=k-1,\text{这时 } \boldsymbol{x_{k'k}=x_{k-1,k}=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k}{2}}} \tag{6}$$

$k^{'}=k+1$, 这时 $\boldsymbol{x_{k^{'}k}=x_{k+1,k}=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k+1}{2}}}$

因得结论：一维谐振子跃迁的选择定则是：初态末态的量子数差数是 1。

（2）每秒钟从基态 $k=0$ 跃迁到第一激发态的几率可以从（2）式和（7）式得到：

$$W_{10}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\left(\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2\rho(\omega_{10})=\frac{2\pi^2q^2}{3\hbar^2\mu\omega_{10}}\rho(\omega_{10})$$

11.3 设有一带电 q 的粒子，质量为 μ，在宽度为 a 的一维无限深势阱中运动，它在入射光照射下发生跃迁，波长 $\lambda>>a$。

（1）求跃迁的选择定则。

（2）设粒子原来处于基态，求跃迁速率公式。

解：本题亦是一维运动，并且亦是周期性微扰，故可用前题类似方法。

（1）跃迁选择定则：

按第三章§3.1 一维无限深势阱定态波函数是：（原点取在势阱左端）

$$\psi_k(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi x}{a} \qquad (1)$$

根据此式计算矩阵元：

$$x_{k^{'}k}=\frac{2}{a}\int_{x=0}^{a}\sin\frac{k^{'}\pi x}{a}\cdot x\cdot\sin\frac{k\pi x}{a}dx=\frac{1}{a}\int_{x=0}^{a}x[\cos\frac{(k^{'}-k)\pi x}{a}-\cos\frac{(k^{'}+k)\pi x}{a}]dx$$

利用不定积分公式：

$$\int_x x\cos px dx=\frac{\sin px}{p}\cdot x+\frac{\cos px}{p^2} \qquad (2)$$

$$\boldsymbol{x_{k^{'}k}=\frac{1}{a}\{\frac{ax}{(k^{'}-k)\pi}\sin\frac{(k^{'}-k)\pi x}{a}+\frac{a^2}{(k^{'}-k)^2\pi^2}\cos\frac{(k^{'}-k)\pi x}{a}}$$

$$\boldsymbol{-\frac{ax}{(k^{'}+k)\pi}\sin\frac{(k^{'}+k)\pi x}{a}-\frac{a^2}{(k^{'}-k)^2\pi^2}\cos\frac{(k^{'}+k)\pi x}{a}\}\Bigg|_0^a}$$

$$\boldsymbol{=\frac{4k^{'}ka}{\pi^2}\cdot\frac{(-1)^{k^{'}+k}-1}{(k^{'2}-k^2)^2}} \qquad (3)$$

从最后一式知道，要使矩阵元 $x_{k^{'}k}\neq 0$，$k^{'}+k$ 必需要是奇数。但这个规律也可以用别种方式叙述，

当 $k^{'}+k$ 是奇数时 $k^{'}+k-2k=k^{'}-k$

必然也是奇数，因此一维无限深势阱受光照的选择定则是：表示初态和末态的量子数之和（或差）应是个奇数

$$k^{'}\pm k=(2n-1) \qquad (n=0,1,2,\cdots\cdots)$$

因此 $k,k^{'}$ 二者之中，一个是奇数另一个是偶数。

（2）跃迁速率：依前题公式（1）

$$W_{k^{'}k}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\left|x_{k^{'}k}\right|^2\rho(\omega_{k^{'}k})\ =\frac{64a^2q^2}{3\pi^2\hbar^2}\cdot\frac{k^{'2}k^2}{(k^{'2}-k^2)^4}\cdot[(-1)^{k^{'}+k}-1]^2\cdot\rho(\omega_{k^{'}k})\qquad（4）$$

$k^{'}\pm k=$偶数时$W_{k^{'}k}=0$，$k^{'}\pm k=$奇数时

$$\boldsymbol{W_{k^{'}k}=\frac{1027\pi^2a^2q^2}{3\pi^2h^2}\cdot\frac{k^{'2}k^2}{(k^{'2}-k^2)^4}\rho(\omega_{k^{'}k})}\qquad（5）$$

粒子从基态$k=1$，跃迁到任何一个偶数态$k^{'}=2n$的速率：

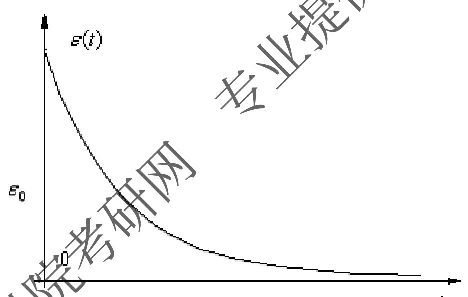
$$\boldsymbol{W_{2n,1}=\frac{1024}{3}(\frac{qa}{h})^2\frac{n^2}{(4n^2-1)^4}\rho(\omega_{2n,1})}$$

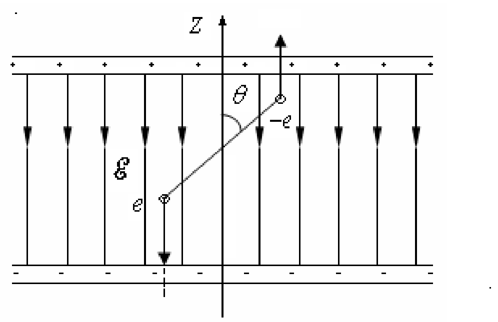
11.4——10.4
11.5——10.5
11.6——10.6

11.7 设把处于基态的氢原子放在平行板电容器中，取平行板法线方向为 z 轴方向、电场沿 z 轴方向可视作均匀，设电容器突然充电然后放电，电场随时间变化规律是：

$$\boldsymbol{\varepsilon(t)=\begin{cases}0 & (t<0)\\ \varepsilon_0e^{-\frac{t}{\tau}} & (t>0)\quad(\tau\text{为常数})\end{cases}}$$

求时间充分长后，氢原子跃迁到 2s，或 2p 态的几率。





（解）按照习惯表示法，氢原子的初态（k 态）的波函数是：ψ_{100}，末态（$k^{'}$态）的波函数是ψ_{200}

或ψ_{21m}，它们的显式是如下：

1s 态 $\quad\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}}$ （1）

2s 态 $\quad\psi_{200}=\frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}}(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}$ （2）

2p 态 $$\psi_{211}=\frac{1}{8\sqrt{\pi a^3}}(\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta\cdot e^{i\varphi} \tag{3a}$$

$$\psi_{21,-1}=\frac{1}{8\sqrt{\pi a^3}}(\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta\cdot e^{-i\varphi} \tag{3b}$$

$$\psi_{210}=\frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}}(\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}\cos\theta \tag{3c}$$

这些公式后面都要用来计算几率。从题意看来，原子所受的微扰是个随时间变化的函数，而且，电场的方向是固定的，与光照射情形不同（光的电磁场是看作各向同性的），因此只能用一般的随时间变化的跃迁振幅公式§ 11-2 公式（14）

$$\boldsymbol{C_{k'k}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{k'k}e^{i\omega_{k'k}}dt} \tag{4}$$

微扰是指氢原子在此均匀电场中的偶极矩势能：

$$\boldsymbol{\hat{H}'=\vec{\mathcal{E}}_0 e^{-\frac{t}{\tau}}\cdot e\vec{r}=\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t}{\tau}}er\cos\theta} \tag{5}$$

微扰算符 $\hat{H}'$ 在初态 ψ_k（即 ψ_{100}）以及末态（即 ψ_{200} 或 ψ_{21m}）$\psi_{k'}$ 之间的矩阵元是：

$$\boldsymbol{H'_{k'k}=\iiint_\tau \psi^*_{k'}\hat{H}'\psi_k d\tau}=\iiint_\tau \psi^*_{k'}[\varepsilon_0 e^{-\frac{t}{\tau}}er\cos\theta]\psi_k d\tau$$

$$=\varepsilon_0 e^{-\frac{t}{\tau}}\iiint_\tau \psi^*_{k'}(er\cos\theta)\psi_k d\tau$$

$$=\varepsilon_0 e^{-\frac{t}{\tau}}(ez)_{k'k} \tag{6}$$

将（6）代入（4）先对时间进行积分；并认为充分长时间可以用 $t\to\infty$ 表达：

$$\boldsymbol{C_{k'k}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \varepsilon_0 e^{-\frac{t}{\tau}}(ez)_{k'k}\cdot e^{i\omega_{k'k}t}dt=\frac{\varepsilon_0}{i\hbar}(ez)_{k'k}\int_{t=o}^{t=\infty}e^{[i\omega_{k'k}-\frac{1}{\tau}]t}dt}$$

$$\boldsymbol{=\frac{\varepsilon_0}{i\hbar}(ez)_{k'k}\left.\frac{e^{[i\omega_{k'k}-\frac{t}{\tau}]t}}{i\omega_{k'k}-\frac{1}{\tau}}\right|_{t=0}^{t=\infty}}$$

$$\boldsymbol{=\frac{\varepsilon_0}{\hbar[\omega_{k'k}+\frac{i}{\tau}]}(ez)_{k'k}} \tag{7}$$

（前式中利用了$\left|e^{i\omega_{k'k}t}\right|=1$）

其次计算偶极矩阵元 $(ez)_{k'k}$，按题意，要求两种跃迁几率，下面分别进行：

$(1s\to 2s)$ 跃迁，即从态 ψ_{100} 跃迁到 ψ_{200} 的几率：

$$\boldsymbol{(ez)_{200,100}=\int_r\int_\theta\int_\varphi[\frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}}(2-\frac{r}{a})a^{-\frac{r}{2a}}][er\cos\theta][\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}}]\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}}\int_{r=0}^{\infty}(2-\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}-\frac{r}{a}}r^3dr\cdot\int_0^\pi\cos\theta\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi=0 \qquad (8)$$

代入（4）中知道 $C_{200,100}=0, W_{200,100}=0$ 即自 $1s$ 向 $2s$ 的跃迁不存在。再考察 $(1s\to 2p)$ 的跃迁，由于 2p 有三种不同态，自 1s 跃迁到每一态都有一定几率，因而要分别计算再求总和。

$$\boldsymbol{(ez)_{211,100}=\int_r\int_\theta\int_\varphi[\frac{1}{8\sqrt{\pi a^3}}(\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta e^{i\varphi}][er\cos\theta][\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}}]\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi}$$

$$=\int_r\frac{e}{8\pi a^4}r^4e^{-\frac{3r}{2a}}dr\cdot\int_{\theta=0}^{\pi}\sin^2\theta\cos\theta d\theta\cdot\int_{\varphi=0}^{2\pi}e^{i\varphi}d\varphi \qquad (9)$$

同理可求

$$\boldsymbol{(ez)_{21-1,100}=\int_r\int_\theta\int_\varphi[\frac{1}{8\sqrt{\pi a^3}}(\frac{r}{a})e^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta e^{-i\varphi}][er\cos\theta][\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}}]\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi}$$

$$=\int\frac{e}{8\pi a^4}r^4e^{-\frac{3r}{2a}}dr\cdot\int_0^\pi\sin^2\theta\cos\theta d\theta\cdot\int_{\varphi=0}^{2\pi}e^{-i\varphi}d\varphi \qquad (10)$$

$$\boldsymbol{(ez)_{210,100}=\int_r\int_\theta\int_\varphi[\frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}}(\frac{r}{a})a^{-\frac{r}{2a}}\cos\theta][er\cos\theta][\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}}]\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi}$$

$$=\frac{e}{\sqrt{32\pi a^4}}\int_{r=0}^{r=\infty}r^4e^{-\frac{3r}{2a}}dr\cdot\int_{\theta=0}^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta\cdot\int_{\varphi=0}^{2\pi}d\varphi$$

$$=\frac{e}{\sqrt{32\pi a^4}}\cdot 4!\cdot(\frac{-2a}{3})^5\cdot(-\frac{1}{3}\cos^3\theta)\Big|_0^\pi 2\pi$$

$$=\frac{2^{7*5}}{3^5}ae \qquad (11)$$

将三种值分别代入（7），得 $C_{211,100}=0, C_{21-1,100}=0$

$$C_{210,100}=\frac{\varepsilon_0 e}{\hbar[(\omega_{k'}-\omega_k)+\frac{i}{\tau}]}\cdot\frac{2^{7\cdot 5}}{3^5}\cdot a \qquad (12)$$

相应的跃迁几率（自 ψ_{100} 态——ψ_{210} 态）因 $\boldsymbol{\omega_{k'k}=\omega_{k'}-\omega_k=\frac{E_2}{\hbar}-\frac{E_1}{\hbar}=\frac{-e^2}{8a}-\frac{-e^2}{2a}}$

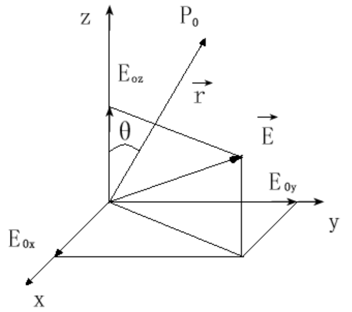
$$W_{210,100}=|C_{210,100}|^2=\frac{e^2E_0^2a^2}{\hbar^2[(\omega_k'-\omega)^2+\frac{1}{\tau^2}]}\cdot\frac{2^{15}}{3^{\omega}}$$

$$=\frac{e^2E_0^2a^2\tau^2}{\hbar^2[1+(\omega_k'-\omega_k)^2\tau^2]}\cdot\frac{2^{15}}{3^{\omega}}$$

$$=\frac{1}{1+(\frac{3e^2\tau}{8a\hbar})^2}\cdot\frac{2^{15}e^2E_0^2a^2\tau^2}{3^{\omega}\cdot\hbar^2}$$

11.8 氢原子处于基态加上交变电场 $E=E_0\ (e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$，$\hbar\omega>>$ 电离能，用微扰论一级近似，计算氢原子的每秒电离的几率。

解：本题的性质属周期性微扰问题范围，但这过程中的末状态是电离态，电离态可以包括一切方向传播的平面几率波，因此在跃迁几率方面要用类似于弹性散射的积分计算。



根据 11.3 章周期性微扰论，若体系受微扰：

$$\hat{H}'=\frac{W}{2}(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}) \qquad (1)$$

则在较长的时间以后，体系从一个单态$\mathbf{E_k}$，跃迁到一个单态$\mathbf{E_{k'}}$的跃迁几率$\mathbf{W_{k'k}}$是以下式表示的：

$$\omega_{k'k}=\frac{\pi}{2\hbar}\left|W_{k'k}\right|^2\delta\left(E_{k'}-E_k-h\omega\right)$$

在本题的情形，微扰能量乃是氢原子在交变电场中的势能（忽略磁势能），将原子看作偶极子 OP（附图），则微扰算符是：

$$\hat{H}'=e\vec{r}\cdot\vec{E}=e\vec{r}\cdot(\overrightarrow{E_0})(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$$

假定电场矢量的振幅$\mathbf{E_0}$在参考系中的分量是（E_{0x}，E_{0y}，E_{0z}）用球坐标表示电子位置时，有：

$$\hat{H}'=e\ (E_{0x}x+E_{0y}y+E_{0z}z)(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$$
$$=e\ (E_{0x}r\sin\theta\cos\varphi+E_{0y}r\sin\theta\sin\varphi+E_{0z}r\cos\theta)(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}) \qquad (2)$$

因此微扰算符中坐标有关的部分是：

$$\frac{1}{2}\hat{W}=e\,(E_{0x}r\sin\theta\cos\varphi+E_{0y}r\sin\theta\sin\varphi+E_{0z}r\cos\theta) \qquad (3)$$

为了计算单态与单态间的跃迁速率（2），需要求初末态矩阵元$\mathbf{W_{k'k}}$，按题意，初态是氢的基态，其波函数是：

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a^{2}}}e^{\frac{-r}{a}}$$ （a 是玻尔半径）

跃迁的末态是自由态（即正的能态），它的波函数是平面德布罗意波，但这种态的波矢量 $\vec{k}$ （与动量 $\vec{p}$ 成正比）与能量E_k的关系：$E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}$ 是任意的，方向亦是任意的。我们假定波矢量 $\vec{k}$ 已经确定，并且沿z轴，又假设氢原子关闭在体积L^3的立方体中（箱归一化），则可写出末态的波函数：

$$\psi_k=\frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{ik\pi}=\frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{ikr\cos\theta} \qquad (4)$$

下面计算微扰的空间部分 W 在前述两单态中的矩阵元：

$$W_{k,1}=\iiint_\tau \psi_k^* \hat{W}\psi_{100}d\tau$$

$$=\iiint\frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{-ikr\cos\theta}\cdot 2e\ (E_{0x}r\sin\theta\cos\varphi\ +E_{0y}r\sin\theta\sin\varphi\ +E_{0z}r\cos\theta\ )$$

$$\cdot\ \frac{e^{-\frac{r}{a}}}{\sqrt{\pi a^2}}\cdot r^2\sin\theta drd\theta d\varphi \qquad (5)$$

注意这个积分包括三部分，并且积分变量$\mathbf{r}$， θ ， φ 是分离的。与φ有关的积分中，因：

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi}\cos\varphi d\varphi=0 \qquad\qquad \int_{\varphi=0}^{2\pi}\sin\varphi d\varphi=0$$

因此（5）式中只有与$\mathbf{E_{0x}}$有关的积分不为零，在下面的计算中，积分的次序是$\mathbf{r}$， θ ， φ：

11.9——10.8
11.10——10.9
11.11——10.10
11.12——10.11
11.13 没有找到答案

$$W_{k,1}=\frac{2eE_{0x}}{\sqrt{\pi a^3L^3}}\int_{\varphi=0}^{2\pi}d\varphi\int_{r=0}^{\infty}r^3e^{-\frac{r}{a}}\left(\int_{\theta=0}^{\pi}e^{-ikr\cos\theta}\sin\theta\cos\theta d\theta\right)dr$$

$$=\frac{4\pi eE_{0x}}{\sqrt{\pi a^3L^3}}\int_{r=0}^{\infty}r^3e^{-\frac{r}{a}}\cdot\frac{1}{ikr}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{d}{d\theta}(e^{-ikr\cos\theta})\cos\theta d\theta\cdot dr$$

$$=\frac{4\pi eE_{0x}}{\sqrt{\pi a^3L^3}}\int_{r=0}^{\infty}r^3e^{-\frac{r}{a}}\cdot\frac{1}{ikr}\{|e^{-ikr\cos\theta}\cos\theta|_0^{\pi}+\int_{\theta=0}^{\pi}e^{-ikr\cos\theta}\cdot\sin\theta d\theta\}dr$$

$$=\frac{4\pi eE_{0x}}{\sqrt{\pi a^3L^3}}\cdot\frac{1}{ik}\int_0^{\infty}r^2e^{-\frac{r}{a}}\{-e^{ikr}-e^{-ikr}+\frac{1}{ikr}|e^{-ikr\cos\theta}|_0^{\pi}\}dr$$

$$=\frac{4\pi eE_{0x}}{\sqrt{\pi a^3L^3}}\cdot\frac{1}{ik}\int_0^{\infty}r^2e^{-\frac{r}{a}}\{\frac{e^{ikr}-e^{-ikr}}{ikr}-e^{-ikr}\}dr$$

$$=\frac{4\pi eE_{0x}}{\sqrt{\pi a^3L^3}}\cdot\frac{1}{ik}\int_0^{\infty}[\frac{r}{ik}(e^{-\frac{r}{a}+ikr}-e^{-\frac{r}{a}-ikr})-r^2(e^{-\frac{r}{a}+ikr}-e^{-\frac{r}{a}-ikr})]dr$$

利用定积分公式：

$$\int_0^{\infty}e^{-ax}x^ndx=\frac{n!}{a^{n+1}}$$

于前一积分得：

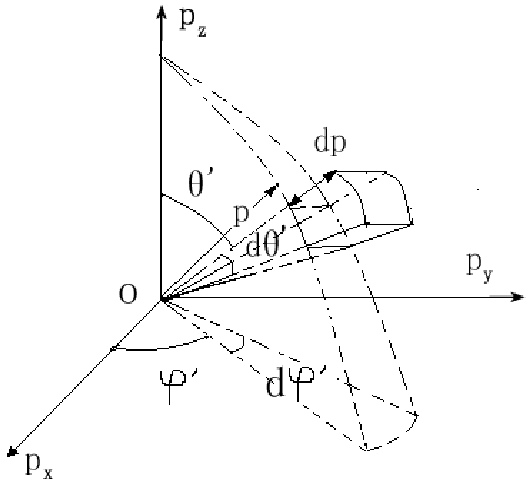
$$W_{k,1}=\frac{4\pi eE_{0x}}{\sqrt{\pi a^3L^3}}\{-\frac{1}{k^2}[\frac{1}{(\frac{1}{a}-ik)^2}-\frac{1}{(\frac{1}{a}+ik)^2}]-\frac{1}{ik}[\frac{1}{(\frac{1}{a}-ik)^2}+\frac{2}{(\frac{1}{a}+ik)^2}]\}$$

$$=\frac{-64a^5ekE_{0i}}{\sqrt{\pi a^3L^3}(1+a^2k^2)^3}$$

代（2）得：

$$\omega_{k,1}=\frac{\pi}{\hbar}\cdot\frac{2^{11}a^{10}e^2E_{0x}^2k^2}{\pi a^3L^3(1+a^2k^2)^6}\cdot\delta(E_k-E_1-\hbar\omega)\qquad(7)$$

其次计算自初态跃迁到末态为中心的，包括一切邻近态在内的总跃迁速度，根据 11.2 章常微扰相类似，要考虑累计效应，在箱归一化的条件下，电子的动量分量是量子化的，表示为：



$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_x, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_y$$

$$p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_z$$

而在动量相空间（P_x, P_y, P_z）中，若以（$\frac{2\pi\hbar}{L}$）为线度将相空间分割成立方形细胞，则每一立方形相当于一个不同的动量态，因而“单位相空间体积”中的态数目是

$$1/(\frac{2\pi\hbar}{L})^3 = (\frac{L}{2\pi\hbar})^3$$

在相空间体元 $d\tau = p^2 d\Omega dp = p^2 d\Omega \sin\theta' d\theta' d\varphi'$ 之中，独立态数目是：

$$dN = (\frac{L}{2\pi\hbar})^3 d\tau = (\frac{L}{2\pi\hbar})^3 p^2 d\Omega dp \qquad (8)$$

另一方面，根据态密度 ρ 的定义，在指定方向（θ'，φ'）上，单位立方体角和单位能量间隔的态数目是态密度 ρ，因而在立方体角 $d\Omega$ 和能量间隔 dE_k 中的态数目是

$$dN = \rho d\Omega dE = \rho d\Omega d(\frac{p^2}{2\mu}) = \frac{1}{\mu}\rho p dp d\Omega \qquad (9)$$

*注：本页第二行起到下页第九行公式（11）为止一段文字，是为使读者容易理解起见插入的有关“态密度”的补充说明。

将（8）（9）二式等起来，就得到箱归一化自由粒子的态密度公式：

$$\rho = (\frac{L}{2\pi\hbar})^3 \mu p = (\frac{L}{2\pi\hbar})^3 \mu\sqrt{2\mu E_k} \qquad (10)$$

由于独立事件的几率可以相加，因此，从同一单态 E_1 跃迁到各种末态的总几率用积分计算，首先，对于末端动量 $\vec{p}$ 在立体角 $d\Omega$ 之内，能量间隔在 dE_k 之内的态数目是：

$$dN = \rho d\Omega dE_k$$

每一种跃迁的速率（单位时间的几率）都看作 W_{k1}（即 7 式），则对于所述的一系列跃迁的总的跃迁速率是个微量

$$dw = w_{k1}dN = w_{k1}\cdot\rho d\Omega dE_k \qquad (11)$$

因而向一切可能末态跃迁的总速率：

$$w = \int_{\Omega}\int_{E_k} w_{k1}\rho d\Omega dE_k$$

$$= \int_{\Omega} d\Omega \int_{E_k} \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \mu \sqrt{2\mu E_k}\,\frac{\pi}{\hbar}\cdot\frac{2^{11}a^{10}e^2E_0^2k_z^2}{\pi a^3L^3(1+a^2k^2)^6}\cdot\delta(E_k-E_1-\hbar\omega)\,dE_k$$

$$= 4\pi\cdot\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\cdot\frac{2^{11}a^{10}e^2E_{0x}^2}{\pi a^3L^3}\cdot\int_{E_k}\mu\sqrt{2\mu E_k}\cdot\frac{\frac{2\mu E_k}{\hbar^2}}{\left(1+\frac{2\mu a^2E_k}{\hbar^2}\right)^6}\delta(E_k-E_1-\hbar\omega)\,dE_k$$

利用 δ 函数的变换性质于前一式，简化数字系数后，得以下的结果：

$$\omega = \frac{2^{11}\sqrt{2}a^7\mu^{5/2}e^2E_{0x}^2}{\pi^2\hbar^6}\int_{E_k}\frac{E_k^{3/2}}{\left(1+\frac{2\mu a^2E_k}{\hbar^2}\right)^6}\delta(E_k-E_1-\hbar\omega)\,dE_k$$

$$= \frac{2^{11}\sqrt{2}a^7\mu^{5/2}e^2E_{0x}^2}{\pi^2}\cdot\frac{\hbar^6(E_1+\hbar\omega)^{3/2}}{[\hbar^2+2\mu a^2(E_1+\hbar\omega)]^6}$$

11.13 一维运动的体系从|m>态跃迁到|n>态所相应的振子强度定义为：

$$j_{nm} = \frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar}|\langle n|x|m\rangle|^2$$

μ 为振子质量，求证：$\sum_n j_{nm} = 1$（$\sum_n$ 指对一切能量本征态求和）。这称为 Thomas—Reich—Kuhn 求和规则。

（证明）第一法：用薛定谔图象（表象）：设|m>|n>是能量算符 $\hat{H}$ 的本征矢，其相应的本征值是$\mathbf{E_m}$和$\mathbf{E_n}$，即|m>|n>满足：

$$\hat{H}|m\rangle = E_m|m\rangle \qquad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \qquad (1)$$

现将特征一式等号左方用能量本征值表示，再利用前两个本征方程式的特点将本征值换成哈氏算符如下：

$$j_{nm}=\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n-E_m)<n|x|m>^*<n|x|m>$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n-E_m)<m|x|n>\ <n|x|m>$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}E_n<m|x|n>\ <n|x|m>\ -\frac{2\mu}{\hbar^2}E_m<m|x|n>\ <n|x|m>$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}<m|xH|n>\ <n|x|m>\ -\frac{2\mu}{\hbar^2}<m|x|n>\ <n|xH|m>$$

将前述的j_{nm}对n求和（m固定），并利用两个矩阵乘积法则，即

$$\sum_n<P|\hat{A}|n><n|\hat{B}|q>=<P|\hat{A}\hat{B}|q> \qquad (2)$$

$$\sum_n j_{nm}=\sum_n\ \frac{2\mu}{\hbar^2}[<m|xH|n>\ <n|x|m>\ -<m|x|n>\ <n|xH|m>]$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}<m|xHx-x^2H|m>$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}<m|\{x\ [-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)]x-x^2[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)]\}m>$$

$$=<m|-2x\frac{\partial}{\partial x}|m>=<m|1-x\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x|m>$$

$$=<m|m>-<m|x\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}x|m>$$

$$=1-\frac{i}{h}<m|xp+px|m> \qquad (3)$$

在第四章的习题（8）中证明过：形如$\sum A_{nm}\frac{p^n x^m+x^m p^n}{2}$的算符是厄密算符，因而 **xp+px** 是厄密算符，它在任何态**|m>**的平均值是实数，故**<m|xp+px|m>**是实数，而（**i/h**）**<m|xp+xp|m>**是纯虚数。

但从题意：$j_{nm}=\sum_n\ \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n-E_m)<n|x|m>^2$

看来$\sum j_{nm}$的每一项是实数，因而j_{nm}是实的，可见（**i/ℏ**）**<m|xp+px|m>=0**

而$\sum_n j_{nm}=1$ （由 3）。

第二法：用海森伯图象（表象）：这种情形下我们将算符看作时间的函数而将本征函数看作与时间无

关，根据第五章的原理，任何算符$\hat{A}$的海氏表象都满足方程式：$\dfrac{d\hat{A}}{dt}=\dfrac{1}{\hbar i}[\hat{A},\hat{H}]$

将$A=x'$，$\hat{H}=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\partial^2}{\partial x}+V(x)$代入得：

$$\frac{d\hat{x}'}{dt}=\frac{\hbar}{\mu i}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\hat{p}'}{\mu} \qquad (4)$$

为了求得题给的和数，首先假设本征矢|m>|n>是薛氏表象，即

$$|m>=|m'>e^{-iE_m t/\hbar}\quad ,\quad |n>=|n'>e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (5)$$

|m'>n'>是海氏表象本征矢，都与时间无关。现在求偶极矩阵元<n|x|m>的时间导数：

$$\frac{d}{dt}<n|x|m>=\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)<n'|x|m'>e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}$$
$$=\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)<n|x|m> \qquad (6)$$

代入题给的求和式：

$$S=\sum_n j_{nm}=\sum_n\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n-E_m)<m|x|n><n|x|m>$$
$$=\sum_n\{\frac{\mu}{\hbar i}<m|x|n>\frac{d}{dt}<n|x|m>-\frac{\mu}{\hbar i}\frac{d}{dt}<m|x|n>\cdot<n|x|m>\} \qquad (7)$$

按海氏表象定义

$$\frac{d}{dt}<n|x|m>=<n'|\dot{x}'|m'> \qquad \frac{d}{dt}<m|x|n>=<m'|\dot{x}'|n'>$$

式中，文字加撇的都代表海氏表象，无撇的代表薛氏表象，代入（7）式

$$S=\sum_n\{\frac{\mu}{\hbar i}<m'|x'|n'><n'|\dot{x}'|m'>-\frac{\mu}{\hbar i}<m'|\dot{x}'|n'><n'|x'|m'>\}$$

又根据（4）：$S=\dfrac{1}{\hbar i}<m'|x'p'-p'x'|m'>=\dfrac{1}{\hbar i}(-\dfrac{\hbar}{i})=1$

最后一式利用了：$[\hat{p}',\hat{x}']=\dfrac{\hbar}{i}$

第十二章：变分法

这一章我看得很马虎，所以答案也没怎么找全，很多习题的答案还在《剖析》里面

P591——9.9

12.1——9.1

12.4——9.16

12.5——参考 5.3

12.10——9.6

12.11——9.10

12.12——9.2

12.13——9.3

12.14——9.17

12.15——9.15

12.16——9.7

12.17——9.8

12.18——9.12

12.19——9.14

12.20——9.18

12.21——10.12

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

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

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

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

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

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。

12.7 对于非谐振子，$H = -\frac{\hbar^2}{2u}\frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4$，取试探波函数为$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2}$（与谐振子基态波函数形式相同），$\alpha$ 为参数，用变分法求基态能量。

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

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

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

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

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

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

12.18 设在氘核中的质子与中子的相互作用表成 $V(r) = -Ae^{-r/a}$，（$A = 32Mev$ ，$a = 2.2\times 10^{-15}m$）。设质子与中子相对运动波函取为$e^{-\lambda r/2a}$，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，$\int|\psi|^2 d\tau = 4\pi\int_0^\infty N^2 e^{-\lambda r/a} r^2 dr = 1$，

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

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

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

$$\langle V\rangle=-AN^2\cdot 4\pi\int_0^\infty e^{-r/a}e^{-\lambda r/a}r^2dr=-A\left(\frac{\lambda}{1+\lambda}\right)^3$$

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

其中u为质子－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$\frac{\partial E}{\partial\lambda}=0$，求得$\lambda$最佳值满足的方程：

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

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，$\frac{\hbar^2}{12ua^2A}=\frac{(\hbar c)^2}{12uc^2a^2A}=0.04531$

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

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

第十三章：弹性散射

P660——11.21
13.1——11.20
13.3——11.3
13.5——11.1
13.7——11.10
13.8——11.9
13.11——11.12
13.12——11.17
13.13——11.18
13.14——11.19
13.15——11.5
13.16——11.2
13.17——11.4

P686 用玻恩近似法，求在下列势场中的散射微分截面：

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

（2） $V(r)=V_0e^{-ar^2}$ $(a>0)$

(3) $V(r)=\beta\dfrac{e^{-ar}}{r}$ $(a>0)$

(4) $V(r)=V_0e^{-ar}$ $(a>0)$

(5) $V(r)=\dfrac{a}{r^2}$

(解) （1）先列出玻恩近似法的基本公式。根据理论，如果散射粒子所在的势场是$V(r)$。

粒子质量是μ，粒子的波数是k（因是弹性散射，在散射前后都用此文字表示，它与能量 E 的关系是$k^2=\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}$）散射角度是$\theta$，而$q(\theta)$表示以下参数：

$$q(\theta)=2k\sin\frac{\theta}{2} \qquad （1）$$

则与散射方向θ对应的散射振幅用下述一维定积分计算

$$f(\theta)=\frac{-2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r)\sin qr\cdot r\cdot dr \qquad （2）$$

是为玻恩的散射振幅公式一般适用于高能量散射，若$V(r)=-V_0 \quad (r<a)$

代入（2）：

$$f(\theta)=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}\int_0^a \sin qr\cdot r\cdot dr$$

利用积分公式

$$\int x\sin qxdx=\frac{1}{q^2}\sin qx-\frac{x}{q}\cos qx$$

于前一式，注意上下限为 a 和 0。

$$f(\theta)=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}(\frac{\sin qa}{q^2}-\frac{a\cos qa}{q}) \quad (3)$$

微分截面：

$$\sigma(\theta)=\left|f(\theta)\right|^2=\frac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4 q^2}(\frac{\sin qa}{q^2}-\frac{a\cos qa}{q})^2$$