科学版

大学物理习题精解系列

# 量子力学

## 习题精解

吴 强 柳盛典 编著

科学出版社
www.sciencep.com

(O-1779.0101)

ISBN 7-03-011549-X

9 787030 115492 >

ISBN 7-03-011549-X
定 价：18.00 元

大学物理习题精解系列

# 量子力学习题精解

吴　强　柳盛典　编著

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书是与科学出版社2003年出版的普通高等教育"十五"国家级规划教材《量子力学》(张永德著)配套的习题解答,主要包括量子力学物理基础、Schrödinger方程的一般讨论、一维问题、中心场束缚态问题、量子力学的表象与表示、对称性分析及应用、电子自旋角动量、定态微扰论、电磁作用分析和应用、势散射理论、含时问题与量子跃迁、量子信息论的物理基础。

本书适合于理科大学与师范大学物理系学习量子力学的学生。

**图书在版编目(CIP)数据**

量子力学习题精解/吴强,柳盛典编著. —北京:科学出版社,2003
(大学物理习题精解系列)

ISBN 7-03-011549-X

Ⅰ.量… Ⅱ.①吴…②柳… Ⅲ.量子力学-高等学校-习题
Ⅳ.O413.1~44

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第048336号

责任编辑:鄢德平 / 责任校对:宋玲玲
责任印制:安春生 / 封面设计:陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码:100717
http://www.sciencep.com
新蕾印刷厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2003年8月第 一 版 开本:B5(720×1000)
2003年8月第一次印刷 印张:12 3/4
印数:1-4 000 字数:243 000

**定价:18.00元**

(如有印装质量问题,我社负责调换(路通))

# 序　言

物理习题是锻炼物理思维的体操。做物理习题是学习物理课程中必要而又重要的环节。通过做习题，可以巩固、丰富已经掌握的东西，发现一些你还不懂或懂得不够的地方，或是某些问题的某些侧面；它有助于深化对基本概念、基本原理的理解，使学到的知识更加融会贯通；它能进一步锻炼处理问题的技巧，提高运用所学知识的能力；此外，它还有助于进一步拓宽知识面等。所以许多著名物理学家都十分重视习题，要求勤奋地做习题，多做习题，将它看成学习是否踏实的一种标志。

一般地说，在四大力学的学习中，量子力学的学习有一种特殊的困难，这不仅在于量子力学中基本概念、基本原理和初学者的日常宏观观念差距很大，不容易理解，也在于量子力学的方法有时很新颖，其中包含不少物理和数学新技巧。于是，这种情况常常会造成：学生听课还都能懂，但做起题来有时却是“老虎啃天——无从下嘴”。这说明在学习量子力学中，做习题和上习题课的重要性，要求教师和学生必须更加重视做习题和上习题课这个环节。

在我写的《量子力学》中，吸收了美国一些著名大学研究生入学考试材料，参照书中内容也部分地拟定了一些，同时又参考了以往国内教学积累，一共编集了 251 道习题。出书后，一些老师提出，为教学方便，希望出版一本相应的习题解答。与此同时，科学出版社鄢德平先生也这样建议。于是我们便产生了针对那本《量子力学》的习题编写一本题解的想法。

这本题解是供同行老师们在教学中参考用的，它也适合于研究生作为复习量子力学之用。对于正在学习量子力学的本科同学，如能正确使用，它也很有益处。这里，我们向使用本书的本科生郑重建议：做习题时，千万不要不经思索就抄这本题解中的答案，应当有个小小的三部曲：第一，看到题目之后一定要思考几分钟，但也不必苦苦思索很长时间；第二，如仍不得要津，径直去看题解；第三，做完这道题后，反思几分钟，对自己做个分析和小结。这样，学习既踏实了，也有了高效率。本来，在看书、做题，以至阅读文献中，踏实和速度（效率）是一对矛盾。采用此类（以及其他合适的）方法是能够将两者统一起来的。这些无非是想说明：讲究学习方法（广义而言，讲究治学之道）至关重要。

成书期间，我的几位研究生：赵梅生、杨洁、赵博、张强承当了几乎全部求解任务和大部分计算机输入任务。烟台师范学院王立志同学也做了部分输入工作。经过吴强和柳盛典两位教授辛勤审校、修改和补充，终于完成了全书。为了尽力保证

质量，审改补充工作是彼此交换、反复进行的；其中第十二章曾由我另一位学生郁司夏博士协助审校；陈增兵教授也参加过题解的讨论；我则断断续续地参加了求解和讨论的全过程。

由于成书时间短促和我们见识所限，书中错误或不当之处在所难免，敬请同行专家和使用者们热心指正。我们真诚希望这本题解能有助于教学和学习，得到大家的认可。

张永德
中国科学技术大学
2002 年 11 月 15 日

# 目　录

第一章　量子力学的物理基础…… 1
第二章　Schrödinger 方程的一般讨论 …… 10
第三章　一 维 问 题 …… 24
第四章　中心场束缚态问题 …… 43
第五章　量子力学的表象与表示 …… 67
第六章　对称性分析及应用 …… 83
第七章　电子自旋角动量 …… 92
第八章　定态微扰论…… 114
第九章　电磁作用分析和重要应用…… 134
第十章　势散射理论…… 153
第十一章　含时问题与量子跃迁…… 169
第十二章　量子信息论的物理基础…… 179

# 第一章　量子力学的物理基础

**1.1**　在宏观世界里，量子现象常常可以忽略. 对下列诸情况，在数值上加以证明：

(1) 长 $l=1\text{m}$，质量 $M=1\text{kg}$ 的单摆的零点振荡的振幅；

(2) 质量 $M=5\text{g}$，以速度 10cm/s 向一刚性障碍物(高 5cm，宽 1cm)运动的子弹的透射率；

(3) 质量 $M=0.1\text{kg}$，以速度 0.5m/s 运动的钢球被尺寸为 $1\times1.5\text{m}^2$ 的窗子所衍射.

**解**：(1) 由位力定理可推知，谐振子的平均势能 $\langle V\rangle=\langle T\rangle=\frac{E}{2}$，再由谐振子的零点振荡能为 $\frac{\hbar\omega}{2}$，可得

$$\frac{m\omega^2A^2}{2}=\frac{\hbar\omega}{4}$$

其中，$A$ 为对应零点能的均方根振幅，所以

$$A=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m}}\sqrt{\frac{l}{g}}\approx0.41\times10^{-17}\text{m}$$

可见宏观振子的零点振荡实际上是没有的($A$ 也可用 $\sqrt{\int\psi_0^*(x)x^2\psi_0(x)\mathrm{d}x}$ 来求.).

(2) 如果把障碍物的宽度看成是势垒的厚度 $a$，把子弹透射看成是越过障碍物所设置的重力势垒，则透射概率

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

这里 $V_0=mgH$，$E=mv^2/2$(公式参见第三章)，则

$$T\approx\exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(mgH-\frac{mv^2}{2}\right)}\right\}$$

$$\approx\mathrm{e}^{-0.9\times10^{30}}$$

(3) 入射钢球的 de Broglie 波长为

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}\approx1.3\times10^{-30}\text{cm}$$

方形窗的水平和垂直方向的衍射角分别为

$$\theta_h\approx\frac{\lambda}{D}\approx1.3\times10^{-30}\text{rad}$$

$$\theta_1 \approx \frac{\lambda}{L} \approx 0.9 \times 10^{-30}\,\mathrm{rad}$$

**1.2** 用 $h, e, c, m$(电子质量), $M$(质子质量)表示下列每个量,给出粗略的数值估计:

(1) 玻尔半径(cm); (2) 氢原子结合能(eV); (3)玻尔磁子;(4) 电子的康普顿波长(cm);(5)经典电子半径(cm);(6)电子静止能量(MeV);(7)质子静止能量(MeV);(8)精细结构常数;(9)典型的氢原子精细结构分裂.

**解**: (1) $a=\dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}=0.529\times10^{-10}\,\mathrm{cm}$

(2) $E=\dfrac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}=13.605\mathrm{eV}$

(3) $\mu_B=\dfrac{e\hbar}{2m}=5.788\times10^{-11}\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{T}^{-1}$

(4) $\lambda_c=\dfrac{h}{mc}=2.426\times10^{-10}\,\mathrm{cm}$

(5) $r_{cl}=\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}=2.817\times10^{-13}\,\mathrm{cm}$

(6) $E_e=mc^2=0.511\mathrm{MeV}$

(7) $E_p=Mc^2=938.272\mathrm{MeV}$

(8) $\alpha=\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}=7.297\times10^{-3}\approx1/137$

(9) $\Delta E=\alpha^4 mc^2=1.8\times10^{-4}\mathrm{eV}$

**1.3** 导出、估计、猜测或背出下列数值,精确到一个数量级范围内.

(1) 电子的汤姆逊截面; (2) 氢原子的电离能; (3) 氢原子中基态能级的超精细分裂能量; (4) $^7_3\mathrm{Li}(Z=3)$核的磁偶极矩;(5) 质子和中子质量差; (6) $^4\mathrm{He}$ 核的束缚能;(7)最大稳定核的半径; (8)$\pi^0$介子的寿命;(9)$\mu^-$介子的寿命;(10) 自由中子的寿命.

**解**:(1) $\sigma=\dfrac{8\pi}{3}r_e^2=6.56\times10^{-31}\,\mathrm{m}^2$

(2) $I=\dfrac{e^2}{2a}=13.6\mathrm{eV}$

(3) $\Delta E_{fine}\approx13.6\times\left(\dfrac{1}{137}\right)^2\approx10^{-4}\mathrm{eV}$, $\Delta E_{super}\approx\Delta E_{fine}\times10^{-3}\approx10^{-7}\mathrm{eV}$

(4) $\mu=1.67\times10^{-26}\mathrm{J}\cdot\mathrm{T}^{-1}$

(5) $\Delta m=m_p-m_n=-2.3\times10^{-30}\,\mathrm{kg}$

(6) $E=4\times7=28\mathrm{MeV}$

(7) 在核力范围内,$r=1.4A^{1/3}\,\mathrm{fm}=1.4\times(100)^{1/3}\,\mathrm{fm}\approx6.5\mathrm{fm}$

(8) $\tau=0.828\times10^{-16}$s

(9) 衰变是弱相互作用过程，$\tau=2.2\times10^{-6}$s

(10) $\tau_n\approx15\text{min}=9\times10^{2}$s

**1.4** 指出下列实验中，哪些实验表明了辐射场的粒子性？哪些实验主要证明能量交换的量子性？哪些实验主要表明物质粒子的波动性？简述理由.

(1) 光电效应；(2) 黑体辐射谱；(3) Franck-Hertz 实验；(4) Davisson-Germer 实验；(5) Compton 散射.

**解**：光电效应和 Compton 散射说明了光场的粒子性. 光电效应表明每个光子的能量为 $\hbar\omega$，Compton 散射更进一步说明光子的动量为 $h/\lambda$，并且说明光子与物质相互作用时，满足动量守恒与能量守恒.

黑体辐射谱与 Franck-Hertz 实验说明，黑体(常描述为一谐振子体系)与辐射场的能量交换过程、电子与原子的碰撞过程，能量交换是量子化的，即原子的能级是量子化的.

Davisson-Germer 实验（电子在晶体中发生衍射），则主要表现出电子的波动性，验证了 de Broglie 波长与动量的关系，$\lambda=h/p$.

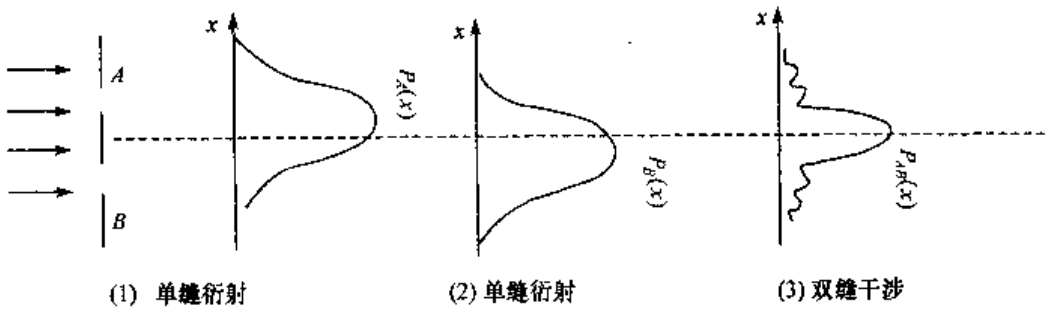
**1.5** 考虑如下实验：一束电子射向刻有 $A$、$B$ 两缝的平板，板外是一装有检测器阵列的屏幕. 利用检测器能定出电子撞击屏幕的位置. 在下列各种情形下，画出入射电子强度随屏幕位置变化的草图，给出简单解释.

(1) $A$ 缝开启，$B$ 缝关闭；

(2) $B$ 缝开启，$A$ 缝关闭；

(3) 两缝均开启.

**解**：如图(1)～(3).




当 $A$ 缝单独开启时，屏幕上的电子强度分布 $P_A(x)$ 为电子 de Broglie 波在 $A$ 缝的单缝衍射强度分布；同理，$B$ 缝单独开启时，屏幕上形成 $B$ 缝的电子单缝衍射强度分布 $P_B(x)$；两缝同时开启时，屏幕上的电子强度分布 $P_{AB}(x)$ 并非前两种情况强度分布的简单叠加，而是出现了干涉效应，即 $P_A(x)+P_B(x)+$干涉项，从而显示出电子的波动性.

**1.6** 导出(1.11)式，验算三个公式中的系数数值.

**解**:因为

$$P=\frac{h}{\lambda}\qquad E=\frac{P^2}{2m}$$

这里 $P$, $E$ 分别是自由粒子的动量和能量,$m$ 为质量,$h$ 为普朗克常数. 由上两式可以导出

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

对于光子而言

$$\lambda=\frac{c}{\nu}=\frac{hc}{E}$$

以上两式,即(1.11)式的来源. 容易验算

$$\frac{h}{\sqrt{2m_e}}=\frac{6.626\times10^{-34}\,\mathrm{Js}}{\sqrt{2\times9.109\times10^{-31}\,\mathrm{kg}}}=12.26\text{Å}/\mathrm{eV}^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{h}{\sqrt{2m_n}}=\frac{6.626\times10^{-34}\,\mathrm{Js}}{\sqrt{2\times1.675\times10^{-27}\,\mathrm{kg}}}=0.286\text{Å}/\mathrm{eV}^{\frac{1}{2}}$$

$$hc=6.626\times10^{-13}\,\mathrm{Js}\times2.998\times10^{8}\,\mathrm{ms}^{-1}=1.241\times10^{4}\text{Å}/\mathrm{eV}$$

**1.7** 讨论以下波函数的归一化问题:

(1) 粒子在一维无限深势阱中运动,设 $\psi(x)=A\sin\frac{\pi x}{a}(0\leqslant x\leqslant a)$, 求 $A$ 使波函数归一;

(2) 设 $\psi(x)=A\exp\left\{-\frac{1}{2}a^2x^2\right\}$,$a$ 为已知常数,求归一化常数 $A$.

(3) 设 $\psi(x)=\exp\{ikx\}$, 粒子的位置概率分布如何? 能否归一?

(4) 设 $\psi(x)=\delta(x)$, 粒子的位置概率分布如何? 能否归一?

**解**: (1) 由于在全空间(一维)发现粒子的概率为 1, 应有

$$\int\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\int_0^a A^2\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^2\mathrm{d}x=1$$

由此可得 $A=\sqrt{\frac{2}{a}}$.

(2) 同理,有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}A^2\exp\{-a^2x^2\}\mathrm{d}x=1$$

得 $A=\sqrt[4]{\frac{a^2}{\pi}}$.

(3) 概率密度 $p(x)=\mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{e}^{ikx}=1$. 即,在空间中任何位置, 单位体积内测到一个粒子的概率为 1.

若沿用上面的方法来求归一化系数，则会出现

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-ikx} e^{ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 dx = \infty \cdot A^2$$

要使积分为 1，必须 $A=0$. 因此波函数不能归一，只能归于 $\delta$ 函数.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \exp\{-ik'x\} \exp\{ikx\} dx = \delta(k-k')$$

(4) $\psi(x)=\delta(x-x_0)$ 是粒子的位置本征函数，此波函数描述的粒子的位置概率分布为

$$P(x) = \left| \int_{\infty}^{-\infty} \delta(x'-x_0)\delta(x-x') dx' \right|^2 = \delta^2(x-x_0)$$

即，在 $x=x_0$ 处可测得粒子，在其他位置测不到粒子. 位置本征函数不能归一，只能归到 $\delta$ 函数，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_1)\delta(x-x_2) dx = \delta(x_1-x_2)$$

**1.8** 设在球坐标中，粒子波函数为 $\psi(r,\theta,\varphi)$，试求

(1) 在球壳 $(r, r+dr)$ 中找到粒子的概率；

(2) 在 $(\theta,\varphi)$ 方向的立体角 $d\Omega$ 中找到粒子的概率.

**解**：(1) 在球壳 $(r, r+dr)$ 中找到粒子的概率为

$$P(r)dr = \left[ \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi \right] r^2 dr$$

(2) 在 $(\theta,\varphi)$ 方向的立体角 $d\Omega$ 中找到粒子的概率为

$$P(\theta,\varphi)d\Omega = \left[ \int_0^{\infty} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 dr \right] d\Omega$$

**1.9** 对下列波函数所描述的粒子，分别求出位置和动量的不确定度，并验证不确定性关系：

(1) 平面波 $\psi(x)=\exp\{ikx\}$

(2) $\psi(x)=\delta(x-x_0)$

(3) Gauss 型波包 $\psi(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right\}$

(4) $\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{L}} \exp\{-|x|/L\}$

**解**：(1) 算符 $\Omega$ 的不确定度，指 $\Omega$ 在某一量子态 $\psi$ 下的不确定度

$$\Delta_\psi \Omega = \sqrt{\langle \Omega^2 \rangle_\psi - \langle \Omega \rangle_\psi^2}$$

其中，$\langle \Omega \rangle_\psi = \int \psi^*(x) \Omega \psi(x) dx$.

算符 $\Omega_1, \Omega_2$ 之间的不确定性关系满足：

$$(\Delta_\psi \Omega_1)(\Delta_\psi \Omega_2) \geqslant \left| \frac{1}{2} \langle [\Omega_1, \Omega_2] \rangle_\psi \right|$$

平面波 $e^{ikx}$ 是动量 $p=k/\hbar$ 的本征态，此波函数描述的粒子具有确定的动量 $p$，所以动量的平均值也为 $p$，均方偏差 $\Delta_\psi p=0$.

再计算 $\langle\hat{x}\rangle_\psi$，$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi$，易得

$$\langle\hat{x}\rangle_\psi=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}\,x\,e^{ikx}\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}x\,dx=0$$

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}x^2e^{ikx}\,dx=\infty$$

故有，$\Delta_\psi x=\infty$.

综上所述，仍可以认为满足

$$(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})\geqslant\left|\frac{1}{2}\langle[\hat{x},\hat{p}]\rangle_\psi\right|=\frac{1}{2}\hbar$$

(2)与(1)类似，$\delta(x-x_0)$是位置的本征态，其本征值为 $x_0$，处于这种量子态的粒子具有确定的位置 $x_0$，所以有 $\Delta_\psi x=0$. 对于 $\langle\hat{p}\rangle_\psi$，可转到动量空间求解，$\psi(k)=\int\delta(x-x_0)e^{ikx}\,dx=e^{ikx_0}$，利用奇函数的性质，可求得 $\langle\hat{p}\rangle_\psi=0$，$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi=\int e^{-ikx_0}\,\hat{p}^2e^{ikx_0}\,dp=\infty$，故 $\Delta_\psi p=\infty$，因此满足 $(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})\geqslant\frac{1}{2}\hbar$.

注意：动量本征态与位置本征态是两种理想极限，是真实的物理波包无限展宽和无限压缩的两种极限结果. 它们是很有用的概念，但并非是物理上真实的量子状态.

(3) 因为 $\langle\hat{x}\rangle_\psi$，$\langle\hat{p}\rangle_\psi$ 的积分式中被积函数为奇函数，故在 $-\infty\sim\infty$ 范围内的积分为零. 另外易求出 $\langle\hat{x}^2\rangle_\psi$，$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi$，即

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int e^{-\alpha^2x^2}x^2\,dx=\frac{1}{2\alpha^2}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int e^{-\alpha^2x^2/2}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\right)e^{\alpha^2x^2/2}\,dx=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2}$$

所以有 $(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})=\hbar/2$. 因此称 $\psi(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}e^{-\alpha^2x^2/2}$ 为最小不确定波包.

(4) 同样因为被积函数为奇函数积分，易算出 $\langle\hat{x}\rangle_\psi=0$，

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi=\frac{2}{L}\int_0^{\infty}e^{-2x/L}x^2\,dx=\frac{L^2}{2}$$

故有 $\Delta_\psi\hat{x}=\frac{L}{\sqrt{2}}$，下面求 $\Delta_\psi\hat{p}$.

因为 $\frac{\partial}{\partial x}e^{-|x|/L}=\left[\frac{1}{L}-\frac{2}{L}\theta(x)\right]e^{-|x|/L}$，其中

$$\theta(x)=\begin{cases}1, & x>0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

为阶梯函数，故有

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{-|x|/L}=-\frac{2}{L}\delta(x)e^{-|x|/L}+\frac{1}{L^2}e^{-|x|/L}$$

因此，

$$\langle\hat{p}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{L}}e^{-|x|/L}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\frac{1}{\sqrt{L}}e^{-|x|/L}dx$$

$$=-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}e^{-|x|/L}\left[\frac{1}{L}-\frac{2}{L}\theta(x)\right]e^{-|x|/L}dx=0$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}e^{-|x|/L}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)e^{-|x|/L}dx$$

$$=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}\left[\frac{2}{L}\delta(x)-\frac{1}{L^2}\right]e^{2|x|/L}dx$$

$$=\frac{2\hbar^2}{L}|\psi(0)|^2-\frac{\hbar^2}{L^2}=\frac{\hbar^2}{L^2}$$

$$\Delta_\psi\hat{p}=\frac{\hbar}{L}$$

也可以转到动量空间求解，

$$\psi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-|x|/L}e^{-ipx/\hbar}dx=\frac{2}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_0^{\infty}e^{-\frac{1}{L}x}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\frac{\frac{2}{L}}{\frac{p^2}{\hbar^2}+\frac{1}{L^2}}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi=\frac{1}{2\pi\hbar L}\int_0^{\infty}\left(\frac{\frac{2}{L}}{\frac{p^2}{\hbar^2}+\frac{1}{L^2}}\right)^2p^2dp=\frac{\hbar^2}{L^2}$$

上面利用了积分公式

$$\int\frac{dx}{(a^2+x^2)^n}$$

$$=\begin{cases}\dfrac{1}{a}\tan^{-1}\dfrac{x}{a} & (n=1)\\ \dfrac{x}{2(n-1)a^2(a^2+x^2)^{n-1}}+\dfrac{2n-3}{2(n-1)a^2}\displaystyle\int\frac{dx}{(a^2+x^2)^{n-1}} & (n>1)\end{cases}$$

由上面计算可知$(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}>\dfrac{\hbar}{2}$.

**1.10**　利用不确定性关系估计无限深势阱中粒子的基态能量，设阱宽为 $a$.

**解**：因为对基态波函数有 $x=\bar{p}=0$，故 $\Delta x\sim a$，$\Delta p\sim p$，代入不确定性关系

$$\Delta p\cdot\Delta x\geqslant \hbar/2$$

给出 $p\geqslant\frac{\hbar}{2a}$，这时基态能量为

$$E_0=\frac{p^2}{2m}\sim\frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

**1.11**　证明流密度算符

$$\hat{j}=\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]$$

是 Hermite 算符，并求它在 $\psi(\boldsymbol{r})$ 态中的平均值表达式.

**解**：由厄米算符的定义可知，当算符 $\hat{A}$ 满足下列关系式时为厄米算符

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\,\hat{A}\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\varphi(\boldsymbol{r})[\hat{A}\psi(\boldsymbol{r})]^*\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

其中 $\psi(\boldsymbol{r})$，$\varphi(\boldsymbol{r})$ 为两个任意波函数.

现将 $\hat{j}$ 代替上式中的 $\hat{A}$，并将 $\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 代入，这时等式左边为

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{-\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}+\frac{-\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\oint_{\infty}\mathrm{d}\boldsymbol{S}\psi^*(\boldsymbol{r})\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(\frac{-\mathrm{i}\hbar}{m}\right)\varphi(\boldsymbol{r})\right]\\&\quad+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}+\frac{\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\psi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\end{aligned}$$

上式右边第一项面积分因 $\boldsymbol{r}'$ 不在积分面上而消失，第二项正好是 $\int\varphi(\boldsymbol{r})[\hat{j}\psi(\boldsymbol{r})]^*\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$，故 $\hat{j}$ 为厄米算符.

上面用到了矢量微分公式：

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})=\nabla[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})]-[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})]\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})$$

以及

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla\varphi(\boldsymbol{r})=\nabla[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})]-[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\varphi(\boldsymbol{r})$$

同理可证

$$\langle\hat{j}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}')\hat{j}\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\psi(\boldsymbol{r})-\psi(\boldsymbol{r})\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})]$$

**1.12**　证明：$\sum_{n,m=0}^{\infty}A_{n,m}\frac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}$（$A_{n,m}$ 是实数）是 Hermite 算符.

**证明**：因为 $\hat{x}$，$\hat{p}$ 是 Hermite 算符，所以有

$$\left[\frac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}\right]^\dagger=\frac{(\hat{x}^m)^\dagger(\hat{p}^n)^\dagger+(\hat{p}^n)^\dagger(\hat{x}^m)^\dagger}{2}$$

$$= \frac{\hat{p}^n \hat{x}^m + \hat{x}^m \hat{p}^n}{2}$$

**1.13**　结合电子 Young 双缝实验中，电子被接受屏与探测器探测前后的实验测量过程，解释量子力学第三公设——测量公设中三个阶段的说法.

**解**：设双缝屏上有 $A,B$ 两条缝，通过双缝之后的电子状态可表示为

$$\psi(x,t) = \psi_A(x,t) + \psi_B(x,t)$$

这说明电子的量子态在经过双缝仪器时，和仪器由两条缝所表示的两个可区分态构成了纠缠态. 当我们要测量电子从哪条缝经过时，则测量结果一定是塌缩到和某一条缝纠缠的对应的态. ($\psi_A(x,t)$或者 $\psi_B(x,t)$) 当不测量时，则处于叠加态，于是可以认为当不可区分时，电子是同时通过两条缝. 在电子到达接收屏时 $\psi(x,t)$可以分解为与接收屏位置可区分态相纠缠的电子位置本征态的叠加.

$$\Psi(x,t) = \iiint \Psi(x',t)\delta(x-x')\mathrm{d}x'$$

其中 $\delta(x-x')$是位置本征值为 $x'$的本征态. 当在接收屏上 $x'$位置发现电子时，即已经以 $|\Psi(x,t)|^2$ 的概率塌缩到 $\delta(x-x')$态，然后以此为初态在接收屏新环境的新哈密顿量下继续演化.

**1.14**　设$\hat{\Omega}$为对应力学量 $\Omega$ 的算符，其本征值为一系列分立值 $\omega_k$. 现在对量子态 $\Psi(x)$的大量复制品进行了关于 $\Omega$ 的重复测量，所得 $\Omega$ 的实测值：(1) 必为分立的；(2) 不一定分立的. 而每次测量中，所得 $\Omega$ 的实测值：(3) 必是 $\Omega$ 的本征值之一；(4) 可以为本征值之外的某个数.

**解**：(1)、(3)是对的，(2)、(4)是错的. 被测态无论是任何量子态时都是如此.

**1.15**　为什么说轨道概念是被量子力学摒弃的纯经典的概念?

**解**：微观粒子的波粒二象性及波函数的描述导致了不确定性关系尤其是位置与动量的不确定性关系，使得在微观物理学中必须摒弃经典的轨道概念. 因为经典粒子之所以有轨道，其前提是在任意时刻可以同时确定它的位置与动量. 这和不确定性原理相违背.

**1.16**　根据不确定性关系，对“静止粒子”的概念进行讨论.

**解**：若有“静止粒子”则应理解为动量本征值为零，但根据不确定性关系，其位置应完全不确定. 即便对平面波，当 $p$ 为零时也难以理解其坐标波函数及动量波函数，故一般以不考虑“静止微观粒子”为宜.

# 第二章　Schrödinger 方程的一般讨论

**2.1**　设粒子在势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动，

(1) 证明其能量平均值为

$$E=\int \mathrm{d}^3 x\, W=\int \mathrm{d}^3 x\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^* V\psi\right]$$

$W$ 称为能量密度；

(2) 证明能量守恒公式：$\dfrac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{S}=0$，其中

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

**证**：(1) 设粒子的波函数为 $\psi(\boldsymbol{r})$，则其能量平均值

$$E=\int \mathrm{d}^3 x\psi^*(\boldsymbol{r})\,\hat{H}\psi^*(\boldsymbol{r})=\int \mathrm{d}^3 x\psi^*(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})$$

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

上式右边第一项，由高斯定理可以化为面积分，即

$$\iiint \nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi)\mathrm{d}^3 x=\oiint(\psi^*\nabla\psi)\cdot\mathrm{d}s$$

将束缚态边条件 $\psi|_{\pm\infty}=\nabla\psi|_{\pm\infty}=0$，代入上式可知这项为零，所以

$$E=\int \mathrm{d}^3 x\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^* V\psi\right]$$

(2)

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

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

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

$$=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{H}\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\hat{H}\psi^*=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\frac{\partial\psi}{\partial t}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)=0$$

**2.2**　考虑任意势 $V(x)$ 的时间无关的一维 Schrödinger 方程，证明：如果一个解具有性质，当 $x\to\pm\infty$ 时 $\psi(x)\to 0$，则此解必然非简并，进而是实的，除了某一可能的相因子.

**证**：用反证法. 设另一 $\phi(x)$ 满足同样的方程，且具有与 $\psi(x)$ 相同的能量 $E$，并

有 $\lim_{x\to\infty}\phi(x)\to 0$，则

$$\begin{cases}\psi''/\psi = -2m(E-V)/\hbar^2\\ \phi''/\phi = -2m(E-V)/\hbar^2\end{cases}$$

所以 $\psi''\phi-\phi''\psi=0$，$\psi'\phi-\phi'\psi=$常数.

由无穷远处条件，$\psi'\phi-\phi'\psi=0$，得

$$\psi'/\psi=\phi'/\phi,\quad [\ln\psi/\phi]'=0$$

所以 $\psi=$常数$\times\phi$，$\psi$ 和 $\phi$ 代表同一个态.

当 $V(x)$ 为实函数时，$\psi^*$ 与 $\psi$ 满足相同的方程，有相同的能量和相同的边界条件 $\lim_{x\to\infty}\psi^*=0$，故 $\psi^*=c\psi$，或 $\psi=c^*\psi^*$，由此得 $|c|^2=1$，$c=e^{i\delta}$. 此处 $\delta$ 为实数. 不妨取 $\delta=0$，则 $c=1$，$\psi$ 为实数.

**2.3**　考虑一个一维束缚粒子：

(1) 证明：$\dfrac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx=0$；

(2) 证明某粒子在一给定的时刻是定态，则它将永远保持定态；

(3) 若在 $t=0$ 时，波函数在 $-a<x<a$ 范围内是常数，而在其他处为零，利用系统的本征态表达以后时间的完整波函数.

**解**：(1)

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

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\psi+\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi\right]dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{1}{-i\hbar}(\hat{H}\psi^*)\psi+\frac{1}{i\hbar}\psi^*\hat{H}\psi\right]dx$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\psi\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*+\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\right)+(-V\psi^*\psi+\psi^*V\psi)\right]dx$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)dx=\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$

因为 $\psi$ 是束缚态，$\psi(x\to\pm\infty)=0$，所以，上式为 0.

(2) 所谓定态即指能量本征态. 设粒子在 $t_0$ 时刻处于定态，则有 $\hat{H}\psi(x,t_0)=E\psi(x,t_0)$. 任意时刻 $t$，粒子满足的 Schrödinger 方程为 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)$.

在 $\hat{H}$ 不显含 $t$ 下，积分此式得形式解

$$\psi(x,t)=e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(x,t_0)$$

不难证明，此波函数满足定态 Schrödinger 方程

$$\hat{H}\psi(x,t) = E\psi(x,t)$$

即在任意时刻也保持定态.

(3) 设

$$\psi(x,0) = \begin{cases} c, & |x| < a \\ 0, & |x| \geqslant a \end{cases}$$

式中 $c$ 是常数,归一化得 $|c|^2 = 1/2a$, $c = e^{i\delta}/\sqrt{2a}$, $\delta$ 为位相因子. 设 $t=0$ 时刻,粒子的能量本征态完备集为 $\{\psi_n(x,0)\,|\,n=0,1,2,\cdots\}$, 则有

$$\hat{H}\psi_n(x,0) = E_n\psi_n(x,0)$$

任意粒子态可用它来展开,得

$$\psi(x,0) = \sum_n a_n\psi_n(x,0)$$

$a_n$ 是与时间无关的系数,上式两边同乘以 $\psi_m^*(x,0)$,并且从负无穷到正无穷积分,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x,0)\psi(x,0)\mathrm{d}x = \sum_n a_n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x,0)\psi_n(x,0)\mathrm{d}x$$

由 $\psi_n$ 的正交归一性,得

$$a_m = \sum_n a_n\delta_{nm} = e^{i\delta}\frac{1}{\sqrt{2a}}\int_{-a}^{a}\psi_m^*(x,0)\mathrm{d}x$$

由(2)问, 得

$$\psi(x,t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0) = \sum_n a_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x,0)$$

**2.4** 证明:力学量 $A$(不显含 $t$)的平均值对时间的二次微商为

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

$H$ 为 Hamilton 量.

**证**: 不显含 $t$ 的算符 $A$ 的平均值的时间导数为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi^*(x)A\psi(x)\mathrm{d}x = \int\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(x)A\psi(x)]\mathrm{d}x \\ &= \int\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial t}A\psi - \psi^*A\frac{\partial\psi}{\partial t}\right]\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{i\hbar}\int[\psi^*AH\psi - (H\psi^*)A\psi]\mathrm{d}x = \frac{1}{i\hbar}\overline{[A,H]}\end{aligned}$$

同理可知,$A$ 平均值的二次时间微商为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{1}{i\hbar}\overline{[A,H]}\right] = -\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[A,H],H]}$$

**2.5** 证明:对于一组波包, 有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\hat{x}^2}=\frac{1}{m}\overline{(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})}$$

**证**：由题，设 $A=\hat{x}^2$，考虑到 $H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\hat{x}^2}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{x}^2,H]}=\frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{x}^2,\hat{p}^2]}=\frac{1}{m}\overline{[\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}]}$$

**2.6**　设 $F(x,p)$是 $x_k,p_k$ 的整函数，证明

$$[p_k,F]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial F}{\partial x_k},[x_k,F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}$$

整函数是指可展开成 $F(x,p)=\sum_{m,n}\sum_{k,l=1}^{3}C_{kl}^{mn}x_k^m p_l^n$ 的函数.

**证**：由对易关系 $[x_k,p_l]=\mathrm{i}\hbar\delta_{k,l}$，易证 $[x_k,p_l{}^n]=\mathrm{i}\hbar n p_l{}^{n-1}\delta_{k,l}$，$[p_k,x_l{}^m]=-\mathrm{i}\hbar m x_l{}^{m-1}\delta_{k,l}$，所以

$$\begin{aligned}[p_k,F]&=\Big[p_k,\sum_{mn}\sum_{j,l=1}^{3}C_{jl}^{mn}x_j^m p_l^n\Big]=\sum_{mn}\sum_{j,l=1}^{3}C_{jl}^{mn}[p_k,x_j^m]p_l^n\\&=\sum_{mn}\sum_{j,l=1}^{3}C_{jl}^{mn}[-\mathrm{i}\hbar m x_k^{m-1}]p_l^n\delta_{jk}=\sum_{mn}\sum_{l=1}^{3}C_{kl}^{mn}\Big(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}x_k^m\Big)p_l^n\\&=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial F}{\partial x_k}\end{aligned}$$

同理可得

$$[x_k,F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}$$

**2.7**　给定算符$\hat{A}$和$\hat{B}$，令$\hat{C}_0=\hat{B}$，$\hat{C}_1=[\hat{A},\hat{B}],\hat{C}_2=[\hat{A},\hat{C}_1],\cdots,\hat{C}_n=[\hat{A},\hat{C}_{n-1}],\cdots$，若 $\lambda$ 为常数，则有如下 Baker-Hausdorff 公式：

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\hat{C}_n$$

先用 $\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}$的指数定义式直接验证此公式的前三项，接着作一般性证明.

**证**：令 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}$，将 $f(\lambda)$按 $\lambda$ 作级数展开，有

$$f(\lambda)=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n}f(\lambda=0)$$

对照上式，只须证明下列关系即可

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n}f(\lambda=0)=\hat{C}_n$$

下面用数学归纳法证明之. 先验证前三项. 将 $f(\lambda)$按 $\lambda$ 展开，有

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\Big(1+\lambda\hat{A}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{A}^2+\cdots\Big)\hat{B}\Big(1-\lambda\hat{A}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{A}^2-\cdots\Big)$$

上式右边，只含 $\lambda^0$ 的项的系数：$\hat{B}=\hat{C}_0$；

只含 $\lambda^1$ 的项的系数：$\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}_1$；

只含 $\lambda^2$ 的项的系数：$-\hat{A}\hat{B}\hat{A}+\frac{1}{2}\hat{A}^2\hat{B}+\frac{1}{2}\hat{B}\hat{A}^2=\frac{1}{2}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]=\frac{1}{2}\hat{C}_2$.

……

由此可知，

$$f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_0e^{-\lambda\hat{A}},\qquad f(\lambda=0)=\hat{C}_0$$

$$\frac{d}{d\lambda}f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_1e^{-\lambda\hat{A}},\qquad \frac{d}{d\lambda}f(\lambda=0)=\hat{C}_1$$

$$\frac{d^2}{d\lambda^2}f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_2e^{-\lambda\hat{A}},\qquad \frac{d^2}{d^2\lambda}f(\lambda=0)=\hat{C}_2$$

假设

$$\frac{d^{n-1}}{d\lambda^{n-1}}f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}e^{-\lambda\hat{A}},\qquad \frac{d^{n-1}}{d\lambda^{n-1}}f(\lambda=0)=\hat{C}_{n-1}$$

则

$$\begin{aligned}\frac{d^n}{d\lambda^n}f(\lambda)&=\frac{d}{d\lambda}[e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}e^{-\lambda\hat{A}}]\\&=\hat{A}e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}e^{-\lambda\hat{A}}-e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}e^{-\lambda\hat{A}}\hat{A}\\&=e^{\lambda\hat{A}}[\hat{A},\hat{C}_{n-1}]e^{\lambda\hat{A}}=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_ne^{-\lambda\hat{A}}\end{aligned}$$

故有

$$\frac{d^n}{d\lambda^n}f(\lambda=0)=\hat{C}_n$$

得证.

**2.8** 设 $\hat{A},\hat{B}$ 不对易，令 $\hat{C}=[\hat{A},\hat{B}]$，设 $\hat{C}$ 与 $\hat{B}$ 对易，即 $[\hat{B},\hat{C}]=0$. 证明

$$[\hat{A},\hat{B}^n]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1},[\hat{A},e^{\lambda\hat{B}}]=\lambda\hat{C}e^{\lambda\hat{B}}$$

特例

$$[\hat{A},e^{\hat{B}}]=\hat{C}e^{\hat{B}},\ [\hat{A},f(\hat{B})]=\hat{C}f'(\hat{B})$$

$f(\hat{B})$ 是可以表成 $\hat{B}$ 正幂级数展开的函数.

**证**：用数学归纳法. 因为 $n=1$ 时式子成立，假设 $n-1$ 时也成立，即 $[\hat{A},\hat{B}^{n-1}]=(n-1)\hat{C}\hat{B}^{n-2}$，则

$$[\hat{A},\hat{B}^n]=[\hat{A},\hat{B}\hat{B}^{n-1}]=[\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^{n-1}+\hat{B}[\hat{A},\hat{B}^{n-1}]$$

$$= \hat{C}\hat{B}^{n-1} + (n-1)\,\hat{B}\hat{C}\,\hat{B}^{n-2}$$

因为$\hat{C}$与$\hat{B}$对易，$[\hat{A},\hat{B}^n]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1}$，证毕.

所以

$$[\hat{A},e^{\lambda\hat{B}}]=\left[\hat{A},\sum_n\frac{1}{n!}\lambda^n\hat{B}^n\right]=\sum_n\frac{1}{n!}\lambda^n[\hat{A},\hat{B}^n]=\sum_n\lambda^n\frac{1}{n!}n\hat{C}\hat{B}^{n-1}=\lambda\hat{C}e^{\lambda\hat{B}}$$

对于特例$[\hat{A},e^{\hat{B}}]$只需令上式中$\lambda=1$，即可得证. 对于$[\hat{A},f(\hat{B})]$

$$[\hat{A},f(\hat{B})]=[\hat{A},\sum_{n=0}a_n\hat{B}^n]=a_0[\hat{A},\hat{B}^0]+\sum_{n=1}a_n[\hat{A},\hat{B}^n]$$

$$=\sum_{n=1}na_n\hat{C}\hat{B}^{n-1}=\hat{C}f'(\hat{B})$$

**2.9**　证明 $e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}=e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}=e^{\lambda\hat{B}}e^{\lambda\hat{A}}e^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$. 其中$\hat{C}=[\hat{A},\hat{B}]$，且与$\hat{A},\hat{B}$都对易. 验证它是上面 Baker-Hausdorff 公式的特殊情况.

**证**：令 $f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\hat{A}f(\lambda)+e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{\lambda\hat{B}}=\hat{A}f(\lambda)+\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^n\hat{B}e^{\lambda\hat{B}}$$

因为$[\hat{A},\hat{B}]$与$\hat{A},\hat{B}$对易，易证$[\hat{A}^n,\hat{B}]=n[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^{n-1}$，即有$\hat{A}^n\hat{B}=\hat{B}\hat{A}^n+n[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^{n-1}$，代入上式，得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\hat{A}f(\lambda)+\hat{B}\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^ne^{\lambda\hat{B}}+[\hat{A},\hat{B}]\sum_n n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^{n-1}e^{\lambda\hat{B}}$$

$$=(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C})f(\lambda)$$

同理，可证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=f(\lambda)(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C})$$

因为$[f,(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C})]=0$，所以，可对上式积分，得

$$f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}+\lambda\hat{B}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$$

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}=e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$$

又可证 $e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}=e^{\lambda\hat{B}}e^{\lambda\hat{A}}e^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$，只须将 2.7 题中的$\hat{B}$换成 $e^{\lambda\hat{B}}$，且$\hat{C}_n=0,(n\geqslant 2)$则

$$e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\lambda\hat{A}}=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}^ne^{-\lambda\hat{A}}=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}(e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}})^n$$

$$=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}(\lambda\hat{C}_0+\lambda^2\hat{C}_1)^n=e^{\lambda\hat{C}_0+\lambda^2\hat{C}_1}=e^{\lambda\hat{B}+\lambda^2\hat{C}}$$

$\hat{B}$与$\hat{C}$对易，所以

$$e^{\lambda\hat{A}}\,e^{\lambda\hat{B}}=e^{\lambda\hat{B}}\,e^{\lambda\hat{A}}\,e^{\lambda^2\hat{C}}$$

**2.10** 定义反对易式$[A,B]_+=AB+BA$，证明

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

并与下列二式对照

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

上述代数式在计算 Fermi 子算符的对易式时极为有用.

证：$[AB,C]=ABC-CAB=ABC+ACB-ACB-CAB$

$$=A[B,C]_+-[A,C]_-\,B$$

$[A,BC]=ABC-BCA=ABC+BAC-BAC+BCA$

$$=[A,B]_+\,C-B[A,C]_-$$

**2.11** 设$\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$为矢量算符，$F$为标量算符，证明

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

证：$[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]=F\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}F\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot F\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}F$

$$=[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]$$

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

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

**2.12** 设$F$是由$\hat{\boldsymbol{r}}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$构成的整函数算符，证明：

$$[\hat{\boldsymbol{L}},F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}$$

证：$[\hat{\boldsymbol{L}},F]=[\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}},F]=[\hat{\boldsymbol{r}},F]\times\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{r}}\times[\hat{\boldsymbol{p}},F]$

由 2.6 题结果可知

$$[\hat{\boldsymbol{L}},F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}$$

**2.13** 证明：

$$\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=2\mathrm{i}\hbar\,\hat{\boldsymbol{p}}$$

$$\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{p}}]$$

注：在证明这一类题时，切记算符不可随便交换顺序. 利用三个关系式：

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}$$
$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=A_\alpha\boldsymbol{B}C_\alpha-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$
$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=A_\alpha\boldsymbol{B}C_\alpha-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$$

其中 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 是矢量算符. 上面采用了 Einstein 求和约定,以后也一直采用.

再给出几个常用的对易子

$$[x_i, x_j]=0,\quad [p_i, p_j]=0,\quad [x_i, p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$$

$$[L_i, x_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}x_k,\quad [L_i, p_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}p_k,\quad [L_i, L_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$

以及　　$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{r}=0,\ \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}=0,\ \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L},\ \boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$

**证**: 用分量来求

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_x&=\hat{p}_y\hat{L}_z-\hat{p}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{p}_z-\hat{L}_z\hat{p}_y\\&=[\hat{p}_y,\hat{L}_z]+[\hat{L}_y,\hat{p}_z]=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{p}_x]&=[\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2,\hat{p}_x]\\&=[\hat{L}_y,\hat{p}_x]\hat{L}_y+\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{p}_x]+[\hat{L}_z,\hat{p}_x]\hat{L}_z+\hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{p}_x]\\&=\mathrm{i}\hbar[-\hat{p}_z\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{p}_z+\hat{p}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{p}_y]\\&=\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_x\end{aligned}$$

同理,动量在 $y,z$ 方向的分量,也具有上面的对易关系.

**2.14**　证明:

$$\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}=0,\qquad \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0$$

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0,\qquad \hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=0$$

$$(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0,\qquad \hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=0$$

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0,\qquad \hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=0$$

$$(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

**证**:　$(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^\dagger=\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0$

同理可得

$$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0$$

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=0$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0$$

$$(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0$$

$$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0$$

下面用到 2.12 题结论:

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=(2\mathrm{i}\hbar\,\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=2\mathrm{i}\hbar\,\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})$$

$$(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=(2\mathrm{i}\hbar\,\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=2\mathrm{i}\hbar\,\hat{\boldsymbol{p}}^2=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})$$

$$[\hat{\boldsymbol{p}}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})]_i=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot L_i\,\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{p}_i(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=\hat{p}_j\hat{L}_i\,\hat{p}_j=(\hat{L}_i\,\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\,\hat{p}_k)\,\hat{p}_j=\hat{L}_i\,\hat{p}_j\,\hat{p}_j$$

$$[(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{p}}]_i=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{p}_i\,\hat{\boldsymbol{p}})-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{p}_i-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=-\hat{L}_i\,\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

讨论：更一般的结果，若 $\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，即

$$[L_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,\quad \alpha,\beta,\gamma=1,2,3 \tag{1}$$

则有

$$[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{A}]=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}) \tag{2}$$

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A} \tag{3}$$

上面(2)式的证明如下：

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{A}]&=[L_\alpha L_\alpha,A_\beta\boldsymbol{e}_\beta]=L_\alpha[L_\alpha,A_\beta]\boldsymbol{e}_\beta+[L_\alpha,A_\beta]L_\alpha\boldsymbol{e}_\beta\\&=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\alpha A_\gamma\boldsymbol{e}_\beta+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma L_\alpha\boldsymbol{e}_\beta=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

其中利用了

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta\boldsymbol{e}_\gamma=-\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta B_\alpha\boldsymbol{e}_\gamma$$

(3)式的证明：

由(1) $L_\alpha A_\beta=A_\beta L_\alpha+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\theta}A_\theta$ 可知

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha L_\beta\boldsymbol{e}_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\beta A_\alpha\boldsymbol{e}_\gamma+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}A_\theta\boldsymbol{r}_\gamma\\&=-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+2\mathrm{i}\hbar\delta_{\theta,\gamma}A_\theta\boldsymbol{e}_\gamma=-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\end{aligned}$$

其中

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}=2\delta_{\theta,\gamma}$$

**附**　关于矢量算符 $\boldsymbol{A}$ 与角动量 $\boldsymbol{L}$ 的一些代数结果.

若 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，$[L_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma$，则有

$$[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{A}]=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}) \tag{4}$$

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A} \tag{5}$$

$$[\boldsymbol{L},\boldsymbol{A}^2]=0 \tag{6}$$

由(4)、(5)、(6)进一步得到结果，

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L}$$

$$\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A}$$

$$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})$$

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{L}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{A}=-\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}^2$$

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})=-(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{L}+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}^2$$

$$\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A}$$

$$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{L}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L}$$
$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{L}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{A}$$
$$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\times\boldsymbol{A}=-\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{L}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A})$$

不难看出本题结果是上述各式之特例，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}$.

**2.15** 证明：

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2=\hat{\boldsymbol{r}}^2\,\hat{\boldsymbol{p}}^2-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2+\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$$
$$\hat{\boldsymbol{p}}^2=\frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2+p_r^2=\frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

注：$p_r=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\,\frac{1}{r}\right)$.

证：$\hat{\boldsymbol{L}}^2=(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=[(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{r}}]_i\,\hat{p}_i$

$$=\hat{\boldsymbol{r}}\cdot(\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{p}_i-\hat{r}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{p}_i=\hat{r}_j\,\hat{p}_i\hat{r}_j\,\hat{p}_i-\hat{r}_i\,\hat{p}_j\hat{r}_j\,\hat{p}_i$$
$$=\hat{r}_j(\hat{r}_j\,\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\,\hat{p}_i-(\hat{p}_j\hat{r}_i+\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\hat{r}_j\,\hat{p}_i$$
$$=\hat{\boldsymbol{r}}^2\,\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{p}_j\hat{r}_j\hat{r}_i\,\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$$
$$=\hat{\boldsymbol{r}}^2\,\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-(\hat{r}_j\,\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\delta_{jj})\hat{r}_i\,\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$$
$$=\hat{\boldsymbol{r}}^2\,\hat{\boldsymbol{p}}^2+\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2$$

其中，用到了 $\delta_{jj}=3$.

在球坐标下 $\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla=-\mathrm{i}\hbar\left[\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$，由径向动量的定义

$$\hat{p}_r\psi=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\,\frac{1}{r}\right)\psi$$
$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\nabla+\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\nabla+\left(\nabla\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)\right)\psi$$
$$=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)\right)\psi$$

将 $\nabla\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=\frac{1}{r}\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{r}}+\nabla\frac{1}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}=\frac{2}{r}$ 代入上式可得

$\hat{p}_r\psi=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi$，$\psi$ 为任意波函数，故有

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

不难得到 $\hat{p}_r^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=-\hbar^2\nabla_r^2$.

因为 $\hat{r}\cdot\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$，$(\hat{r}\cdot\hat{p})^2=-\hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}+r\frac{\partial}{\partial r}\right)$，由上面一问得

$$\frac{\hat{L}^2}{r^2}=\hat{p}^2-\frac{(\hat{r}\cdot\hat{p})^2}{r^2}+\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{r}\cdot\hat{p}}{r^2}=\hat{p}^2+\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}$$

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

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

注意：2.14，2.15 题证明的是算符恒等式，在证明时应考虑到在它们的后面尚有一任意的波函数.

**2.16** 证明

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}+2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})+(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}$$

证：$\hat{\boldsymbol{L}}\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\nabla=-\mathrm{i}\hbar\left[\boldsymbol{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$，所以 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 及 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 与 $\frac{\partial}{\partial r}$ 无关，所以 $[\hat{\boldsymbol{L}},r]=0$，$[\hat{\boldsymbol{L}}^2,r]=0$.

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(-\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times(-\mathrm{i}\hbar\nabla)+\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\times\frac{1}{r}\right)\right)$$

$$=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{L}}$$

$$=2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})+(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}$$

$$=\left[\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}})-\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right)\hat{p}_i\right]+\left[\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(\hat{p}_i\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)-\hat{L}_i\left(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)\right]$$

$$=\frac{1}{r}\hat{r}_j\hat{L}_i\hat{p}_j+(\hat{L}_j\hat{p}_i\hat{r}_j-\hat{L}_i\hat{p}_j\hat{r}_j)\frac{1}{r}$$

$$=\frac{1}{r}(\hat{L}_i\hat{r}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{r}_k)\hat{p}_j+\hat{L}_j(\hat{r}_j\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\frac{1}{r}-\hat{L}_i(\hat{r}_j\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\delta_{jj})\frac{1}{r}$$

$$=\frac{1}{r}\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\hat{L}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\frac{1}{r}+3\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}$$

$$=\hat{L}_i\left[\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\frac{1}{r}\right]+3\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\left[r\frac{\partial}{\partial r},\frac{1}{r}\right]+3\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}$$

**2.17**　证明

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

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

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

证：下面用到 2.12，2.13 题结论：

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})^2=(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})^2$$

$$=(2\mathrm{i}\hbar)^2\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})^2$$

$$-2\mathrm{i}\hbar[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})+(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}]$$

$$=(2\mathrm{i}\hbar)^2\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})^2-2\mathrm{i}\hbar[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})$$

$$+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})]$$

$$=(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})^2$$

$$=(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times$$

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

$$=[\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{L}})-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})]\hat{p}_i$$

$$=\hat{L}_j\hat{p}_i\hat{L}_j\hat{p}_i=\hat{L}_j(\hat{L}_j\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k)\hat{p}_i=\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$-(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})$$

$$=-2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})+(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})^2$$

$$=4\hbar^2\hat{\boldsymbol{p}}^2+\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$[(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})]_i=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot[\hat{p}_i(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})]-\hat{L}_i[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})]$$

$$=\hat{L}_j\hat{p}_i(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_j-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})$$

$$=(\hat{p}_i\hat{L}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k)(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_j-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$=\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})+\mathrm{i}\hbar[\hat{\boldsymbol{p}}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})]_i-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$= \mathrm{i}\hbar[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}})-(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})\hat{p}_i]-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$= \mathrm{i}\hbar\hat{p}_j\hat{L}_i\hat{p}_j-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2=\mathrm{i}\hbar(\hat{L}_i\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k)\hat{p}_j-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

**2.18** 设属于某能级 $E$ 有三个归一化的简并态$(\psi_1,\psi_2,\psi_3)$，彼此线性无关，但不正交. 试找出三个彼此正交归一化的波函数. 它们是否还简并?

**解**：可以用线性代数中的 Schmidt 正交化方法. 设三个彼此正交的归一化波函数为 $e_1,e_2,e_3$ 不难证明

$e_1=\psi_1$；

$e_2=f_2/|f_2|$，其中，$f_2=\psi_2-(e_1\cdot\psi_2)e_1$，$|f_2|$ 表示 $f_2$ 的模长；

$e_3=f_3/|f_3|$，其中，$f_3=\psi_3-(e_2\cdot\psi_3)e_2-(e_1\cdot\psi_3)e_1$，$|f_3|$ 表示 $f_3$ 的模长.

因为 $e_1,e_2,e_3$ 是 $\psi_1,\psi_2,\psi_3$ 的线性组合，所以，它们仍简并.

**2.19** 设 $\lambda$ 是一个小量，算符$\hat{A}$之逆$\hat{A}^{-1}$存在，求证：

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots$$

**证**：右边可以表为 $\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n$，则

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n-\lambda(\hat{B}\hat{A}^{-1})\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n-\sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n=\lambda^0(\hat{B}\hat{A}^{-1})^0=1$$

左边$(\hat{A}-\lambda\hat{B})(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=1$.

**2.20** 设算符$\hat{A}(\xi)$依赖于一个连续变化的参数 $\xi$，它对 $\xi$ 的导数定义为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi)=\lim_{\epsilon\to0}\frac{\hat{A}(\xi+\epsilon)-\hat{A}(\xi)}{\epsilon}$$

证明：

(1) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}\hat{B})=\dfrac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}+\hat{A}\dfrac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}$

(2) 设$\hat{A}$之逆存在，$\hat{A}$对 $\xi$ 可导，则 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}^{-1})=-\hat{A}^{-1}\dfrac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}$

(3) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\exp[\mathrm{i}\hat{O}\xi]=\mathrm{i}\hat{O}\exp[\mathrm{i}\hat{O}\xi]$

**证**：(1) 用微积分中的 Leibniz 法则.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}\hat{B}) = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\hat{A}(\xi+\epsilon)\hat{B}(\xi+\epsilon)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)}{\epsilon}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{\hat{A}(\xi+\epsilon)\hat{B}(\xi+\epsilon)-\hat{A}(\xi+\epsilon)\hat{B}(\xi)+\hat{A}(\xi+\epsilon)\hat{B}(\xi)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)}{\epsilon}$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\left[\hat{A}(\xi+\epsilon)\frac{\hat{B}(\xi+\epsilon)-\hat{B}(\xi)}{\epsilon}+\frac{\hat{A}(\xi+\epsilon)-\hat{A}(\xi)}{\epsilon}\hat{B}(\xi)\right]$$

$$= \hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}+\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}$$

(2)

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}^{-1}\hat{A}) = \frac{\mathrm{d}\hat{A}^{-1}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}+\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}^{-1}) = -\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}$$

(3)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{O}\xi} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\sum_n\frac{1}{n!}(\mathrm{i}\hat{O}\xi)^n = \sum_n\frac{1}{n!}n\mathrm{i}\hat{O}(\mathrm{i}\hat{O}\xi)^{n-1} = \mathrm{i}\hat{O}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{O}\xi}$$

**2.21** 对幂次势 $V=\alpha|x|^n$，分别就 $\alpha>0$ 和 $\alpha<0$ 情况，用位力定理讨论存在束缚态时，$n$ 的取值范围.

**解**：由位力定理 $\langle T\rangle=\left\langle\frac{1}{2}x\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$. 因为幂次势是对称势，只考虑 $x>0$ 的一边.

$\alpha>0$，束缚态存在的条件是 $\langle T\rangle\geqslant 0$.

$$\langle T\rangle = \frac{n}{2}\alpha\langle|x|^n\rangle\geqslant 0$$

$$\Rightarrow n>0$$

$\alpha<0$，束缚态存在的条件是 $\langle E\rangle\leqslant 0$，$\langle T\rangle\geqslant 0$.

$$\langle T\rangle = \frac{n}{2}\alpha\langle|x|^n\rangle\geqslant 0$$

$$\Rightarrow\langle E\rangle = \langle T+V\rangle = \frac{n+2}{2}\alpha\langle|x|^n\rangle\leqslant 0$$

$$\Rightarrow -2<n<0$$

# 第三章　一维问题

**3.1**　一个质量为 $m$ 的粒子在一维无限深势阱($0\leqslant x\leqslant a$)中运动，$t=0$ 时刻的初态波函数为

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{8}{5a}}\left(1+\cos\frac{\pi x}{a}\right)\sin\frac{\pi x}{a}$$

(1) 在后来某一时刻 $t_0$ 的波函数是什么?

(2) 体系在 $t=0$ 和 $t=t_0$ 时的平均能量是多少?

(3) 在 $t=t_0$ 时，在势阱左半部$\left(0\leqslant x\leqslant\frac{a}{2}\right)$发现粒子的概率是多少?

**解**：(1) 无穷深方势阱中粒子的定态波函数为$\left\{\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right\}$，相应的能量 $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

将 $t=0$ 时刻粒子的初态波函数用这组定态波函数展开

$$\psi(x,0)=\sum_n A_n\psi_n$$

$$\psi(x,0)=A_1\psi_1+A_2\psi_2$$

其中 $A_1=\sqrt{\frac{4}{5}}$，$A_2=\sqrt{\frac{1}{5}}$.

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right)+\sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$t=t_0$ 时刻粒子的波函数

$$\psi(x,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t_0/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}A_1\psi_1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}A_2\psi_2$$

$$=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}\sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right)+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}\sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)$$

(2) $t=0$ 时，$\langle E\rangle=\int\psi^*(x,0)\hat{H}\psi(x,0)\mathrm{d}x=\frac{4}{5}E_1+\frac{1}{5}E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{5ma^2}$；$t=t_0$ 时，同理可得，能量与 $t=0$ 时相同.

(3)

$$\int_0^{\frac{a}{2}}\psi^*(x,t_0)\psi(x,t_0)\mathrm{d}x$$

$$= \int_0^{\frac{a}{2}} (e^{-iE_1 t_0/\hbar} A_1 \psi_1 + e^{-iE_2 t_0/\hbar} A_2 \psi_2)^* (e^{-iE_1 t_0/\hbar} A_1 \psi_1 + e^{-iE_2 t_0/\hbar} A_2 \psi_2) dx$$

$$= \int_0^{\frac{a}{2}} \left[ A_1^2 \psi_1^2 + A_2^2 \psi_2^2 + 2A_1 A_2 \psi_1 \psi_2 \cos \frac{(E_2 - E_1) t_0}{\hbar} \right] dx$$

$$= \int_0^{\frac{a}{2}} \left( \frac{8}{5a} \sin^2 \frac{\pi x}{a} + \frac{2}{5a} \sin^2 \frac{2\pi x}{a} + \frac{8}{5a} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \cos \frac{3\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2} \right) dx$$

$$= \int_0^{\frac{a}{2}} \left[ \frac{4}{5a} \left( 1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) + \frac{1}{5a} \left( 1 - \cos \frac{4\pi x}{a} \right) \right.$$

$$\left. + \frac{4}{5a} \left( \cos \frac{\pi x}{a} - \cos \frac{3\pi x}{a} \right) \cos \frac{3\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2} \right] dx$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos \frac{3\pi^2 \hbar t_0}{2ma^2}$$

**3.2** 自由转子——一个量子"刚体"，具有惯性矩 $I_z$，自由地在 $xy$ 平面内转动，$\phi$ 为转角.

(1) 找出其能量本征值 $E_n$ 和本征波函数 $\psi_n(\phi)$；

(2) 在 $t=0$ 时转子由波包 $\psi(0)=A\sin^2\phi$ 描述，求在 $t>0$ 时的 $\psi(t)$. 此系统的 Hamilton 量为 $H=\frac{J_z^2}{2I_z}$.

**解**：(1) 写出其 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2I_z} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi = E\psi$$

解此方程可得

$$\psi(\phi) = Ae^{ik\phi}$$

其中 $k=\frac{\sqrt{2I_z E}}{\hbar}$ 利用波函数归一化条件可求出

$$A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}.$$

再利用周期边条件 $\psi(2\pi)=\psi(0)$ 可知 $k$ 为整数，故可知

能量本征态为 $\psi_n(\phi)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{in\phi}$，

能量本征值 $E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2I_z}$，$(n=0,\pm1,\cdots)$.

(2) $t=0$ 时的波函数 $\psi(0)$ 用这一组本征波函数展开

$$\psi(0) = A\sin^2\phi = A\left(\frac{1-\cos 2\phi}{2}\right) = \frac{A}{2} - \frac{A}{2} \frac{e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}}{2} = \frac{A}{2} - \frac{A}{4}(e^{2i\phi} + e^{-2i\phi})$$

$$\psi(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(0) = \frac{A}{2} - \frac{A}{4}\left[e^{-i(-2\phi+2\hbar t/I_z)} + e^{-i(2\phi+2\hbar t/I_z)}\right]$$

由归一化条件，$|A|^2\int\sin^4\varphi d\varphi=1$，有

$$A=\frac{2}{\sqrt{3\pi}}$$

**3.3** 一个电子被禁闭在一维盒子中，并处于基态上. 盒宽 $10^{-10}$ m，电子能量为 38eV. 计算

(1) 电子在其第一激发态的能量；

(2) 当电子处于基态时盒壁所受的平均力.

**解**：设盒宽为 $a$，一维无限深方势阱中，能量本征值为 $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，

(1) 第一激发态 $E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=4E_1=4\times38=152(\text{eV})$.

(2) 用到 Hellmann-Feynman 定理：

$$\frac{dE_n(\lambda)}{d\lambda}=\int\psi_n^*(x)\frac{\partial\hat{H}(x,\lambda)}{\partial\lambda}\psi_n(x)dx=\left\langle\frac{\partial\hat{H}(x,\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle$$

$$\langle F\rangle=\left\langle-\frac{\partial\hat{V}}{\partial a}\right\rangle=\left\langle-\frac{\partial\hat{H}}{\partial a}\right\rangle=-\frac{dE_1}{da}=-\frac{d}{da}\left[\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right]$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^3}=\frac{2}{a}\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=7.6\times10^9(\text{cm}^{-1}\cdot\text{eV})$$

**3.4** 质量为 $m$ 的粒子处在一维短程势 $V(x)=-V_0\delta(x)$ 中，求束缚能.

**解**：Schrödinger 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-V_0\delta(x)\right)\psi(x)=E\psi(x)\quad(E<0)\tag{1}$$

在离开原点处，Schrödinger 方程

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

解为

$$\begin{cases}\psi_I=Ae^{kx}, & x<0,\\ \psi_{II}=Ae^{-kx}, & x>0,\end{cases}\quad k^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}$$

在原点附近$(-\epsilon,+\epsilon)$积分(1)式，并取极限 $\epsilon\to0$

$$\lim_{\epsilon\to0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_0\delta(x)\right)\psi(x)dx=\lim_{\epsilon\to0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}E\psi(x)dx$$

$$\lim_{\epsilon\to0}[\psi'(+\epsilon)-\psi'(-\epsilon)]+\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)=0$$

$$\lim_{\epsilon\to0}[-Ake^{-k\epsilon}-Ake^{-k\epsilon}]+\frac{2mV_0}{\hbar^2}A=0$$

$$k=\frac{mV_0}{\hbar^2}$$

由于 $k^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}$，所以

$$E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

**3.5** 证明：当 $\frac{a}{\hbar}\to\infty$，(3.4a)式将过渡成为(3.4b)式.

提示：利用表达式 $\delta(x)=\lim_{a\to\infty}\frac{\sin^2 ax}{\pi a x^2}$.

证：由(3.4b)式，有

$$|\varphi(p)|^2=\frac{1}{2}\delta\left(p-\frac{\pi\hbar}{2a}\right)+\frac{1}{2}\delta\left(p+\frac{\pi\hbar}{2a}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\lim_{\frac{a}{\hbar}\to\infty}\left[\frac{\sin^2\frac{a}{\hbar}\left(p-\frac{\pi\hbar}{2a}\right)}{\pi\frac{a}{\hbar}\left(p-\frac{\pi\hbar}{2a}\right)^2}+\frac{\sin^2\frac{a}{\hbar}\left(p+\frac{\pi\hbar}{2a}\right)}{\pi\frac{a}{\hbar}\left(p+\frac{\pi\hbar}{2a}\right)^2}\right]$$

当 $\frac{a}{\hbar}$ 有限时，

$$|\varphi(p)|^2=\frac{a}{2\pi\hbar}\left[\left(\frac{ap}{\hbar}+\frac{\pi}{2}\right)^2\sin^2\frac{a}{\hbar}\left(p-\frac{\pi\hbar}{2a}\right)+\left(\frac{ap}{\hbar}-\frac{\pi}{2}\right)^2\sin^2\frac{a}{\hbar}\left(p+\frac{\pi\hbar}{2a}\right)\right]$$

$$\cdot\left[\left(\frac{ap}{\hbar}\right)^2-\left(\frac{\pi}{2}\right)^2\right]^2$$

$$=\frac{\pi a}{2\hbar}\cos^2\left(\frac{ap}{\hbar}\right)\left[\left(\frac{ap}{\hbar}\right)^2-\left(\frac{\pi}{2}\right)^2\right]^{-2}$$

即(3.4a)式.

**3.6** 一个质量为 $m$ 的粒子在势 $V(x)$ 的作用下作一维运动. 假如它处在 $E=\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m}$ 的能量本征态 $\psi(x)=(\gamma^2/\pi)^{1/4}e^{-\gamma^2x^2/2}$ 上.

(1) 求粒子的平均位置；(2) 求粒子的平均动量；(3) 求 $V(x)$；(4) 求粒子动量在 $p\to p+dp$ 之间概率 $P(p)dp$.

解：(1)

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\psi(x)dx=(\gamma^2/\pi)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma^2x^2}xdx$$

因为 $x$ 为奇函数，所以上式积分为 0；

(2) 解法一：

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)dx=i\hbar(\gamma^2/\pi)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma^2x^2}\gamma^2xdx=0$$

解法二：

这一结果也可以通过下述考虑给出，因为 $\psi^* = \psi$（$\psi$ 为实数），所以，$\langle \boldsymbol{p} \rangle = -\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\psi'(x)\mathrm{d}x$，上式左边为实数（$\boldsymbol{p}$ 为可观察量），而右边为一纯虚数，故必有 $\langle \boldsymbol{p} \rangle = 0$. 所以在一维束缚态中 $\langle \boldsymbol{p} \rangle = 0$（一维束缚态波函数，可取为实函数）.

(3)

$$E\psi(x) = \hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2 x} + V(x)\right)\psi(x)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-\gamma^2 + \gamma^4 x^2) + V(x)\right]\psi(x)$$

$$V(x) = \frac{\hbar^2\gamma^4 x^2}{2m}$$

(4) 波函数作 Fourier 变换转换到动量空间，（积分公式：$\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2}\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha}$）.

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\psi(x)\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\gamma^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\gamma^2}{2}\left(x-\frac{p}{\gamma^2\hbar}\right)^2 - \frac{p^2}{2\gamma^2\hbar^2}}\mathrm{d}x$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\gamma^2}{\pi}}\sqrt{\frac{2\pi}{\gamma^2}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\gamma^2\hbar^2}} = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi\gamma^2\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\gamma^2\hbar^2}}$$

$$P(p)\mathrm{d}p = \varphi^*(p)\varphi(p)\mathrm{d}p = \left(\frac{1}{\hbar^2\gamma^2\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\gamma^2\hbar^2}}$$

**3.7** 一个质量为 $m$ 的粒子处于频率为 $\omega$ 的一维谐振子势阱的基态上，受到一冲力 $p\delta(t)$. 求它仍处于基态的概率.

**解**：设粒子的动量为 $P$，初始时动量为 $p_0$.

$F = p\delta(t) = \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t}$，则粒子的动量是一个阶跃函数 $P = ph(t) + p_0 = \begin{cases} p_0 + p, & t > 0 \\ p_0, & t < 0 \end{cases}$

转到动量空间 $\varphi(p_0) \to \varphi(p_0 + p)$.

谐振子基态 $\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$，

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}}\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\int\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} - \frac{\mathrm{i}px}{\hbar}}\mathrm{d}x$$

$$= \sqrt[4]{\frac{1}{\pi m\omega\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}}$$

初态 $\varphi(p_0)$，末态 $\varphi(p_0 + p)$，

$$P = |\langle\varphi(p_0) \mid \varphi(p_0 + p)\rangle|^2 = \left|\sqrt{\frac{1}{\pi m\omega\hbar}}\int\mathrm{e}^{-\frac{(p_0+p)^2}{2\hbar m\omega} - \frac{p_0^2}{2\hbar m\omega}}\mathrm{d}p_0\right|^2$$

$$= \mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}\left|\int\sqrt{\frac{1}{\pi m\omega\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2\hbar m\omega}(p_0 + p/2)^2}\mathrm{d}p_0\right|^2$$

$$= \mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}$$

也可以在 $x$ 表象中看此问题，冲击后体系的波函数为

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int\varphi(p')\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(p'+p)x}\mathrm{d}p'=\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}xp}\psi_0(x)$$

其中 $\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}$，$\alpha=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}$，故有

$$P=\left|\int\psi_0^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x\right|^2=\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}$$

**3.8** 粒子在深度为 $V_0$，宽度为 $a$ 的对称方势阱中运动，求

(1) 在阱口附近刚好出现一条束缚能级($E\approx V_0$)的条件；

(2) 束缚态能级总数.

**解**：写出 1,2,3 区内的 Schrödinger 方程.

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi_1+V_0\psi_1=E\psi_1,\ x<-a/2,\ \psi_1=A\mathrm{e}^{k_1x},\ k_1^2=\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi_2=E\psi_2,\ |x|\leqslant a/2,\ \psi_2=B\sin k_2x+C\cos k_2x,\ k_2^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi_3+V_0\psi_3=E\psi_3,\ x>a/2,\ \psi_3=D\mathrm{e}^{-k_1x},\ k_1^2=\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\end{cases}$$

$$E\approx V_0(E<V_0),\qquad k_1\to 0$$

(1) 将 $\psi_2$ 分为奇、偶宇称态，

$$\begin{cases}\psi_2=B\sin k_2x, & \text{奇宇称态}\\ \psi_2=C\cos k_2x, & \text{偶宇称态}\end{cases}$$

并利用 $\psi,\psi'$ 连续，$\psi'_1(a/2)=\psi'_2(a/2)\propto k_1\to 0$.

对于奇、偶宇称态分别有

$$\begin{cases}\psi'_2=Bk_2\cos k_2a/2=0,\ k_2=\dfrac{n\pi}{a}\quad(n=1,3,\cdots)\\ \psi'_2=Ck_2\sin k_2a/2=0,\ k_2=\dfrac{n\pi}{a}\quad(n=2,4,\cdots)\end{cases}$$

因为 $k_2^2=\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\leqslant\frac{2mV_0}{\hbar^2}$，阱口刚好出现一条能级的条件是

$$1\leqslant\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\quad\text{即}\quad V_0\geqslant\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

(2)(参见书 59～60 页)

由书中图 3-4 可见，若 $\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}<\pi^2$，即圆半径内，(或由束缚态存在定理) 存在一个束缚态，为偶宇称态；

若 $\pi^2\leqslant\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}<(2\pi)^2$，阱中出现另一条束缚能级，为奇宇称态；

若$(2\pi)^2 \leqslant \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < (3\pi)^2$，阱中出现第三条束缚能级；

……

若$(n\pi)^2 \leqslant \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < [(n+1)\pi]^2$，出现第 $n+1$ 条能级.

所以，束缚能级总数 $N=1+\left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right]$，这里的$\left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right]$表示不超过$\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}$的最大整数.

**3.9** 一个一维无限深方势阱将一粒子禁闭在区域 $0 \leqslant x \leqslant L$ 中. 描绘其最低能量本征态波函数. 若在阱中心加一个排斥的 $\delta$ 函数势 $H'=\lambda\delta(x-L/2)$，$(\lambda>0)$，画出新波函数，并叙述能量是增加还是减少. 若其最初能量为 $E_0$，当 $\lambda\to\infty$时它变成什么?

**解**：无 $\delta$ 势时，最低能量本征函数及本征值为

$$\begin{cases}\phi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi x}{L} \\ E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\end{cases}$$

加入 $\delta$ 势后的 Schrödinger 方程写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi(x)+\lambda\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)\psi = E\psi$$

在 $x\neq L/2$ 处，解得的波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1\sin kx, & 0 \leqslant x < L/2, \\ A_2\sin k(x-L), & L/2 < x \leqslant L, \end{cases} \qquad k = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

由波函数连续，可得

$$A_1\sin(kL/2) = A_2\sin(-kL/2)$$

$$A_1 = -A_2$$

再在$\frac{L}{2}-\epsilon < x < \frac{L}{2}+\epsilon$，$(\epsilon\to 0)$处，积分上述 Schrödinger 方程，

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{\frac{L}{2}-\epsilon}^{\frac{L}{2}+\epsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi(x)+\lambda\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)\psi = E\psi\right)$$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\psi'\left(\frac{L}{2}+\epsilon\right)-\psi'\left(\frac{L}{2}-\epsilon\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\psi\left(\frac{L}{2}\right)$$

此式称为在 $\delta$ 势中的波函数一阶导数跃变条件. 将波函数代入上式，有

$$\lim_{\epsilon\to 0}A_2k\cos k\left(-\frac{L}{2}+\epsilon\right)-A_1k\cos k\left(\frac{L}{2}-\epsilon\right)$$

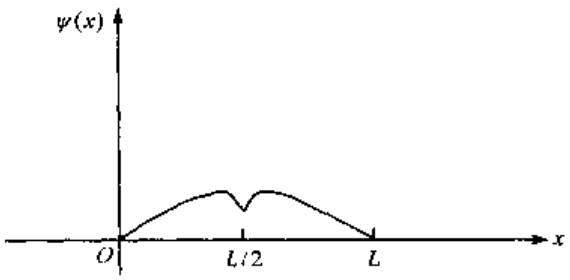
$$=2A_1 k\cos k\frac{L}{2}=\frac{2m}{\hbar^2}\lambda A_1\sin k\frac{L}{2}$$

最后得 $\tan\frac{kL}{2}=-\frac{\hbar^2}{m\lambda}k$.

根据上式，可用图解法或者数值解法求出 $k$ 的特征值，从而求出能级 $E$. 设 $K_0$ 为最小的本征值，即相应波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\sin K_0 x, & 0\leqslant x<L/2\\ -A\sin K_0(x-L), & L/2\leqslant x\leqslant L\end{cases}$$

因为一维基态波函数无节点，故可知其图形如题 3.9 图所示.



题 3.9 图

阱中心无 $\delta$ 势时，$E_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\hbar\pi}{L}\right)^2$；加入 $\delta$ 势后，随 $\lambda$ 增加，能量增加；当 $\lambda\to\infty$，$\tan\frac{kL}{2}\sim 0$，$k\to\frac{2n\pi}{L}$，$E_n\to\frac{1}{2m}\left(\frac{2n\hbar\pi}{L}\right)^2$，这个方势阱化为两个长为 $L/2$ 的无穷深方势阱.

**3.10**　质量为 $m$ 的粒子在一维势场 $V(x)=-g[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$ 中运动，$g$ 是大于零的常数. 求基态能量本征函数，并导出联系 $g$ 和能量本征值的方程.

**解**：Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)-g[\delta(x-a)+\delta(x+a)]\psi(x)=E\psi(x).$$

设 $E<0$，$k=\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$. 在 1,2,3 区解得其波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{kx}, & x\leqslant -a\\ B\sinh kx+D\cosh kx, & |x|<a\\ Ce^{-kx}, & x\geqslant a\end{cases}$$

将 2 区的波函数分为奇、偶宇称态，由波函数连续

对奇宇称态 $\left.\begin{aligned}Ae^{kx}|_{x=-a}&=B\sinh kx|_{x=-a},\ \to\ Ae^{-ka}=-B\sinh ka\\ Ce^{-kx}|_{x=a}&=B\sinh kx|_{x=a},\ \to\ Ce^{-ka}=B\sinh ka\end{aligned}\right\}A=-C$

$B=\frac{Ce^{-ka}}{\sinh ka}$；

对偶宇称态 $\left.\begin{aligned}Ae^{kx}|_{x=-a}&=D\cosh kx|_{x=-a},\ \to\ Ae^{-ka}=D\cosh ka\\ Ce^{-kx}|_{x=a}&=D\cosh kx|_{x=a},\ \to\ Ce^{-ka}=D\cosh ka\end{aligned}\right\}A=C$

$D=\frac{Ce^{-ka}}{\cosh ka}$.

在区域$(-a-\epsilon,-a+\epsilon),(a-\epsilon,a+\epsilon)$分别积分此 Schrödinger 方程

$$\begin{cases}\psi'(-a+\epsilon)-\psi'(-a-\epsilon)=-\dfrac{2mg}{\hbar^2}\psi(-a)\\ \psi'(a+\epsilon)-\psi'(a-\epsilon)=-\dfrac{2mg}{\hbar^2}\psi(a)\end{cases}$$

将 1,2,3 区的波函数根据奇偶宇称代入得

奇宇称

$$\begin{cases}Bk\cosh k(-a)-Ake^{k(-a)}=-\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ae^{k(-a)}\\ -Cke^{-ka}-Bk\cosh ka=-\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ce^{-ka}\end{cases}$$

偶宇称

$$\begin{cases}Dk\sinh k(-a)-Ake^{k(-a)}=-\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ae^{k(-a)}\\ -Cke^{-ka}-Dk\sinh ka=-\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ce^{-ka}\end{cases}$$

化简后得

$$\begin{cases}\dfrac{k\hbar^2}{mg}=1-e^{-2ka}, & \text{奇宇称态}\\ \dfrac{k\hbar^2}{mg}=1+e^{-2ka}, & \text{偶宇称态}\end{cases}$$

因为 $E\propto k^2$,且 $E<0$,所以偶宇称态能级更低,偶宇称态为基态,所以基态波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}D\cosh ka\,e^{ka}e^{-k|x|}, & |x|>a\\ D\cosh kx, & |x|\leqslant a\end{cases}$$

由波函数归一化求系数 $D$

$$2\int_a^{+\infty}(D\cosh ka\,e^{ka}e^{-kx})^2\,dx+\int_{-a}^{a}(D\cosh kx)^2\,dx=1$$

$$D=\left[\frac{e^{2ka}+2ka+1}{2k}\right]^{-1/2}$$

**3.11** 考虑一谐振子,令 $\psi_0$ 和 $\psi_1$ 分别为它的基态与第一激发态的波函数(均为实的和归一化的). 令 $A\psi_0+B\psi_1$ 是某一瞬时振子的波函数,$A$ 和 $B$ 是实数. 证明 $x$ 的平均值一般不为零. $A$ 和 $B$ 取什么值$\langle x\rangle$为最大和最小?

**解**:谐振子的本征态 $\psi_n$,$n$ 为奇(偶)数时,分别为奇(偶)函数.

$$\begin{aligned}\langle x\rangle&=\int(A\psi_0+B\psi_1)^*\,x(A\psi_0+B\psi_1)\,dx\\ &=\int(A^*B\psi_0^*\,x\psi_1+AB^*\psi_1^*\,x\psi_0)\,dx\\ &=\int 2AB\psi_0\,x\psi_1\,dx=2AB\int\psi_0\,x\psi_1\,dx\end{aligned}$$

$$= [1-(A-B)^2]\int \psi_0 x\psi_1 \,\mathrm{d}x$$

一般不为零.

考虑到 $A^2+B^2=1$，$A=B=1/\sqrt{2}$ 时，$\langle x\rangle$ 最大；$A=-B=1/\sqrt{2}$ 时，$\langle x\rangle$ 最小.

**3.12**　若粒子从右边入射，求一维阶梯势的反射和透射系数，一维阶梯势为

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

**解**：粒子从右边入射，所以 $E>V_0$.

入射波　　$\psi_i=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}$

反射波　　$\psi_r=B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}$

透射波　　$\psi_t=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}$

其中，$k_1=\sqrt{\dfrac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$，$k_2=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$.

由波函数及波函数的一阶导数连续条件得

$$\begin{cases}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}+B\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}\big|_{x=0}\Rightarrow A+B=C\\ Ak_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}-Bk_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}=Ck_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}\big|_{x=0}\Rightarrow(A-B)k_1=Ck_2\end{cases}$$

由上式可解出反射系数

$$|R|^2=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left|\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right|^2=\left|\frac{\sqrt{E-V_0}-\sqrt{E}}{\sqrt{E-V_0}+\sqrt{E}}\right|^2=\frac{V_0^2}{(\sqrt{E-V_0}+\sqrt{E})^4}$$

透射系数 $|T|^2=1-|R|^2$.

注意：透射系数不能用 $\left|\dfrac{C}{A}\right|^2$，这是因为，透射系数的定义为 $T=\dfrac{j_t}{j_i}$，$j$ 是概率流密度正比于 $k$，因为势垒两边的波矢不同，所以不是简单的 $\left|\dfrac{C}{A}\right|^2$.

**3.13**　求在一维常数虚势 $-\mathrm{i}V(V\ll E)$ 中运动的粒子的波函数. 计算概率流密度并证明虚势代表粒子的吸收. 求相应的吸收系数.

**解**：由 Schrödinger 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{2m(E+\mathrm{i}V)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

可解得波函数为

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}\left(1+\frac{\mathrm{i}V}{E}\right)}x}\approx\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\left(1+\frac{\mathrm{i}V}{2E}\right)x}$$

这里的正负表示左右行波，由下面看到粒子存在吸收，故波函数不归一. 取

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x}\mathrm{e}^{-\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{2E}x}$$

粒子存在吸收，则有

$$j(x)=j(0)\mathrm{e}^{-\alpha x}$$

这里 $j(x)\propto\left[\psi^*\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}-\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\psi\right]$ 为概率流密度，$\alpha$ 为吸收系数.

由上面 $j(x)$ 的定义可解出

$$j(x)\propto \mathrm{e}^{-\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{V}{E}}x}$$

故存在粒子的吸收，吸收系数 $\alpha=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{V}{E}}$.

**3.14** 一个质量为 $m$ 的理想的乒乓球在无反弹的桌子上跳动，并处于它自己的基态. 设只考虑垂直方向上的一维运动. 证明其能量依赖于 $m$，$g$ 和 $E=Kmg\left(\frac{m^2g}{\hbar^2}\right)^{\alpha}$，确定 $\alpha$.

**解**：乒乓球的势能为 $V=mgx$，Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+mgx$$

由量纲分析，$[H]=[E]=\left[\frac{\hbar^2}{mx^2}\right]=[mgx]$，$[x]=\left[\frac{m^2g}{\hbar^2}\right]^{-1/3}$.

所以 $[E]=\left[mg\left(\frac{m^2g}{\hbar^2}\right)^{-1/3}\right]$，也就是说必定有 $E=Kmg\left(\frac{m^2g}{\hbar^2}\right)^{-1/3}$，$K$ 是无量纲常数.

对照题目条件，可知 $\alpha=-\frac{1}{3}$.

**3.15** 下面是一个关于一维 Schrödinger 方程本征值 $E_n(E_1<E_2<E_3<\cdots)$ 的定理.

**定理**：如果势 $V_1(x)$ 给出本征值 $E_{1n}$，$V_2(x)$ 给出本征值 $E_{2n}$，且有 $V_1(x)\leqslant V_2(x)$ 处处成立，则有 $E_{1n}\leqslant E_{2n}$.

(1) 证明这个定理.

(2) 考虑势

$$U(x)=\frac{1}{2}k\begin{cases}x^2, & |x|<a\\ a^2, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

求这个势所能具有的束缚态数目. 假设这个数目 $N\geqslant 1$，决定 $N$ 的上界(或下界).

(1) 提示：利用 Hellmann-Feynman 定理，考虑一个含实常数 $\lambda$ 的辅助势 $V(\lambda,x)$：

$$V(\lambda,x)=(1-\lambda)V_1(x)+\lambda V_2(x)$$

(2) 提示：选择一个可解的比较势，利用此定理.

**解**：(1) 令 $V(\lambda,x)=\lambda V_2(x)+(1-\lambda)V_1(x)$，显然 $V(0,x)=V_1(x)$，$V(1,x)=V_2(x)$.

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

$$\hat{H}(\lambda)=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\lambda,x)$$

$$\hat{H}(\lambda)\mid n,\lambda\rangle=E_n(\lambda)\mid n,\lambda\rangle$$

由 Hellmann-Feynman 定理

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}\lambda}&=\langle n,\lambda\mid\frac{\partial\hat{H}(\lambda)}{\partial\lambda}\mid n,\lambda\rangle\\&=\langle n,\lambda\mid\frac{\partial V(\lambda,x)}{\partial\lambda}\mid n,\lambda\rangle\\&=\int\frac{\partial V}{\partial\lambda}\mid\psi_n(x,\lambda)\mid^2\mathrm{d}x\geqslant 0\end{aligned}$$

因为 $E_n$ 关于 $\lambda$ 是增函数，所以 $E_{1n}=E_n(0)\leqslant E_n(1)=E_{2n}$.

(2) 令 $V(x)=kx^2/2$，则 $V(x)\geqslant U(x)$.

设 $E_n$ 为势 $U(x)$ 对应的能级，则有 $E_n\leqslant(n+1/2)\hbar\omega(\omega=\sqrt{\frac{k}{m}})$. $E_n\leqslant ka^2/2$ 对应于束缚态，因为 $E_n\leqslant(n+1/2)\hbar\omega$，所以，在 $(0,ka^2/2)$ 区间内，$U(x)$ 相应的能级数大于 $V(x)$ 相应的能级数，所以解 $(N+1/2)\hbar\omega\leqslant ka^2/2$，将得到束缚态数目的下限 $\left[\frac{m\omega a^2}{2\hbar}\right]$.

另外，若取势 $V(x)$ 为一有限深方势阱，

$$V(x)=\begin{cases}ka^2/2, & \mid x\mid\geqslant a\\ 0, & \mid x\mid<a\end{cases}$$

同理可知，$U(x)$ 的束缚态数少于 $V(x)$ 的束缚态数，后者为 $\left[\frac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]+1$. 所以，束缚态数目上限为 $\left[\frac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right](N\gg 1,1$ 可以略去). 综上，束缚态数目应介于 $\left[\frac{m\omega a^2}{2\hbar}\right]$ 和 $\left[\frac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]$ 之间.

**3.16** 设实算符 $\hat{A}$ 满足二次方程 $\hat{A}^2-3\hat{A}+2=0$，且知这是 $\hat{A}$ 满足的最低阶方程. 问

(1) $\hat{A}$ 的本征值为何？(2) $\hat{A}$ 的本征态为何？(3) 证明 $\hat{A}$ 是可观测量.

**解**：(1) $\hat{A}$ 的本征值是二次方程的根 $\hat{A}=1$，$\hat{A}=2$.

(2) 由线性代数，算符表示成非退化矩阵，故 $\hat{A}$ 可表示为 $2\times 2$ 矩阵，为简单起见，取其为对角阵，对角元为其本征值

$$\hat{A}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 2\end{pmatrix}$$

易求得$\hat{A}$的本征态为

$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，相应的本征值为 1；

$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，相应的本征值为 2.

(3) 易知$\hat{A}$厄米，且在二维空间中，任意态可以用$\hat{A}$的这两个本征态展开，即，$\hat{A}$的本征函数族完备，所以$\hat{A}$为可观测量.

**3.17** 一个一维吸引势满足：

$$V(x)<0,\ \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xV(x)\text{ 有限},\quad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xx^2V(x)\text{ 有限},$$

(1) 用形如 $\exp\{-\beta x^2/2\}$的尝试函数证明这个势至少有一个束缚态.

(2) 假设势相当弱($\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xV(x)$,$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xx^2V(x)$ 都很“小”)，对于这尝试波函数求能量的最佳上界.

(3) 用无量纲的叙述明确表明(2)中“小”的含义.

**解**：(1) 取归一化波函数 $\psi(x)=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\beta x^2/2}$，令 $\beta=\frac{m\omega}{\hbar}$，则

$$\begin{aligned}\overline{H}&=\langle\psi\mid H\mid\psi\rangle\\&=\langle\psi\mid-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\mid\psi\rangle\\&=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/2}\int\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\beta-\beta^2x^2)+V(x)\right]\mathrm{e}^{-\beta x^2}\,\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^2}{4m}\beta+\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/2}\int V(x)\mathrm{e}^{-\beta x^2}\,\mathrm{d}x\\\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}&=\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2\sqrt{\pi\beta}}\int V(x)\mathrm{e}^{-\beta x^2}\,\mathrm{d}x-\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int x^2V(x)\mathrm{e}^{-\beta x^2}\,\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2\beta}\langle\psi\mid V(x)\mid\psi\rangle-\langle\psi\mid x^2V(x)\mid\psi\rangle\end{aligned}$$

由于 $\beta\to0$ 时，$\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}\to-\infty$；$\beta\to\infty$时，$\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}\to\frac{\hbar^2}{4m}>0$. 故$\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}=0$ 时，至少有一解：$\beta_0(>0)$. 从而尝试波函数适用. 于是，所求的能量为

$$\begin{aligned}\overline{E}=\overline{H}(\beta_0)&=\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+\langle\psi(\beta_0)\mid V(x)\mid\psi(\beta_0)\rangle\\&=\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+2\beta_0\left[-\frac{\hbar^2}{2m}+\langle\psi(\beta_0)\mid x^2V(x)\mid\psi(\beta_0)\rangle\right]\\&=-\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+2\beta_0\langle\psi(\beta_0)\mid x^2V(x)\mid\psi(\beta_0)\rangle\leqslant0\end{aligned}$$

所以，系统至少存在一个束缚态.

(2) 设$\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\mathrm{d}x=A,\int_{-\infty}^{\infty}x^2V(x)\mathrm{d}x=B.$

当$A,B$都很小时，势$V(x)$只能在$|x|$较小处有可能取较大的值，而在大$|x|$处，$V(x)$必须是快速衰减的，于是

$$A_1=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}V(x)\mathrm{d}x\approx\int_{-\infty}^{\infty}(1-\beta x^2)V(x)\mathrm{d}x=A-\beta B$$

$$B_1=\int_{-\infty}^{\infty}x^2\mathrm{e}^{-\beta x^2}V(x)\mathrm{d}x\approx\int_{-\infty}^{\infty}x^2V(x)\mathrm{d}x=B$$

由$\frac{\delta H}{\delta\beta}=0$，得

$$\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{A_1}{2\sqrt{\pi\beta}}-\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}B_1=0$$

$$\sqrt{\beta}=\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}$$

于是，得到能量的一个估计

$$\bar{E}=-\frac{\hbar^2\beta}{4m}+2\beta\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}B$$

$$=\left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}\right)^2\left(-\frac{\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\hbar^4}{36m^2}+\frac{4AB}{3\pi}}\right)$$

对它的最佳下界可如下估计：注意$A$，$B$均是负数，故$E<0$，于是有

$$E<-\frac{\hbar^2}{4m}\left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}\right)^2$$

由于对任意两实数$a$，$b$有$(a+b)^2\geqslant 4ab$，故上界为

$$\bar{E}\leqslant-\frac{\pi\hbar^6}{144m^3B^2}\sqrt{1+\frac{48m^2AB}{\pi\hbar^4}}$$

**3.18**　质量为$m$的粒子处于谐振子势$V_1(x)=\frac{1}{2}Kx^2$，$(K>0)$的基态.

(1) 如弹性系数突然增大一倍，即势场突然变为$V_2(x)=Kx^2$，$(K>0)$，随即测量粒子的能量，求粒子处于$V_2$势场的基态的概率.

(2) 势场由$V_1$突变为$V_2$后，不进行测量，经过一段时间$\tau$后，让势场重新恢复成$V_1$. 问$\tau$取什么值时，粒子正好恢复到原来势场$V_1$的基态(概率100%)?

**解**：(1)初始时谐振子基态波函数

$$\psi_0=\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega_1}{2\hbar}x^2}$$

势场改变后，谐振子的基态波函数

$$\psi_0' = \left(\frac{m\omega_2}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_2 x^2}{2\hbar}}$$

这里，$K=m\omega_1^2$，$2K=m\omega_2^2$.

势场突变后谐振子的波函数不变，仍为 $\psi_0$，所以在此波函数中找到 $\psi_0'$ 的概率幅为

$$\begin{aligned}\langle\psi_0' \mid \psi_0\rangle &= \int\left[\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_1 x^2}{2\hbar}} \left(\frac{m\omega_2}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_2 x^2}{2\hbar}}\right]dx \\ &= \int\left[\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_1 x^2}{2\hbar}} \left(\frac{\sqrt{2}m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\sqrt{2}m\omega_2 x^2}{2\hbar}}\right]dx \\ &= \sqrt[8]{2}\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{-(\sqrt{2}+1)\frac{m\omega_1 x^2}{2\hbar}}dx \\ &= \frac{\sqrt[8]{2^5}}{\sqrt{\sqrt{2}+1}}\int\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega_1 x^2}{\hbar}}dx \\ &= \frac{\sqrt[8]{2^5}}{\sqrt{\sqrt{2}+1}}\end{aligned}$$

所以概率为 $|\langle\psi_0'|\psi_0\rangle|^2=\frac{\sqrt[4]{2^5}}{\sqrt{2}+1}=0.9852$.

(2) 设 $t=0$ 时刻，Hamilton 量为 $H$，势突变后的 Hamilton 量为 $H'$. $\psi_n$，$\psi_n'$ 分别是 $H$，$H'$ 的本征态，相应的本征值为 $E_n$，$E_n'$.

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega_1, \quad E_n' = (n+1/2)\hbar\omega_2$$

将 $\psi_0$ 用 $H'$ 的本征函数族 $\{\psi_n'\}$ 展开

$$\psi_0(x,0) = \sum_n C_n\psi_n'(x,0)$$

随时间的演化

$$\psi_0(x,t) = \sum_n C_n e^{-iE_n't/\hbar}\psi_n'(x,0)$$

设经过 $\tau$ 时间后，粒子又变成 $\psi_0(x,0)$，则要求

$$\psi_0(x,\tau) = \psi_0(x,0)$$

$$\sum_n C_n e^{-iE_n'\tau/\hbar}\psi_n'(x,0) = \sum_n C_n\psi_n'(x,0)$$

$$e^{-iE_n'\tau/\hbar} = e^{-i\theta}$$

$\theta$ 为任意常数相因子.

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar\omega_2\tau}{\hbar} = \theta + 2l'\pi \qquad (l' = 0,1,\cdots)$$

$$\theta = \frac{1}{2}\omega_2\tau$$

因为 $t=0$ 时，谐振子的基态为偶宇称态，势场始终保持宇称态，所以，$n$ 只能取偶

数，取 $n=2k$，于是有：

$$2k\omega_2\tau = 2l'\pi \qquad (k=1,2,\cdots)$$

为了使此式对每一个 $k$ 都满足，$\omega_2\tau$ 必须是 $\pi$ 的整数倍，即，$\omega_2\tau=l\pi$，$(l=1,2,\cdots)$ 所以

$$\tau = l\pi\sqrt{\frac{m}{2K}}$$

**3.19** 由 Kronig-Penney 势的公式(3.37a)导出 Dirac 梳的公式(3.37c).

**解**：$\cos kl=\cosh(2\lambda a)\times\cos(2k_1b)+\epsilon\sinh(2\lambda a)\times\sin(2k_1b)$(3.37a). 其中，

$$\begin{cases} l=2a+2b, \quad \lambda=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \\ k_1=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \epsilon=\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\lambda}{k_1}-\dfrac{k_1}{\lambda}\right) \end{cases}$$

从 Kronig-Penney 势到 Dirac 梳，令每个势垒区域在保持面积($2aV_0=v_0$)的前提下无限减薄($a\to 0$). 因为 $a\to 0$，$l\to 2b$，作近似

$$\cosh(2\lambda a)=1,\ \sinh(2\lambda a)=2\lambda a$$

$$\cos(2k_1b)=\cos k_1 l,\sin(2k_1b)=\sin k_1 l$$

$$\epsilon=\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{k_1}-\frac{k_1}{\lambda}\right)=\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{V_0-E}{E}}-\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}\right)=\frac{V_0-2E}{2\sqrt{E(V_0-E)}}$$

化简上面的式子，得

$$\cos kl=\cos k_1 l+\frac{1}{2}\frac{V_0-2E}{2\sqrt{E(V_0-E)}}2a\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}\times\sin k_1 l$$

$$\cos kl=\cos k_1 l+v_0\sqrt{\frac{m}{2E\hbar^2}}\sin k_1 l$$

**3.20** 注意，弥散中的 Gauss 波包(3.46)式是平均动量为静止的情况，即$\langle\psi(x,t)|\hat{p}|\psi(x,t)\rangle=0$. 假定让它以平均速度$\frac{p_0}{m}$运动起来，试计算这时的不确定性关系.

提示：让(3.46)式以平均速度$\frac{p_0}{m}$运动起来，可对该式乘以因子 $e^{ip_0x/\hbar}$，注意这时波函数只是平均动量为 $p_0$，并非单色波.

**解**：

$$\psi(x,0)=Ce^{\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}}$$

$C$ 为归一化系数，$C=\sqrt[4]{\frac{1}{2\pi\sigma^2}}$，因为 $x,p$ 的不确定性与峰值的位置无关，为简单起见，不妨令 $x_0=0$.

令 Gauss 波包以平均速度$\frac{p_0}{m}$运动，即在原波函数上乘以因子 $e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$，得

$$\psi'(x,0)=C\exp\left\{i\frac{p_0x}{\hbar}-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right\}$$
$$=C\exp\left\{ik_0x-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right\}$$

其中 $C=\left(\frac{1}{2\pi\sigma^3}\right)^{\frac{1}{4}}$，且取 $\hbar=1$，由 Fourier 变换可得出相应的动量空间波函数

$$\varphi(k)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{\infty}\psi'(x,0)e^{-ikx}dx$$
$$=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}C\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{x}{4\sigma^2}-i(k-k_0)x\right]dx$$

利用广义高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha x^2\pm i\beta x}dx=\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}},\ \mathrm{Re}\alpha>0 \qquad (*)$$

可积出

$$\varphi(k)=\left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{1/4}\exp[-\sigma^2(k-k_0)^2]$$

所以

$$\psi'(x,t)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(k)e^{ikx-\frac{\hbar}{2m}k^2}dk$$
$$=\left(\frac{\sigma^2}{2\pi^3}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left[ik_0x-\frac{itk_0^2}{2m}\right]\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\left(\sigma^2+\frac{it}{2m}\right)(k-k_0)^2\right.$$
$$\left.+i\left(x-\frac{k_0t}{m}\right)(k-k_0)\right]d(k-k_0)$$

再次利用积分公式(*)可积出

$$\psi'(x,t)=\frac{B}{A}\exp\left[ik_0x-i\frac{k_0^2t}{2m}\right]\exp\left[-\frac{(x-k_0t/m)^2}{4\sigma^2A^2}\right]$$

其中 $A=\left(1+\frac{it}{2m\sigma^2}\right)^{1/2}$，$B=(2\pi\sigma^2)^{-1/4}$，相应的概率密度为

$$|\psi'(x,t)|^2=\frac{B^2}{|A|^2}e^{\frac{(x-\frac{k_0t}{m})^2}{2\sigma^2|A|^4}}$$

为高斯分布，由此可求出 $\Delta x(t)$ 和 $\Delta p(t)$.

$$\bar{x}(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{B^2}{|A|^2}e^{-\frac{(x-\frac{k_0t}{m})^2}{2\sigma^2|A|^4}}x\,dx=\frac{k_0t}{m}$$

即波包中心以 $v_g=\frac{p_0}{m}$ 运动

$$\overline{x^2(t)}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{B^2}{|A|^2}e^{-\frac{(x-\frac{k_0t}{m})^2}{2\sigma^2|A|^4}}x^2\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{B^2}{|A|^2} e^{-\frac{x'^2}{2\sigma^2 A^4}} \left[ x'^2 + 2x' \frac{k_0 t}{m} + \left( \frac{k_0 t}{m} \right)^2 \right] dx'$$

$$= \sigma^2 |A|^4 + \left( \frac{k_0 t}{m} \right)^2$$

上面第二步做了变量代换 $x' = x - \frac{k_0 t}{m}$，于是

$$\Delta x(t) = \sigma |A|^2 = \sigma \left[ 1 + \left( \frac{t}{2m\sigma^2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\overline{p(t)} = \int_0^{\infty} |\varphi(k)|^2 k dk$$

$$= \int_0^{\infty} \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/2} \exp\{ 2\sigma^2 (k - k_0)^2 \} k dk$$

$$= \int_0^{\infty} \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/2} \exp\{ -2\sigma^2 (k - k_0)^2 \} (k - k_0) d(k - k_0)$$

$$+ k_0 \int_0^{\infty} \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/2} \exp\{ -2\sigma^2 (k - k_0)^2 \} (k - k_0) d(k - k_0)$$

$$= k_0$$

$$\overline{p^2(t)} = \int_0^{\infty} |\varphi(k)|^2 k^2 dk$$

$$= \int_0^{\infty} \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/2} \exp\{ -2\sigma^2 (k - k_0)^2 \} k^2 dk$$

$$= \int_0^{\infty} \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/2} \exp\{ -2\sigma^2 k'^2 \} (k'^2 + 2k' k_0 + k_0^2) dk'$$

$$= \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} + k_0^2$$

因此有，$\Delta p(t) = \Delta p(0) = \frac{\hbar}{2\sigma}$. 最后得，

$$\Delta x(t) \Delta p(t) = \frac{\hbar}{2} |A| = \frac{\hbar}{2} \left[ 1 + \left( \frac{\hbar t}{2m\sigma^2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

**3.21** 证明：　$\psi(t) = \left( \frac{m}{2\pi i t \hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-y)^2 m/(2t\hbar)} \psi(y,0) dy$

是初条件为 $\psi(x,0)$（设为已知）的波包的自由粒子运动普遍解.

提示：代入自由粒子含时 Schrödinger 方程，在检验初条件时，用附录 1.3 第三种 $\delta$ 函数表达式.

**解**：将上式代入自由粒子的含时 Schrödinger 方程，左边为

$$i\hbar \dot{\psi}(x,t) = -\frac{i\hbar}{2t} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(x-y)^2 m}{2t\hbar}} \psi(y,0) dy$$

$$+ \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(x-y)^2 m}{2t\hbar}} \left[ \frac{(x-y)^2 m}{2t^2} \right] \psi(y,0) dy$$

又因为

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)=\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{\mathrm{i}(x-y)m}{t\hbar}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

所以 Schrödinger 方程的右边应为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\left(\frac{\mathrm{i}(x-y)m}{t\hbar}\right)^2+\frac{\mathrm{i}m}{t\hbar}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{(x-y)^2m}{2t^2}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2t}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

比较可知，左边等于右边.

令 $\alpha=\frac{m}{2\hbar t}$，注意到 $\sqrt{-\mathrm{i}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1-\mathrm{i})$，有

$$\psi(x,t)=(1-\mathrm{i})\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x-y)^2}\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

因为 $\delta(x-y)=\lim_{\alpha\to\infty}(1-\mathrm{i})\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x-y)^2}$，所以有

$$\psi(x,0)=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-y)\psi(y,0)\mathrm{d}y=\psi(x,0)$$

# 第四章　中心场束缚态问题

**4.1** 求证：在 $\hat{L}_z$ 的本征态下，$\overline{\hat{L}_x}=\overline{\hat{L}_y}=0$.

证：

$$\overline{\hat{L}_x}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{L}_y,\hat{L}_z]}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int Y_{lm}^*(\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y)Y_{lm}\,\mathrm{d}\Omega$$

$$=-\mathrm{i}m\int Y_{lm}^*(\hat{L}_y-\hat{L}_y)Y_{lm}\,\mathrm{d}\Omega=0$$

同理，$\overline{\hat{L}_y}=0$.

上式证明过程中利用了 $\hat{L}_z$ 的厄米性，即

$$\int Y_{lm}^*\hat{L}_z\hat{L}_y\,Y_{lm}\,\mathrm{d}\Omega=\int(\hat{L}_zY_{lm})^*\,\hat{L}_y\,Y_{lm}\,\mathrm{d}\Omega=m\hbar\int Y_{lm}^*\,\hat{L}_yY_{lm}\,\mathrm{d}\Omega$$

**4.2** 设体系处于态 $\psi=c_1Y_{11}+c_2Y_{22}$，$|c_1|^2+|c_2|^2=1$，求

(1) $L_z$ 的可能测量值及平均值；

(2) $\boldsymbol{L}^2$ 的可能测量值及相应的概率；

(3) $L_x$ 及 $L_y$ 的可能测量值.

**解**：一个算符 $A$ 在态 $\psi$ 中可能的测量值，即将 $\psi$ 用 $A$ 的本征态展开时，各本征态相应的本征值. 相应的概率即展开式中本征态前面系数的模的平方.

$Y_{lm}$ 是 $L_z$，$\boldsymbol{L}^2$ 的共同本征态

$$\begin{cases}L_z\,Y_{lm}=m\hbar Y_{lm}\\ \boldsymbol{L}^2Y_{lm}=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}\end{cases}$$

(1) $L_z$ 的可能测量值为 $\hbar$，$2\hbar$，平均值为

$$\overline{L_z}=\int(c_1Y_{11}+c_2Y_{22})^*\,L_z(c_1Y_{11}+c_2Y_{22})\mathrm{d}\Omega=\hbar\,|\,c_1\,|^2+2\hbar\,|\,c_2\,|^2$$

(2) $\boldsymbol{L}^2$ 可能的测量值为 $1(1+1)\hbar^2=2\hbar^2$，$2(2+1)\hbar^2=6\hbar^2$，相应的概率分别为 $|c_1|^2$，$|c_2|^2$.

(3) 角动量量子数 $l$ 不变的 Hilbert 空间，可以由三组各自独立完备的基矢 $Y_{lm}$，$Y_{lm'}$，$Y_{lm''}$ 构成. 这三组基分别为 $(\boldsymbol{L}^2,L_z)$，$(\boldsymbol{L}^2,L_x)$，$(\boldsymbol{L}^2,L_y)$ 的共同本征态. $l$ 确定后，$m,m'm''$ 只能取 $-l,-l+1,\cdots,l-1,l$.

所以本题中 $L_x$，$L_y$ 的可能测量值为 $0,\pm\hbar,\pm2\hbar$.

**4.3** 求证：在 $L_z$ 的本征态下，角动量沿与 $z$ 轴成 $\theta^0$ 角的方向上分量的平均值为 $m\hbar\cos\theta^0$.

**证**：角动量沿与 $z$ 轴成 $\theta^0$ 角的方向上的分量，即 $l_n=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{n}$. 其中 $\boldsymbol{n}=(\sin\theta^0\cos\varphi^0,\sin\theta^0\sin\varphi^0,\cos\theta^0)$

设 $L_z$ 的本征态为 $Y_{lm}$，

$$\bar{L}_n=\int Y_{lm}^* L_n Y_{lm}\mathrm{d}\Omega=\int Y_{lm}^*(\sin\theta^0\cos\varphi^0 L_x+\sin\theta^0\sin\varphi^0 L_y+\cos\theta^0 L_z)Y_{lm}\mathrm{d}\Omega$$

由题 4.1 可知，在 $L_z$ 的本征态下，$\bar{L}_x=0,\bar{L}_y=0$，所以 $\bar{L}_n=m\hbar\cos\theta^0$.

**4.4** 研究第一章广义不确定性关系的一个不算例外的例外：氢原子基态 $\psi_{100}$ 是角动量 $L_x$、$L_y$ 和 $L_z$ 的一个本征值全为零的共同广义本征态. 说明其实这并不违背广义不确定性关系.

**证**：力学量算符的不确定性关系与系统所处的量子态相关. 氢原子的基态波函数

$$\psi_{100}=\frac{2}{\sqrt{4\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/a}$$

$$L_z\psi_{100}=-\mathrm{i}\hbar(xp_y-yp_x)\psi_{100}=0$$

由于基态波函数关于 $x,y,z$ 对称，所以，$L_x\psi=0,L_y\psi=0,\bar{L}_x=0,\bar{L}_y=0,\bar{L}_z=0$，

$\overline{[L_i,L_j]}=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\bar{L}_k=0$，

因此，当体系处于 $Y_{100}$ 态时 $L_x,L_y$ 的不确定性关系所满足的不等式为

$$(\Delta_\psi L_x)(\Delta_\psi L_y)\geqslant\left|\frac{1}{2}\overline{[L_x,L_y]}_\psi\right|=0.$$

故在此量子态下，$\Delta_\psi L_x,\Delta_\psi L_y$ 可以同时为零，即 $L_x,L_y$ 同时具有确定的本征值.

同理，对于 $L_x,L_z;L_y,L_z$ 也一样. 故 $L_x$、$L_y$ 和 $L_z$ 存在本征值为零的共同本征态，这并不违反广义不确定性关系.

**讨论**：可观测算符 $\hat{A},\hat{B}$，若 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}\neq0$，则广义不确定性关系为

$$(\Delta_\psi A)\cdot(\Delta_\psi B)\geqslant\frac{1}{2}|\langle\hat{C}\rangle| \tag{1}$$

若 $\hat{C}$ 具有零本征值，即 $\hat{C}$ 的核空间 $\ker\hat{C}\equiv\{|\psi\rangle|\hat{C}|\psi\rangle=0\}$，是由 $\hat{C}$ 的所有零本征值的本征态张成的空间. 对于态 $|\varphi\rangle\in\ker\hat{C}$，则(1)式变为

$$(\Delta_\varphi A)\cdot(\Delta_\varphi B)\geqslant0 \tag{2}$$

进一步分析表明，核空间 $\ker\hat{C}$ 有两个子空间 $\Theta\oplus F$. 其中 $\Theta\equiv\{|\theta\rangle|\hat{A}\hat{B}|\theta\rangle=\hat{B}\hat{A}|\theta\rangle\}$，但 $|\theta\rangle$ 不是 $\hat{A},\hat{B}$ 的本征态，显然，$|\theta\rangle\in\Theta\subset\ker\hat{C}$. 且由于 $|\theta\rangle$ 不是 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 的本征态. 所以 $\Delta_\theta A>0,\Delta_\theta B>0$. 即(2)式取不等号. 一个明显的例子是 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，$[L_x,L_y]=\mathrm{i}\hbar L_z\neq0$. 对于 $l\neq0$ 时，可证 $L_xL_yY_{10}=L_yL_xY_{10}$，而且 $Y_{10}(l\neq0)$ 不是 $L_x,L_y$ 的本征态，在该态下

$$(\Delta L_x)=(\Delta L_y)=[\hbar^2 l(l+1)]^{1/2}>0$$

而 $F=\{|f\rangle|\hat{A}|f\rangle=a|f\rangle,\ \hat{B}|f\rangle=b|f\rangle\}$，$|f\rangle\in F$ 为 $\hat{A}$，$\hat{B}$ 的共同本征态且 $|f\rangle\in F\subset\ker\hat{C}$，在该态下 $\Delta_f A=\Delta_f B=0$，进一步 $(\Delta_f A)(\Delta_f B)=0$，这就是(2)取等号的情况. 一个典型的例子，$L_x$、$L_y$ 存在一个共同的本征态 $Y_{00}$，在 $Y_{00}$ 态下有 $(\Delta L_x)(\Delta L_y)=0$.

综上所述，这两种情况是广义不确定性关系(1)的特殊情况[①]而已.

**4.5**　一电子被束缚在半径为 $R$ 的匣子中，求处于基态的电子对匣壁的压力.

**解**：无穷深球方势阱中的 Schrödinger 方程

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

因为势阱关于球对称，电子的角动量守恒，波函数可写为 $\Psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$，其中 $R(r)$ 为径向波函数，满足

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]R(r)=ER(r)$$

考虑基态，$l=0$，作一变量代换，令 $\chi(r)=rR(r)$，代入上式得

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}\chi+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\chi=0\\ \chi(0)=\chi(R)=0\end{cases}$$

解得

$$\chi_n=A\sin kr,\qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\qquad E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2mR^2}$$

对于基态($n=1$)有 $E_1=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mR^2}$.

由 Hellmann-Feynman 定理

$$F=-\overline{\left(\frac{\partial H}{\partial R}\right)}=-\frac{\mathrm{d}E_1}{\mathrm{d}R}=\frac{\pi^2\hbar^2}{mR^3}$$

**4.6**　一个质量为 $m$ 的粒子被限制在半径为 $r=a$ 和 $r=b$ 的两个不可透穿的同心球面之间运动，不存在其他势. 求粒子的基态能量和归一化波函数.

**解**：同上题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}\chi+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\chi=0\\ \chi(a)=\chi(b)=0\end{cases}$$

方程的解为 $\chi=A\sin k(r+a)$，其中 $k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$.

由边界条件

① 柳盛典. 不对易算符有共同本征态的充要条件. 大学物理，待发.

$$\begin{cases}\sin k(a+\alpha)=0, & \alpha=-a\\ \sin k(b-a)=0, & k=\dfrac{n\pi}{b-a}\end{cases}$$

可得能量 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(b-a)^2}$，基态能量 $E_1=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2m(b-a)^2}$.

所以基态波函数为

$$\chi=A\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

$$\psi=A\,\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

求归一化系数

$$\int_a^b r^2\,\mathrm{d}r\int_{4\pi}\mathrm{d}\Omega\left(A\,\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}\right)^2$$

$$=4\pi A^2\int_a^b\mathrm{d}r\,\frac{1}{2}\left(1-\cos 2\pi\left(\frac{r-a}{b-a}\right)\right)=2\pi A^2(b-a)=1$$

$$A=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2}{(b-a)}}$$

所以基态波函数为

$$\psi(r)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2}{(b-a)}}\,\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

**4.7**　质量为 $m$ 的粒子在势场 $V(r)=-\lambda/r^{3/2}$ 中运动，用不确定性关系估算其基态能量.

**解**：在中心势场中，基态波函数仅是 $r$ 的函数，$r=\bar{p}=0$，故有 $\overline{p^2}=(\Delta p)^2$，$\overline{r^2}=(\Delta r)^2$. 由不确定性关系 $\Delta p\cdot\Delta r\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$，得

$$\overline{H}=\frac{\overline{p^2}}{2m}-\lambda\overline{r^{-3/2}}\geqslant\frac{(\Delta p)^2}{2m}-\lambda\left(\frac{\Delta p}{\hbar/2}\right)^{3/2}$$

求能量的极值点得到

$$\frac{\delta\overline{H}}{\delta(\Delta p)}=0$$

$$\Rightarrow\Delta p=\frac{(3m\lambda/2)^2}{(\hbar/2)^3}$$

$$\Rightarrow\overline{H}=-\frac{27}{32}\,\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6}$$

**4.8**　一质量为 $m$ 的粒子在对数势 $V(r)=c\ln(r/r_0)$ 中运动. 证明：

(1) 所有的能量本征态都有相同的方均速度，并求之；

(2) 任何两个能量本征态间的能量间隔是与质量无关的.

**证**：(1) 设粒子的速度算符为$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/m$，则能量本征态的方均速度为

$$\langle \boldsymbol{v}^2\rangle = \frac{2}{m}\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right\rangle = \frac{2}{m}\langle T\rangle$$

对于束缚态的位力定理

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2}\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$$

可知方均速度

$$\langle \boldsymbol{v}^2\rangle = \frac{1}{m}\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle = \frac{1}{m}\int r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}c\ln(r/r_0)\psi^*\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{c}{m}\int\psi^*\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{c}{m}$$

对任何本征态均成立.

(2)
$$\frac{\partial E_n}{\partial m} = \left\langle\frac{\partial H}{\partial m}\right\rangle_n = \left\langle -\frac{p^2}{2m^2}\right\rangle_n = -\frac{1}{2}\langle \boldsymbol{v}^2\rangle_n = -\frac{1}{2}\frac{c}{m}$$

$$\frac{\partial \Delta E}{\partial m} = \frac{\partial(E_n - E_{n-l})}{\partial m} = 0 \qquad (l=0,1,2,\cdots)$$

**4.9**　质量为$\mu$的粒子在中心力场$V(r)=-\frac{\alpha}{r^s}$，$(\alpha>0)$中运动. 证明：存在束缚态的条件为$0\leqslant s\leqslant 2$；再进一步证明在$E\sim 0^-$附近存在无限多束缚态能级.

**解**：由位力定理，有：

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2}\left\langle\sum_i x_i\frac{\partial V}{\partial x_i}\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle r\frac{\partial V(r)}{\partial r}\right\rangle = \left\langle\frac{s\alpha}{2r^s}\right\rangle \geqslant 0$$

$$\Rightarrow s\geqslant 0.$$

当$V(\pm\infty)\to 0$，且$V(r)\leqslant 0$束缚态的总能量须小于等于零，又有：

$$\langle E\rangle = \langle T+V\rangle = \left\langle\frac{s\alpha}{2r^s} - \frac{\alpha}{r^s}\right\rangle = \left\langle\left(\frac{s}{2}-1\right)\frac{\alpha}{r^s}\right\rangle \leqslant 0$$

$$\Rightarrow s\leqslant 2$$

所以存在束缚态的条件为

$$0\leqslant s\leqslant 2$$

接下来我们设想构造一个波包，其径向分布概率集中在$r_0$附近的$\Delta r$范围内，而且$\Delta r\ll r_0$，则

$$E = \left(\frac{s}{2}-1\right)\frac{\alpha}{r^s} \approx \left(\frac{s}{2}-1\right)\frac{\alpha}{r_0^s}$$

只要$r_0$足够大，$|E|$就可以小于任意指定正数，这样就得到无限多条密集在$E\sim 0^-$附近的能级.

也可以这样考虑这个问题，构造如上的波包，则其构成必须受测不准关系的制约：

$$\Delta r\cdot\Delta p\geqslant h$$

由于束缚定态$\langle p\rangle=0$，所以

$$\langle p^2\rangle = (\Delta p)^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{(\Delta r)^2}$$

$$E = \langle T+V\rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \frac{a}{r_0^s}$$

由于 $\Delta r$ 必须小于 $r_0$，如 $s>2$，则对于足够大的 $r_0$，上式将给出 $E>0$，不能成为束缚态；反之，如 $0<s<2$，对于足够大的 $r_0$，上式第二项起主要作用，将给出 $E<0$，而且当 $r_0\to\infty$，$E\to 0^-$，各能级密集在 $E\sim 0$ 附近.

**4.10** 质量为 $\mu$ 的粒子在球势阱 $V(r)=-\gamma\delta(r-a)$，$(\gamma,a>0)$ 中运动，求存在束缚态的条件.

**解**：束缚态为基态时($l=0$)，给出此条件，令 $\chi=r\psi$，Schrödinger 方程

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\delta(r-a) + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)\chi = 0 \tag{1}$$

波函数的边界条件是 $\chi(0)=\chi(\infty)=0$.

因为 $V(r>0)\leqslant 0$，所以束缚态 $E<0$.

可令 $k=\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$，Schrödinger 方程改写成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi(r) + \frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\delta(r-a)\chi(r) - k^2\chi(r) = 0 \tag{2}$$

在 $(a-\epsilon,a+\epsilon)$ 区域积分(2)式($\epsilon\to 0$)，可得另一边界条件

$$\lim_{\epsilon\to 0}\chi'(a+\epsilon) - \chi'(a-\epsilon) = -\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\chi(a)$$

即

$$\frac{\chi'}{\chi}\Big|_{r=a-0}^{r=a+0} = -\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2} \tag{3}$$

在 $r\neq a$ 处，方程为

$$\chi'' - k^2\chi = 0 \tag{4}$$

此方程的解为

$$\begin{cases} \chi = c_1 \mathrm{e}^{-kr} & (r>a) \\ \chi = c_2 \sinh kr & (r<a) \end{cases} \tag{5}$$

将(5)式代入(3)式，可得

$$-k - k\coth ka = -\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2} \tag{6}$$

如 $V_0$ 之值刚够形成第一个束缚态，能级必为 $E=0^-$，这时 $k\sim 0$，$\coth ka\sim\frac{1}{ka}$.

代入(6)式，有

$$-\frac{1}{a} = -\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}$$

$$\gamma = \hbar^2/2\mu a$$

**4.11**　设粒子在无限长的圆筒中运动，筒半径为 $a$，求粒子能量.

**解**：柱坐标下的 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{L_z^2}{2m\rho^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi = E\psi$$

用分离变量法求解该方程

$$\begin{cases}\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\rho}\right)+\dfrac{\nu^2\hbar^2}{2m\rho^2}-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}\right]R(\rho) = ER(\rho)\\ \left(\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}+k^2\right)Z(z) = 0\\ (l_z^2-\nu^2\hbar^2)\Phi(\phi) = 0\end{cases}$$

关于径向是一个柱 Bessel 方程

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\rho}\right)R(\rho)+\left(\dfrac{2mE}{\hbar^2}-k^2-\dfrac{\nu^2}{\rho^2}\right)R(\rho) = 0\\ R(a) = 0\ ,rR(r\to 0)\to 0\end{cases}$$

解得

$$R(\rho) = AJ_\nu(\omega\rho)+BN_\nu(\omega\rho),\qquad \omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}-k^2}$$

因为 $R(0)$有界，$B=0$；由 $a$ 端边界条件 $J_\nu(\omega a)=0$，此方程的零点依次记为 $\omega_1$，$\omega_2$，$\omega_3$，….

所以方程的解为

$$R(\rho) = J_\nu(\omega_n\rho),\qquad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}-k^2} = \omega_n$$

粒子的能量

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2+\omega_n^2)$$

**4.12**　设 $V(r)=-\dfrac{a}{r}+\dfrac{A}{r^2}$，$(a,A>0)$. 求粒子能量本征值.

**解**：取守恒量完全集为$(H,L^2,L_z)$，其共同本征函数为

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

$\chi(r)$满足的径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi+\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2}-\frac{a}{r}+\frac{A}{r^2}\right]\chi = E\chi$$

令 $\lambda=\dfrac{2mA}{\hbar^2}$，

$$l'(l'+1) = l(l+1)+\lambda$$

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1+\frac{4\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2}$$

方程化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi + \left[l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{a}{r}\right]\chi = E\chi$$

相当于氢原子径向方程中 $l$ 换成 $l'$，$e^2$ 换成 $a$. 由氢原子的能级

$$E_n = -\frac{e^2}{2n^2 a_0}, \qquad n = n_r + l + 1$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \qquad n_r = 0,1,2,\cdots$$

得到本题的解

$$E_{n'} = -\frac{ma^2}{2(n')^2\hbar^2}, \qquad n' = n_r + l' + 1$$

**4.13** 有一无自旋粒子，其波函数为

$$\psi = K[x+y+2z]\exp\{-\alpha r\}$$

其中 $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ 且 $K,\alpha$ 是实常数.

(1) 粒子的总角动量是多少？(2) 角动量的 $z$ 分量的期望值是多少？(3) 若角动量的 $z$ 分量 $L_z$ 被测量，问测得 $L_z=+\hbar$ 的概率是多少？(4) 发现粒子在 $\theta$、$\phi$ 方向上的 $\mathrm{d}\Omega$ 立体角内的概率是多少？其中 $\theta$、$\phi$ 就是通常球坐标中的角度.

**解**：先写出头几项球谐函数的表达式

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}};\ Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta;\ Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

在球坐标下写出该粒子的波函数，

$$\psi = R(r)\varphi(\theta,\phi) = K'[\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta]K_r r e^{-\alpha r}$$

其中，径向波函数

$$R(r) = K_r r e^{-\alpha r}$$

归一化系数 $K_r$ 由 $\int_0^\infty R(r)r^2\mathrm{d}r = 1$ 决定.

再考虑波函数的角度部分

$$\begin{aligned}\varphi(\theta,\phi) &= K'[\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta] \\ &= K'\left[\sin\theta\frac{e^{i\phi}+e^{-i\phi}}{2} + \sin\theta\frac{e^{i\phi}-e^{-i\phi}}{2i} + 2\cos\theta\right] \\ &= K'\left[-\frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{11} + \frac{1+i}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,-1} + 2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}\right]\end{aligned}$$

由归一化条件，$\int\varphi(\theta,\phi)^*\varphi(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega = 1$ 及 $Y_{lm}$ 的正交归一性，从而有

$K'^2\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}+\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}+4\cdot\frac{4\pi}{3}\right]=1$，得 $K'=\sqrt{\frac{1}{8\pi}}$.

$$\varphi(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{1}{3}}\left[-\frac{1-\mathrm{i}}{2}Y_{11}+\frac{1+\mathrm{i}}{2}Y_{1,-1}+\sqrt{2}Y_{10}\right]$$

由上式可知

(1) $\varphi$ 是 $\boldsymbol{L}^2$ 的量子数为 1 的本征态，$\boldsymbol{L}^2=1(1+1)\hbar^2=2\hbar^2$，所以，粒子的总角动量 $\sqrt{\langle\boldsymbol{L}^2\rangle}=\sqrt{2}\hbar$.

(2) 角动量的 $z$ 分量 $\langle L_z\rangle=\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}(+\hbar)+\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}(-\hbar)+0=0$.

(3) $P(L_z=+\hbar)=|\langle Y_{11}|\varphi(\theta,\phi)\rangle|^2=\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}=\frac{1}{6}$.

(4) 发现粒子在 $\theta,\varphi$ 方向上的 $\mathrm{d}\Omega$ 立体角内的概率

$$P(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega=|\varphi(\theta,\phi)|^2\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{8\pi}[\sin\theta(\sin\phi+\cos\phi)+2\cos\theta]^2\mathrm{d}\Omega$$

**4.14** (1) 确定由各向同性势 $V(r)=\frac{1}{2}kr^2$ 束缚的单粒子能级，其中 $k$ 是一正的常数.

(2) 导出第 $N$ 级激发态的简并度公式.

(3) 确定第 $N$ 级激发态的角动量及宇称.

**解**：(1)直角坐标下 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}kr^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2)=H_x+H_y+H_z$$

分离变量得到三个方向均为谐振子方程，所以

$$E_{n_xn_yn_z}=(n_x+n_y+n_z+3/2)\hbar\omega=(N+3/2)\hbar\omega,\quad \omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

(2) 设 $n_y+n_z=n$，$n$ 为某个定值，$n_y$ 可以从 0～$n$ 取值，故有 $n+1$ 重简并. 若给定一个 $n_x$，这时 $n=N-n_x=n_y+n_z$；就 $n_y,n_z$ 而言，将有 $N-n_x+1$ 种取法. 由此可知，总简并度

$$f_n=\sum_{n_x=0}^{N}(N-n_x+1)=\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

(3) 球坐标下，径向 Schrödinger 方程

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0$$

令 $\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$，$b=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$，

作变换 $R(r)=r^l\,\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2/2}u(r)$，可得方程

$$u''+\frac{2}{r}(l+1-\alpha^2 r^2)u'+\left[b^2-2\alpha^2\left(l+\frac{3}{2}\right)\right]u=0$$

无量纲化，令 $s=\frac{b^2}{2\alpha^2}$，$\rho=\alpha^2 r^2$，方程化为

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\frac{l+3/2}{\rho}-1\right]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}+\left[\frac{s}{2}-\frac{l+3/2}{2}\right]\frac{u}{\rho}=0$$

此为合流超几何方程，其两个线性无关的广义幂级数解为

$$F\left(\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}-s\right),l+\frac{3}{2},\rho\right),\quad \rho^{-(l-1/2)}F\left(\frac{1}{4}-\frac{l+s}{2},\frac{1}{2}-l,\rho\right)$$

第二个解不满足边界条件 $r\to 0, r\psi\to 0$，所以略去. 对第一个解，由于指数发散，必须截断. 令

$$\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}-s\right)=-n_r\qquad (n_r=0,1,2,\cdots)$$

$n_r$ 为径向量子数. 能量本征值和能量本征态为

$$E=\frac{b^2}{2\alpha^2}=s\hbar\omega=\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega\equiv(N+3/2)\hbar\omega\quad (N=0,1,2,\cdots)$$

$$\psi_{n_r lm}=N_{n_r l}\frac{n_r!\Gamma(l+3/2)}{\Gamma(n_r+l+3/2)}(\alpha r)^l \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2}L_{n_r}^{(l+1/2)}(\alpha^2 r^2)Y_{lm}$$

第 $N$ 激发态的角动量

$$\langle L\rangle=\sqrt{\langle L^2\rangle}=\sqrt{l(l+1)}\hbar$$

第 $N$ 激发态的宇称由 $Y_{lm}$ 决定，$Y_{lm}$ 的宇称为 $(-)^l$.

**4.15** 一个电子被禁闭在一个三维无限深势阱中. 三个平行于 $x$、$y$、$z$ 轴的边分别为 $L$.

(1) 写出适当的 Schrödinger 方程. (2) 写出相应于最低能量态的时间无关波函数. (3) 给出具有能量小于某给定值 $E$ 的态数目 $N$ 的表达式，假定 $N\gg 1$.

**解**：(1) Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi=E\psi\qquad 0<x,y,z<L.$$

(2) 用分离变量法求解，三个方向为独立的一维无穷深方势阱，波函数

$$\psi_{nlm}=\left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{l\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\quad (n,l,m>0)\qquad 0<x,y,z<L$$

最低能量态的波函数为

$$\psi_{111}=\left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

(3) 态 $\psi_{nlm}$ 的能量 $E=(n^2+l^2+m^2)\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$，要求能量小于给定 $E$ 的态数 $N$，实际上是要求满足下面不等式

$$n^2+l^2+m^2 \leqslant \frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}E$$

这是一个求以$\left(\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}E\right)^{1/2}$为半径的球体内整格点数的问题.

$N\gg1$时，因为$n,l,m>0$，该数为球体体积的1/8倍

$$N=\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}=\frac{4\pi}{3}\left(\frac{mL^2}{2\pi^2\hbar^2}\right)^{3/2}$$

**4.16**　氯化钠晶体内有些负离子空穴，每个空穴束缚一个电子. 可将这些电子看成束缚在箱中，箱的长度具有晶格常数的量级. 晶体处于室温，粗略估计被这些电子强烈吸收的电磁波的最长波长.

**解**：电磁波能量和波长的关系

$$E=h\nu=hc/\lambda$$

氯化钠晶体中的电子能级由上题$E_{nlm}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n^2+l^2+m^2)$，取$a=1\text{Å}$，电子的基态能级$E_{111}=\frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\approx112(\text{eV})$

对于处于室温的晶体，考虑热分布可知，电子几乎全部处于基态，所以被强烈吸收的电磁波的最大波长

$$\lambda_{\max}=\frac{hc}{\Delta E}=\frac{hc}{E_{211}-E_{111}}=110\text{Å}$$

**4.17**　(1) 一个质量为$m$的非相对论粒子在一势场中运动，势为

$$V(x,y,z)=A(x^2+y^2+2\lambda xy)+B(z^2+2\mu z)$$

其中$A>0,B>0$. $|\lambda|<1$，$\mu$是任意的. 求能量的本征值.

(2) 现在使势变成$V_{\text{new}}$，对于$z>-\mu$，及任何$x,y$，$V_{\text{new}}=V$，$V$与题(1)相同. 对于$z<-\mu$，及任何$x,y$，$V_{\text{new}}=+\infty$. 求基态能量.

**解**：(1) 令

$$\begin{cases}x=(\xi+\eta)/\sqrt{2}\\ y=(\xi-\eta)/\sqrt{2}\end{cases}$$

则

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x}=\dfrac{\partial\xi}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial\xi}+\dfrac{\partial\eta}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial\eta}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\dfrac{\partial}{\partial\xi}+\dfrac{\partial}{\partial\eta}\right)\\ \dfrac{\partial}{\partial y}=\dfrac{\partial\xi}{\partial y}\dfrac{\partial}{\partial\xi}+\dfrac{\partial\eta}{\partial y}\dfrac{\partial}{\partial\eta}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\dfrac{\partial}{\partial\xi}-\dfrac{\partial}{\partial\eta}\right)\end{cases}$$

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}=\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}$$

$$x^2+y^2+2\lambda xy=\xi^2(1+\lambda)+\eta^2(1-\lambda)$$

进行变量代换后的 Schrodinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi+A[\xi^2(1+\lambda)+\eta^2(1-\lambda)]\psi+B(z^2+2\mu z)\psi=E\psi$$

用分离变量法，令 $\psi=\Xi(\xi)\Upsilon(\eta)Z(z)$，代入上式，得三个谐振子方程

$$\begin{cases}\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\xi^2A(1+\lambda)\right]\Xi(\xi)=E_1\Xi(\xi)\\ \left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\eta^2A(1-\lambda)\right]\Upsilon(\eta)=E_2\Upsilon(\eta)\\ \left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}+B(z^2+2\mu z)\right]Z(z)=E_3Z(z)\end{cases}$$

令

$$\omega_1=\sqrt{\frac{2A}{m}(1+\lambda)};\quad \omega_2=\sqrt{\frac{2A}{m}(1-\lambda)};\quad \omega_3=\sqrt{\frac{2B}{m}}$$

$$E=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2+\left(n_3+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_3-B\mu^2$$

(2) 一维谐振子波函数 $Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$，关于 $n$ 呈奇偶性(当 $n$ 为奇数时，波函数为奇函数，否则，为偶函数). $V_{new}(z=-\mu)=+\infty$时，$\psi(z=-\mu)=0$，所以，$\psi$ 关于 $z+\mu$ 为奇函数，$n_{1min}=0$，$n_{2min}=0$，$n_{3min}=1$.

$$E=\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)+\frac{3}{2}\hbar\omega_3-B\mu^2$$

**4.18** 在 $t=0$ 时氢原子的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},0)=\frac{1}{\sqrt{10}}[2\psi_{100}+\psi_{210}+\sqrt{2}\psi_{211}+\sqrt{3}\psi_{21,-1}]$$

其中下指标是量子数 $n,l,m$ 的值. 忽略自旋和辐射跃迁，试求：

(1) 该体系能量的期望值?

(2) 电子在 $10^{-10}$cm 之内的概率? ($t=0$ 时)(这里可采用近似结果).

(3) $t$ 时刻体系处于 $l=1,m=+1$ 态的概率?

(4) 假设一次测量发现 $L=1,L_z=1$，用上面的 $\psi_{nlm}$ 描述这一测量后瞬间的波函数.

**解**：(1) 体系的能量平均值 $E=\int\psi(\boldsymbol{r},0)^*\hat{H}\psi(\boldsymbol{r},0)\mathrm{d}\boldsymbol{r}$，由 $\psi_{nlm}$ 正交归一可得

$$E=\frac{1}{10}[2^2\cdot E_1+1\cdot E_2+2\cdot E_2+3\cdot E_2]$$

$$=\frac{1}{10}[4E_1+6E_2]=\frac{11}{20}E_1=-7.48(\mathrm{eV})$$

(2) 令 $\alpha=10^{-10}$cm，由 $\psi_{nlm}=R_{nl}Y_{lm}$，$Y_{lm}$ 正交归一，电子在 $10^{-10}$cm 之内的概

率

$$P=\int_0^a \psi^*(\boldsymbol{r},0)\psi(\boldsymbol{r},0)\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{1}{10}\int_0^a (4R_{10}^2+6R_{21}^2)r^2\mathrm{d}r$$

已知 $R_{10}=\frac{2}{a^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a}$, $R_{21}=\frac{1}{2\sqrt{6}}\frac{r}{a^{5/2}}\mathrm{e}^{-r/2a}$, $a=5.29\times10^{-9}\,\mathrm{cm}$.

因为 $\alpha\ll a$, 所以 $\mathrm{e}^{-r/a}\approx1-\frac{r}{a}$.

$$\begin{aligned}P&\approx\frac{4}{10}\int_0^a\left(\frac{2}{a^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a}\right)^2r^2\mathrm{d}r+\frac{6}{10}\int_0^a\left(\frac{1}{2\sqrt{6}}\frac{r}{a^{5/2}}\mathrm{e}^{-r/2a}\right)^2r^2\mathrm{d}r\\&=\frac{4}{10}\int_0^a\frac{4}{a^3}\left(1-\frac{2r}{a}\right)r^2\mathrm{d}r+\frac{6}{10}\int_0^a\frac{r^2}{24a^5}\left(1-\frac{r}{a}\right)r^2\mathrm{d}r\\&=\frac{4}{10}\left[\frac{4}{3}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^3-\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^4\right]+\frac{6}{10}\left[\frac{1}{120}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^5-\frac{1}{144}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^6\right]\\&\approx\frac{8}{15}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^3\approx3.6\times10^{-6}\end{aligned}$$

(3) $t$ 时刻体系的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r},t)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi(\boldsymbol{r},0)\\&=\sqrt{\frac{1}{10}}\left[2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}\psi_{100}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}(\psi_{210}+\sqrt{2}\psi_{211}+\sqrt{3}\psi_{21,-1})\right]\end{aligned}$$

体系处于 $l=1,m=1$ 的态概率为

$$\left|\sum_n\langle\psi_{n11}\mid\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle\right|^2=\left(\sqrt{\frac{2}{10}}\right)^2=\frac{1}{5}$$

(4) 解法一：$L_z$ 的本征态

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r},\qquad Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm\mathrm{i}y}{r}$$

因为 $x,y,z$ 是对称的，要求 $L_x$ 的本征态，即将 $x,y,z$ 轮换 $x\to y,y\to z,z\to x$ 上述态经过这样的变换得

$$Y'_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r},\qquad Y'_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y\pm\mathrm{i}z}{r}$$

本题求用 $L_z$ 的本征态 $Y_{10},Y_{1\pm1}$ 展开 $L=1,L_x=1$ 的态 $Y'_{11}$,

$$\begin{aligned}Y'_{11}&=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y+\mathrm{i}z}{r}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left[\frac{\mathrm{i}}{2}\left(\frac{x+\mathrm{i}y}{r}-\frac{x-\mathrm{i}y}{r}\right)-\mathrm{i}\frac{z}{r}\right]\\&=-\mathrm{i}\left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x+\mathrm{i}y}{r}\right)-\mathrm{i}\left(\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-\mathrm{i}y}{r}\right)-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}\\&=-\mathrm{i}\left[\frac{1}{2}Y_{11}+\frac{1}{2}Y_{1-1}+\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10}\right]\end{aligned}$$

解法二：因为 $L_x=\dfrac{L_+ + L_-}{2}$.

利用升降算符的性质(参见第七章)

$$L_\pm Y_{lm}=\sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}\,Y_{l\,m\pm 1}$$

设 $L=1, L_x=1$ 的态为 $\psi$，用 $L_x$ 的本征态 $Y_{lm}$ 展开

$$\psi = C_1 Y_{11} + C_{-1} Y_{1-1} + C_0 Y_{10}$$

$L_x$ 作用在 $\psi$ 上得

$$\begin{aligned} L_x\psi = \psi &= C_1 Y_{11} + C_{-1} Y_{1-1} + C_0 Y_{10} \\ &= \frac{L_+ + L_-}{2}\psi = \frac{1}{2}[L_+ C_{-1} Y_{1-1} + L_+ C_0 Y_{10} + L_- C_1 Y_{11} + L_- C_0 Y_{10}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[C_{-1} Y_{10} + C_0 Y_{11} + C_1 Y_{10} + C_0 Y_{1-1}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[C_0 Y_{11} + C_0 Y_{1-1} + (C_1 + C_{-1}) Y_{10}] \end{aligned}$$

比较后得

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} C_0, \qquad C_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} C_0$$

由波函数归一得 $C_0=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$.

$$\psi = \frac{1}{2}[Y_{11} + Y_{1-1} + \sqrt{2} Y_{10}]$$

**4.19**　给出原子单位. 进入 Coulomb 场 Schrödinger 方程的物理常数总共三个：$\hbar$，$e$，$\mu_e$. 为简化表述，可采用原子单位制：在计算中，形式上略去这三个常数，即相当于令它们为 1；在最后结果中，再添加上它们适当幂次的组合，凑得量纲正确即可.

**解**：Coulomb 场 Schrödinger 方程

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\psi - \frac{e^2}{r}\psi \\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \end{aligned}$$

由量纲分析

$$\frac{[h]^2}{[\mu_e][r]^2} = \frac{[e]^2}{[r]} = \frac{[h]}{[t]}$$

由此可得各种特征单位，如质量特征单位 $[\mu_e]$，长度特征单位 $[r]=\dfrac{[h]^2}{[\mu_e][e]^2}$，时间特征单位 $[t]=\dfrac{[h]^3}{[\mu_e][e]^4}$；可组成速度，动量，能量的特征单位.

计算长度，在最后结果上乘以 $\rho_B=\hbar^2/\mu_e e^2$；

计算时间，在最后结果上乘以 $\hbar^3/\mu_e e^4$；

计算速度，在最后结果上乘以 $e^2/\hbar$；

计算动量，在最后结果上乘以 $\mu_e e^2/\hbar$；

计算能量，在最后结果上乘以 $\mu_e e^4/\hbar^2$.

**4.20**　假设质子和中子通过交换 $\pi^{\pm}$ 介子产生下面的近似势

$$V(r)=\frac{g^2}{d}\exp\{-r/d\}$$

彼此互相吸引. 其中 $d=\hbar/mc$，$m$ 为 $\pi^{\pm}$ 介子的质量，$mc^2=140\text{MeV}$，质子和中子的质量近似为 $Mc^2=940\text{MeV}$.

(1) 证明适当选取参数 $\alpha,\beta$，通过变量代换 $x=\alpha\exp\{-\beta r\}$，可以将该体系 $l=0$ 时的径向 Schrödinger 方程化为 Bessel 方程.

$$\frac{\mathrm{d}^2J_\rho(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}J_\rho(x)}{\mathrm{d}x}+\left(1-\frac{\rho^2}{x^2}\right)J_\rho(x)=0$$

(2) 假设已知该体系只有一个束缚态，结合能为 2.2MeV；计算 $g^2/\hbar c$ 的数值并指出其单位.

(3) 为使该体系具有两个 $l=0$ 的束缚态，$g^2/\hbar c$ 的最小值应等于多少？($d$ 和 $M$ 不变.)

**解**：(1) $l=0$ 时，径向波函数 $R(r)=\chi(r)/r$ 满足的 Schrödinger 方程为(约化质量 $\mu=M/2$)

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi(r)}{\mathrm{d}r^2}+\frac{M}{\hbar^2}\left(E+\frac{g^2}{d}\mathrm{e}^{-r/d}\right)\chi(r)=0$$

作变量代换，$r\to x=\alpha\mathrm{e}^{-\beta r}$，$0\leqslant x\leqslant\alpha$.

并记 $\chi(r)=J(x)$，则

$$\frac{\mathrm{d}^2J(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}J(x)}{\mathrm{d}x}+\left[\frac{Mg^2}{\hbar^2d\beta^2}\left(\frac{x}{\alpha}\right)^{1/d\beta}\frac{1}{x^2}+\frac{ME}{\hbar^2\beta^2}\frac{1}{x^2}\right]J(x)=0$$

若令

$$\alpha=\frac{2g}{\hbar}\sqrt{Md},\qquad \beta=\frac{1}{2d}$$

并记

$$\rho^2=\frac{4d^2M|E|}{\hbar^2}=-\frac{4d^2ME}{\hbar^2}$$

则径向 Schrödinger 方程化成 $\rho$ 阶 Bessel 方程：

$$\frac{\mathrm{d}^2J_\rho(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}J_\rho(x)}{\mathrm{d}x}+\left(1-\frac{\rho^2}{x^2}\right)J_\rho(x)=0$$

(2) 对于束缚态，要求 $r\to\infty$ 时，$R(r)\to0$，满足该条件的解为(不考虑归一)

$$\chi(r)=J_\rho(\alpha e^{-\beta r})\qquad(\rho\geqslant 0)$$

由 $\chi(0)=0$，得 $J_\rho(\alpha)=0$.

已知

$$\rho=\frac{2d}{\hbar}\sqrt{M\mid E\mid}=\frac{2}{mc^2}\sqrt{Mc^2\mid E\mid}=\frac{2}{140}\sqrt{940\times 2.2}\approx 0.6$$

根据 $J_\rho(x)$的数值曲线，可以看出 $\rho=0.6$ 时，函数 $J_\rho(x)$的最小零点值为 3.3，这就是给出只具有一个束缚态的势阱的 $\alpha$ 值.

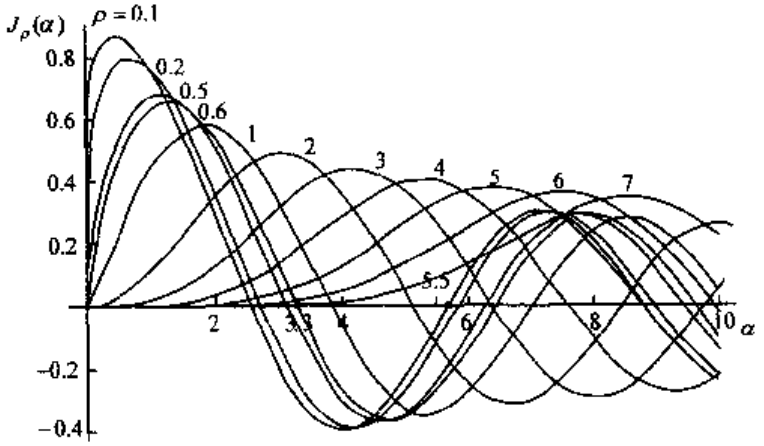
$$\alpha\approx 3.3.$$

于是，容易求出

$$\frac{g^2}{\hbar c}=\frac{\hbar\alpha^2}{4Mcd}=\frac{mc^2\alpha^2}{4Mc^2}=\frac{140\times(3.3)^2}{4\times 940}\approx 0.4$$

(3) 观察下图，不难发现当 $\alpha<5.5$ 时，给定 $\alpha$ 值，只能求一个 $\rho(>0)$，使得 $J_\rho(\alpha)=0$，这时无论如何只能给出一个束缚态. 因此，要得到两个 $l=0$ 的束缚态，必须 $\alpha\geqslant 5.5$，于是 $g^2/\hbar c$ 的最小值为

$$\left(\frac{g^2}{\hbar c}\right)_{\min}=\frac{\hbar\alpha_{\min}^2}{4Mcd}=\frac{140\times(5.5)^2}{4\times 940}\approx 1.1$$




题 4.20 图

**4.21**　证明在非相对论量子力学中，对于中心势场 $V(r)$中的任何单粒子束缚态有下列关系式成立：

$$\mid\psi(0)\mid^2=\frac{m}{2\pi}\left\langle\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\frac{1}{2\pi}\left\langle\frac{L^2}{r^3}\right\rangle$$

其中 $\psi(0)$是原点波函数，$V(r)$为势能，$m$ 为粒子质量，$L^2$ 为角动量平方(令 $\hbar=1$). 在角动量不为零的情形下给出方程的经典解释.(设上式中各项均有意义，即$\Psi(0)$有限，平均值收敛)

**解**：解法一：中心力场下，径向 Schrödinger 方程为(设 $\hbar=1$)

$$\left[-\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r)+V(r)R(r)=ER(r)$$

令 $\chi(r)=rR(r)$，得

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi(r)+\left[2m(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r)=0$$

上式两边乘以 $\chi'(r)$，并对 $r$ 积分，得

$$\int\chi'(r)\chi''(r)\mathrm{d}r+\int\left[2m(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\left(\frac{1}{2}\chi^2(r)\right)'\mathrm{d}r=0$$

分部积分之，并利用 $\chi'(\infty)=0,\chi(\infty)=\chi(0)=0$，

$$\chi'(0)=[R(r)+rR'(r)]_{r=0}=R(0)$$

得

$$\begin{aligned}&-\frac{1}{2}R^2(0)+\frac{1}{2}\left[2m\int\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}r^2R^2\mathrm{d}r-\int\frac{2l(l+1)}{r^2}r^2R^2\mathrm{d}r\right]=0\\&R^2(0)=\left[2m\int\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}r^2R^2\mathrm{d}r-\int\frac{2l(l+1)}{r^3}r^2R^2\mathrm{d}r\right]\end{aligned}\tag{1}$$

当 $l=0$ 时，(1)式左边乘以 $|Y_{00}|^2$，右边乘以 $|Y_{00}|^2\int|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2\mathrm{d}\Omega$，得

$$\begin{aligned}|\psi(0)|^2&=|Y_{00}|^2R^2(0)=\frac{1}{4\pi}R^2(0)\\&=\frac{m}{2\pi}\int|R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega\\&\quad-\frac{1}{2\pi}\int[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]^*\frac{L^2}{r^3}[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega\end{aligned}$$

即

$$|\psi(0)|^2=\frac{m}{2\pi}\left\langle\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\frac{1}{2\pi}\left\langle\frac{L^2}{r^3}\right\rangle$$

解法二：

$$\hat{H}=-\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+V(r)$$

所以有

$$\left[\frac{\partial}{\partial r},\hat{H}\right]=\frac{1}{mr^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{L}^2}{mr^3}+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\tag{2}$$

其中利用了以下对易关系(读者自证)

$$\left[\frac{\partial}{\partial r},V(r)\right]=\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r};\qquad\left[\frac{\partial}{\partial r},r^{-2}\right]=-\frac{2}{r^3}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial r},\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right]=\frac{2}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r},\frac{\partial}{\partial r}\right]+\left[\frac{\partial}{\partial r},\frac{2}{r}\right]\frac{\partial}{\partial r}=-\frac{2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}$$

又因为，若 $\hat{F}^{+}=\hat{F}$，且 $\hat{F}\varphi_n=f_n\varphi_n$，则对任一算符 $\hat{G}$ 容易证明 $\int\varphi_n^{*}[\hat{F},\hat{G}]\varphi_n=0$.

所以从(2)式对 $\hat{H}$ 的本征态求平均时，其左端为零，故

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\hat{L}^2}{mr^3}\right\rangle=-\frac{1}{m}\left\langle\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right\rangle \tag{3}$$

上面(3)式左端是实数(厄米算符的平均值)，所以右端也为实的，即

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right\rangle=\int\mathrm{d}\Omega\int_0^{\infty}\Psi^{*}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\mathrm{d}r=\int\mathrm{d}\Omega\int_0^{\infty}\Psi\frac{\partial\Psi^{*}}{\partial r}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}\Omega\int_0^{\infty}\frac{\partial}{\partial r}(\Psi^{*}\Psi)\mathrm{d}r=2\pi\Psi^{*}\Psi\big|_{r=0}^{\infty}=2\pi|\Psi(0)|^2$$

代入(3)式即有

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\hat{L}^2}{mr^3}\right\rangle=-\frac{2\pi}{m}|\Psi(0)|^2 \tag{4}$$

解毕.

当 $l\neq0$，$R^2(0)=0$. 由(4)式可得：

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right\rangle=\frac{1}{m}\left\langle\frac{L^2}{r^3}\right\rangle$$

其经典对应为

$$\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}=\frac{1}{m}\frac{L^2}{r^3}$$

而 $\dfrac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}=-F$ 为向心力，

$$\frac{1}{m}\frac{L^2}{r^3}=m\frac{|\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}|^2}{r^3}=m\frac{1}{r}(v\sin\langle\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}\rangle)^2=m\frac{v_t^2}{r}=ma_r$$

其中，$v_t$ 为沿球面的切向速度，$a_r=\dfrac{v_t^2}{r}$ 为向心加速度.

**4.22** 一个质量为 $m$ 的无自旋粒子，约束在一半径为 $r_0$ 的有限深球方势阱内.

(1) 为了获得两个零角动量的束缚态，势阱的最小深度为多少?

(2) 在这个势阱深度下，属于零角动量的 Hamilton 量本征值为多少?

(3) 如果粒子处于基态，在坐标基下画出波函数和与之相应的概率分布. 详细解释后者的物理意义.

(4) 用这一波函数预言对粒子动能的单次测量的结果，可以将之表成一维定积分的形式.

(5) 在不确定原理基础上，给出(3)和(4)联系的定性分析.

**解**：(1) 径向波函数 $R(r)=\chi(r)/r$ 满足的 Schrödinger 方程($l=0$)

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}-V_0\chi=E\chi & (0<r<r_0) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}=E\chi & (r_0<r<\infty) \end{cases}$$

边界条件 $\chi(0)=0$，$\chi(\infty)$有限.

于是，波函数应取

$$\chi(r)=\begin{cases} A\sin\alpha r, & 0\leqslant r\leqslant r_0, \quad \alpha^2=2m(V+E)/\hbar^2 \\ B\mathrm{e}^{-\beta r}, & r_0<r<\infty, \quad \beta^2=-2mE/\hbar^2 \end{cases} \quad (E<0)$$

由波函数连续及波函数的一阶导数连续

$$\begin{cases} A\sin\alpha r_0=B\mathrm{e}^{-\beta r_0} \\ A\alpha\cos\alpha r_0=-B\beta\mathrm{e}^{-\beta r_0} \end{cases}$$

得

$$\beta=-\alpha\cot\alpha r_0$$

定义 $\xi=\alpha r_0$，$\eta=\beta r_0$ 则得出

$$\begin{aligned} \xi^2+\eta^2&=2mV_0r_0^2/\hbar^2 \\ -\xi\cot\xi&=\eta \end{aligned} \tag{1}$$

由教科书 61 页图 3-4 可见，有两个束缚态的条件是(1)所描述的曲线半径大于等于 $3\pi/2$，可以求出最小势阱深度满足

$$\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2}\geqslant\left(\frac{3\pi}{2}\right)^2$$

$$(V_0)_{\min}=\frac{9\pi^2\hbar^2}{8mr_0^2} \tag{2}$$

(2)在(1)问的势阱深度下，有 $\eta=0$，$\xi=3\pi/2$，所求 Hamilton 量的本征值 $E_2=0$

另外设基态能量为

$$E_1=-\frac{\beta^2\hbar^2}{2m}$$

联立(1)式，(2)式，可得 $\beta$ 满足的方程

$$-\left[\frac{3\pi}{2}\sqrt{1-\left(\frac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2}\right]\cot\left[\frac{3\pi}{2}\sqrt{1-\left(\frac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2}\right]=\beta r_0$$

(3) 归一化后的基态波函数为

$$\chi(r)=\begin{cases} A\sin\alpha r, & 0\leqslant r\leqslant r_0 \\ A\sin\alpha r_0\cdot\mathrm{e}^{\beta(r-r_0)}, & r>r_0 \end{cases}$$

归一化常数为

$$\frac{1}{A^2}=\frac{1}{2\alpha}[\alpha r_0-\sin\alpha r_0\cos\alpha r_0]+\frac{1}{2\beta}\sin^2\alpha r_0$$

而 $\alpha,\beta$ 的意义已在(1)(2)中给出. 由其波函数与概率分布可知,粒子在 $r<r_0$ 区域中的概率很大,在 $r_0$ 外指数衰减,故可认为粒子被束缚在此球方势阱中.

(4) 粒子动能 $E_T=\frac{p^2}{2m}$ 是动量 $p$ 的函数,故对粒子动能的测量概率等同于对动量 $p$ 的测量概率 $|\psi(p)|^2$. $\psi(p)$ 是基态坐标波函数的 Fourier 变换,而 $\psi(p)$ 是对 $\psi(p)$ 在 $4\pi$ 立体角内作积分,且因为 $\psi(p)$ 各向同性,故有 $|\psi(p)|^2=4\pi|\psi(p)|^2$,设 $p$ 沿 $z$ 轴,则

$$|\psi(p)|^2=4\pi|\psi(p)|^2=4\pi\left|\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{\chi(r)}{r}e^{-ip\cdot r/\hbar}dr\right|^2$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left|\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\chi(r)}{r}e^{-ipr\cos\theta/\hbar}\sin\theta d\theta d\varphi r^2 dr\right|^2$$

$$=\frac{2}{\pi\hbar^3}\left|\int_0^{\infty}\frac{\chi(r)}{r}\frac{\sin(pr/\hbar)}{(pr/\hbar)}r^2dr\right|^2$$

代入(3)中的 $\chi(r)$ 表达式即可积出.

平均动能的数值为

$$\bar{E}_T=\left\langle\psi_1\left|\frac{p^2}{2m}\right|\psi_1\right\rangle=E_1-\langle\psi_1|V|\psi_1\rangle$$

$$=E_1+V_0\int_0^{r_0}A^2\sin^2\alpha r\frac{1}{r^2}r^2dr\cdot 4\pi$$

$$=E_1+2\pi V_0A^2\left(r_0-\frac{\sin 2\alpha r_0}{2\alpha}\right)$$

(5) 由上述讨论可知,(3)中的空间波函数给出了空间的概率分布,而(4)中 $p$ 空间波函数给出了动量的概率分布,这两者的弥散特征量之积应满足测不准原理

$$\Delta p\Delta r\geqslant\hbar/2$$

**4.23** (1) 一个质量为 $m$ 的粒子在三维球方势阱中运动. 证明对于一个半径 $R$ 的方阱,只当阱深大于某一极小值时,才可能有束缚态存在. 计算此极小值.

(2) 在一维问题中有一类似的结果. 那个结果是什么?

(3) 你能证明(1),(2)结果中的一般性质对任意形状的势阱均成立吗? 例如,在一维情况(2)中,当

$$\begin{cases}V(x)=\lambda f(x)<0, & a\leqslant x\leqslant b\\ V(x)=0, & x<a\text{ 或 }x>b\end{cases}$$

时,保持 $f(x)$ 不变,讨论不同的 $\lambda$ 值.

**解**: (1) 假定存在一束缚态 $\psi(r)$,并假定它为基态($l=0$),$\psi(r)=\psi(r)$.

Schrödinger 方程为($E<0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right]\psi(r)+U(r)\psi(r)=E\psi(r)$$

$$U(r)=\begin{cases}0, & r>R\\ -V_0, & 0<r<R\end{cases}$$

解得

$$\psi(r)=\begin{cases}A\sin kr/r, & r<R,\quad k=\sqrt{\dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\\ B\mathrm{e}^{-k'r}/r, & r>R,\quad k'=\sqrt{\dfrac{-2mE}{\hbar^2}}\end{cases}$$

$A,B$ 是归一化常数. 利用在 $r=R$ 处的边界条件

$$[\ln(r\psi(r))]'\,|_{r=R^-}=[\ln(r\psi(r))]'\,|_{r=R^+}$$

得到，$\cot kR=\dfrac{k'}{k}$，再利用 4.22 题(1)中的类似方法，可求出系统的能谱及可能存在束缚态的势阱的条件是

$$V_0\geqslant\frac{\pi^2\hbar^2}{8mR^2}$$

(2) 在一维方势阱中，无论阱深如何，总有一束缚态存在. 束缚态基态是偶宇称态，Schrödinger 方程为(取阱中心为原点)

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V'(x)]\psi(x)=0$$

$$V'(x)=\begin{cases}-V_0, & |x|<R/2\\ 0, & |x|>R/2\end{cases}$$

由于 $\psi(-x)=\psi(x)$，解得

$$\psi(x)=\begin{cases}A\cos(kx), & |x|<R/2\\ B\mathrm{e}^{-k'|x|}, & |x|>R/2\end{cases}$$

利用 $r=R$ 处的边界条件，有

$$\tan\left(\frac{kR}{2}\right)=\frac{k'}{k}$$

$$\cos\left(\frac{kR}{2}\right)=\pm\frac{k}{\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}}$$

(3) 对一维情况，定义一个方势阱 $V_s$，使之满足

$$V_s(x)=\begin{cases}-V_0, & |x|<R/2\\ 0, & |x|>R/2\end{cases}$$

且 $-V_0>V(x)$ 对任何 $x$ 均成立. 从(2)中可知存在一个 $|\psi_0(x)\rangle$，是与 $V_s(x)$ 相应

的本征束缚态，即

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V_s(x) \right| \psi_0 \right\rangle < 0$$

但是

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V(x) \right| \psi_0 \right\rangle < \left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V_s(x) \right| \psi_0 \right\rangle$$

所以

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{p^2}{2m} + V(x) \right| \psi_0 \right\rangle < 0$$

即，题中所给的 $V(x)$ 形式的阱均有束缚态.

**4.24**　多数介子可由夸克-反夸克对的非相对论性束缚态($q\bar{q}$)构成. 设 $m_q$ 是夸克质量. 假定构成 $q,\bar{q}$ 束缚态的禁闭势可写成 $V=\frac{A}{r}+Br, A<0, B>0$. 请用 $A, B, m_q, \hbar$ 对这个体系的基态能量给出一个合理的近似. 遗憾的是对于一类适合于该题的尝试函数，需要解一个三次方程. 如果遇上了这种情况，可以只对 $A=0$ 的情况完成求解. 请把最后答案写成一个数值常数乘上 $B, m_q, \hbar$ 的一个函数.

**解**：解法一：取尝试波函数为氢原子基态波函数. $\mu=m_q/2$ 为 $q,\bar{q}$ 体系的约化质量.

$$\psi(r) = e^{-r/a}$$

$$\begin{aligned}
\overline{H} &= \frac{\langle \psi \mid H \mid \psi \rangle}{\langle \psi \mid \psi \rangle} \\
&= \frac{\int_0^\infty e^{-r/a}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)+Ar^{-1}+Br\right]e^{-r/a}r^2\,dr}{\int_0^\infty e^{-2r/a}r^2\,dr} \\
&= \frac{3Ba}{2}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{a^2}+\frac{A}{a}
\end{aligned}$$

由变分原理 $\frac{\delta \overline{H}}{\delta a}=0$，所以

$$\frac{3}{2}B-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{1}{a^3}-\frac{A}{a^2}=0$$

取 $A=0$，则

$$a=\left(\frac{2\hbar^2}{3B\mu}\right)^{1/3}$$

得基态能量

$$E=\frac{3}{4}\left[\frac{36B^2\hbar^2}{m_q}\right]^{1/3}=2.48\left[\frac{B^2\hbar^2}{m_q}\right]^{1/3}$$

解法二：此题基态能量也可用测不准关系求得，准确到相差一个常系数.

$$\overline{H}=\frac{\overline{p}^2}{2\mu}+\frac{A}{\Delta r}+B\Delta r$$

考虑到 $\overline{p}=\overline{x}=0$，

$$\overline{H}=\frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2m}+\frac{A}{\Delta r}+B\Delta r$$

由于 $\Delta p_x\Delta x\geqslant\hbar/2$，对基态不妨假定 $\Delta p_x\Delta x=\hbar/2$，于是

$$H=\frac{\hbar^2}{8\mu(\Delta x)^2}+\frac{\hbar^2}{8\mu(\Delta y)^2}+\frac{\hbar^2}{8\mu(\Delta z)^2}+\frac{A}{\Delta r}+B\Delta r$$

求极值$\frac{\partial H}{\partial\Delta x}=0$，得

$$-\frac{\hbar^2}{4\mu(\Delta x)^3}-A\frac{\Delta x}{(\Delta r)^3}+B\frac{\Delta x}{\Delta r}=0$$

由 $x,y,z$ 对称可知，达极值时 $\Delta x=\Delta y=\Delta z$，即 $\Delta r=\sqrt{3}\Delta x$，于是可得方程

$$-\frac{\hbar^2}{4\mu(\Delta x)^3}-\frac{A}{3\sqrt{3}(\Delta x)^2}+\frac{B}{\sqrt{3}}=0$$

令 $A=0$，可得

$$\Delta x=3^{1/6}\left(\frac{\hbar^2}{4\mu B}\right)^{1/3},\qquad \Delta r=\left(\frac{9\hbar^2}{4\mu B}\right)^{1/3}$$

代入 $H$ 中可得

$$\overline{H}=\frac{3\hbar^2}{8\mu(\Delta x)^2}+B\Delta r=2\left(\frac{9}{4}\frac{\hbar^2B^2}{\mu}\right)^{1/3}=2\left(\frac{9}{2}\frac{\hbar^2B^2}{m_q}\right)^{1/3}=3.30\left(\frac{\hbar^2B^2}{m_q}\right)^{1/3}$$

**4.25**　设 $\psi_m^{(0)}$ 是 $\hat{L}_z$ 的本征态，相应的本征值为 $m$（取 $\hbar=1$），证明如下的态

$$\psi_m=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{L}_z\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{L}_y\theta}\psi_m^{(0)}$$

是 $\hat{L}_n=\hat{L}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{L}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{L}_z\cos\theta$ 的本征态.

**证**：设幺正变换

$$U=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{L}_z\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{L}_y\theta}$$

则从 $\psi_m^{(0)}$ 到 $\psi_m$ 是进行了一次态的幺正变换操作

$$\psi_m=U\psi_m^{(0)}$$

下面证明

$$\hat{L}_n=U\hat{L}_zU^{-1}$$

由 Baker-Hausdorff 公式（第二章）

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{L}_y\theta}\hat{L}_z\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{L}_y\theta}$$

$$=\hat{L}_z+(-\mathrm{i}\theta)[\hat{L}_y,\hat{L}_z]+\frac{1}{2!}(-\mathrm{i}\theta)^2[\hat{L}_y,[\hat{L}_y,\hat{L}_z]]$$

$$+\frac{1}{3!}(-i\theta)^3[\hat{L}_y,[\hat{L}_y,[\hat{L}_y,\hat{L}_z]]]+\cdots$$

$$=\hat{L}_z+\theta\hat{L}_x-\frac{1}{2!}\theta^2\hat{L}_z-\frac{1}{3!}\theta^3\hat{L}_y+\cdots$$

$$=\hat{L}_z\left(1-\frac{\theta^2}{2!}+\cdots\right)+\hat{L}_x\left(\theta-\frac{\theta^3}{3!}+\cdots\right)$$

$$=\hat{L}_z\cos\theta+\hat{L}_x\sin\theta$$

同理可得

$$e^{i\hat{L}_z\varphi}\hat{L}_x e^{i\hat{L}_z\varphi}=\hat{L}_x\cos\varphi+\hat{L}_y\sin\varphi$$

$$U\hat{L}_z U^{-1}=e^{-i\hat{L}_z\varphi}e^{-i\hat{L}_y\theta}\hat{L}_z e^{i\hat{L}_y\theta}e^{i\hat{L}_z\varphi}=\hat{L}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{L}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{L}_z\cos\theta=\hat{L}_n$$

将 $\hat{L}_n$ 作用到 $\psi_m$ 上，可得

$$\hat{L}_n\psi_m=U\hat{L}_zU^{-1}U\psi_m^{(0)}=U\hat{L}_z\psi_m^{(0)}=m\psi_m$$

所以，$\psi_m$ 为 $\hat{L}_n$ 本征值为 $m$ 的本征态.

# 第五章　量子力学的表象与表示

**5.1** Hermite 算符$\hat{A}$与$\hat{B}$满足$\hat{A}^2=\hat{B}^2=1$，$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，$\hat{A}$，$\hat{B}$均无简并，求

(1) 在 $A$ 表象中$\hat{A}$与$\hat{B}$的矩阵表示式，并求$\hat{B}$的本征函数表示式；

(2) 在 $B$ 表象中$\hat{A}$与$\hat{B}$的矩阵表示式，并求$\hat{A}$的本征函数表示式；

(3) $A$ 表象到 $B$ 表象的幺正变换矩阵 $S$.

**解**：(1) 因为$\hat{A}^2=\hat{B}^2=1$，算符$\hat{A}$，$\hat{B}$的本征值为 1，−1，在 $A$ 表象中，$\hat{A}$的矩阵表示式为对角阵，对角元为其本征值$\hat{A}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$，设$\hat{B}$的矩阵表示式为$\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$.

$$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=\begin{pmatrix}2a & 0\\ 0 & -2d\end{pmatrix}=0$$

$$a=0,\qquad d=0$$

$$\hat{B}^2=\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}^2=\begin{pmatrix}bc & 0\\ 0 & bc\end{pmatrix}=1$$

又因为 $B^{\dagger}=B$，故有 $b^*=c$，于是，有

$$b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta},c=\mathrm{e}^{\ \mathrm{i}\delta}$$

$$\hat{B}=\begin{bmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{bmatrix}$$

$\hat{B}$的本征函数$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}$，相应的本征值为 1；$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}$，相应的本征值为−1.

(2) 同上题，只需将$\hat{A}$与$\hat{B}$的地位交换一下即可.

(3) 令 $S=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$，为$\hat{A}$表象到$\hat{B}$表象的正交变换矩阵，则有

$$S\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}S^{-1}=\begin{bmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{bmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}a & -b\\ c & -d\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}c\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} & d\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{bmatrix}$$

解得 $a=1,b=1,c=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta},d=-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}$. 因为 $S$ 是幺正矩阵，$S^{\dagger}=S^{-1}$，最后得到

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ e^{-i\delta} & -e^{-i\delta}\end{pmatrix}$$

**5.2** 证明 (1) $\det(AB)=\det A\cdot\det B$

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

(3) $\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)$

(4) $\mathrm{tr}(ABC)=\mathrm{tr}(CAB)=\mathrm{tr}(BCA)$

(5) $\mathrm{tr}(S^{-1}AS)=\mathrm{tr}A$

**证**：设 $A,B,C$ 均为 $n$ 阶方阵.

(1) 设 $A=(a_{ij})_{n\times n}$，$B=(b_{ij})_{n\times n}$，它们的乘积 $C=AB=(c_{ij})_{n\times n}$，其中，

$$c_{ij}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj},(i,j=1,2,\cdots,n)$$

考虑 $2n$ 阶方阵

$$D=\begin{pmatrix}A & 0\\ -I_n & B\end{pmatrix}$$

有 $\det D=\det A\cdot\det B$，下面证明 $\det C=\det D$.

$$\det D=\begin{vmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & 0 & 0 & \cdots & 0\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & 0 & 0 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & 0 & 0 & \cdots & 0\\ -1 & 0 & \cdots & 0 & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n}\\ 0 & -1 & \cdots & 0 & b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & -1 & b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn}\end{vmatrix}$$

利用行列式的性质，对 $\det D$ 作如下运算：

将第 1 列的 $b_{11}$ 倍，第 2 列的 $b_{21}$ 倍，…，第 $n$ 列的 $b_{n1}$ 倍加到第 $n+1$ 列；再将第 1 列的 $b_{12}$ 倍，第 2 列的 $b_{22}$ 倍，…，第 $n$ 列的 $b_{n2}$ 倍加到第 $n+2$ 列；……；最后，将第 1 列的 $b_{1n}$ 倍，第 2 列的 $b_{2n}$ 倍，…，第 $n$ 列的 $b_{nn}$ 倍加到第 $2n$ 列，得到

$$\det D=\begin{vmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn}\\ -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0\end{vmatrix}=\det\begin{pmatrix}A & C\\ -I_n & 0\end{pmatrix}$$

将上面行列式中的前 $n$ 行于后 $n$ 行顺序相互对换，便有

$$\det\begin{pmatrix} A & C \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} = (-1)^n \det\begin{pmatrix} -I_n & 0 \\ A & C \end{pmatrix} = (-1)^n \cdot (-1)^n \cdot \det C = \det C$$

所以 $\det D = \det C$，得证.

(2) 利用(1)的结论

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

(3) 设 $A=(a_{ij})_{n\times n}$，$B=(b_{ij})_{n\times n}$，

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(AB) &= \mathrm{tr}\Big(\sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{kj}\Big) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{ki} \\ &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} b_{ki}a_{ik} = \mathrm{tr}\Big(\sum_{i=1}^{n} b_{ki}a_{ij}\Big) = \mathrm{tr}(BA) \end{aligned}$$

(4) 设 $A=(a_{ij})_{n\times n}$，　$B=(b_{ij})_{n\times n}$，　$C=(c_{ij})_{n\times n}$，

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(ABC) &= \mathrm{tr}\Big(\sum_{j,k=1}^{n} a_{ij}b_{jk}c_{kl}\Big) = \sum_{i,j,k=1}^{n} a_{ij}b_{jk}c_{ki} \\ &= \sum_{i,j,k=1}^{n} c_{ki}a_{ij}b_{jk} = \mathrm{tr}\Big(\sum_{i,j=1}^{n} c_{ki}a_{ij}b_{jl}\Big) = \mathrm{tr}(CAB) \\ &= \sum_{i,j,k=1}^{n} b_{jk}c_{ki}a_{il} = \mathrm{tr}\Big(\sum_{i,k=1}^{n} b_{jk}c_{ki}c_{il}\Big) = \mathrm{tr}(BCA) \end{aligned}$$

(5)　　$\mathrm{tr}(S^{-1}AS) = \mathrm{tr}(SS^{-1}A) = \mathrm{tr}A$

**5.3**　设 $A$ 为任意矩阵，证明在任何表象中 $\det A = \mathrm{e}^{(\mathrm{tr}\ln A)}$.

提示：利用 Schur 定理，任意矩阵 $A$ 可通过幺正变换化为上(下)三角矩阵，且其对角元为 $A$ 的本征值.

**证**：根据提示，存在幺正矩阵 $U$，使得 $UAU^{-1}$ = 上(下)三角矩阵. 从而有，$\det A = \det UAU^{-1} = \prod_i \lambda_i$（$\lambda_i$ 为 $A$ 的本征值）.

待证等式右边为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{tr}(\ln A)} = \mathrm{e}^{\sum_i \langle i|\ln A|i\rangle} = \mathrm{e}^{\sum_i \ln\lambda_i} = \prod_i \lambda_i = \det A$$

式中 $|i\rangle$ 为 $A$ 的本征态.

**5.4**　写出动量表象中的不含时间的 Schrödinger 方程.

**解**：将坐标表象下 Schrödinger 方程

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

Fourier 变换到动量表象. 有以下变换关系：

$$\psi(\boldsymbol{r}) \to \varphi(\boldsymbol{p}), \quad -\mathrm{i}\hbar\nabla_r \to \boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{r} \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}$$

于是动量表象中的不含时间的 Schrödinger 方程

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\varphi(\boldsymbol{p})+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\right)\varphi(\boldsymbol{p})=E\varphi(\boldsymbol{p})$$

若对(*)式两边同时做 Fourier 变换，也可得到另一结果：

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\varphi(\boldsymbol{p})+\int \bar{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\varphi(\boldsymbol{p}')\mathrm{d}\boldsymbol{p}'=E\varphi(\boldsymbol{p})$$

其中

$$\bar{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

**5.5** 一个质量为 $m$ 的粒子受力 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})=-\nabla V(\boldsymbol{r})$ 作用，使其波函数满足动量空间的 Schrödinger 方程：

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-a\nabla_p^2\right]\varphi(\boldsymbol{p},t)=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{p},t)$$

上面已令 $\hbar=1$，求力 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$.

**解**：将动量空间的 Schrödinger 方程进行反 Fourier 变换到坐标空间

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left\{\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-a\nabla_p^2\right]\varphi(\boldsymbol{p},t)=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{p},t)\right\}\mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

由逆 Fourier 变换性质，即 $\mathrm{F}^{-1}[\varphi(\boldsymbol{p},t)]=\psi(\boldsymbol{r},t)$；$\mathrm{F}^{-1}[-\nabla_p\varphi(\boldsymbol{p},t)]=\boldsymbol{r}^2\psi(\boldsymbol{r},t)$ 及 $\mathrm{F}^{-1}[\boldsymbol{p}^2\varphi(\boldsymbol{p},t)]=-\nabla_r^2\psi(\boldsymbol{r},t)$ 有

$$-\frac{1}{2m}\nabla_r^2\psi(\boldsymbol{r},t)+a\boldsymbol{r}^2\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

所以 $V(\boldsymbol{r})=a\boldsymbol{r}^2$，$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})=-\nabla_r V(\boldsymbol{r})=-2a\boldsymbol{r}$.

**5.6** $\psi(x,t)$ 是质量为 $m$ 的自由粒子的一维 Schrödinger 方程的解，$\psi(x,0)=A\mathrm{e}^{-x^2/a^2}$.

(1) 求出 $t=0$ 时，动量空间的概率振幅；(2) 求出 $\psi(x,t)$.

**解**：(1)Fourier 变换

$$\begin{aligned}\varphi(p,0)&=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\psi(x,0)\mathrm{d}x\\&=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}A\mathrm{e}^{-x^2/a^2}\mathrm{d}x\\&=A\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int \mathrm{e}^{-\frac{1}{a^2}\left(x+\frac{\mathrm{i}a^2p}{2\hbar}\right)^2-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}}\mathrm{d}x\\&=\frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}}\end{aligned}$$

(2) 动量空间中 $\varphi(\boldsymbol{p},t)$ 随时间的演化得

$$\varphi(p,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\varphi(p,0)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}p^2}{2m\hbar}t}\varphi(p,0)=\frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}p^2t}{2m\hbar}-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}}$$

经过反 Frourier 变换得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int e^{ipx/\hbar}\varphi(p,t)\,dp\\&=\frac{Aa}{\sqrt{4\pi\hbar^2}}\int\exp\left\{ipx/\hbar-\frac{ip^2t}{2m\hbar}-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}\right\}dp\\&=\frac{Aa}{\sqrt{4\pi\hbar^2}}\int\exp\left\{-\left(\frac{it}{2m\hbar}+\frac{a^2}{4\hbar^2}\right)p^2+ipx/\hbar\right\}dp\\&=\frac{Aa}{\sqrt{a^2+\dfrac{2i\hbar t}{m}}}\exp\left\{-\frac{x^2}{a^2+\dfrac{2i\hbar t}{m}}\right\}\end{aligned}$$

**5.7**　已知一量子体系，除了能量之外，还包括另外三个可观测量，称为 $P,Q,R$. 设该体系只有两个(归一化的)能量本征态$|1\rangle,|2\rangle$，它们未必是 $P,Q,R$ 的本征态. 基于下列各组"实验数据"，尽可能多地定出 $P,Q,R$ 的本征值(注意：有一组数据是非物理的，下面设 $\hbar=1$)：

(1) $\langle1|P|1\rangle=1/2,\langle1|P^2|1\rangle=1/4.$

(2) $\langle1|Q|1\rangle=1/2,\langle1|Q^2|1\rangle=1/6.$

(3) $\langle1|R|1\rangle=1,\langle1|R^2|1\rangle=5/4,\langle1|R^3|1\rangle=7/4.$

**解**：(1) 因为$\langle1|P|1\rangle=1/2$，可设 $P|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle+\alpha|2\rangle$，由态的正交归一和 $P$ 的 Hermite 性，得$\langle1|P|2\rangle=\alpha^*$. 于是可设 $P|2\rangle=\alpha^*|1\rangle+\beta|2\rangle$.

$$P^2|1\rangle=P\left(\frac{1}{2}|1\rangle+\alpha|2\rangle\right)=\left(\frac{1}{4}+\alpha^*\alpha\right)|1\rangle+\left(\frac{1}{2}\alpha+\alpha\beta\right)|2\rangle$$

由$\langle1|P^2|1\rangle=1/4$，得 $\alpha^*\alpha=0$，$\alpha=0$.

所以，$P|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle$，$|1\rangle$是 $P$ 的本征值为$\frac{1}{2}$的本征态；$|2\rangle$也是 $P$ 的本征态，但本征值未知.

(2) 令 $Q|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle+\gamma|2\rangle$.

同(1)得 $\gamma^*\gamma=(1/6-1/4)<0$，所以这组数据是非物理的.

(3) 设 $R|1\rangle=|1\rangle+\lambda|2\rangle$，由$\langle1|R^2|1\rangle=5/4$可得

$$\lambda^*\lambda=1/4,\quad \lambda=\frac{1}{2}e^{i\delta}$$

即 $R|1\rangle=|1\rangle+\frac{1}{2}e^{i\delta}|2\rangle$.

因为$\langle1|R|2\rangle=\langle2|R|1\rangle^*=\frac{1}{2}e^{-i\delta}$，可设 $R|2\rangle=\frac{1}{2}e^{-i\delta}|1\rangle+\eta|2\rangle$.

则有

$$R^2 \mid 1\rangle = \frac{5}{4} + \frac{1}{2}(1+\eta)e^{i\delta} \mid 2\rangle$$

$$R^3 \mid 1\rangle = \frac{5}{4} \mid 1\rangle + \frac{1}{4}(1+\eta) \mid 1\rangle + \frac{5}{8}e^{i\delta} \mid 2\rangle + \frac{1}{2}(1+\eta)\eta e^{i\delta} \mid 2\rangle$$

由$\langle 1|R^3|1\rangle = 7/4$，得 $\eta=1$. 所以在基$|1\rangle, |2\rangle$下，$R$ 的矩阵为

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2}e^{i\delta} \\ \frac{1}{2}e^{-i\delta} & 1 \end{pmatrix}$$

由此可得 $R$ 的本征值为$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

**5.8** 利用坐标动量对易关系证明 $\sum_n (E_n - E_0) \mid \langle n \mid x \mid 0 \rangle \mid^2 = \text{const.}$ 其中 $E_n$ 是本征态$|n\rangle$的能量. 再求出该常数的值. Hamilton 量为 $H = p^2/2m + V(x)$.

**解**：利用完备性条件 $\sum_n \mid n\rangle\langle n \mid = 1$.

$$\begin{aligned}
&\sum_n (E_n - E_0) \mid \langle n \mid x \mid 0 \rangle \mid^2 \\
&= \sum_n (\langle 0 \mid xH \mid n\rangle\langle n \mid x \mid 0\rangle - \langle 0 \mid Hx \mid n\rangle\langle n \mid x \mid 0\rangle) \\
&= \langle 0 \mid xHx - Hxx \mid 0\rangle \\
&= \sum_n (\langle 0 \mid x \mid n\rangle\langle n \mid Hx \mid 0\rangle - \langle 0 \mid x \mid n\rangle\langle n \mid xH \mid 0\rangle) \\
&= \langle 0 \mid xHx - xxH \mid 0\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle 0 \mid xHx - Hxx + xHx - xxH \mid 0\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle 0 \mid [x,[H,x]] \mid 0\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle 0 \mid \left[x,\left[\frac{p^2}{2m},x\right]\right] \mid 0\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}
\end{aligned}$$

**5.9** (1) 给定一个本征值为 $a_n$，本征函数为 $u_n(x)(n=1,2,3,\cdots,N;0\leqslant x\leqslant L)$的 Hermite 算符 $A$，说明算符 $\exp\{iA\}$是幺正算符.

(2)用任意算符的矩阵构造出一 Hermite 算符的矩阵.

(3)给定另一 Hermite 算符 $B$ 其本征值为 $b_m$，本征函数为 $v_m(x)$，构造出一幺正算符 $V$ 的表示，使它把 $B$ 的本征矢量转换成 $A$ 的本征矢量.

**解**：(1) $A$ 为 Hermite 算符，则 $A^\dagger = A$.

$$(e^{iA})^\dagger = \left[\sum_n \frac{(iA)^n}{n!}\right]^\dagger = \sum_n \frac{(-iA^\dagger)^n}{n!} = e^{-iA^\dagger} = e^{-iA} = (e^{iA})^{-1}$$

所以 $e^{iA}$ 是幺正矩阵.

(2) 设 $U_{mn}$ 为一般算符矩阵,令 $S_{mn}=U_{mn}+U_{mn}^{\dagger}$,则

$$(S^{\dagger})_{mn}=U_{mn}^{\dagger}+U_{mn}=S_{mn}$$

$S$ 是 Hermite 矩阵.

(3) 设有幺正算符 $\hat{V}$ 的表示 $V_{mn}$,使得

$$u_n(x)=V_{nm}v_m(x)$$

利用 $u_n(x)$,$v_m(x)$ 的正交归一性

$$\int_0^L u_n(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x=V_{nm}\int_0^L v_m(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x=V_{nm}\delta_{ml}$$

即得

$$V_{nl}=\int_0^L u_n(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x$$

**5.10**　证明(5.31)式中的第二个公式.

**证**：要证

$$\hat{\boldsymbol{p}}\mid\hat{\boldsymbol{r}}'\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\mid\boldsymbol{r}'\rangle$$

在上式左边左乘任意态矢$\langle A\mid$,并且在适当的位置插入动量表象基矢的完备性条件$\int\mid\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}\mid\mathrm{d}\boldsymbol{p}=1$,利用

$$\langle\boldsymbol{p}'\mid\hat{\boldsymbol{p}}\mid\boldsymbol{r}'\rangle=\boldsymbol{p}'\langle\boldsymbol{p}'\mid\boldsymbol{r}'\rangle=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2}\boldsymbol{p}'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}$$

有

$$\begin{aligned}\langle A\mid\hat{\boldsymbol{p}}\mid\hat{\boldsymbol{r}}'\rangle&=\int\langle A\mid\boldsymbol{p}'\rangle\langle\boldsymbol{p}'\mid\hat{\boldsymbol{p}}\mid\hat{\boldsymbol{r}}'\rangle\mathrm{d}\boldsymbol{p}'\\&=\int\boldsymbol{p}'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}\psi_A(\boldsymbol{p}')\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\\&=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}\psi_A(\boldsymbol{p}')\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\\&=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\psi_A(\boldsymbol{r}')\\&=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\langle A\mid\boldsymbol{r}'\rangle\end{aligned}$$

证明过程中利用了

$$\boldsymbol{p}'\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'}$$

由于$\langle A\mid$任意,故有$\hat{\boldsymbol{p}}\mid\hat{\boldsymbol{r}}'\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\mid\boldsymbol{r}'\rangle$,得证.

**5.11**　证明(5.32)式.

**证**：同上题的证法. 要证

$$\hat{\boldsymbol{r}} \mid \boldsymbol{p}'\rangle = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'} \mid \boldsymbol{p}'\rangle$$

可在上式左边左乘任意态矢$\langle A|$，并且在适当的位置插入坐标表象基矢的完备性条件.

$$\begin{aligned}
\langle A \mid \hat{\boldsymbol{r}} \mid \boldsymbol{p}'\rangle &= \int \langle A \mid \boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}' \mid \hat{\boldsymbol{r}} \mid \boldsymbol{p}'\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \\
&= \int \boldsymbol{r}' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}\psi_A(\boldsymbol{r}') \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\
&= -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}\psi_A(\boldsymbol{r}') \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\
&= -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\psi_A(\boldsymbol{p}') \\
&= -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\langle A \mid \boldsymbol{p}'\rangle
\end{aligned}$$

（证明过程中利用了 $\boldsymbol{r}'\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'} = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'}$）. 因为$\langle A|$任意，故有 $\hat{\boldsymbol{r}} \mid \boldsymbol{p}'\rangle = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}|\boldsymbol{p}'\rangle$，证毕.

再证

$$\langle \boldsymbol{p}' \mid \hat{\boldsymbol{r}} = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\langle \boldsymbol{p}' \mid$$

在上式左边右乘任意态矢$|A\rangle$，有

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{p}' \mid \hat{\boldsymbol{r}} \mid A\rangle &= \int \langle \boldsymbol{p}' \mid \boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}' \mid \hat{\boldsymbol{r}} \mid A\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \\
&= \int \boldsymbol{r}' \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}\psi_A(\boldsymbol{r}') \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\
&= \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'/\hbar}\psi_A(\boldsymbol{r}') \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\
&= \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\psi_A(\boldsymbol{p}') \\
&= \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\langle \boldsymbol{p}' \mid A\rangle
\end{aligned}$$

故有$\langle \boldsymbol{p}'|\hat{\boldsymbol{r}} = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}'}\langle \boldsymbol{p}'|$.

**5.12** (i) 设$A(t)$为幺正算符，对$t$可微，证明 $\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}$可以表成

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = BA \tag{1}$$

其中 $B$ 为 Hermite 算符.

(ii) 设 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}=BA$ 成立，$B$ 为 Hermite 算符，证明 $AA^{+}$ 满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}AA^{+}}{\mathrm{d}t}=[B,AA^{+}] \tag{2}$$

进而再证明，如 $t=t_0$ 时 $A(t_0)$ 为幺正算符，则 $A(t)$ 总是幺正算符.

**证**：(i) 因为 $A(t)$ 是幺正的，$A(t)A^{+}(t)=A^{+}(t)A(t)=1$. 对 $t$ 求导，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(AA^{+})=\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{+}+A\frac{\mathrm{d}A^{+}}{\mathrm{d}t}=0$$

即

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{+}=-A\frac{\mathrm{d}A^{+}}{\mathrm{d}t}$$

由(1)式可知

$$B=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{+}$$

则

$$B^{+}=\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{+}\right)^{+}=-\mathrm{i}\hbar A\frac{\mathrm{d}A^{+}}{\mathrm{d}t}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{+}=B$$

即 $B$ 为 Hermite 算符.

(ii) 如 $A(t)$ 满足(i)，而且 $B(t)=B^{+}(t)$，则式(1)的共轭方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A^{+}}{\mathrm{d}t}=A^{+}B \tag{3}$$

因此

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(AA^{+})=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{+}+\mathrm{i}\hbar A\frac{\mathrm{d}A^{+}}{\mathrm{d}t}=BAA^{+}-AA^{+}B=[B,AA^{+}]$$

此即式(2). 由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[AA^{-1}]=\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{-1}+A\frac{\mathrm{d}A^{-1}}{\mathrm{d}t}=0$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A^{-1}=-A^{-1}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{-1}$$

两边乘 $-\mathrm{i}\hbar$，并利用(1)式，有

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A^{-1}}{\mathrm{d}t}=\mathrm{i}\hbar A^{-1}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{-1}=A^{-1}BAA^{-1}=A^{-1}B \tag{4}$$

比较(3)和(4)式，可见，$A^{-1}$ 与 $A^{+}$ 满足同样的方程，所以 $A^{-1}=\lambda A^{+}$，$\lambda$ 为任意常数. 但是，如果在时刻 $t_0$，$A(t_0)A^{+}(t_0)=1$，即 $A(t_0)$ 为幺正算符，则 $A^{+}(t_0)=A^{-1}(t_0)$. 由此初条件可得出结论：$A^{+}(t)=A^{-1}(t)$，即对 $t$ 取任何值，$A(t)$ 为幺正算符.

**5.13**　验证积分方程　$\hat{B}(t)=\hat{B}(0)+\mathrm{i}[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau]$

有下列解：

$$\hat{B}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t}$$

其中$\hat{A}$与时间无关.

**证**：对该解求导

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t)=\mathrm{i}\hat{A}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t}-\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{A}=\mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}(t)]$$

上式两边在$0\sim t$对时间积分，即得

$$\hat{B}(t)-\hat{B}(0)=\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]$$

**5.14**　设体系能量本征态记为$|n\rangle$，$H|n\rangle=E_n|n\rangle$，力学量$A$在能量表象中矩阵元记为$A_{kn}=\langle k|A|n\rangle$，证明：

$$\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}=\mathrm{i}\bar{\omega}_{kn}A_{kn}$$

其中$\bar{\omega}_{kn}=(E_n-E_k)/\hbar$.

**证**：

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}&=\left\langle k\left|\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)\right|n\right\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle k\mid[A,H]\mid n\rangle\\&=\frac{1}{-\mathrm{i}\hbar}\langle k\mid HA\mid n\rangle+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle k\mid AH\mid n\rangle\\&=\mathrm{i}\frac{E_k}{\hbar}\langle k\mid A\mid n\rangle-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}\langle k\mid A\mid n\rangle\\&=\mathrm{i}\bar{\omega}_{kn}A_{kn}\end{aligned}$$

**5.15**　计算坐标表象、动量表象和能量表象的 Hamilton 量算符$H=T+V$矩阵元：

$$\langle\boldsymbol{r}'\mid H\mid\boldsymbol{r}''\rangle,\ \langle\boldsymbol{p}'\mid H\mid\boldsymbol{p}''\rangle,\langle n'l'm'\mid H\mid nlm\rangle.$$

**解**：坐标表象下，$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+V(r)$，

$$\langle\boldsymbol{r}'\mid H\mid\boldsymbol{r}''\rangle=\langle\boldsymbol{r}'\mid-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+V(r)\mid\boldsymbol{r}''\rangle=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+V(\boldsymbol{r}')\right]\langle\boldsymbol{r}'\mid\boldsymbol{r}''\rangle$$

$$=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+V(\boldsymbol{r}'')\right]\delta(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}')$$

动量表象下，$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\right)$，

$$\langle\boldsymbol{p}'\mid H\mid\boldsymbol{p}''\rangle=\langle\boldsymbol{p}'\mid\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\right)\mid\boldsymbol{p}''\rangle=\langle\boldsymbol{p}'\mid\frac{\boldsymbol{p}''^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}''}\right)\mid\boldsymbol{p}''\rangle$$

$$= \left[\frac{\boldsymbol{p}''^2}{2m} + V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}''}\right)\right]\delta(\boldsymbol{p}'' - \boldsymbol{p}')$$

能量表象下，

$$\langle n'l'm' \mid H \mid nlm \rangle = E_n\langle n'l'm' \mid nlm\rangle = E_n\delta_{n'n}\delta_{l'l}\delta_{m'm}.$$

**5.16**　设 $H=\boldsymbol{p}^2/2\mu+V(\boldsymbol{r})$，试用纯矩阵的运算，证明下列求和规则：

$$\sum_n (E_n - E_m) \mid x_{nm} \mid^2 = \hbar^2/2\mu$$

其中 $x$ 是 $\boldsymbol{r}$ 的一个直角坐标分量，求和对一切可能的态进行，$E_n$ 是 $|n\rangle$ 态的能量.

**证**：在第 5.8 题中将 $|0\rangle$，改为 $|m\rangle$，即可得证.

**5.17**　设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 为 Hermite 算符，证明在能量表象中的求和规则：

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

**证**：

$$\begin{aligned}
&\sum_n (E_n - E_k) \mid \langle n \mid F \mid k\rangle \mid^2 \\
&= \sum_n (\langle k \mid FH \mid n\rangle\langle n \mid F \mid k\rangle - \langle k \mid HF \mid n\rangle\langle n \mid F \mid k\rangle) \\
&= \langle k \mid FHF - HFF \mid k\rangle \\
&= \sum_n (\langle k \mid F \mid n\rangle\langle n \mid HF \mid k\rangle - \langle k \mid F \mid n\rangle\langle n \mid FH \mid k\rangle) \\
&= \langle k \mid FHF - FFH \mid k\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle k \mid FHF - HFF + FHF - FFH \mid k\rangle \\
&= \frac{1}{2}\langle k \mid [F,[H,F]] \mid k\rangle
\end{aligned}$$

**5.18**　对于一维粒子，$H=p^2/2\mu+V(x)$，证明求和规则：

$$\sum_n (E_n - E_k)^2 \mid x_{nk} \mid^2 = -2\hbar^2\frac{\partial E_k}{\partial \mu}$$

**证**：由 Hellmann-Feynman 定理，有

$$\left\langle\frac{\partial H}{\partial \lambda_k}\right\rangle = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\lambda_k}$$

$$\begin{aligned}
&\sum_n (E_n - E_k)^2 \mid x_{nk} \mid^2 \\
&= \sum_n \langle k \mid xH - Hx \mid n\rangle\langle n \mid Hx - xH \mid k\rangle \\
&= -\langle k \mid (Hx - xH)^2 \mid k\rangle = -\langle k \mid \left[\frac{p^2}{2\mu}, x\right]^2 \mid k\rangle
\end{aligned}$$

$$= 2\hbar^2\langle k \mid \frac{p^2}{2\mu^2} \mid k\rangle = -2\hbar^2\langle k \mid \frac{\partial H}{\partial \mu} \mid k\rangle = -2\hbar^2\frac{\partial E_k}{\partial \mu}$$

**5.19** 对于一维谐振子，试利用能级公式，位力定理及求和规则，计算矩阵元 $x_{nk}$.

**解**：解法一：利用公式 $x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(a+a^\dagger)$，及 Fock 空间产生、湮灭算符作用于谐振子态的公式

$$\begin{cases} a \mid n\rangle = \sqrt{n} \mid n-1\rangle \\ a^\dagger \mid n\rangle = \sqrt{n+1} \mid n+1\rangle \end{cases}$$

则矩阵元

$$\begin{aligned} x_{kn} &= \langle k \mid x \mid n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\langle k \mid a+a^\dagger \mid n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\langle k \mid (\sqrt{n} \mid n-1\rangle + \sqrt{n+1} \mid n+1\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{k,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{k,n+1}\right) \end{aligned}$$

**解法二**：利用 Hermite 多项式的递推关系，容易证明谐振子的波函数有下列关系：

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

由此可得到上述同样关系.

**5.20** 证明$[a,a^\dagger]=1$.

**证**：

$$\begin{aligned} [a,a^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x + \mathrm{i}p), \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x - \mathrm{i}p)\right] \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega}m\omega([x,-\mathrm{i}p]+[\mathrm{i}p,x]) = 1 \end{aligned}$$

**5.21** 对于 $a^\dagger$ 的任意幂级数函数 $f(a^\dagger)$，证明 $af(a^\dagger)=f(a^\dagger)a+\frac{\partial f(a^\dagger)}{\partial a^\dagger}$

**证**：将 $f(a^+)$ 展开为 $f(a^\dagger)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}C_n(a^\dagger)^n$. 用归纳法易证$[a,(a^+)^n]=n(a^+)^{n-1}$(参见本章 25 题解答). 所以，

$$[a,f(a^\dagger)] = \sum_{n=-\infty}^{+\infty}C_n[a,(a^\dagger)^n] = \sum_{n=-\infty}^{+\infty}nC_n(a^\dagger)^{n-1} = \frac{\partial f(a^\dagger)}{\partial a^\dagger}$$

即，

$$af(a^\dagger) = f(a^\dagger)a + \frac{\partial f(a^\dagger)}{\partial a^\dagger}$$

将此式取 Hermite 共轭，得

$$f(a)a^{\dagger}=a^{\dagger}f(a)+\frac{\partial f(a)}{\partial a}$$

**5.22** 证明
$$\begin{cases}\exp\{\alpha a\}a^{\dagger}\exp\{-\alpha a\}=a^{\dagger}+\alpha\\ \exp\{\alpha a^{\dagger}\}a\exp\{-\alpha a^{\dagger}\}=a-\alpha\end{cases}$$

**证**：由 Baker-Hausdorff 公式

$$e^{\alpha a}a^{\dagger}e^{-\alpha a}=a^{\dagger}+[\alpha a,a^{\dagger}]+\frac{1}{2!}[\alpha a,[\alpha a,a^{\dagger}]]+\cdots=a^{\dagger}+\alpha$$

$$e^{\alpha a^{\dagger}}ae^{-\alpha a^{\dagger}}=a+[\alpha a^{\dagger},a]+\frac{1}{2!}[\alpha a^{\dagger},[\alpha a^{\dagger},a]]+\cdots=a-\alpha$$

**5.23** 用 Baker-Hausdorff 公式证明
$$\begin{cases}\exp\{\alpha a^{\dagger}a\}a^{\dagger}\exp\{-\alpha a^{\dagger}a\}=\exp\{\alpha\}a^{\dagger}\\ \exp\{\beta a^{\dagger}a\}a\exp\{-\beta a^{\dagger}a\}=\exp\{-\beta\}a\end{cases}$$

**证**：

$$\begin{aligned}&e^{\alpha a^{\dagger}a}a^{\dagger}e^{-\alpha a^{\dagger}a}\\ &=a^{\dagger}+[\alpha a^{\dagger}a,a^{\dagger}]+\frac{1}{2!}[\alpha a^{\dagger}a,[\alpha a^{\dagger}a,a^{\dagger}]]+\\ &\quad\frac{1}{3!}[\alpha a^{\dagger}a,[\alpha a^{\dagger}a,[\alpha a^{\dagger}a,a^{\dagger}]]]+\cdots\\ &=a^{\dagger}+\alpha a^{\dagger}+\frac{1}{2!}[\alpha a^{\dagger}a,\alpha a^{\dagger}]+\frac{1}{3!}[\alpha a^{\dagger}a,[\alpha a^{\dagger}a,\alpha a^{\dagger}]]+\cdots\\ &=a^{\dagger}+\alpha a^{\dagger}+\frac{1}{2!}\alpha^{2}a^{\dagger}+\frac{1}{3!}[\alpha a^{\dagger}a,\alpha^{2}a^{\dagger}]+\cdots\\ &=e^{\alpha}a^{\dagger}\end{aligned}$$

同理可得

$$e^{\beta a^{\dagger}a}ae^{-\beta a^{\dagger}a}=e^{-\beta}a$$

**5.24** 用习题 5.21 公式证明
$$\begin{cases}\exp\{\alpha a^{2}\}a^{\dagger}\exp\{-\alpha a^{2}\}=a^{\dagger}+2\alpha a\\ \exp\{\beta(a^{\dagger})^{2}\}a\exp\{-\beta(a^{\dagger})^{2}\}=a-2\beta a^{\dagger}\end{cases}$$

（或用 Baker-Hausdorff 公式证明. 注意此处第一式可由对第二式 Hermite 共轭得到.）

**证**：(1) 取 $f(a)=e^{\alpha a^{2}}$.

$$f(a)a^{\dagger}=a^{\dagger}f(a)+\frac{\partial f(a)}{\partial a}$$

$$e^{\alpha a^{2}}a^{\dagger}=a^{\dagger}e^{\alpha a^{2}}+2\alpha ae^{\alpha a^{2}}$$

$$e^{\alpha a^{2}}a^{\dagger}e^{-\alpha a^{2}}=a^{\dagger}+2\alpha a$$

(2) 取 $f(a^{\dagger})=e^{\beta(a^{\dagger})^{2}}$.

$$af(a^{\dagger})=f(a^{\dagger})a+\frac{\partial f(a^{\dagger})}{\partial a^{\dagger}}$$

$$ae^{-\beta(a^\dagger)^2} = e^{-\beta(a^\dagger)^2}a - 2\beta a^\dagger e^{\beta(a^\dagger)^2}$$

$$e^{\beta(a^\dagger)^2}ae^{-\beta(a^\dagger)^2} = a - 2\beta a^\dagger$$

**5.25** 证明 Fock 空间基矢 $|n\rangle=\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ 是正交归一的.

**证**：先证明 $a(a^\dagger)^n=(a^\dagger)^n a+n(a^\dagger)^{n-1}$.

用数学归纳法.

$k=1$ 时，$aa^\dagger=a^\dagger a+1$，满足上式.

假设 $k=n-1$ 时，上式也成立，即 $a(a^\dagger)^{n-1}=(a^\dagger)^{n-1}a+(n-1)(a^\dagger)^{n-2}$，则 $k=n$ 时

$$a(a^\dagger)^n=\left[(a^\dagger)^{n-1}a+(n-1)(a^\dagger)^{n-2}\right]a^\dagger=(a^\dagger)^n a+n(a^\dagger)^{n-1}$$

因此，

$$\begin{aligned}\langle m\mid n\rangle &= \langle 0\mid \frac{a^m}{\sqrt{m!}}\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\mid 0\rangle\\ &= \frac{1}{\sqrt{m!n!}}\langle 0\mid a^m(a^\dagger)^n\mid 0\rangle\\ &= \frac{1}{\sqrt{m!n!}}\langle 0\mid a^{m-1}\left[(a^\dagger)^n a+n(a^\dagger)^{n-1}\right]\mid 0\rangle\\ &= \frac{1}{\sqrt{m!n!}}\langle 0\mid na^{m-1}(a^\dagger)^{n-1}\mid 0\rangle\\ &= n(n-1)\frac{1}{\sqrt{m!n!}}\langle 0\mid a^{m-2}(a^\dagger)^{n-2}\mid 0\rangle\\ &= \cdots\\ &= n!\frac{1}{\sqrt{m!n!}}\delta_{mn}=\delta_{mn}\end{aligned}$$

**5.26** 证明真空态投影算符 $|0\rangle\langle 0|$ 可以表成如下正规乘积形式：

$$|0\rangle\langle 0| = :e^{-a^\dagger a}:$$

此处记号 $:\cdots:$ 是正规乘积符号. 其含义是将符号内算子集团中的 $a^\dagger$ 和 $a$ 重新排序：所有 $a^\dagger$ 均在所有 $a$ 的左方. 并且在重新排序过程中，忽略任何对易子. 例如：$m$ 个 $a^\dagger$，$n$ 个 $a$ 的任意顺序连乘 $:=(a^\dagger)^m a^n$

**证**：设任意态 $|\psi_1\rangle=\sum_n C_n^{(1)}|n\rangle$，$|\psi_2\rangle=\sum_m C_m^{(2)}|m\rangle$，将两态分别左，右作用在待证等式两端，这时等式左端为

$$\sum_m C_m^{(2)*}\langle m\mid 0\rangle\langle 0\mid \sum_n C_n^{(1)}\mid n\rangle = C_0^{(2)*}C_0^{(1)}$$

等式右端为

$$\sum_m C_m^{(2)*}\langle m\mid :e^{-a^\dagger a}:\sum_n C_n^{(1)}\mid n\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{mn} C_m^{(2)*} C_n^{(1)} \langle m | : \sum_l \frac{(-1)^l}{l!} (a^\dagger a)^l : | n \rangle \\
&= \sum_{mn} C_m^{(2)*} C_n^{(1)} \sum_l \frac{(-1)^l}{l!} \langle m | a^{\dagger l} a^l | n \rangle \\
&= \sum_{mn} C_m^{(2)*} C_n^{(1)} \sum_l \frac{(-1)^l}{l!} (\sqrt{m}\sqrt{m-1}\cdots\sqrt{m-l+1}) \\
&\quad \times (\sqrt{n}\cdots\sqrt{n-l+1}) \langle m-l | n-l \rangle \\
&= \sum_n C_n^{(2)*} C_n^{(1)} \sum_l \frac{(-1)^l}{l!} \frac{n!}{(n-l)!} \\
&= \sum_n C_n^{(2)*} C_n^{(1)} \delta_{n0} = C_0^{(2)*} C_0^{(1)}
\end{aligned}
$$

所以，左端＝右端，又因为$|\psi_1\rangle$，$|\psi_2\rangle$的任意性，故$|0\rangle\langle 0| = :e^{-a^\dagger a}:$.

**5.27**　令 $z=x+iy$，用 $d^2z=dxdy$，可以直接检验下面积分公式

$$\int \frac{d^2z}{\pi} \exp\{\alpha |z|^2 + \beta z + \gamma z^*\} = -\frac{1}{\alpha} \exp\left\{-\frac{\beta\gamma}{\alpha}\right\} \quad (\mathrm{Re}\alpha < 0)$$

利用这个数学公式，以及在正规乘积号下算符 $a$ 和 $a^\dagger$ 是对易的，求证

$$\int \frac{d^2z}{\pi} : \exp\{-|z|^2 + za^\dagger + z^* a - aa^\dagger\} : = 1$$

**证**：因为在正规乘积下算符 $a$ 和 $a^\dagger$ 是对易的，可以当成普通数

$$\int \frac{d^2z}{\pi} : e^{-|z|^2 + za^\dagger + z^* a - aa^\dagger} : = : \int \frac{d^2z}{\pi} e^{-|z|^2 + za^\dagger + z^* a} e^{-aa^\dagger} :$$

$\alpha=-1, \beta=a^\dagger, \gamma=a$.

$$\int \frac{d^2z}{\pi} : e^{-|z|^2 + za^\dagger + z^* a - aa^\dagger} : = : e^{a^\dagger a} e^{-aa^\dagger} : = 1$$

**5.28**　设 $N=a^\dagger a$，这里$(a, a^\dagger)$是 Bose 子算符，求证 $:N^k:=N(N-1)\cdots(N-k+1)$

进一步：如果 $N=a^\dagger a+b^\dagger b$，其中$(a, a^\dagger)$和$(b, b^\dagger)$均是 Bose 算符，分别属于不同自由度. 则结果又将如何？

**证**：

$$Na = a^\dagger aa = aa^\dagger - a = a(N-1)$$

$k=0$ 时，$:N^0:=1$，$k>0$ 用数学归纳法.

$k=1$ 时，$:N:=:a^\dagger a:=a^\dagger a=N$，

假设 $k=n-1$ 时，上式成立，即 $:N^{n-1}:=N(N-1)\cdots(N-n+2)$，

则 $k=n$ 时，

$$
\begin{aligned}
:N^n: &= :a^\dagger N^{n-1} a: a^\dagger :N^{n-1}: a = a^\dagger N(N-1)\cdots(N-n+3)(N-n+2)a \\
&= a^\dagger N(N-1)\cdots(N-n+3)a(N-1-n+2) \\
&= a^\dagger N(N-1)\cdots(N-n+3)a(N-n+1)
\end{aligned}
$$

$$= a^\dagger N(N-1)\cdots a(N-n+2)(N-n+1)$$
$$= \cdots\cdots$$
$$= a^\dagger a(N-1)(N-2)\cdots(N-n+2)(N-n+1)$$
$$= N(N-1)\cdots(N-n+2)$$

设 $N_1=a^\dagger a, N_2=b^\dagger b$，因为 $a,b$ 属于不同自由度，所以对易.

$$:N^k: = :(N_1+N_2)^k: = \sum_{k_1=0}^{k} C_k^{k_1} :N_1^{k_1} N_2^{k-k_1}:$$

$$= \sum_{k_1=0}^{k} C_k^{k_1} :N_1^{k_1}::N_2^{k-k_1}:$$

$$= \sum_{k_1=0}^{k} \frac{k!}{(k-k_1)!k_1!} N_1(N_1-1)\cdots(N_1-k_1+1)N_2(N_2-1)\cdots(N_2-k+k_1+1)$$

$$= \sum_{k_1=0}^{k} \frac{k!N_1!(N-N_1)!}{k_1!(k-k_1)!(N_1-k_1)![(N-k)-(N_1-k_1)]!}$$

**5.29** 证明等式 $:e^{xN}:=(1+x)^N$，这里 $N=a^\dagger a+b^\dagger b$，$x$ 为常数.

**证**：如果 $N=a^\dagger a$，

$$:e^{xN}: = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}x^n :N^n:$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}x^n N(N-1)\cdots(N-n-1)$$
$$= \sum_{n=0}^{N} \frac{1}{n!}x^n N(N-1)\cdots(N-n-1)$$
$$= \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{(N-n)!n!}x^n = (1+x)^N$$

本题中令 $N=N_1+N_2, N_1=a^\dagger a, N_2=b^\dagger b$，

$$:e^{xN}: = :e^{x(N_1+N_2)}: = :e^{xN_1}e^{xN_2}: = :e^{xN_1}::e^{xN_2}:$$
$$= (1+x)^{N_1}(1+x)^{N_2} = (1+x)^{N_1+N_2} = (1+x)^N$$

**5.30** 证明 $:e^{(A-1)N}:=e^{(\ln A)N}$，这里 $A$ 是常数.

**证**：利用 5.29 题结果，

$$:e^{xN}: = (1+x)^N$$

令 $x=e^\lambda-1$，$A=e^\lambda$，则上式左边为

$$:e^{xN}: = :e^{(e^\lambda-1)N}: = :e^{(A-1)N}:$$

上式右边为

$$(1+x)^N = (e^\lambda)^N = e^{\lambda N} = e^{(\ln A)N}$$

于是有 $:e^{(A-1)N}:=e^{(\ln A)N}$.

# 第六章　对称性分析及应用

**6.1**　利用 Baker-Hausdorff 公式（习题 2.7）

$$e^{A}Be^{-A}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[A^{(n)},B]$$

其中$[A^{(n)},B]=[A,[A^{(n-1)},B]]$.

证明 $\boldsymbol{r}'=U(\boldsymbol{a})\boldsymbol{r}U^{-1}(\boldsymbol{a})=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}$. 这里空间平移算符$U(\boldsymbol{a})$是(6.12a)式.

**证：**

$$U(\boldsymbol{a})=e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}}$$

令 $A=-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}$, $B=\boldsymbol{r}$,则

$$\boldsymbol{r}'=U(\boldsymbol{a})\hat{\boldsymbol{r}}U^{-1}(\boldsymbol{a})=e^{A}Be^{-A}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[A^{(n)},B].$$

因为

$$[A^{(0)},B]=B;$$

$$[A^{(1)},B]=[A,B]=-\frac{i}{\hbar}[\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}]=-\frac{i}{\hbar}(-i\hbar\boldsymbol{a})=-\boldsymbol{a};$$

$$[A^{(2)},B]=0;$$

……

$$[A^{(n)},B]=0,(n\geqslant 2)$$

所以

$$\boldsymbol{r}'=B+[A^{(1)},B]=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}$$

**6.2**　$U(\varphi\boldsymbol{n})$为绕 $\boldsymbol{n}$ 方向转 $\varphi$ 角的空间转动算符，其表达式为(6.14)式. 标量算符 $S$ 是由矢量算符 $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 的标积所组成的标量函数. 证明任意两个矢量算符的点乘积是空间转动不变的，并用 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{L}$ 为两个例子检验之.

**提示：先计算角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 和标量算符的对易子.**

**证：**由于 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{r}$ 及 $\boldsymbol{p}$ 的对易规则有相似性，形式上都可以写为

$$[L_i,A_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}A_k$$

故而，我们计算下面的对易子

$$[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L},\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}]$$

$\boldsymbol{n}$ 是单位常矢量，$\boldsymbol{B}$,$\boldsymbol{C}$ 满足对易关系如下：

$$[L_i,B_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}B_k,[L_i,C_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}C_k$$

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L},\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}] &= [n_\alpha L_\alpha, B_\beta C_\beta] \\ &= n_\alpha([L_\alpha,B_\beta]C_\beta + B_\beta[L_\alpha,C_\beta]) \\ &= n_\alpha(\mathrm{i}\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma C_\beta + \mathrm{i}\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\beta C_\gamma) \\ &= -(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})\cdot\boldsymbol{n} + (\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})\cdot\boldsymbol{n} = 0\end{aligned}$$

于是，由 Baker-Hausdorff 公式知，$\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}$ 在空间转动下是不变的，即，

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\right)^{(n)},\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}\right] = \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}$$

由于，在上面的计算中只涉及 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{C}$ 的对易规则，故可知 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{L}$ 的标积，在空间转动下也是不变的(检验略去).

**6.3** 矢量算符 $\boldsymbol{V}$ 一般是由矢量算符 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 本身以及它们的矢积所组成的矢量函数(可能还要乘它们的标量函数). 它的各分量在空间转动下将按线性代数中的正交矩阵改变.

证明 (1)$[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L},\boldsymbol{V}]=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}$，也即$[L_i,V_j]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}V_k$.

(2) 利用(1)及 Baker-Hausdorff 公式，求证在 $U(\boldsymbol{n}\varphi)$转动下. 有

$$\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi\right\}\boldsymbol{V}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi\right\}$$

$$= \boldsymbol{V} - \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}\varphi + \frac{1}{2!}\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V})\varphi^2 - \frac{1}{3!}\boldsymbol{n}\times[\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V})]\varphi^3 + \cdots$$

**证**：(1) 若$[L_i,V_j]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}V_k$，则有

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L},\boldsymbol{V}] &= [n_\alpha L_\alpha, V_\beta\boldsymbol{e}_\beta] \\ &= [L_\alpha,V_\beta]n_\alpha\boldsymbol{e}_\beta = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}V_\gamma n_\alpha\boldsymbol{e}_\beta \\ &= -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}\end{aligned}$$

下面证$[L_i,V_j]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}V_k$，

$$\begin{aligned}[L_i,V_j] &= [L_i,\epsilon_{j\alpha\beta}B_\alpha C_\beta] = \epsilon_{j\alpha\beta}[L_i,B_\alpha C_\beta] \\ &= \epsilon_{j\alpha\beta}B_\alpha[L_i,C_\beta] + [L_i,B_\alpha]C_\beta \\ &= \epsilon_{j\alpha\beta}B_\alpha\mathrm{i}\hbar\epsilon_{i\beta\gamma}C_\gamma + \epsilon_{j\alpha\beta}\mathrm{i}\hbar\epsilon_{i\alpha\gamma}B_\gamma C_\beta \\ &= \mathrm{i}\hbar[\delta_{j\gamma}\delta_{\alpha i} - \delta_{ji}\delta_{\alpha\gamma}]B_\alpha C_\gamma + \mathrm{i}\hbar[\delta_{ji}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{j\gamma}\delta_{\beta i}]B_\gamma C_\beta \\ &= \mathrm{i}\hbar[B_iC_j - \delta_{ji}B_\gamma C_\gamma + \delta_{ji}B_\gamma C_\gamma - B_jC_i] \\ &= \mathrm{i}\hbar[B_iC_j - B_jC_i] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}V_k\end{aligned}$$

因为$[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}$，标量函数$]=0$，乘标量函数对原矢积函数的对易关系无影响.

(2) 先求$\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi,\boldsymbol{V}\right]$. 利用(1)知

$$\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi,\boldsymbol{V}\right] = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}) = -\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}\varphi$$

令 $A=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi$，$B=\boldsymbol{V}$，则

$$[A^{(k)},B]=-\underbrace{\boldsymbol{n}\times(-\boldsymbol{n}\times(-\boldsymbol{n}\times\cdots(-\boldsymbol{n}}_{k}\times\boldsymbol{V}))\cdots)\varphi^k$$

即$[A^{(k)},B]=(-1)^k\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\cdots(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V})\cdots)\varphi^k$.

于是利用 Baker-Hausdorff 公式得到

$$\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi\right\}\boldsymbol{V}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi\right\}$$

$$=\boldsymbol{V}-\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}\varphi+\frac{1}{2!}\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V})\varphi^2-\frac{1}{3!}\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V}))\varphi^3+\cdots$$

**6.4**　设 $\boldsymbol{e}_n$ 为原点与(1,1,1)点连线的方向矢量，求 $U\left(\frac{2\pi}{3}\boldsymbol{e}_n\right)\boldsymbol{L}U^{-1}\left(\frac{2\pi}{3}\boldsymbol{e}_n\right)$.

**解：**

$$\boldsymbol{e}_n=\frac{1}{\sqrt{3}}(\boldsymbol{e}_x+\boldsymbol{e}_y+\boldsymbol{e}_z)=\frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)$$

故

$$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L}=\frac{1}{\sqrt{3}}(L_z-L_y,L_x-L_z,L_y-L_x) \tag{1}$$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})=\frac{1}{3}(L_y+L_z-2L_x,L_z+L_x-2L_y,L_x+L_y-2L_z) \tag{2}$$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L}))=\frac{1}{\sqrt{3}}(L_y-L_z,L_z-L_x,L_x-L_y)=-(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})$$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})))=\boldsymbol{n}\times[-(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})]=-\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})$$

所以

$$U\left(\frac{2\pi}{3}\boldsymbol{e}_n\right)\boldsymbol{L}U^{-1}\left(\frac{2\pi}{3}\boldsymbol{e}_n\right)$$

$$=\boldsymbol{L}-(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})\varphi+\frac{1}{2!}\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})\varphi^2+\cdots$$

$$=\boldsymbol{L}-(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{L})\sin\frac{2\pi}{3}-\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V})\cos\frac{2\pi}{3}+\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{V})$$

$$=(L_y,L_z,L_x)$$

最后一个等号用到了(1),(2)两式.

**6.5**　若动量反演算符 $U$ 具有性质 $U\psi_a(p)=\psi_a(-p)$，则证明 $U$ 是幺正的.

**证**：$U^\dagger=U$，这是因为，令

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(p)U\varphi(p)\mathrm{d}p=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(p)\varphi(-p)\mathrm{d}p$$

上式中令 $p\to-p$，则

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)\psi^*(-p)\mathrm{d}p=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p)[U\psi(p)]^*\mathrm{d}p$$

另外，由 $U^2=1$，有 $U^{-1}=U$ 故 $U^{\dagger}=U^{-1}$.

**6.6** 多粒子体系，如不受外力，Hamilton 量可表成

$$\hat{H}=\sum_i \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}+\sum_{i<j}V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)$$

证明总角动量 $\boldsymbol{P}=\sum_i \boldsymbol{p}_i$ 守恒.

**证**：即证 $[\hat{H},\boldsymbol{P}]=0$.

$$\begin{aligned}[\hat{H},\boldsymbol{P}]&=\Big[\sum_{i<j}V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{P}\Big]=\sum_k\Big[\sum_{i<j}V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{p}_k\Big]\\&=\sum_{l=1}^{3}\sum_{i<j}[[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),p_i^l]+[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),p_j^l]]\boldsymbol{e}_l\\&=\sum_{l=1}^{3}\sum_{i<j}\Big[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}{\partial x_i^l}+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}{\partial x_j^l}\Big]\boldsymbol{e}_l\end{aligned}$$

因为 $\dfrac{\partial V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}{\partial x_i^l}=-\dfrac{\partial V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}{\partial x_j^l}$ 故有 $[\hat{H},\boldsymbol{P}]=0$.

**6.7** 多粒子体系，如所受外力矩为零，则总角动量 $\boldsymbol{L}=\sum_i \boldsymbol{L}_i$ 守恒.

**解**：体系 Hamilton 量可以表为 $\dfrac{1}{2m}\sum_i \boldsymbol{L}_i^2+\sum_{i<j}V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)$.

$$\begin{aligned}[H,\boldsymbol{L}]&=\sum_{i<j}\Big[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\sum_k\boldsymbol{L}_k\Big]\\&=\sum_{i<j}[[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{L}_i]+[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{L}_j]]\end{aligned}$$

因为，

$$\begin{aligned}[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{L}_i]&=[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{p}_i]=\boldsymbol{r}_i\times[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{p}_i]\\&=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}_i\times\nabla_i V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{M}_i\end{aligned}$$

类似的有

$$[V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j),\boldsymbol{L}_j]=\boldsymbol{r}_j\times\mathrm{i}\hbar\nabla_j V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{M}_j$$

最后得到

$$[H,\boldsymbol{L}]=\sum_{i<j}-\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{M}_i+\boldsymbol{M}_j)=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{M}=0$$

上面 $\boldsymbol{M}_i$ 表示第 $i$ 个粒子所受的力矩，$\boldsymbol{M}$ 表示总力矩.

**6.8** 证明对于经典力学，若 $A,B$ 为守恒量，泊松括号 $A,B$ 也为守恒量(但不一定是新的守恒量). 对于量子力学体系，若 $\hat{A},\hat{B}$ 为守恒量，则 $[\hat{A},\hat{B}]$ 也是守恒量.

**证**：经典情况略去.

对于量子力学体系，$\hat{A},\hat{B}$ 守恒 $\Rightarrow[H,\hat{A}]=0,[H,\hat{B}]=0$.

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

$$= [H,\hat{A}]\hat{B} + \hat{A}[H,\hat{B}] - [H,\hat{B}]\hat{A} - \hat{B}[H,\hat{A}] = 0$$

即$[\hat{A},\hat{B}]$也是守恒量. 考虑到$[\hat{A},\hat{B}]$可能为$\hat{A},\hat{B}$的线性组合或等于常数,$[\hat{A},\hat{B}]$未必是新的守恒量.

**6.9**　$D_x(a)=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ap_x\right\}=\exp\left\{-a\frac{\partial}{\partial x}\right\}$表示沿 $x$ 方向的平移算符,设 $f(x)$与 $D_x(a)$对易,求 $f(x)$的一般形式.

**解**：解法一：

因为 $f(x)$与 $D_x(a)$对易，有

$$f(x)D_x(a) = D_x(a)f(x)$$
$$D_x(a)f(x)D_x^{-1}(a) = f(x)$$
$$f(x-a) = f(x)$$

解法二：

因为 $f(x)$与 $D_x(a)$对易，取任意波函数 $\psi(x)$有

$$f(x)D_x(a)\psi(x) = D_x(a)f(x)\psi(x)$$
$$f(x)\psi(x-a) = f(x-a)\psi(x-a)$$
$$f(x) = f(x-a)$$

即 $f(x)$为周期函数，周期为 $a$.

**6.10**　证明周期场中的 Bloch 波函数

$$\psi(x) = \exp(\mathrm{i}kx)\phi_k(x)$$
$$\phi_k(x) = \phi_k(x-a)$$

是 $D_x(a)$的本征态,相应的本征值为 $\exp[-\mathrm{i}ka]$.

**证**：

$$\begin{aligned} D_x(a)\psi(x) &= D_x(a)\exp(\mathrm{i}kx)D_x^{-1}(a)D_x(a)\phi_k(x) \\ &= \exp[\mathrm{i}k(x-a)]\phi_k(x-a) \\ &= \exp(-\mathrm{i}ka)\exp(\mathrm{i}kx)\phi_k(x) \\ &= \exp[-\mathrm{i}ka]\psi(x) \end{aligned}$$

得证.

**6.11**　设 Hamilton 算符表为

$$H = \frac{l_x^2}{2J_1} + \frac{l_y^2}{2J_2} + \frac{l_z^2}{2J_3} - (a_1x + a_2y + a_3z)$$

写出 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{l}$(角动量)的 Heisenberg 方程.

**解**：Heisenberg 方程：

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H,\boldsymbol{r}] = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}, \qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H,\boldsymbol{l}] = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}}{\mathrm{d}t}.$$

令 $\boldsymbol{L}=\left(\frac{l_x}{J_1},\frac{l_y}{J_2},\frac{l_z}{J_3}\right)$.

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H,\boldsymbol{r}]\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\sum_{i=1}^{3}\frac{l_i^2}{2J_i},\sum_j x_j\boldsymbol{e}_j\right]\\&=\sum_{ij}\frac{\boldsymbol{e}_j}{\mathrm{i}\hbar 2J_i}[l_i^2,x_j]\\&=\sum_{ij}\frac{\boldsymbol{e}_j}{\mathrm{i}\hbar 2J_i}(l_i[l_i,x_j]+[l_i,x_j]l_i)\\&=\sum_{ij}\frac{\boldsymbol{e}_j}{2J_i}(\epsilon_{ijk}l_ix_k+\epsilon_{ijk}x_kl_i)\\&=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

令 $\boldsymbol{A}=(a_1,a_2,a_3)$.

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H,\boldsymbol{l}]\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\sum_{i=1}^{3}a_ix_i,\sum_j l_j\boldsymbol{e}_j\right]+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\sum_{i=1}^{3}\frac{l_i^2}{2J_i},\sum_j l_j\boldsymbol{e}_j\right]\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\sum_{ij}a_i\boldsymbol{e}_j[x_i,l_j]+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\sum_{ij}\frac{\boldsymbol{e}_j}{2J_i}[l_i^2,l_j]\\&=\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}a_i\boldsymbol{e}_jx_k+\sum_{ij}\frac{\boldsymbol{e}_j}{2J_i}([l_i,l_j]l_i+l_i[l_i,l_j])\\&=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{l})\end{aligned}$$

**6.12** 若 $J_1=J_2=J$, $a_1=a_2=0$, 列出上题 $H$ 量中的主要的守恒量.

**解：**

$$H=\frac{l_x^2}{2J}+\frac{l_y^2}{2J}+\frac{l_z^2}{2J_3}-a_3z=\frac{1}{2J}\boldsymbol{l}^2+\frac{J-J_3}{2J_3J}l_z^2-a_3z$$

因为 $H$ 不显含时间，故 $H$ 是守恒量.

$$[H,\boldsymbol{l}^2]=-[a_3z,\boldsymbol{l}^2]=a_3[\boldsymbol{l}^2,z]=\mathrm{i}\hbar a_3(l_yx+xl_y-l_zy-yl_x)$$

故 $\boldsymbol{l}^2$ 不是守恒量.

$$[H,\boldsymbol{l}]=\left[\frac{J-J_3}{2J_3J}l_z^2,\boldsymbol{l}\right]+[-a_3z,\boldsymbol{l}]$$

容易知道 $[H,\boldsymbol{l}]\neq 0$，即 $\boldsymbol{l}$ 不是守恒量.

因为 $[H,l_z]=0$，所以 $l_z$ 是守恒量.

因为 $H$ 中含 $z$ 项，$[H,l_z]\neq 0$，所以 $l_x$ 不守恒，同理 $l_y$ 也不守恒.

对于宇称算符 $P$，由于 $P$ 与 $l^2$ 对易，而不与 $x$ 对易，故 $P$ 不是守恒量.

对于动量算符 $\boldsymbol{p}$，

$$[H,p_x]=\left[\frac{l_y^2}{2J},p_x\right]+\left[\frac{l_z^2}{2J_3},p_x\right]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2J}(l_yz+zl_y)-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2J_3}(l_zy+yl_z)$$

可见，$p_x$ 不是守恒量，同理 $p_y,p_z$ 都不是守恒量.

综上所述，守恒量只有 $H,l_z,\frac{l_z^2}{2J_3}$. 如果考虑自旋，那么 $S^2,S_z$ 也是守恒量.

**6.13**　写出三个分别处于单粒子态$|\psi_{p1}\rangle,|\psi_{p2}\rangle,|\psi_{p3}\rangle$的全同 Bose 子构成的体系的归一化波函数.

**解**：$N=3$ 个全同 Bose 子，可处于 $G=3$ 个单粒子态，则系统容许交换对称态，共有

$$n=\frac{(N+G-1)!}{N!(G-1)!}=10\text{ 个}$$

设其分别为$|\Psi_n\rangle$.

$$|\Psi_1\rangle=|\Psi_{p_1}(1)\rangle|\Psi_{p_1}(2)\rangle|\Psi_{p_1}(3)\rangle$$
$$|\Psi_2\rangle=|\Psi_{p_2}(1)\rangle|\Psi_{p_2}(2)\rangle|\Psi_{p_2}(3)\rangle$$
$$|\Psi_3\rangle=|\Psi_{p_3}(1)\rangle|\Psi_{p_3}(2)\rangle|\Psi_{p_3}(3)\rangle$$

上面三个态属于三个粒子处于同一单粒子态的情况.

$$|\Psi_4\rangle=\sqrt{\frac{2!}{3!}}[|\Psi_{p_1}(1)\rangle|\Psi_{p_1}(2)\rangle|\Psi_{p_2}(3)\rangle+|\Psi_{p_1}(1)\rangle|\Psi_{p_2}(2)\rangle|\Psi_{p_1}(3)\rangle$$
$$+|\Psi_{p_2}(1)\rangle|\Psi_{p_1}(2)\rangle|\Psi_{p_1}(3)\rangle]$$

这是两个粒子处于 $p_1$ 态，一个粒子处于 $p_2$ 态的情况. 还有两个粒子处于 $p_1$ 态，一个粒子处于 $p_3$ 态的情况；两个粒子处于 $p_2$ 态，一个粒子处于 $p_1$ 态的情况；两个粒子处于 $p_2$ 态，一个粒子处于 $p_3$ 态的情况；两个粒子处于 $p_3$ 态，一个粒子处于 $p_1$ 态的情况；两个粒子处于 $p_3$ 态，一个粒子处于 $p_2$ 态的情况；五种情况的波函数 $|\Psi_5\rangle\sim|\Psi_9\rangle$不一一写出，最后一种情况是三个粒子分别处于不同单态

$$|\Psi_10\rangle=\sqrt{\frac{1}{3!}}\sum_{i\neq j\neq k=1}^{3}|\Psi_{p_i}(1)\rangle|\Psi_{p_j}(2)\rangle|\Psi_{p_k}(3)\rangle$$

**6.14**　写出三个分别处于不同单粒子态$|\psi_{p1}\rangle,|\psi_{p2}\rangle,|\psi_{p3}\rangle$的全同 Fermi 子体系的归一化波函数.

**解**：$N=3$ 个全同 Fermi 子，可处于 $G=3$ 个单粒子态，则系统容许交换反对称态，共有

$$n=\frac{G!}{N!(G-1)!}=1\text{ 个}$$

可以用 Slater 行列式写为

$$|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix}|\Psi_{p_1}(1)\rangle & |\Psi_{p_2}(1)\rangle & |\Psi_{p_3}(1)\rangle\\ |\Psi_{p_1}(2)\rangle & |\Psi_{p_2}(2)\rangle & |\Psi_{p_3}(2)\rangle\\ |\Psi_{p_1}(3)\rangle & |\Psi_{p_2}(3)\rangle & |\Psi_{p_3}(3)\rangle\end{vmatrix}$$

**6.15** 考虑由两个全同粒子组成的体系，设可能的单粒子态为 $\phi_1,\phi_2,\phi_2$，求体系可能的态数目.

(1) 粒子为 Bose 子，(2) 粒子为 Fermi 子，(3) 粒子为经典粒子.

**解**：(1) 可能的态有 $\phi_1\phi_1,\phi_2\phi_2,\phi_3\phi_3,\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_2+\phi_2\phi_1),\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_3+\phi_3\phi_1),\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2\phi_2+\phi_3\phi_2)$共 6 种.

(2) 可能的态有$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_2-\phi_2\phi_1),\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_3-\phi_2\phi_1),\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2\phi_2-\phi_3\phi_2)$共 3 种.

(3) 经典粒子是可区分的，所以 $\phi_1\phi_2$(第一个粒子处于 $\phi_1$)与 $\phi_2\phi_1$(第一个粒子处于 $\phi_2$ 不同) 共 9 种.

**6.16** 设$^8_4$Be 核可以看成由两个 $\alpha$ 粒子组成，证明总角动量量子数必为偶数(取质心坐标系).

**证**：$\alpha$ 粒子自旋为零，只考虑轨道波函数. 在质心系中，两个 $\alpha$ 粒子的波函数写为

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\Psi(\boldsymbol{r})=R(r)Y_{LM}(\theta,\varphi)$$

其中 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$；设$\hat{p}_{12}$为交换算符，因为 $p_{12}\boldsymbol{r}=-\boldsymbol{r}$，即两粒子交换时，$r\to r,\theta\to\pi-\theta,\varphi\to\pi+\varphi$，所以

$$\hat{p}_{12}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\Psi(-\boldsymbol{r})=R(\boldsymbol{r})\,\hat{p}_{12}Y_{LM}(\theta,\varphi)=(-1)^L\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$$

由于$^8_4$Be 核波函数为交换对称的，故 $L$ 必取偶数.

**6.17** 设光子分束器入射光子的极化状态更为一般，即输入态(6.38)式改为

$$|\psi_i\rangle_{12}=(\alpha|\leftrightarrow\rangle_1+\beta|\updownarrow\rangle_1)\otimes|a\rangle_1\cdot(\gamma|\leftrightarrow\rangle_2+\delta|\updownarrow\rangle_2)\otimes|b\rangle_2$$

写出相应的(6.39)式和(6.40)式.

**解**：分束器不改变极化状态.

$$|\psi_f\rangle_{12}=\left[\alpha|\leftrightarrow\rangle_1\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(i|c\rangle_1+|d\rangle_1)+\beta|\updownarrow\rangle_1\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(i|c\rangle_1+|d\rangle_1)\right]$$
$$\cdot\left[\gamma|\leftrightarrow\rangle_2\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(|c\rangle_2+i|d\rangle_2)+\delta|\updownarrow\rangle_2\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(|c\rangle_2+i|d\rangle_2)\right]$$

$$|\psi_f\rangle_{21}=\left[\alpha|\leftrightarrow\rangle_2\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(i|c\rangle_2+|d\rangle_2)+\beta|\updownarrow\rangle_2\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(i|c\rangle_2+|d\rangle_2)\right]$$
$$\cdot\left[\gamma|\leftrightarrow\rangle_1\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(|c\rangle_1+i|d\rangle_1)+\delta|\updownarrow\rangle_1\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(|c\rangle_1+i|d\rangle_1)\right]$$

整理后得

$$
\begin{aligned}
|\psi_f\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_f\rangle_{12}+|\psi_f\rangle_{21}) \\
&= \frac{1}{2}\{(\alpha\gamma+\beta\delta)\cdot|\Phi^+\rangle_{12}\otimes i(|c\rangle_1|c\rangle_2+|d\rangle_1|d\rangle_2) \\
&\quad +(\alpha\gamma-\beta\delta)\cdot|\Phi^-\rangle_{12}\otimes i(|c\rangle_1|c\rangle_2+|d\rangle_1|d\rangle_2) \\
&\quad +(\alpha\delta+\beta\gamma)\cdot|\Psi^+\rangle_{12}\otimes i(|c\rangle_1|c\rangle_2+|d\rangle_1|d\rangle_2) \\
&\quad +(\alpha\delta-\beta\gamma)\cdot|\Psi^-\rangle_{12}\otimes(|c\rangle_1|d\rangle_2-|d\rangle_1|c\rangle_2)\}
\end{aligned}
$$

其中

$$
|\Phi^{\pm}\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle_1|\updownarrow\rangle_2\pm|\leftrightarrow\rangle_1|\leftrightarrow\rangle_2)
$$

$$
|\Psi^{\pm}\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle_1|\leftrightarrow\rangle_2\pm|\leftrightarrow\rangle_1|\updownarrow\rangle_2)
$$

# 第七章　电子自旋角动量

**7.1**　在 $\sigma_z$ 表象中求 $\sigma_x$ 的本征态.

**解**：在 $\sigma_z$ 表象中，

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

设 $\sigma_x$ 的本征态为 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$，$a^2+b^2=1$，有

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

由此可得久期方程

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

解出 $\lambda=\pm 1$ 代入本征方程，可解得 $\sigma_x$ 的本征态如下：

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, & \lambda = 1 \\ \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, & \lambda = -1 \end{cases}$$

**7.2**　若 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 为 Pauli 矩阵，求

(1) 在 $\sigma_z$ 表象中，$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 的归一化本征态.

(2) 在 $\sigma_z$ 表象中，$\sigma_y,\sigma_z$ 的本征态和本征值.

**解**：(1) 在 $\sigma_z$ 表象中，$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 的表示为

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

设本征态为 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$.

由相应算符的久期方程可得它们的本征值皆为 $\pm 1$，代入各自的本征方程可得

$$\sigma_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, & \lambda = 1 \\ \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, & \lambda = -1 \end{cases}$$

$$\sigma_y\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{cases}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ \mathrm{i}/\sqrt{2}\end{pmatrix}, & \lambda=1\\ \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ -\mathrm{i}/\sqrt{2}\end{pmatrix}, & \lambda=-1\end{cases}$$

$$\sigma_x\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{cases}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, & \lambda=1\\ \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, & \lambda=-1\end{cases}$$

(2) 因为 $\sigma_x$ 在 $\sigma_z$ 表象和 $\sigma_x$ 表象中的本征态分别为：

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

和

$$\psi_1'=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\psi_2'=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

故可求出由 $\sigma_z$ 表象向 $\sigma_x$ 表象的变换矩阵

$$S_{ak}=(\psi_a',\psi_k)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\quad(a,k=1,2)$$

由此可得 $\sigma_y$ 的本征态为

$$\psi_{y+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i}\\ 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$\psi_{y-}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i}\\ 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

因为幺正变换不改变本征值，故本征值仍为 $\pm1$.

同理可得 $\sigma_z$ 的本征态为

$$\psi_{z+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\lambda=1$$

$$\psi_{z-}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},\lambda=-1$$

**7.3**　在 $\sigma_z$ 表象中，求 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征态，其中 $\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$ 是 $(\theta,\varphi)$ 方向的单位矢量.

**解**：因为 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2=1$，所以其本征值为 $\pm1$，又

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sin\theta\cos\varphi\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\sigma_y+\cos\theta\sigma_z=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

令本征态为$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$,则

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\pm\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{cases}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix},\lambda=1\\ \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix},\lambda=-1\end{cases}$$

**7.4** 讨论下列算符是否存在.

(1) $(1+\sigma_x)^{\frac{1}{2}}$; (2) $(1+\sigma_x+i\sigma_y)^{\frac{1}{2}}$; (3) $(1+\sigma_x)^{-1}$

**解**: (1) 解法一: 由于任意 $2\times2$ 矩阵皆可由 $\sigma_0,\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3$($\sigma_0=I,\sigma_1=\sigma_x,\sigma_2=\sigma_y,\sigma_3=\sigma_z$)的线性组合表示,故

$$(1+\sigma_1)^{\frac{1}{2}}=\sum_{i=0}^{3}C_i\sigma_i$$

两边平方,利用 $\sigma_i^2=1$ 以及$[\sigma_i,\sigma_j]_+=2\delta_{ij}$, $i,j=1,2,3$,有

$$1+\sigma_1=\sum_{i=0}^{3}C_i^2+2C_0\sum_{i=1}^{3}C_i\sigma_i$$

比较两边相同项的系数,得

$$C_2=C_3=0,\ C_0=C_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

所以

$$(1+\sigma_1)^{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1+\sigma_1)$$

解法二: 参见本题附录

$$(1+\sigma_x)^{\frac{1}{2}}=C_0\,I+C_1\,\sigma_x$$

将上式作用于 $\sigma_x$ 的两个本征态上,有

$$\begin{cases}\sqrt{2}=C_0+C_1\\ C_0-C_1=0\end{cases}$$

解出

$$C_0=C_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

(2) 解法一: 令$(1+\sigma_x+i\sigma_y)^{\frac{1}{2}}=\sum_{i=0}^{3}C_i\sigma_i$

有

$$1+\sigma_x+i\sigma_y=\sum_{i=0}^{3}C_i^2+2C_0\sum_{i=1}^{3}C_i\sigma_i$$

比较系数有　　$C_3=0$

$$\begin{cases}\sum_{i=0}^{3}C_i^2=1\\ 2C_0C_1=1\\ 2C_0C_2=\mathrm{i}\end{cases}$$

解得　$\begin{cases}C_0=1,\ C_1=\frac{1}{2},\ C_2=\frac{\mathrm{i}}{2}\\ C_0=-1,\ C_1=-\frac{1}{2},\ C_2=-\frac{\mathrm{i}}{2}\end{cases}$ 若约定只取正号，则

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{\frac{1}{2}}=1+\frac{1}{2}(\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2)$$

解法二：令 $A=\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2$，$A$ 的本征值为 0(二重根)，且 $A$ 不能通过相似变换对角化

$$(1+A)^{\frac{1}{2}}=C_0+C_1A$$

$$\frac{1}{2}(1+A)^{-\frac{1}{2}}=C_1$$

将以上两式作用于 $A$ 的本征态上有 $C_0=1, C_1=\frac{1}{2}$，故

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{\frac{1}{2}}=1+\frac{1}{2}(\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2)$$

(3) $\det(1+\sigma_x)=0$ 故 $(1+\sigma_x)$ 无逆矩阵，即 $(1+\sigma_x)^{-1}$ 不存在.

附录：有限维算符(矩阵)整函数展开的一种简单方法.

设 $A$ 为 $n$ 维方阵，由线性代数中的 Hamilton-Cayley 定理，若 $\varphi(\lambda)=\det(A-\lambda I)$，则有 $\varphi(A)=0$，由于 $\varphi(\lambda)$ 为 $\lambda$ 的 $n$ 次多项式，故

$$\sum_{i=0}^{n-1}C_iA^i+A^n=0$$

即 $A^n$ 可由 $I, A, \cdots, A^{n-1}$ 线性表示，因此对于任意的整函数 $f(x)=\sum_{i=0}^{\infty}C_ix^i$；有

$$f(A)=\sum_{i=0}^{n-1}b_iA^i \qquad (*)$$

若 $A$ 的本征值 $\lambda_i, i=1,2,3,\cdots,n$ 皆为单根，可将(*)式作用于 $A$ 的相互独立的 $n$ 个本征态 $|\lambda_i\rangle$ 上有

$$f(\lambda_i)=\sum_{l=0}^{n-1}b_l\lambda_i^l,\ i=1,2,3,\cdots,n \qquad (**)$$

可将 $f(A)$ 中 $n$ 个系数 $b_l, l=0,1,2,\cdots,n-1$ 解出.

若 $\lambda_i$ 中有重根，不妨假设 $\lambda_i$ 为 $m_j$ 重根方程组(**)中 $n$ 个方程不独立. 但我们可

将(*)式及其直至 $m_j-1$ 阶导数式，作用到 $m_j$ 重根的 $|\lambda_j\rangle$ 上，这样可有 $n$ 个独立方程足以确定 $b_j$. 对于 $\lambda_i$ 中有重根，但 $A$ 是可对角化的(相似变换)，这时(*)式可简化. 设 $A$ 的所有互异的本征值 $\lambda_i$，$i=1,2,\cdots,m<n$，可证 $A$ 的最小多项式(也是 $A$ 的化零式)为

$$m_A(\lambda)=\prod_{i=1}^{m}(\lambda-\lambda_i)$$

即有

$$m_A(A)=0$$

这时 $f(A)$ 的展开式为

$$f(A)=\sum_{l=0}^{m-1}C_l A^l$$

**7.5** 在自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 下，求 $\overline{\Delta S_x^2}$ 和 $\overline{\Delta S_y^2}$.

**解**：在 $S_z$ 表象中求平均值，

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

$$\overline{S_y}=(1,0)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$$

故有

$$\overline{\Delta S_x^2}=\overline{(S_x-\overline{S_x})^2}=\overline{S_x^2}=\frac{\hbar^2}{4}\overline{\sigma_x^2}=\frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{\Delta S_y^2}=\overline{(S_y-\overline{S_y})^2}=\overline{S_y^2}=\frac{\hbar^2}{4}\overline{\sigma_y^2}=\frac{\hbar^2}{4}$$

**7.6** 设矩阵 $A,B,C$ 满足 $A^2=B^2=C^2=1$，$BC-CB=\mathrm{i}A$

(1) 求证 $AB+BA=AC+CA=0$；

(2) 在 $A$ 表象中，求出 $B,C$ 的矩阵(设无简并).

**解**：(1)

$$\begin{aligned}AB+BA&=\mathrm{i}((BC-CB)B+B(BC-CB))\\&=\mathrm{i}(BCB-C+C-BCB)=0\\AC+CA&=\mathrm{i}((BC-CB)C+C(BC-CB))\\&=\mathrm{i}(B-CBC+CBC-C)=0\end{aligned}$$

(2) 无简并，$A^2=1$，故 $A$ 只有两个本征态，本征值为 $+1,-1$. 于是可将 $A$ 在自己的表象中写为 $\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$

设 $A$ 的两个本征态为 $|1\rangle,|2\rangle$，有

$$\langle 1|(AB+BA)|1\rangle=0\Rightarrow\langle 1|B|1\rangle=0$$

$$\langle 1 \mid (AC+CA) \mid 1\rangle = 0 \Rightarrow \langle 1 \mid C \mid 1\rangle = 0$$

(3) 同理

$$\langle 2 \mid (AB+BA) \mid 2\rangle = 0 \Rightarrow \langle 2 \mid B \mid 2\rangle = 0$$
$$\langle 2 \mid (AC+CA) \mid 2\rangle = 0 \Rightarrow \langle 2 \mid C \mid 2\rangle = 0$$

于是可设

$$B = \begin{pmatrix} 0 & a \\ b & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & c \\ d & 0 \end{pmatrix}$$

$$B^2 = C^2 = 1 \Rightarrow ab = 1, cd = 1$$

再利用条件 $BC-CB=\mathrm{i}A$ 可得 $b^2-c^2=\mathrm{i}bc$.

**7.7** 矩阵 $A,B$ 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 $A$ 的矩阵表达式.

**解**：(1) $B^2 = (A^+A)^2 = A^+AA^+A = A^+(1-A^+A)A = A^+A - A^{+2}A^2 = A^+A = B$

(2) 令 $B$ 的表象中两个本征态为 $|1\rangle, |2\rangle$，其本征值分别为 1 和 0. 在 $B$ 自身的表象中有 $B=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$，故有下列关系

$$BA = A' \; A^2 = 0 \Rightarrow \langle 1 \mid BA \mid 1\rangle = 0 \Rightarrow$$
$$\langle 1 \mid B \mid 1\rangle\langle 1 \mid A \mid 1\rangle + \langle 1 \mid B \mid 2\rangle\langle 2 \mid A \mid 1\rangle = 0 \Rightarrow \langle 1 \mid A \mid 1\rangle = 0$$

设 $A=\begin{pmatrix} 0 & a \\ c & b \end{pmatrix}$

$$A^2 = 0 \Rightarrow \begin{cases} ac = 0 \\ ab = 0 \\ bc = 0 \\ ac + b^2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b = 0 \\ a = 0 \text{ 或 } c = 0 \end{cases}$$

不妨设 $A=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{pmatrix}$

$$A^+A + AA^+ = 1 \Rightarrow |c|^2 = 1$$

即 $c=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$，于是得

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & 0 \end{pmatrix}$$

容易验证 $B=A^+A$.

**7.8** 满足 $U^+U=UU^+=1, \det U=1$ 的 $n$ 维矩阵称为 $SU_n$ 矩阵，求 $SU_2$ 的一般形式.

**解**：设 $U=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

$$U^{\dagger}U=1\Rightarrow\begin{cases} a^2+b^2=1 \\ a^*b+c^*d=0 \\ b^*a+d^*c=0 \\ b^2+d^2=1 \end{cases}$$

$$UU^{\dagger}=1\Rightarrow\begin{cases} a^2+b^2=1 \\ a^*c+b^*d=0 \\ c^*a+d^*b=0 \\ c^2+d^2=1 \end{cases}$$

$$\det U=1\Rightarrow ad-bc=1$$

联立这些条件，解得

$$\begin{cases} a=\cos\omega e^{i\alpha} \\ b=\sin\omega e^{i\beta} \\ c=-\sin\omega e^{-i\beta} \\ d=\cos\omega e^{-i\alpha} \end{cases}$$

$\alpha,\beta,\omega$ 是实参量.

**7.9** 某个状态 $|\phi\rangle$ 是 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的本征态：

$$\hat{L}^2|\phi\rangle=l(l+1)\hbar^2|\phi\rangle,\hat{L}_z|\phi\rangle=m\hbar|\phi\rangle$$

在这个态下计算 $\langle\hat{L}_x\rangle$ 和 $\langle\hat{L}_x^2\rangle$.

**解**：

$$\hat{L}_x=\frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$$

$$\langle\hat{L}_x\rangle=\frac{1}{2}(\langle\hat{L}_+\rangle+\langle\hat{L}_-\rangle)=0$$

$$\begin{aligned}\langle\hat{L}_x^2\rangle&=\frac{1}{4}\langle(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)^2\rangle \\ &=\frac{1}{4}(\langle\hat{L}_+^2\rangle+\langle\hat{L}_+\hat{L}_-\rangle+\langle\hat{L}_-\hat{L}_+\rangle+\langle\hat{L}_-^2\rangle) \\ &=\frac{1}{4}(\langle\hat{L}_+\hat{L}_-\rangle+\langle\hat{L}_-\hat{L}_+\rangle) \\ &=\frac{1}{4}(l(l+1)-m(m+1)+l(l+1)-m(m-1))\hbar^2 \\ &=\frac{1}{2}(l(l+1)-m^2)\hbar^2\end{aligned}$$

**7.10**　一粒子的某个量子态在直角坐标 $x,y,z$ 中由归一化波函数

$$\psi(x,y,z)=\frac{\alpha^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\pi}}z\exp[-\alpha(x^2+y^2+z^2)]$$

描述. 证明它处在一个具有确定的角动量的态上，并给出该态相应的 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 值.

**解**：用球坐标将波函数改写为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{\alpha^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{\pi}}r\cos\theta\exp[-\alpha r^2]$$

角度部分的波函数为 $A\cos\theta=KY_{10}$

故该态处在角动量 $L$ 为 $\hbar$ 的态上.

$$\hat{L}^2=l(l+1)\hbar^2=2\hbar^2$$

$$\hat{L}_z=0$$

**7.11**　(1) 考虑自旋为 $\frac{1}{2}$ 的系统，求出算符 $A\hat{s}_y+B\hat{s}_z$ 的本征值及归一化的本征波函数. 其中 $\hat{s}_y,\hat{s}_z$ 是角动量算符，且 $A,B$ 是实常数. (2) 假定此系统处于以上算符的一个本征态上，求测量 $\hat{s}_y$ 得到结果 $\frac{\hbar}{2}$ 的概率.

**解**：(1) 设 $\hat{T}=A\hat{s}_y+B\hat{s}_z$ 则在 $\hat{s}^2,\hat{s}_z$ 表象中有

$$\hat{T}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}B & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B\end{pmatrix}$$

设本征值为 $\lambda\frac{\hbar}{2}$，有

$$\det\begin{pmatrix}B-\lambda & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B-\lambda\end{pmatrix}=0\Rightarrow\lambda=\pm\sqrt{A^2+B^2}$$

设归一化的本征态为 $\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，$a^2+b^2=1$ 则由本征方程

$$\begin{pmatrix}B & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

可以解出本征态为

$$|\Psi_\pm\rangle=\left[\frac{1}{A^2+(B\mp\sqrt{A^2+B^2})^2}\right]^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{i}A\\ B\mp\sqrt{A^2+B^2}\end{pmatrix}$$

(2) 在 $\hat{s}^2,\hat{s}_z$ 表象中，$\hat{s}_y$ 的本征态为(见 7.2 题)

$$\left|\hat{s}_y-\pm\frac{\hbar}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

故发现 $\hat{s}_y=\frac{\hbar}{2}$ 的概率为

$$P_{\pm}=\left|\langle \hat{s}_y=\frac{\hbar}{2}\mid \Psi_{\pm}\rangle\right|^2=\frac{1}{2}\frac{(B-A\mp\sqrt{A^2+B^2})^2}{A^2+(B\mp\sqrt{A^2+B^2})^2}$$

**7.12** 考虑一个电子在沿 $z$ 方向的均匀磁场中运动. 在 $t=0$ 时刻测量得到电子自旋沿 $+y$ 方向. 求在 $t>0$ 时自旋的 Schrödinger 态矢及沿 $x$ 方向的平均极化率(正比于 $\hat{s}_x$ 的期望值).

**解**:取 $\hat{s}^2,\hat{s}_z$ 表象,则电子自旋态初态为 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$

演化满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mid\Psi\rangle=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}\mid\Psi\rangle \tag{1}$$

令 $|\Psi\rangle=\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}$.

$$-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_0B\sigma_z=\begin{pmatrix}-\mu_0B & 0\\ 0 & \mu_0B\end{pmatrix}$$

代入(1)式,得微分方程组

$$\begin{cases}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi_1=-\mu_0B\chi_1\\ \mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi_2=\mu_0B\chi_2\end{cases}$$

令 $\frac{\mu_0B}{\hbar}=\omega$,可得到如下形式的解

$$\begin{cases}\chi_1=a\exp(\mathrm{i}\omega t)\\ \chi_2=b\exp(-\mathrm{i}\omega t)\end{cases}$$

代入初条件,得

$$\Psi(t)=\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\\ \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{pmatrix}$$

$$\langle\hat{S}_x\rangle=(\chi_1^*,\chi_2^*)\hat{S}_x\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\sin2\omega t$$

**7.13** 两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成一个复合系统. 自旋 $A$ 在 $S_z=\frac{1}{2}$ 的本征态,自旋 $B$ 在 $S_x'=\frac{1}{2}$ 的本征态. 求发现系统自旋为零的概率.

**解**: 系统处于态 $|S_z=\frac{1}{2}\rangle_A\otimes|S_x=\frac{1}{2}\rangle_B$ 上. 将其写到 $S_z$ 的表象中,有

$$|\Psi\rangle = |S_z = \frac{1}{2}\rangle_A \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|S_z = \frac{1}{2}\rangle_B + |S_z = -\frac{1}{2}\rangle_B\right)$$

总自旋为零的态可以写为

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|S_z = \frac{1}{2}\rangle_A |S_z = -\frac{1}{2}\rangle_B + |S_z = -\frac{1}{2}\rangle_A |S_z = \frac{1}{2}\rangle_B\right)$$

发现总自旋为 0 的概率

$$P = |\langle 0 | \Psi\rangle|^2 = \frac{1}{4}$$

**7.14**　预先建立一个 Stern-Gerlach 实验，使得一个电子自旋 $z$ 分量为 $-\frac{\hbar}{2}$，在 $t=0$ 时刻加入一个沿 $x$ 方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}$. 问 (1) 经过时间 $T$ 后，测自旋 $z$ 分量的结果是什么？(2) 如果不是测自旋的 $z$ 分量，而是 $x$ 分量，则结果如何？

**解**：设自旋波函数在 $S_z$ 表象中为 $\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}$，它满足下面的方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix} = \frac{e\hbar B}{2mc}\sigma_x\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix} = \hbar\omega\sigma_x\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix},\ \omega \equiv \frac{eB}{2mc}$$

化简得

$$\begin{cases}\mathrm{i}\dot{\chi}_1 = \omega\chi_2\\ \mathrm{i}\dot{\chi}_2 = \omega\chi_1\end{cases}$$

解得

$$\begin{cases}\chi_1 = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ \chi_2 = -A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{cases}$$

代入初条件 $\begin{cases}\chi_1(t=0)=0\\ \chi_2(t=0)=1\end{cases}$ 解出

$$\begin{cases}A = -\frac{1}{2}\\ B = \frac{1}{2}\end{cases}$$

于是

$$\begin{cases}\chi_1 = -\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = -\mathrm{i}\sin\omega t\\ \chi_2 = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \cos\omega t\end{cases}$$

(1) $T$ 时刻自旋波函数

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix}\chi_1(T)\\ \chi_2(T)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\mathrm{i}\sin\omega T\\ \cos\omega T\end{pmatrix}$$

$S_z$ 的本征态为

$$\begin{cases} |s_z=\frac{\hbar}{2}\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\ |s_z=-\frac{\hbar}{2}\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \end{cases}$$

由测量假设可得

$$\begin{cases} P_{z\uparrow}=|\langle s_z=\frac{\hbar}{2}|\Psi\rangle|^2=\sin^2\omega T \\ P_{z\downarrow}=|\langle s_z=-\frac{\hbar}{2}|\Psi\rangle|^2=\cos^2\omega T \end{cases}$$

(2) $S_x$ 的本征态为

$$\begin{cases} |s_x=\frac{\hbar}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \\ |s_x=-\frac{\hbar}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \end{cases}$$

同理可得

$$\begin{cases} P_{x\uparrow}=|\langle s_x=\frac{\hbar}{2}|\Psi\rangle|^2=1/2 \\ P_{x\downarrow}=|\langle s_x=-\frac{\hbar}{2}|\Psi\rangle|^2=1/2 \end{cases}$$

**7.15** 考虑带自旋的 Young 双缝实验. 设想在 $B$ 缝后面紧靠的地方，装上通电螺线管以便形成局域的近似均匀的磁场($A$ 缝不加，维持原样). 设射入电子自旋均为 $-\frac{\hbar}{2}$ 调节通过螺线管的电流，问(1) 当缝 $B$ 出来的电子为 $s_z=\frac{\hbar}{2}$ 时，接受屏上结果如何? (2) 当缝 $B$ 出来的电子为 $s_x=\frac{\hbar}{2}$ 时接受屏上结果如何? (3) 当连续改变螺线管中电流时，描述接受屏上干涉结果的变化. 又，如果束流强度很低，低到任一时刻只有一个电子通过此装置，统计结果有变化吗?

**解**：(1)穿过缝的电子状态为 $|\Psi(x)\rangle=|\Psi_A(x)\rangle|\chi_{z\downarrow}\rangle+|\Psi_B(x)\rangle|\chi_{z\uparrow}\rangle$，故接受屏上概率密度为

$$\begin{aligned} |\langle x|\Psi(x)\rangle|^2&=|\langle x|\Psi_A(x)\rangle|\chi_{z\downarrow}\rangle+\langle x|\Psi_B(x)\rangle|\chi_{z\uparrow}\rangle|^2 \\ &=|\Psi_A(x)|^2+|\Psi_B(x)|^2 \end{aligned}$$

干涉消失.

(2) 此时

$$\begin{aligned} |\Psi(x)\rangle&=|\Psi_A(x)\rangle|\chi_{z\downarrow}\rangle+|\Psi_B(x)\rangle|\chi_{x\uparrow}\rangle \\ &=|\Psi_A(x)\rangle|\chi_{z\downarrow}\rangle+|\Psi_B(x)\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_{z\uparrow}\rangle+|\chi_{z\downarrow}\rangle) \end{aligned}$$

$$|\langle x|\Psi(x)\rangle|^2=|\Psi_A(x)|^2+|\Psi_B(x)|^2+\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\Psi_A(x)|\Psi_B^*(x)\rangle+\langle\Psi_A^*(x)|\Psi_B(x)\rangle)$$

干涉减弱.

(3) 显然,当螺线管电流连续变化时,干涉从最强到最弱连续变化,而这个统计结果与束流强度是无关的.

**7.16** 一个具有两个电子的原子,处于单态($s=0$). 证明:自旋-轨道耦合作用$\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$对能量无贡献.

**证**: $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2)$,在$S=0$的单态$|0\rangle$中,有

$$s=0,j=l+s=l$$

$$\langle 0|\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}|0\rangle=\frac{1}{2}(j(j+1)-l(l+1))=0$$

即$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$对能量无贡献.

**7.17** 设两个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的相互作用为:$V(r)=V_c(r)+V_\tau(r)S_{12}$,第一项为中心力,第二项为张量项,$S_{12}=3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n})-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$,这里$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$,$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$. 证明:

(1) $\boldsymbol{J}^2$, $J_z$以及总自旋平方$\boldsymbol{S}^2$是守恒量,但轨道角动量$\boldsymbol{L}^2$以及总自旋$\boldsymbol{S}$不是守恒量.

(2) 在自旋单态下,张量力为零.

**证**: (1) 为方便,令$\hbar=1$.

$$\boldsymbol{S}=s_1+s_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$\boldsymbol{S}^2=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$S_n=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\boldsymbol{n}=\frac{1}{2}(\sigma_{1n}+\sigma_{2n})$$

因为$\sigma_{1n}^2=\sigma_{2n}^2=1$,所以

$$S_n^2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sigma_{1n}\cdot\sigma_{2n}$$

于是,$S_{12}$可以用下式替代:

$$S_{12}=3\sigma_{1n}\cdot\sigma_{2n}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=6S_n^2-2\boldsymbol{S}^2$$

下面证明$[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{S}_{12}]=0$,为此先证$[\boldsymbol{J}^2,S_n^2]=0$

因为

$$[\boldsymbol{S},S_n]=[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}]=[S_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha,S_\beta n_\beta]$$

$$=[S_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha,S_\beta n_\beta]=[S_\alpha,S_\beta]\boldsymbol{e}_\alpha n_\beta$$

$$= \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma \boldsymbol{e}_\alpha n_\beta = (\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma n_\beta)\boldsymbol{e}_\alpha$$
$$= \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S}$$

不为零. 故 $\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}_n$ 不对易. 进而可知$[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}_{12}]\neq 0$,故 $\boldsymbol{S}$ 不守恒.

同样,由于$[l_\alpha,x_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma$

易知

$$[\boldsymbol{L},S_n]=-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S}$$

所以$[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}_{12}]\neq 0$,$\boldsymbol{L}$ 也不守恒. 但是综合上面两式,却有

$$[\boldsymbol{J},S_n]=[\boldsymbol{L}+\boldsymbol{n},S_n]=0$$

即 $J$ 与 $S_n$ 对易,因此$[\boldsymbol{J}^2,S_n]=\boldsymbol{J}\cdot[\boldsymbol{J},S_n]+[\boldsymbol{J},S_n]\cdot\boldsymbol{J}=0$

于是有

$$[\boldsymbol{J}^2,S_n^2]=S_n[\boldsymbol{J}^2,S_n]+[\boldsymbol{J}^2,S_n]S_n=0$$

下面再证明$[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{S}^2]=0$,因为

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{S}^2]=[\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}^2]$$
$$=[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}^2]=[\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2,\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2]$$
$$=2\mathrm{i}\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2-2\mathrm{i}\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2=0$$

故

$$[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{S}^2]=\boldsymbol{J}\cdot[\boldsymbol{J},\boldsymbol{S}^2]+[\boldsymbol{J},\boldsymbol{S}^2]\cdot\boldsymbol{J}=0$$

进一步可得

$$[\boldsymbol{J}^2,S_{12}]=6[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{S}^2]-2[\boldsymbol{J}^2,S_n^2]=0$$

所以$\boldsymbol{J}^2$ 是守恒量.

显然有$[J_z,\boldsymbol{S}^2]=0$. 容易看出 $J_z$ 和 $S_n$ 对易,因为$[J_z,S_n]\equiv[J,S_n]_z=0$,故$[J_z,S_{12}]=6[J_z,S_n^2]-2[J_z,\boldsymbol{S}^2]=0$,即 $J_z$ 是守恒量.

下面计算$[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}_{12}]$

因为

$$[\boldsymbol{S}^2,S_n]=[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}]=[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}]\cdot\boldsymbol{n}+\boldsymbol{S}\cdot[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{n}]=0$$

所以

$$[\boldsymbol{S}^2,S_{12}]=6[\boldsymbol{S}^2,S_n^2]=6[\boldsymbol{S}^2,S_n]S_n+6S_n[\boldsymbol{S}^2,S_n]=0$$

即 $\boldsymbol{S}^2$ 也是守恒量.

(2) 利用 Hellmann-Feynman 定理,张量力 $f=-\langle\frac{\partial H}{\partial r}\rangle=-\frac{\partial}{\partial r}\langle\hat{H}\rangle$因为 $s=0$,故$\langle\boldsymbol{S}^2\rangle=s(s+1)=0$

现在计算$\langle\boldsymbol{S}_n^2\rangle$,易算出下列三式:

$$S_z\mid 0,0\rangle=0$$
$$S_x\mid 0,0\rangle=0$$
$$S_y\mid 0,0\rangle=0$$

上式中$|0,0\rangle$表示自旋单态，又因为

$$S_n = \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n} = n_xS_x + n_yS_y + n_zS_z$$

故有

$$S_n\,|\,0,0\rangle = 0 \Rightarrow \langle S_n^2\rangle = 0$$

于是有

$$f = -\frac{\partial}{\partial r}\langle\hat{H}\rangle = -\frac{\partial}{\partial r}(6\langle S_n^2\rangle - 2\langle\boldsymbol{S}^2\rangle)\,V_\tau(r) = 0$$

**7.18**　(1) 设电子处于自旋态$\chi_{1/2}(\sigma_z=1)$，求$\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的可能测量值及相应的概率($\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)$)；

(2) 对于$\sigma_n=+1$的自旋态，求$\boldsymbol{\sigma}$各分量的可能测量值及相应的概率，以及$\boldsymbol{\sigma}$的平均值.

**解**：(1)将$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$用 Pauli 矩阵表示，得到如下表示.

$$\sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix},\qquad (\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)).$$

其本征值为$\pm1$，对应的本征矢为

$$\chi_+ = \begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix},\qquad \chi_- = \begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

电子处于态$\chi_{1/2}(\sigma_z=1)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$上.

故$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的可能测量值有两个：$\pm1$，相应的概率

$$\begin{cases}P_+ = |\langle\chi_+|\chi_{1/2}\rangle|^2 = \left|(\cos\dfrac{\theta}{2},\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2 = \cos^2\dfrac{\theta}{2}\\ P_- = |\langle\chi_-|\chi_{1/2}\rangle|^2 = \sin^2\dfrac{\theta}{2}\end{cases}$$

(2) $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的本征值为 1 的本征态为

$$\chi_+ = \begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{\sigma}$的三个分量$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$

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

本征值为$\pm1$，本征态分别为

$$\chi_{n_x\pm}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix},\quad \chi_{n_y\pm}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm \mathrm{i}\end{pmatrix}\quad \chi_{n_z+}=\begin{cases}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{cases}$$

故可能的测量值均为$\pm 1$.

概率分别求出如下：

$$P_{n_x\pm}=|\langle\chi_{n_x}|\chi_+\rangle|^2=\frac{1}{2}\left[1\pm\frac{1}{2}\sin\theta(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi})\right]=\frac{1}{2}(1\pm\sin\theta\cos\varphi)$$

$$P_{n_y\pm}=\frac{1}{2}\left[1\pm\frac{\mathrm{i}}{2}\sin\theta(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi})\right]=\frac{1}{2}(1\mp\sin\theta\sin\varphi)$$

$$P_{n_z\pm}=\begin{cases}\cos^2\dfrac{\theta}{2}\\ \sin^2\dfrac{\theta}{2}\end{cases}$$

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\left(\cos\frac{\theta}{2},\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\right)[\sigma_x\boldsymbol{i}+\sigma_y\boldsymbol{j}+\sigma_z\boldsymbol{k}]\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\end{pmatrix}=\boldsymbol{n}$$

**7.19** 设 $f(\sigma_z)$可以展开成 $\sigma_z$ 的幂级数的任意函数，证明

$$f(\sigma_z)\sigma_\pm=\sigma_\pm f(\sigma_z\pm 2),$$

其中 $\sigma_\pm=\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y$.

提示：$[\sigma_z,\sigma_\pm]=\pm 2\sigma_\pm$.

**证**：因为$[\sigma_z,\sigma_\perp]=\pm 2\sigma_\perp$，故有 $\sigma_z\sigma_\perp=\sigma_\perp(\sigma_z+2)$，多次重复上式可得

$$\sigma_z^n\sigma_\pm=\sigma_\pm(\sigma_z+2)^n$$

设 $f(\sigma_z)=\sum_n C_n\sigma_z^n$，由此可知

$$f(\sigma_z)\sigma_\pm=\sum_n C_n\sigma_z^n\sigma_\pm=\sum_n\sigma_\pm C_n(\sigma_z+2)^n=\sigma_\pm f(\sigma_z+2)$$

**7.20** 展开两个$\frac{1}{2}$自旋粒子的两体算符 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}$.

提示：用自旋交换算符 $P_{12}$代换 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$.

**解**：解法一：设 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=2P_{12}-1$ 代入，级数展开

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}&=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}-\mathrm{i}\alpha}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}}\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sum_{n=0}\frac{(2\mathrm{i}\alpha)^n}{n!}P_{12}^n\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sum_{k=0}\frac{(2\alpha)^{2k}}{2k!}(-1)^k+\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sum_{k=0}\frac{(2\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!}P_{12}(-1)^k\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}(\cos 2\alpha+\mathrm{i}\sin 2\alpha P_{12})\end{aligned}$$

$$= e^{-i\alpha}\left[\cos 2\alpha + \frac{i}{2}\sin 2\alpha(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\right]$$

解法二：因为 $P_{12}^2=1$，故 $P_{12}$ 的本征值为 $\pm1$

由 7.4 题附录

$$e^{2i\alpha P_{12}} = C_0 + C_1 P_{12}$$

将其作用到 $P_{12}$ 的本征值为 $\pm1$ 的本征态上有

$$C_0 + C_1 = e^{2i\alpha},\quad C_0 - C_1 = e^{2i\alpha}$$

解出

$$C_0 = \cos 2\alpha,\quad C_1 = i\sin 2\alpha$$

$$e^{2i\alpha P_{12}} = \cos 2\alpha + iP_{12}\sin 2\alpha$$

**7.21**　自旋为 1 的三个矩阵算符满足 $[S_i, S_j]=i\varepsilon_{ijk}S_k$，其中 $i,j,k=x,y,z$.

证明 $S_z^3=S_z$，$(S_x\pm iS_y)^3=0$.

证：解法一：

由角动量理论可知，自旋角动量量子数 $s=1$，磁量子数 $m_s=1,0,-1$. 在 $S^2$ 和 $S_z$ 表象中，$S_z$ 矩阵表示为 $\begin{pmatrix}1&&\\&0&\\&&-1\end{pmatrix}$，易证

$$\begin{pmatrix}1&&\\&0&\\&&-1\end{pmatrix}^3 = \begin{pmatrix}1&&\\&0&\\&&-1\end{pmatrix}$$

由于幺正变换不改变算符关系，而不同表象之间仅差一个幺正变换，所以在所有表象中有

$$S_z^3 = S_z$$

因为 $S_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$，$S_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$.

所以有

$$(S_x+iS_y)^3 = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&2&0\\0&0&2\\0&0&0\end{pmatrix}\right]^3 = 0$$

$$(S_x-iS_y)^3 = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&0&0\\2&0&0\\0&2&0\end{pmatrix}\right]^3 = 0$$

解法二：

设 $S_z$ 的本征态为 $|m_s=1\rangle$，$|m_s=0\rangle$，$|m_s=-1\rangle$.

一般态可写成$|\psi\rangle=C_1|1\rangle+C_0|0\rangle+C_{-1}|-1\rangle$，则有 $\hat{S}_z(\hat{S}_z-1)(\hat{S}_z+1)|\psi\rangle=0$.
因为$|\psi\rangle$任意，故有

$$\hat{S}_z(\hat{S}_z \quad 1)(\hat{S}_z+1) = 0$$

即 $\hat{S}_z^3=\hat{S}_z$.
由于 $S_+$ 为自旋角动量上升(下降)算符

$$\hat{S}_+|m_s\rangle=\sqrt{s(s+1)-m_s(m_s\pm1)}\,|m_s\pm1\rangle$$

易得

$$\hat{S}_\pm^3|\psi\rangle=0$$

故有 $S_\pm^3=0$.

**7.22** 设$|\psi\rangle$是 $\hat{L}^2,\hat{L}_z$ 的本征态，即 $\hat{L}^2|\psi\rangle=l(l+1)\hbar^2|\psi\rangle,\hat{L}_z|\psi\rangle=m\hbar|\psi\rangle$.

在这个态下计算$\langle\hat{L}_x\rangle,\langle\hat{L}_x^2\rangle$.

**解**：因为 $\hat{L}_x=\frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}\ )$，$\hat{L}_+,\hat{L}_-$为角动量升降算符，故$\langle\hat{L}_x\rangle=\langle\frac{1}{2}(\hat{L}_+ +\hat{L}_-)\rangle=0$.
利用对易式

$$[L_i,L_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$

可得算符关系

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar L_x^2&=(L_yL_z-L_zL_y)L_x=L_y(L_xL_z+\mathrm{i}\hbar L_y)-L_zL_xL_x\\&=\mathrm{i}\hbar L_y^2+L_yL_xL_z-L_zL_yL_z\end{aligned}$$

将上式在$|\psi\rangle$下求平均，右边后两项相消，有

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

因此

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

**7.23** 一个处于中心势的粒子具有轨道角动量量子数 $l=2$ 和自旋角动量量子数 $S=1$，求形如 $H_I=A\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ 的自旋-轨道作用相关的能级和简并度.

**解**：$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}=\frac{1}{2}(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2)$，故该旋-轨作用的能级能量

$$\begin{aligned}E_j&=\langle A\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\rangle=\frac{1}{2}\hbar^2A(j(j+1)-l(l+1)-S(S+1))\\&=\frac{1}{2}\hbar^2A(j(j+1)-8)\end{aligned}$$

对于 $m_j=-j,-j+1,\cdots,0,\cdots,j$ 的态 $E_j$ 都是简并的，简并度为 $2j+1(j=1,2,$

3).

**7.24**　可以证明，角动量升降算符 $J_{\pm}=J_x\pm iJ_y$ 与 $J^2$ 对易，并且如果 $j,m$ 是 $J^2$，$J_z$ 的本征值，则 $J_{\pm}|jm\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,|j,m\pm1\rangle$，利用这些性质将 $m=(l-1/2)$ 的态 $|j,m\rangle$ 用 $|l,m_l,S,m_s\rangle$ 表示出来.（这里 $S=1/2$）

**解**：根据角动量耦合理论，总角动量取值为

$$j=l+\frac{1}{2},\quad l-\frac{1}{2}.$$

(1) $j=l+\frac{1}{2}$ 时，因为

$$\left|l+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}\right\rangle=\left|l,l,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

故

$$\begin{aligned}J_-\left|l+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}\right\rangle&=(L_-+S_-)\left|l,l,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\\&=\hbar\sqrt{2l+1}\left|l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}$$

而

$$L_-\left|l,l,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\sqrt{2l}\left|l,l-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$S_-\left|l,l,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\left|l,l,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

故

$$\left|l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\left|l,l-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{2l+1}}\left|l,l,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

(2) $j=l-\frac{1}{2}$ 时，令

$$\left|l-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\right\rangle=a\left|l,l-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+b\left|l,l,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

其中　　$a^2+b^2=1.$

由　　$$\left\langle l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\middle|l-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\right\rangle=0$$

得　　$a\sqrt{2l}+b=0$，故 $a=-\sqrt{\frac{1}{2l+1}}$，$b=\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}$.

得到

$$\left|l-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\right\rangle=-\sqrt{\frac{l}{2l+1}}\left|l,l-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\left|l,l,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle.$$

**7.25** 一个由三个自旋$\frac{1}{2}$粒子组成的系统的 Hamilton 量为

$$H=\frac{A}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2+\frac{B}{\hbar^2}(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{S}_3$$

$\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_2,\boldsymbol{S}_3$ 分别为三个粒子的自旋算符. 求系统的能级及能级简并度.

**解**：选取系统的力学量完全集为$(H,\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}^2,S_z)$.

其中 $\boldsymbol{S}_{12}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2,\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_{12}+\boldsymbol{S}_3=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2+\boldsymbol{S}_3.$

则本征函数取为$|S_{12},S_3,S,m_s\rangle$，而定态方程为

$$H|S_{12},S_3,S,m_s\rangle=E|S_{12},S_3,S,m_s\rangle$$

$$H=\frac{A}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2+\frac{B}{\hbar^2}(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{S}_3$$

$$=\frac{A}{2}\left[\frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_{12}-\frac{3}{4}-\frac{3}{4}\right]+\frac{B}{2}\left[\frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{S}^2-\frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_{12}^2-\frac{3}{4}\right].$$

$$H|S_{12}S_3Sm_s\rangle$$

$$=\left\{\frac{A}{2}\left[(S_{12}+1)S_{12}-\frac{3}{2}\right]+\frac{B}{2}\left[S(S+1)-S_{12}(S_{12}+1)-\frac{3}{4}\right]\right\}|S_{12}S_3Sm_s\rangle$$

$$E=\frac{A}{2}\left[(S_{12}+1)S_{12}-\frac{3}{2}\right]+\frac{B}{2}\left[S(S+1)-S_{12}(S_{12}+1)-\frac{3}{4}\right]$$

$\begin{cases}S_{12}=0,\\ S=1/2,\end{cases}$ $E=-\frac{3}{4}A$，能级简并度为 2；

$\begin{cases}S_{12}=1,\\ S=1/2,\end{cases}$ $E=\frac{A}{4}-B$，能级简并度为 2；

$\begin{cases}S_{12}=1,\\ S_3=3/2,\end{cases}$ $E=\frac{A}{4}+B$，能级简并度为 4.

**7.26** 一个自旋为 1 的粒子的 Hamilton 量为 $H=AS_z+BS_x^2$，其中 $A$ 和 $B$ 是常数，求系统的能级. 如果 $t=0$ 时，粒子处于自旋 $S_z=+\hbar$ 的本征态上，求时间 $t$ 时，粒子自旋的期望值.

**解**：在 $S_z$ 的对角表象中，

$$S_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\hbar,\quad S_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\hbar,\quad S_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\hbar$$

$$S_x^2=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0&-1\\0&2&0\\1&0&0\end{pmatrix}\hbar^2$$

$$H=AS_z+BS_x^2=\begin{bmatrix}A\hbar+B\hbar^2&0&B\hbar^2/2\\0&B\hbar^2&0\\B\hbar^2&0&-A\hbar+B\hbar^2/2\end{bmatrix}$$

得到久期方程为(令 $A'=A\hbar, B'=B\hbar^2/2$)

$$\begin{vmatrix} A'+B'-E & 0 & B' \\ 0 & 2B'-E & 0 \\ B' & 0 & -A'+B'-E \end{vmatrix}=0$$

$$\Rightarrow (A'+B'-E)(2B'-E)(-A'+B'-E)-B'^2(2B'-E)=0$$

$$(2B'-E)[(B'-E)^2-A'^2-B'^2]=0$$

得到定态能级及相应的本征函数

$$E_1=2B',\quad E_{2,3}=B'\pm\sqrt{A'^2+B'^2}=B'\pm\omega$$

$$\psi_1=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \psi_2=\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\omega-A'}{B'}\end{pmatrix}\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\omega-A')^2}},$$

$$\psi_3=\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\omega+A'}{-B'}\end{pmatrix}\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\omega+A')^2}}$$

其中　　$\omega=\sqrt{A'^2+B'^2}$.

系统的含时波函数

$$\psi(t)=C_1\psi_1 e^{-\frac{i}{\hbar}2B't}+C_2\psi_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}+C_3\psi_3 e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}.$$

由初条件

$$\psi(0)=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=C_1\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}+C_2\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\omega-A'}{B'}\end{pmatrix}\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\omega-A')^2}}+$$

$$C_3\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\omega+A'}{-B'}\end{pmatrix}\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\omega+A')^2}}$$

可求得

$$C_1=0,\quad C_2=\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\omega-A')^2}},\quad C_3=\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\omega+A')^2}}$$

故

$$\psi(t)=\frac{B'^2}{B'^2+(\omega-A')^2}\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\omega-A'}{B'}\end{pmatrix}e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}+\frac{B'^2}{B'^2+(\omega+A')^2}\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\omega+A'}{-B'}\end{pmatrix}e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}$$

自旋的期望值为

$$\langle S_x\rangle = 0,$$
$$\langle S_y\rangle = 0,$$
$$\langle S_z\rangle = \left[1-\frac{B^2\hbar^4}{2\omega^2}\sin\left(\frac{\omega}{2\hbar}t\right)\right]\hbar$$

**7.27** 求下列态中，算符$\boldsymbol{J}^2, J_z, \boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$的本征值.

(1)$\psi_1=\chi_{1/2}(S_z)Y_{11}(\theta,\varphi)$

(2)$\psi_2=\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}\chi_{1/2}(S_z)Y_{10}(\theta,\varphi)+\chi_{-1/2}(S_z)Y_{11}(\theta,\varphi)]$

(3)$\psi_3=\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}\chi_{-1/2}(S_z)Y_{10}(\theta,\varphi)+\chi_{1/2}(S_z)Y_{1,-1}(\theta,\varphi)]$

(4)$\psi_4=\chi_{-1/2}(S_z)Y_{1,-1}(\theta,\varphi)$

**解**：耦合表象与非耦合表象的转换关系

$$\begin{cases}\left|l,m,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\left|l+\frac{1}{2},m_j\right\rangle-\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\left|l-\frac{1}{2},m_j\right\rangle\\ \left|l,m+1,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\left|l+\frac{1}{2},m_j\right\rangle+\sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\left|l-\frac{1}{2},m_j\right\rangle\end{cases}$$

(1) 显然$l=1$，$m_l=1$，$S=1/2, m_s=1/2$，$j=l+S=\frac{3}{2}, m_j=m_l+m_s=\frac{3}{2}$.

$\boldsymbol{J}^2$的本征值为$j(j+1)\hbar^2=\frac{15}{4}\hbar^2$，$J_z$的本征值为$\frac{3}{2}\hbar$.

(2) $\psi=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\left|10\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle+\left|11\ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\right]$.

在耦合表象中

$$\begin{aligned}\psi=&\sqrt{\frac{2}{3}}\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle\right)\\&+\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle\right)\\=&\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}$$

$j=\frac{3}{2}, \boldsymbol{J}^2=j(j+1)=\frac{15}{4}\hbar^2, J_z=\frac{1}{2}\hbar$.

(3)

$$\begin{aligned}\psi=&\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{2}\left|1,0,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\left|1,-1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right)\\=&\sqrt{\frac{2}{3}}\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle\right)\end{aligned}$$

$$+\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle\right)$$

$$=\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$j=\frac{3}{2},\boldsymbol{J}^2=\frac{15}{4}\hbar^2,J_z=-\frac{1}{2}\hbar$$

(4) 显然，　　$l=1,m_l=-1,m_s=-1/2$

$$j=l+S=\frac{3}{2},m_j=m_l+m_s=-3/2$$

$$\boldsymbol{J}^2=\frac{15}{4}\hbar^2,J_z=-\frac{3}{2}\hbar$$

# 第八章　定态微扰论

**8.1**　设非谐振子的 Hamilton 量为 $H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2+\beta x^3$，($\beta$ 为常数)，取

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2, H'=\beta x^3$$

试用微扰论计算其能量及能量本征函数.

**解**：$H_0|n\rangle=\varepsilon_n|n\rangle$；$\varepsilon_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

由于 $H'=\beta x^3$ 为奇宇称算符，故

$$E_n^{(1)}=\langle n|H'|n\rangle=0$$

又因为

$$x|n\rangle=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle+\sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle\right], \alpha=\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$$

$$H'_{mn}=\beta\langle m|x^3|n\rangle=\sum_{k,l}\beta\langle m|x|k\rangle\langle k|x|l\rangle\langle l|x|n\rangle$$

$$=\frac{\beta}{(\sqrt{2}\alpha)^3}[\sqrt{n(n-1)(n-2)}\delta_{m,n-3}+3n^{3/2}\delta_{m,n-1}$$

$$+3(n+1)^{3/2}\delta_{m,n+1}+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{m,n+3}]$$

故

$$E_n^{(2)}=\sum_m{}'\frac{|H'_{mn}|^2}{\varepsilon_n-\varepsilon_m}=-\frac{\hbar^2\beta^2}{\mu^3\omega^4}\frac{30n^2+30n+11}{8}$$

而波函数的一级修正

$$|n\rangle^{(1)}=\sum_m{}'\frac{H'_{nm}}{\varepsilon_n-\varepsilon_m}|m\rangle$$

$$=\frac{\beta}{2\sqrt{2}\hbar\omega\alpha^3}\left[\frac{\sqrt{n(n-1)(n-2)}}{3}|n-3\rangle+3n^{3/2}|n-1\rangle\right.$$

$$\left.-3(n+1)^{3/2}|n+1\rangle-\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}}{3}|n+3\rangle\right]$$

**8.2**　一维谐振子 Hamilton 量表示为

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

设再加一个微扰

$$H' = \frac{\lambda}{2}\mu\omega^2 x^2 (\lambda \ll 1)$$

试用微扰论求能级的修正(到三级近似)，并和精确解比较.

**解：**

$$H_0\psi_n^{(0)}(x) = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}(x), \qquad E_n^{(0)} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad (n = 0,1,2,3,\cdots).$$

因为

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

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

其中 $\alpha = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$.

故

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{\lambda}{2}E_n^{(0)}$$

这一结果亦可由位力定理直接给出：$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \lambda\overline{T} = \frac{\lambda}{2}E_n^{(0)}$.

$$H'_{mn} = \frac{\lambda}{4}\hbar\omega\left[\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}\right]$$

当 $m \neq n$ 时，不为零的 $H'_{mn}$ 为

$$H'_{n,n+2} = H'_{n+2,n} = \frac{\lambda}{4}\hbar\omega\sqrt{(n+1)(n+2)}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_m{}' \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = -\frac{\lambda^2}{8}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

而

$$E_n^{(3)} = \sum_m{}' \sum_l{}' \frac{H'_{nm}H'_{ml}H'_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - H'_{nn}\sum_m{}' \frac{|H'_{mn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}$$

$$= \frac{1}{(2\hbar\omega)^2}\left[H'_{n+2,n+2}(H'_{n-2,n})^2 + H'_{n-2,n-2}(H'_{n-2,n})^2 - H'_{nn}(|H'_{n+2,n}|^2 + |H'_{n-2,n}|^2)\right]$$

$$= \frac{\lambda^3}{16}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

本题的严格解为

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

令 $\omega' = \omega\sqrt{1+\lambda}$，则

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega'^2x^2$$

故

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega'=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\sqrt{1+\lambda}$$

由于$\lambda\ll1$，将$(1+\lambda)^{1/2}$作泰勒展开有

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\frac{\lambda^3}{16}+\cdots\right)\hbar\omega$$

与微扰解一致.

**8.3** 自旋为$\frac{1}{2}$的三维各向同性谐振子，处于基态. 设粒子受到微扰$H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$作用，求粒子的能级修正(二级近似).

**解**：能量算符、能级和波函数的零级近似分别为

$$H_0=\frac{1}{2\mu}p^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$$

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\qquad n=n_1+n_2+n_3(n_1,n_2,n_3=0,1,2,\cdots)$$

$$\psi_n^{(0)}=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\alpha;\qquad \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\beta$$

其中$\psi_{n_1}(x)$为一维谐振子能量本征态，$\alpha,\beta$为$\sigma_z=\pm1$的本征态，在$\sigma_z$表象中有

$$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

微扰作用前，基态波函数为

$$\psi_{0\alpha}^{(0)}=\phi_0(x)\phi_0(y)\phi_0(z)\alpha;\qquad \psi_{0\beta}^{(0)}=\phi_0(x)\phi_0(y)\phi_0(z)\beta$$

二者均为偶宇称. 微扰算符可以写为

$$H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}=\lambda(\sigma_xx+\sigma_yy+\sigma_zz)$$

由于$H'$为奇宇称，故在两基态波函数的简并子空间中，$H'$的所有四个矩阵元皆为零.

故：$E_0^{(1)}=0$(二重根)

由简并微扰理论①，在$\{|n\tau\rangle,\tau=\alpha,\beta\rangle\}$为基的表象($H_0$表象)中，$H'$在$E_0^{(1)}$的简并子空间中是对角的———一阶表象.

算符

$$A=\sum_{n\neq0}\sum_{\tau}\frac{H'|n\tau\rangle\langle n\tau|H'}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}$$

在$E_0^{(1)}$的二维简并子空间中，

① 徐秀玮等. 简并部分解除情况下，二阶微扰修正. 大学物理，1996，Vol. 15. No. 4.

(1) 若 $A$ 为对角矩阵，则对角元即为能量二级修正. 即此种情况下可用非简并公式处理

(2) 若为非对角矩阵，则在该二维子空间中，由久期方程

$$\det \mid A - E_0^{(2)} I \mid = 0$$

求出能量二级修正 $E_0^{(2)}$.

由于

$$\langle n\tau \mid H' \mid 0f \rangle \qquad \tau, f = \alpha, \beta$$

中不为零的矩阵元有

$$\begin{aligned}\langle 001\alpha \mid H' \mid 000\alpha \rangle &= \langle 100\beta \mid H' \mid 000\alpha \rangle \\ &= \langle 100\alpha \mid H' \mid 000\beta \rangle \\ &= -\langle 001\beta \mid H' \mid 000\beta \rangle = \lambda \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{1/2}\end{aligned}$$

$$\langle 010\beta \mid H' \mid 000\alpha \rangle = \langle 010\alpha \mid H' \mid 000\beta \rangle = \mathrm{i}\lambda \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)^{1/2}$$

显然，由于 $\langle 0\alpha | A | 0\beta \rangle = 0$，

$$A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha}^{*} = 0$$

即属于上面第一种情况. 而二重根

$$\begin{aligned}A_{\alpha\alpha} &= A_{\beta\beta} \\ &= -\frac{1}{\hbar\omega}\left[\mid \langle 000\alpha \mid H' \mid 001\alpha \rangle \mid^2 + \mid \langle 000\alpha \mid H' \mid 010\beta \rangle \mid^2 \right. \\ &\quad \left. + \mid \langle 000\alpha \mid H' \mid 100\beta \rangle \mid^2 \right] \\ &= -\frac{3\lambda^2}{2\mu\omega^2}\end{aligned}$$

$$E_0^{(2)} = -\frac{3\lambda^2}{2\mu\omega^2} \text{(二重根)}$$

$$E_0 = \frac{3\hbar\omega}{2} - \frac{3\lambda^2}{2\mu\omega^2}$$

**8.4**　自旋为 0 的两个全同粒子在谐振子势中运动，

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

设粒子之间有相互作用

$$H' = V_0 \mathrm{e}^{-\beta^2(x_1 - x_2)^2}$$

试用微扰论求体系的基态能级修正(一级近似).

**解**：$H_0$ 的基态波函数的零级近似为

$$\psi_0^{(0)}(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2)$$

其中 $\phi_0(x)$ 为一维谐振子的基态波函数，即

$$\phi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}e^{-\alpha^2x^2/2},\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

基态能级的零级近似为

$$E_0^{(0)}=2\times\frac{1}{2}\hbar\omega=\hbar\omega$$

微扰一级修正为

$$E_0^{(1)}=\langle\psi_0^{(0)}\mid H'\mid\psi_0^{(0)}\rangle$$

令

$$X=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+x_2),x=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_2)$$

利用

$$x_1^2+x_2^2=X^2+x^2$$

则

$$\psi_0^{(0)}(x_1,x_2)=\phi_0(x_1)\phi_0(x_2)=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}e^{-\alpha X^2/2}e^{-\alpha^2x^2/2}=\phi_0(X)\phi_0(x)$$

且

$$H'=V_0e^{-2\beta^2x^2}$$

所以

$$E_0^{(1)}=\langle\psi_0^{(0)}\mid H'\mid\psi_0^{(0)}\rangle=\langle\psi_0^{(0)}\mid e^{-2\beta^2x^2}\mid\psi_0^{(0)}\rangle=\frac{V_0}{(1+2\beta^2/\alpha^2)^{1/2}}$$

**8.5**　一维无限深势阱$(0\leqslant x\leqslant a)$中的粒子，受到微扰

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

的作用，求基态能量的一级修正.

**解**：一维无限深势阱$(0\leqslant x\leqslant a)$中，粒子的基态能量和波函数为

$$E_1^{(0)}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m^2a^2},\qquad\psi_1^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

则基态能量的一级修正为

$$\begin{aligned}E_1^{(1)}&=\langle\psi_1^{(0)}(x)\mid H'(x)\mid\psi_1^{(0)}(x)\rangle\\&=\frac{2}{a}\int_0^{a/2}2\lambda\frac{x}{a}\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx+\frac{2}{a}\int_{a/2}^{a}2\lambda\left(1-\frac{x}{a}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx\\&=\left(\frac{1}{2}+\frac{2}{\pi^2}\right)\lambda\end{aligned}$$

**8.6**　假设原子核有非零半径$r_p\approx10^{-13}$cm，且其电荷沿该尺寸均匀的分布. 求由于点电荷与此扩展电荷间差异导致的氢原子的1s态和2p态的能移.

**解**：在球内电子所受的力为

$$\boldsymbol{F}=-e_s^2\left(\frac{r}{r_p}\right)^3\frac{1}{r^2}\boldsymbol{e}_r=-\frac{e_s^2}{r_p^3}r\boldsymbol{e}_r$$

其中 $e_s^2=\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

所以静电势能为

$$\begin{cases}V_1=\dfrac{e_s^2}{2r_p^3}r^2+C, & r\leqslant r_p\\ V_2=-\dfrac{e_s^2}{r}, & r\geqslant r_p\end{cases}$$

由 $V_1(r_p)=V_2(r_p)$,得

$$C=-\frac{3}{2}\frac{e_s^2}{r_p}$$

所以

$$V(r)=\begin{cases}-\dfrac{e_s^2}{r}, & r>r_p\\ \dfrac{e_s^2}{2r_p}\left[\left(\dfrac{r}{r_p}\right)^2-3\right], & r\leqslant r_p\end{cases}$$

体系的 Hamilton 量为

$$H=H_0+H'$$

$$H_0=\frac{p^2}{2m}-\frac{e_s^2}{r}$$

$$H'=\begin{cases}0, & r>r_p\\ \dfrac{e_s^2}{2r_p}\left[\left(\dfrac{r}{r_p}\right)^2+\dfrac{2r_p}{r}-3\right], & r\leqslant r_p\end{cases}$$

所以

$$\langle nlm\mid H'\mid nlm\rangle=\langle nl\mid H'\mid nl\rangle=\int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}rR_{nl}^*(r)R_{nl}(r)H'(r)$$

$$=\int_0^{r_p}r^2\,\mathrm{d}rR_{nl}^*(r)R_{nl}(r)\times\frac{e_s^2}{2r_p}\left[\left(\frac{r}{r_p}\right)^2+\frac{2r_p}{r}-3\right]$$

因为

$$R_{10}=\frac{2}{a^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a},\ R_{21}=\frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}}\times\frac{r}{a}\mathrm{e}^{-r/2a}$$

考虑到这里不过是一级微扰论,而 $H'$ 又只是在核子体积内起作用. $r_p\ll a$，这里 $a$ 为玻尔半径. 所以计算中可略去径向波函数中的指数,认为 $\mathrm{e}^{-r/a}\approx1$，由此得 1s 态能移

$$E_{10}=\langle10\mid H'\mid10\rangle\approx\frac{2e_s^2r_p^2}{5a^3}$$

2p 态能移

$$E'_{21}=\langle 21\mid H'\mid 21\rangle\approx\frac{e_s^2r_p^4}{1920a^5}$$

**8.7** 质量为 $m$ 的粒子约束在一半径为 $a$ 的圆周上，除此之外它是自由的. 加一个微扰 $H'=A\sin\theta\cos\theta$(其中 $\theta$ 是圆周上的角位置). 对于最低的两个态求出修正后的零级波函数，并计算它们的微扰能量修正(二级近似).

**解**：未受微扰的波函数和能级分别为

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\theta},$$

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2ma^2},\ n=\pm1,\pm2,\cdots$$

由此，我们只需考虑 $n=\pm1$ 的两个态，它们是简并的，微扰矩阵为 $\begin{pmatrix}0 & -\frac{iA}{4}\\ \frac{iA}{4} & 0\end{pmatrix}$，

将它对角化可得出两个零级波函数

$$\begin{cases}\psi'_1=(i\mid 1\rangle+\mid -1\rangle)/\sqrt{2}, & \Delta E_1^{(1)}=\dfrac{A}{4}\\ \psi'_2=(\mid 1\rangle+i\mid -1\rangle)/\sqrt{2}, & \Delta E_2^{(1)}=-\dfrac{A}{4}\end{cases}$$

为了求二级能量修正，利用公式

$$\Delta E^{(2)}=\sum_n{}'\frac{|\langle\psi'_k\mid H'\mid n\rangle|^2}{E_k-E_n}$$

但是

$$H'\mid n\rangle=\frac{A}{2}\sin2\theta\mid n\rangle=\frac{A}{4i}\mid n+2\rangle-\frac{A}{4i}\mid n-2\rangle$$

所以

$$\Delta E_1^{(2)}=\sum_n{}'\frac{|\langle\psi'_1\mid n+2\rangle-\langle\psi'_1\mid n-2\rangle|^2}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}(1-n^2)+\frac{A}{4}}\times\left(\frac{A}{4}\right)^2$$

$$=\frac{1/2}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}[1-(-3)^2]+\frac{A}{4}}\times\left(\frac{A}{4}\right)^2+\frac{1/2}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}[1-3^2]+\frac{A}{4}}\times\left(\frac{A}{4}\right)^2$$

$$\approx-\frac{ma^2A^2}{64\hbar^2}$$

同理，$\Delta E_2^{(2)}\approx-\dfrac{ma^2A^2}{64\hbar^2}$，从而

$$\begin{cases} E_1 = \dfrac{\hbar^2}{2ma^2} + \dfrac{A}{4} - \dfrac{ma^2A^2}{64\hbar^2} \\ E_2 = \dfrac{\hbar^2}{2ma^2} - \dfrac{A}{4} - \dfrac{ma^2A^2}{64\hbar^2} \end{cases}$$

**8.8**　一个一维无限深方势阱在 $x=0$ 及 $x=L$ 处有两个无限高的壁，在 $x=L/4$ 和 $x=3L/4$ 处有两个宽为 $a(a\ll L)$，高为 $V$ 的小微扰势. 用微扰方法估计 $n=2$ 与 $n=4$能级的差异(精确到一阶微扰).

**解**：一维无限深势阱能级和波函数为

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2}, \quad (n = 1,2,3,\cdots)$$

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

在一级微扰下第 $n$ 能级的移动为

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \int_{L/4-a/2}^{L/4+a/2} V\frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x + \int_{3L/4-a/2}^{3L/4+a/2} V\frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x$$

因为 $a\ll L$，利用积分中值定理得

$$H'_{nn} = \frac{2Va}{L}\left\{\sin^2\frac{n\pi}{L}\left(\frac{L}{4}\right) + \sin^2\frac{n\pi}{L}\left(\frac{3L}{4}\right)\right\} = \frac{2Va}{L}\left(\sin^2\frac{n\pi}{4} + \sin^2\frac{3n\pi}{4}\right)$$

在一级微扰近似下，$n=2$ 与 $n=4$ 的能级差的变化为

$$E_2^{(1)} - E_4^{(1)} = \frac{2Va}{L}\left(\sin^2\frac{\pi}{2} + \sin^2\frac{3\pi}{2} - \sin^2\pi - \sin^2 3\pi\right) = \frac{4Va}{L}$$

**8.9**　粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动，能级为 $E_n^c$，$(n=1,2,3,\cdots)$，如受到微扰 $H'=\dfrac{\lambda}{m}p$ 的作用，求能级的修正(二级近似).

**解**：在微扰前能量算符可写为

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$H_0$ 的本征函数记作 $\psi_n^{(0)}$ 或 $|n\rangle$. 利用对易式 $[x,p]=\mathrm{i}\hbar$ 易得到

$$\frac{m}{\mathrm{i}\hbar}[x,H_0] = \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}(xH_0 - H_0x) = p$$

因此在 $H_0$ 表象中(以 $|n\rangle$ 为基矢)有矩阵关系

$$\langle k \mid p \mid n\rangle = \mathrm{i}m\omega_{kn}\langle k \mid x \mid n\rangle$$

其中

$$\omega_{kn} = (E_k^{(0)} - E_n^{(0)})/\hbar$$

一维束缚态是非简并的. 按照微扰论公式，能级的一级修正为

$$E_n^{(1)} = \langle n \mid H' \mid n\rangle = \frac{\lambda}{m}\langle n \mid p \mid n\rangle = \mathrm{i}\lambda\omega_{nn}\langle n \mid x \mid n\rangle = 0$$

二级修正为

$$E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{|H'_{kn}|^2}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}=\frac{\lambda^2}{\hbar}\sum_k{}'\frac{\omega_{kn}^2|x_{kn}|^2}{\omega_{kn}}$$

$$=-\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\sum_k(E_k^{(0)}-E_n^{(0)})|x_{kn}|^2=-\frac{\lambda^2}{2m}$$

$\left(\text{最后一步利用了求和规则}\sum_k(E_k^{(0)}-E_n^{(0)})|x_{kn}|^2=\frac{\hbar^2}{2m}.\right)$

**8.10** 粒子在二维无限深方势阱中运动，$V=\begin{cases}0, & 0\leqslant x\leqslant a,0\leqslant y\leqslant a\\ \infty & x<0,x>a,y<0,y>a\end{cases}$，写出能级和能量本征函数，若加上微扰 $H'=\lambda xy$，求最低的两个能级的一级修正.

**解**：(1) 能级和能量本征函数(阱内，以下同)

$$E_{n_1n_2}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2),\qquad n_1,n_2=1,2,3,\cdots$$

$$\psi_{n_1n_2}^{(0)}=\frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a}$$

基态是非简并的，能级为 $E_{11}^{(0)}$，本征函数为

$$\psi_{11}^{(0)}=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}$$

第一激发态是二重简并的，能级为 $E_{12}^{(0)}$，本征函数为

$$\psi_{12}^{(0)}=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}=\psi_\alpha$$

$$\psi_{21}^{(0)}=\frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}=\psi_\beta$$

(2) 基态能级的一级修正等于 $H'$ 的平均值，即

$$E_{11}^{(1)}=\langle\psi_{11}^{(0)}|H'|\psi_{11}^{(0)}\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a\int_0^a xy\sin^2\frac{\pi x}{a}\times\sin^2\frac{\pi y}{a}\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{\lambda}{4}a^2$$

对于 $\psi_\alpha,\psi_\beta$ 容易算出 $H'$ 的矩阵元为

$$H'_{\alpha\alpha}=H'_{\beta\beta}=\frac{\lambda}{4}a^2$$

$$H'_{\alpha\beta}=H'_{\beta\alpha}=\frac{256}{81\pi^4}\lambda a^2$$

在 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中，$H'$ 的矩阵元表示为

$$H'=\frac{\lambda}{4}a^2\begin{bmatrix}1 & \frac{1024}{81\pi^4}\\ \frac{1024}{81\pi^4} & 1\end{bmatrix}$$

解久期方程可得能级的一级修正为

$$E_{12}^{(1)}=H'_{aa}\pm H'_{a\beta}=\frac{\lambda}{4}a^2\left(1\pm\frac{1024}{81\pi^4}\right)=\frac{\lambda}{4}a^2(1\pm0.13)=\lambda a^2\times\begin{cases}0.2824\\0.2176\end{cases}$$

结论：在微扰作用下，基态能级升高 $\lambda a^2/4$，第一激发能级的重心升高 $\lambda a^2/4$，同时分裂为二，裂距为 $0.065(\lambda a^2)$.

**8.11**　一个带电粒子被约束在谐振子势 $V=kx^2/2$ 内，系统处于一恒定的外电场 $E$ 中，计算能级的移动，准确到 $E^2$ 量级.

**解**：(1)(微扰解)选电场方向为 $x$ 轴，系统 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}kx^2-qEx=H_0+H'$$

其中 $H'=-qEx$

谐振子的基态波函数

$$\psi_0(x)=\langle x\mid 0\rangle=\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$\psi_0$ 为偶函数，所以 $\langle 0|H'|0\rangle=0$，由

$$\langle n'\mid x\mid n\rangle=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n',n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n',n+1}\right]$$

得

$$H'_{0,n}=-qE\langle 0\mid x\mid n\rangle=-\frac{qE}{\sqrt{2}\alpha}\delta_{n,1}$$

所以基态准确到 $E^2$ 的能级为

$$\Delta E_0^{(2)}=\sum_n{}'\frac{|H'_{0n}|^2}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}=\sum_n{}'\frac{\frac{q^2E^2}{2\alpha^2}\delta_{n,1}}{-n\hbar\omega}=-\frac{q^2E^2}{2\hbar\omega\alpha^2}=-\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

(2)(严格解)Hamilton 量可以写为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}k(x-qE/k)^2-\frac{q^2E^2}{2k}$$

令 $x'=x-\frac{qE}{k}$，则有

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2+\frac{1}{2}kx'^2-\frac{q^2E^2}{2k}$$

则

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2E^2}{2k},\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

所以严格解得能量移动为

$$\Delta E_0=-\frac{q^2E^2}{2k}=-\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

**8.12**　一个长度为 $d$，质量均匀的棒，可以绕其中心在一平面内转动，设棒的质量

为 $M$，而在棒的两端分别带电荷 $+Q$ 和 $-Q$，

(1) 写出体系的 Hamilton 量算符，本征态和本征值；(2)若在转动平面内存在电场强度为 $E$ 的弱电场，这时的本征态和本征值将如何变化，精确到一级修正；(3)若该电场很强，求基态的近似能量.

**解**：(1) 该系统的 Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

其中 $I=\frac{1}{12}Md^2$，$\theta$ 是棒与平面内 $x$ 轴的夹角.

本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi_m(\theta) = E_m\psi_m(\theta)$$

解此方程有

$$\psi(\theta)_m = ce^{ik_m\theta},\ k_m = \frac{2IE_m}{\hbar^2}$$

利用边界条件

$$\psi_m(\theta+2\pi) = \psi_m(\theta)$$

得 $k_m=0,\pm1,\pm2,\cdots$，再利用归一化条件有

$$c^2\cdot 2\pi = 1;\ c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

得本征函数

$$\psi(\theta)_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_m\theta},k_m = 0,\pm1,\pm2,\cdots$$

本征值

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I}k_m^2 = \frac{6\hbar^2}{Md^2}k_m^2$$

(2) 不失一般性，可设此电场 $\boldsymbol{E}=E\boldsymbol{e}_x$，这样 Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + V(\theta)$$

其中 $V(x)=-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}=-QdE\cos\theta$，将 $V(\theta)$看成微扰项 $H_1=-QdE\cos\theta$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

未受微扰的本征函数和本征值为

$$\psi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_m\theta}$$

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I}m^2 = \frac{6\hbar^2}{Md^2}m^2,\qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

利用一级微扰论，虽然 $\psi_m(\theta)$ 及 $\psi_{-m}(\theta)$ 是简并的，但是我们有

$$\langle -m \mid V(\theta) \mid m\rangle = \int_0^{2\pi} -QdE\cos\theta \frac{1}{2\pi} e^{2im\theta} d\theta = 0$$

所以仍然可以用非简并理论，

$$E_m^{(1)} = \langle m \mid H_1 \mid m\rangle = \int_0^{2\pi} -QdE\cos\theta \frac{1}{2\pi} d\theta = 0$$

$$\psi_m^{(1)} = \sum_n{}' \frac{\langle n \mid H_1 \mid m\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)}$$

$$\langle n \mid H_1 \mid m\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} -QdE\cos\theta e^{i(m-n)\theta} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} d\theta$$

$$= \frac{1}{2\pi}(-QdE)\ \frac{1}{2} \cdot 2\pi[\delta_{m-n+1,0} + \delta_{m-n-1,0}]$$

$$= -\frac{1}{2}QdE[\delta_{m,n+1,0} + \delta_{m,n-1,0}]$$

所以

$$\psi_m^{(1)} = \frac{Md^3QE}{12\hbar^2} \frac{1}{2m+1} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+1)\theta} + \frac{Md^3QE}{12\hbar^2} \frac{1}{2m-1} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m-1)\theta}$$

$$= \frac{Md^3QE}{12\hbar^2\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{2m+1} e^{i(m+1)\theta} + \frac{1}{2m-1} e^{i(m-1)\theta}\right]$$

在准确到 $E^{(1)}$ 时，

$$E_m = \frac{6\hbar^2}{Md^2} m^2$$

$$\psi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} + \frac{Md^3QE}{12\hbar^2\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{2m+1} e^{i(m+1)\theta} - \frac{1}{2m-1} e^{i(m-1)\theta}\right]$$

(3) 若电场很强，这时 $\theta$ 必定在小角度范围内的概率大，因而近似有 $\cos\theta \approx 1-\frac{1}{2}\theta^2$，代入(2)中的 Hamilton 量中，

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - QdE\left(1-\frac{1}{2}\theta^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{2}QdE\theta^2 - QdE$$

这类似于一个简谐振子方程，对基态有

$$E_0 = -QdE + \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{QEd}{I}} = -QdE + \hbar\sqrt{\frac{3QE}{Md}}$$

$$\psi_0 = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha\theta^2/2}, \qquad \alpha = \sqrt{\frac{QEdI}{\hbar^2}}$$

所以

$$\psi_0 = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\left(\frac{\hbar^2}{QEdI}\right)^{1/8} \exp\left[-\frac{1}{2}\theta^2\left(\frac{QEdI}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right], \quad \alpha = \sqrt{\frac{QEdI}{\hbar^2}}$$

**8.13** 一个量子体系 Hamilton 量由算符 $H=H_0+H'$ 表述，$H'=\mathrm{i}\lambda[A,H_0]$ 为微扰，$A$ 为 Hermite 算符，$\lambda$ 为实数，设 $B$ 为另一个算符，且 $C=\mathrm{i}[B,A]$，若已知 $A$，$B$，$C$ 在无微扰基态(无简并)的平均值为 $\langle A_0\rangle$，$\langle B_0\rangle$，$\langle C_0\rangle$. 求当微扰加入后 $B$ 在基态上的平均值(精确到第一阶).

**解**：根据题设，已知

$$\langle 0\mid A\mid 0\rangle = A_0,\langle 0\mid B\mid 0\rangle = B_0,\langle 0\mid C\mid 0\rangle = C_0$$

按照微扰论公式，微扰作用后的基态为

$$\mid \varphi_0\rangle = \mid 0\rangle + \sum_n{}' \frac{H'_{n0}}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}\mid n\rangle$$

其中

$$\begin{aligned} H'_{n0} &= \langle n\mid H'\mid 0\rangle = \mathrm{i}\lambda\langle n\mid (AH_0-H_0A)\mid 0\rangle \\ &= \mathrm{i}\lambda(E_0^{(0)}-E_n^{(0)})\langle n\mid A\mid 0\rangle \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} \mid \varphi_0\rangle &= \mid 0\rangle + \mathrm{i}\lambda\sum_n{}'\mid n\rangle\langle n\mid A\mid 0\rangle \\ &= \mid 0\rangle + \mathrm{i}\lambda\sum_n\mid n\rangle\langle n\mid A\mid 0\rangle - \mathrm{i}\lambda A_0\mid 0\rangle \end{aligned}$$

即

$$\mid \varphi_0\rangle = \mid 0\rangle + \mathrm{i}\lambda(A-A_0)\mid 0\rangle$$

计算中利用了公式 $\sum_n \mid n\rangle\langle n\mid = 1$.

从而 $\langle\varphi_0\mid\varphi_0\rangle = 1+\lambda^2(\langle 0\mid A^2\mid 0\rangle - A_0^2)$，所以波函数 $\varphi_0$ 的表达式准确到量级 $\lambda$ 时，已经归一化.

在 $\varphi_0$ 态下，算符 $B$ 的平均值(准确到量级 $\lambda$)为

$$\begin{aligned} \langle\varphi_0\mid B\mid\varphi_0\rangle &= \langle 0\mid B\mid 0\rangle + \mathrm{i}\lambda\langle 0\mid B(A-A_0)\mid 0\rangle \\ &\quad - \mathrm{i}\lambda\langle 0\mid (A-A_0)B\mid 0\rangle + \lambda^2(\cdots) \end{aligned}$$

略去 $\lambda^2$ 项，即得

$$\langle\varphi_0\mid B\mid\varphi_0\rangle = B_0 + \mathrm{i}\lambda\langle 0\mid (BA-AB)\mid 0\rangle = B_0+\lambda C_0$$

从以上整个推导过程来看，如将 $\mid 0\rangle$ 换成 $H_0$ 的任何一个非简并的本征态，$\varphi_0$ 换成 $H$ 的相应的本征态，结果显然仍然成立，因此上面的式子适合任何非简并的能量本征态.

**8.14** 弱电场中极化的双原子分子，可处理成一个在弱场 $E$ 中的转动惯量为 $I$，电偶极矩为 $d$ 的刚性转子.(1) 忽略质心运动，将转子的 Hamilton 量写为 $H_0+H'$ 形式；(2) 求出未受微扰的解，讨论能级简并情况；(3) 用非简并微扰论对所有能级计算最低阶修正；(4) 为什么可以使用非简并微扰论，微扰后简并情况如何?

**解**：(1) 由题意知道

$$H=\frac{1}{2I}\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}=\frac{1}{2I}\boldsymbol{J}^2-dE\cos\theta$$

其中

$$H_0=\frac{1}{2I}\boldsymbol{J}^2,\ H'=-dE\cos\theta$$

(2) 本征函数为

$$\psi_{jm}=Y_{jm}(\theta,\varphi),$$

其中 $m=-j,(-j+1),\cdots,(j-1),j$，为 $2j+1$ 重简并.

(3) 一级修正，由于

$$\langle jm\mid -dE\cos\theta\mid jm\rangle=-dE\langle jm\mid\cos\theta\mid jm\rangle=0$$

二级修正，由于

$$\langle j+1,m\mid -dE\cos\theta\mid jm\rangle=-dE\sqrt{\frac{(j+1-m)(j+1+m)}{(2j+1)(2j+3)}}$$

$$\langle j-1,m\mid -dE\cos\theta\mid jm\rangle=-dE\sqrt{\frac{(j+m)(j-m)}{(2j+1)(2j-1)}}$$

因此

$$\begin{aligned}E_j^{(2)}&=\frac{2Id^2E^2}{\hbar^2}\times\left\{\frac{(j+1-m)(j+1+m)}{(2j+1)(2j+3)[j(j+1)-(j+1)(j+2)]}\right.\\&\quad\left.+\frac{(j+m)(j-m)}{(2j+1)(2j-1)[j(j+1)-j(j-1)]}\right\}\\&=\frac{Id^2E^2[j(j+1)-3m^2]}{\hbar^2j(j+1)(2j-1)(2j+3)}\end{aligned}$$

(4) 由简并微扰理论(见 8.2 题文献)，在 $H_0$ 表象中，$H'$ 在 $E_j^{(0)}$ 的简并子空间已经对角化，且在一级修正中简并没有完全解除($E_j^{(1)}$ 为$(2j+1)$重根)；二级修正可按非简并微扰论处理的充要条件为算符

$$A=\sum_{j'\neq j}\sum_{m'=-j'}^{j'}\frac{H'\mid j'm'\rangle\langle j'm'\mid H'}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}$$

在量子数为 $j$ 的子空间中是对角化的，且对角元即为 $E_j^{(2)}$，在本题中

$$\langle jm\mid H'\mid j'm'\rangle$$

不为零的条件 $\Delta j=\pm1,\Delta m=0$

所以

$$\langle jm\mid H'\mid j'm'\rangle\langle j'm'\mid H'\mid jn\rangle$$

不为零的条件 $\Delta j=\pm1$，$m=m'=n$，

显然在 $j$ 的子空间中 $A$ 是对角的，故可用非简并微扰公式处理.

**8.15**　讨论氢原子的 $n=2$ 能级在 $H'=xyf(r)$ 微扰下的能级分裂.

提示：在考虑自旋时，$n=2$ 时氢原子为四重简并，$H'$ 的选择定则为 $\Delta m=\pm2$.

**解**：在微扰作用前，能级 $E_2^{(0)}$ 是四重简并的，相应的状态为

$$\psi_{200}=R_{20}(r)Y_{00},\psi_{211}=R_{21}(r)Y_{11}$$
$$\psi_{210}=R_{21}(r)Y_{10},\psi_{21-1}=R_{21}(r)Y_{1-1}$$

其中

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\qquad Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$$

$$Y_{11}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x+iy}{r},\quad Y_{1,-1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-iy}{r}$$

由波函数和 $H'$ 的对称性容易看出，在这四个简并态构成的子空间中，微扰 $H'$ 不等于零的矩阵元只有 $H'_{211,21-1}$ 和 $H'_{21-1,211}$，经过简单的计算，可得

$$H'_{211,21-1}=iA;\qquad H'_{21-1,211}=-iA$$

其中

$$A=\frac{1}{5}\int_0^\infty (R_{21})^2 f(r)r^4\,dr;(\text{实数})$$

在这子空间中，在一级微扰近似下，$\psi_{200}$ 不和其他态发生耦合，能级也不变，$\psi_{211}$ 和 $\psi_{21-1}$ 则将发生耦合，与此相应，能级发生分裂

在 $\{\psi_{211},\psi_{21-1}\}$ 子空间中，$H'$ 的矩阵表示为

$$H'=\begin{pmatrix}0 & iA\\ -iA & 0\end{pmatrix}$$

于是我们有

$$E_2^{(1)}=A,\quad \psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211}-i\psi_{21-1})$$

$$E_2^{(1)}=-A,\quad \psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211}+i\psi_{21-1})$$

结论：在微扰一级近似下，能级 $E_2^{(0)}$ 分裂为三条等间距的能级，即 $E_2^{(0)}\to E_2^{(0)}$，$E_2^{(0)}\pm A$，前一条仍为二重简并（相应于 $\psi_{200}$ 及 $\psi_{210}$），后两条不简并.

**8.16**　设在 $H_0$ 的表象中，$H$ 的矩阵表示为 $\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & 0 & a\\ 0 & E_2^{(0)} & b\\ a^* & b^* & E_3^{(0)}\end{pmatrix}$，$E_1^{(0)}<E_2^{(0)}<E_3^{(0)}$，用微扰论求能量的二级修正.

**解**：取

$$H_0=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & 0 & 0\\ 0 & E_2^{(0)} & 0\\ 0 & 0 & E_3^{(0)}\end{pmatrix},\qquad H'=\begin{pmatrix}0 & 0 & a\\ 0 & 0 & b\\ a^* & b^* & 0\end{pmatrix}$$

由非简并微扰论公式

$$E_n^{(2)}=\sum_m{}' \frac{|H'_{nm}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

$$E_1^{(2)}=\frac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}},\quad E_2^{(2)}=\frac{|b|^2}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}},\quad E_3^{(2)}=\frac{|a|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|b|^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

**8.17**　一个体系无微扰时，有两条能级，其中一条是二重简并的. $H_0=\begin{pmatrix}E_1^{(0)}&0&0\\0&E_1^{(0)}&0\\0&0&E_2^{(0)}\end{pmatrix}$，$E_2^{(0)}>E_1^{(0)}$，加入微扰后，Hamilton 量表示为 $H=\begin{pmatrix}E_1^{(0)}&0&a\\0&E_1^{(0)}&b\\a^*&b^*&E_2^{(0)}\end{pmatrix}$.

(1) 用微扰论求 $H$ 的本征值，准确到二级近似. (2) 把 $H$ 严格对角化后，求 $H$ 的精确本征值.

**解**：(1)取

$$H_0=\begin{pmatrix}E_1^{(0)}&0&0\\0&E_1^{(0)}&0\\0&0&E_2^{(0)}\end{pmatrix},\qquad H'=\begin{pmatrix}0&0&a\\0&0&b\\a^*&b^*&0\end{pmatrix}.$$

在 $E_1^{(0)}$ 的简并子空间中，$H'=\begin{pmatrix}0&0\\0&0\end{pmatrix}$，故 $E_1^{(1)}=0$(二重根)，由简并微扰论，在 $E_1^{(1)}$ 的二维子空间中

$$A=\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\begin{pmatrix}|a|^2&ab^*\\a^*b&|b|^2\end{pmatrix}$$

由 $\det|A-E_1^{(2)}|=0$ 解出

$$E_1^{(2)}=0,\qquad E_1^{(2)}=\frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

故

$$E_1=\begin{cases}E_1^{(0)}\\E_1^{(0)}+\dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\end{cases}$$

$E_2^{(0)}$ 能级由非简并理论

$$E_2=E_2^{(0)}+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}$$

(2) $H$ 的严格解由下式决定

$$\det|H-E|=0$$

解出

$$E = E_1^{(0)}$$

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

**8.18** 讨论和计算氢原子基态的 Stark 效应.

**解**：取外电场 $\varepsilon$ 沿 $z$ 轴方向，则

$$H' = e\varepsilon z$$

由于氢原子基态非简并，所以

$$E_1^{(1)} = \langle 100 | H' | 100 \rangle = 0$$

这是由于 $H'$ 为奇宇称算符.

$$E_1^{(2)} = e^2\varepsilon^2 \sum_{n\neq 1}\sum_{l,m} \frac{|\langle 100 | z | nlm \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} = \frac{1}{\sqrt{3}} e^2\varepsilon^2 \sum_{n\neq 1} \frac{A_n^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} < 0$$

其中

$$A_n = \int_0^\infty R_{10}^* R_{n1} r^3 \, dr$$

$$E_n^{(0)} = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}, n = 1, 2, 3, \cdots$$

故 $E_1 < E_n$，$(n>1)$加入电场后氢原子的能级降低.

**8.19** 氢原子处于一个沿 $z$ 轴的电场 $\varepsilon$ 和沿 $x$ 轴的磁场 $H$ 中. 这两个场在能级上的效应是可比较的. 若氢原子处于主量子数 $n=2$ 的态. 试求一阶微扰能量修正. (为简明，不考虑自旋)

**解**：由题意可知，微扰 Hamilton 量为

$$H' = \frac{eB}{2mc}\hat{L}_x + e\varepsilon\hat{z}$$

对 $n=2$，$E_n$ 四重简并. 简并态为 $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$.

由公式

$$(L_x \pm iL_y) | l, m \rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}\hbar | l, m \pm 1 \rangle$$

可知

$$L_x | l, m \rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar | l, m+1 \rangle + \frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar | l, m-1 \rangle$$

即有

$$\hat{L}_x | 0, 0 \rangle = 0$$

$$\hat{L}_x | 1, 1 \rangle = \hat{L}_x | 1, -1 \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar | 1, 0 \rangle$$

$$\hat{L}_x \mid 1,0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar(\mid 1,1\rangle + \mid 1,-1\rangle)$$

又因为

$$\cos\theta \mid l,m\rangle = a_{lm} \mid l+1,m\rangle + a_{l-1,m} \mid l-1,m\rangle$$

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

所以有

$$\langle 210 \mid r\cos\theta \mid 200\rangle = \langle 200 \mid r\cos\theta \mid 210\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\langle r\rangle$$

式中$\langle r\rangle = \int_0^\infty rR_{20}R_{21}r^2\mathrm{d}r$，$z = r\cos\theta$ 的其余矩阵元为零. 于是 $H'$ 在$\{\mid 200\rangle, \mid 210\rangle, \mid 211\rangle, \mid 21-1\rangle\}$子空间中的矩阵为

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}e\varepsilon\langle r\rangle & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}e\varepsilon\langle r\rangle & 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

令 $\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}}e\varepsilon\langle r\rangle$，$\beta = \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc}$，由 $H'$ 的本征方程可知其久期方程为

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & -E^{(1)} & \beta & \beta \\ 0 & \beta & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & \beta & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

得 $E^{(1)} = 0$(两重根)，及 $E^{(1)} = \pm\sqrt{2\beta^2 + \alpha^2}$.

**8.20**　两个非全同粒子，每个质量都为 $m$，被禁闭在长为 $L$ 的一维不可穿透的盒中. 系统三个最低能态的波函数和能级是什么？若加入一个 $V_{12} = \lambda\delta(x_1 - x_2)$形式的相互作用势，计算这三个态的能量到 $\lambda$ 第一级及它们的波函数到 $\lambda$ 零级.

**解**：两个粒子非全同，故系统最低三个能态和相应的能级分别为

$$E_{11} = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}, \quad \psi_{11} = \frac{2}{L}\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{\pi x_2}{L}$$

$$E_{12} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, \quad \psi_{12} = \frac{2}{L}\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{2\pi x_2}{L}$$

$$E_{21}=\frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2},\quad \psi_{21}=\frac{2}{L}\sin\frac{2\pi x_1}{L}\sin\frac{\pi x_2}{L}$$

$\psi_{12}$，$\psi_{21}$表示有一个粒子处于基态，另一个粒子处于第一激发态.

当两个粒子都处于基态(系统的基态)时，能量一级修正为

$$E^{(1)}=\langle\psi_{11}\mid V_{12}\mid\psi_{11}\rangle=\frac{4\lambda}{L^2}\int_0^L\sin^4\left(\frac{\pi x_1}{L}\right)\mathrm{d}x_1=\frac{3\lambda}{2L}$$

零级波函数仍为 $\psi_{11}$.

当有一个粒子处于激发态时，能级是两重简并的，故用简并微扰.

$$\iint\psi_{12}^*V_{12}\psi_{12}\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2=\iint\psi_{21}^*V_{12}\psi_{21}\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2=\frac{4}{L^2}\lambda\int_0^L\sin^2\frac{\pi x_1}{L}\sin^2\frac{2\pi x_1}{L}\mathrm{d}x_1=\frac{\lambda}{L}$$

$$\iint\psi_{12}^*V_{12}\psi_{21}\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2=\iint\psi_{21}^*V_{12}\psi_{12}\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2=\frac{\lambda}{L}$$

故此久期方程为

$$\det\begin{vmatrix}\frac{\lambda}{L}-E^{(1)} & \frac{\lambda}{L}\\ \frac{\lambda}{L} & \frac{\lambda}{L}-E^{(1)}\end{vmatrix}=0$$

得到，$E_+^{(1)}=\frac{2\lambda}{L}$，$E_-^{(1)}=0$

对应的零级波函数为

$$\phi_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12}\pm\psi_{21})$$

**8.21**　考虑由下列 Hamilton 量描述的三能级系统：$H=H_0+\lambda H'$，$H_0$ 的本征态为$|1\rangle$，$|2\rangle$，$|3\rangle$，相应的本征值分别为 $\theta$，$\Delta$，$\Delta$.

(1) 在 $H_0$ 表象写出 $H'$的 $3\times3$ 矩阵表示($\lambda$ 为实数)；

(2) 用微扰论计算 $H$ 的能谱时，发现准确到 $\lambda$ 的最低级近似时，$H$ 的本征态为$|1\rangle$，$|\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle\pm|3\rangle)$，相应的本征值为

$$E_1=-\frac{\lambda^2}{\Delta}+O(\lambda^3),E_+=\Delta+\lambda+\frac{\lambda^2}{\Delta}+O(\lambda^3),E_-=\Delta-\lambda+O(\lambda^3)$$

请尽可能多地确定(1)中 $H'$的矩阵元.

**解**：(1) 因 $\lambda$ 为实数，$H'$为厄米算符，所以 $H'$的以$|1\rangle$，$|2\rangle$，$|3\rangle$为基矢的矩阵元可一般地写为

$$H'=\begin{pmatrix}a & d & e\\ d^* & b & f\\ e^* & f^* & c\end{pmatrix}$$

其中 $a,b,c$ 为实数，$\begin{pmatrix} b & f \\ f^* & c \end{pmatrix}$ 是以 $|2\rangle,|3\rangle$ 为基矢的 $H'$ 的矩阵元.

(2) 因为 $|2\rangle,|3\rangle$ 是简并态，根据简并微扰论可知，相应的能量一级修正值，正好是 $H'$ 在修正后的零级波函数的平均值，故有

$$\langle +|H'|+\rangle = 1,\ \langle -|H'|-\rangle = -1$$

从 $|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle$ 表象转入 $|1\rangle,|+\rangle,|-\rangle$ 表象时，应有

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & d & e \\ d^* & b & f \\ e^* & f^* & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & \frac{d+e}{\sqrt{2}} & \frac{d-e}{\sqrt{2}} \\ \frac{d^*+e^*}{\sqrt{2}} & 1 & 0 \\ \frac{d^*-e^*}{\sqrt{2}} & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

由上式可知

$$\begin{pmatrix} b & f \\ f^* & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

考虑到包括二级微扰修正后的能量应为

$$E_1 = \lambda a + \frac{\lambda^2 |d+e|^2}{2(0-\Delta)} + \frac{\lambda^2 |d-e|^2}{2(0-\Delta)} + O(\lambda^3)$$

$$E_2 = \Delta + \lambda + \frac{\lambda^2 |d+e|^2}{2\Delta} + O(\lambda^3)$$

$$E_3 = \Delta - \lambda + \frac{\lambda^2 |d-e|^2}{2\Delta} + O(\lambda^3)$$

与题中的条件比较，得

$$|d+e| = \sqrt{2},\quad |d-e| = 0,\quad a = 0$$

在 $|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle$ 表象中 $H'$ 的矩阵为

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta} & \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\delta} & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\delta} & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

# 第九章　电磁作用分析和重要应用

**9.1**　质量为 $m$，电荷为 $q$ 的非相对论粒子在电磁场中运动时，Hamilton 量算符为 $H=\frac{(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2}{2m}+q\phi$，其中 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$，$\phi(\boldsymbol{r},t)$ 是电磁场的矢势和标势，$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 是正则动量算符，定义速度算符 $\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]$，求 $\boldsymbol{v}$ 的具体表示式以及它的各分量之间的对易关系.

**解**：$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},\frac{(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2}{2m}+q\phi]=\frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2]$

注意到 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 对易，且 $[x_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}$，有

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m\mathrm{i}\hbar}\times 2(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})=\frac{1}{m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}) \tag{1}$$

另外，利用

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F(\boldsymbol{r})$$

可有

$$[v_x,v_y]=-\frac{q}{m^2}\{[p_x,A_y]+[A_x,p_y]\}$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2}(\nabla\times\boldsymbol{A})_z=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2}B_z$$

因此，速度算符各分量的对易关系可表示为

$$[v_\alpha,v_\beta]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma \tag{2}$$

或者

$$\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2}\boldsymbol{B} \tag{2'}$$

利用上式，容易证明

$$[\boldsymbol{v},v^2]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{3}$$

**9.2**　质量为 $m$，电荷为 $q$ 的非相对论粒子在电磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中运动，定义机械角动量算符 $\boldsymbol{L}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times m\boldsymbol{v}-m\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r})$，$\boldsymbol{v}$ 为(机械)速度算符，求 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}$，$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}$.

**解**：Hamilton 量算符可写为

$$H=\frac{(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2}{2m}=\frac{1}{2}mv^2 \tag{1}$$

利用 9.1 题(3)中$\boldsymbol{v}$与$v^2$的对易关系，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v},H]=\frac{q}{2m}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{2}$$

因为

$$\boldsymbol{L}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times m\boldsymbol{v}-m\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r})$$

所以

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}&=\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{v}+\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)\\&=\frac{q}{4}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})-\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})-(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{r}+(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})\times\boldsymbol{r}]\end{aligned}$$

令$\boldsymbol{F}=\frac{q}{2}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$，则有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{2}[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}-\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{r}] \tag{3}$$

**9.3**　在非相对论情况下，自由电子的磁矩为$\boldsymbol{\mu}_s$处于恒定均匀外磁场中. 问

(1) 系统的 Hamilton 量形式如何(设磁场为$B_z$).

(2) 如果在$y$轴方向再加一个常磁场$B_y$，则系统的 Hamilton 量形式又如何.

(3) 设为一般磁场，确定算符$\frac{\mathrm{d}\mu}{\mathrm{d}t}$的形式.

**解**：(1) 系统的 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$$

其中

$$\boldsymbol{\mu}_s=-\frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}=-\frac{e}{m}\boldsymbol{s}$$

若取$\boldsymbol{A}=-B_zy\boldsymbol{e}_x$，$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=B_z\boldsymbol{e}_z$，则有

$$H=\frac{1}{2m}(p_x-eB_zy)^2+\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2m}p_z^2+\frac{e\hbar}{2m}B_z\sigma_z \tag{1}$$

(2) 在(2)的条件下，我们可取$\boldsymbol{A}=-(B_zy\boldsymbol{e}_x+B_yx\boldsymbol{e}_z)$，于是有

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=B_y\boldsymbol{e}_y+B_z\boldsymbol{e}_z \tag{2}$$

$$H=\frac{1}{2m}(p_x-eB_zy)^2+\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2m}(p_z-eB_yx)^2+\frac{e\hbar}{2m}(B_y\sigma_y+B_z\sigma_z) \tag{3}$$

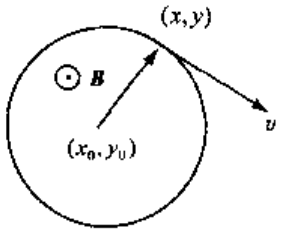
(3) 一般情况下

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\mu}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mu,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2[\sigma_\alpha e_\alpha,\sigma_\beta B_\beta]\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2e_\alpha B_\beta[\sigma_\alpha,\sigma_\beta]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2 2\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}e_\alpha B_\beta\sigma_\gamma\end{aligned}$$

$$= \frac{e}{2m}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{\mu}$$

**9.4** 质量为 $\mu$，电荷为 $q$ 的粒子，在沿 $z$ 轴方向的均匀磁场作用下在 $x,y$ 平面上运动，定义轨道中心算符 $x_0=x+\frac{1}{\omega}v_y$，$y_0=y-\frac{1}{\omega}v_x$，其中 $\omega=qB/\mu$，说明 $x_0,y_0$ 的经典力学的意义，并证明它们是运动常数.



题 9.4 图

**解**：在经典力学中，粒子受 Lorentz 力的作用，将作匀速圆周运动，如图(9.4)所示($q>0$). 设 $\boldsymbol{r}_0(x_0,y_0)$ 为轨道中心，则轨道半径为 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|$，角速度和速度分别为

$$\boldsymbol{\omega}=(0,0,-\omega),\quad \boldsymbol{v}=\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$$

因此

$$v_x=\omega_y(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_z-\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_y=\omega(y-y_0)$$
$$v_y=\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_x-\omega_x(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_y=-\omega(x-x_0)$$

也即

$$x_0=x+\frac{1}{\omega}v_y,\qquad y_0=y-\frac{1}{\omega}v_x \tag{1}$$

将 $\boldsymbol{v}$ 换成算符，即得轨道中心算符 $x_0=x+\frac{1}{\omega}v_y$，$y_0=y-\frac{1}{\omega}v_x$，$\omega$ 的构造式可以利用“Lorentz 力等于向心力”这个条件得出.

根据 9.1 和 9.2 题的结果有：

$$[x,v_x]=\left[x,\frac{1}{\mu}(p_x-qA_x)\right]=\frac{1}{\mu}[x,p_x]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}$$
$$[y,v_y]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu} \tag{2}$$
$$[x,v_y]=[y,v_x]=0$$

$$[v_x,v_y]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{\mu^2}B_z=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\frac{qB}{\mu}=\frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{\mu} \tag{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v},H]=\frac{q}{2\mu}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{4}$$

因此

$$[x_0,y_0]=\frac{1}{\omega}[v_y,y]-\frac{1}{\omega}[x,v_x]-\frac{1}{\omega^2}[v_y,v_x]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu\omega} \tag{5}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x_0=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v_y=v_x+\frac{q}{2\mu\omega}[(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})_y-(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})_y]$$
$$=v_x+\frac{1}{2B}[\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}]_y=v_x-v_x=0 \tag{6}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}y_0=\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}-\frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v_x=v_y-\frac{1}{B}[\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}]_x=v_y-v_y=0 \tag{7}$$

由以上三式可知：轨道中心算符 $x_0$，$y_0$ 为运动常数(守恒量)，这与经典力学一致；$x_0$ 和 $y_0$ 是不对易的，不能同时取确定值. 由测不准关系

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqslant\frac{1}{2}|\overline{[A,B]}|$$

可知

$$\Delta x_0\cdot\Delta y_0\geqslant\frac{1}{2\mu|\omega|}=\frac{\hbar}{2|q|B} \tag{8}$$

在经典力学中，轨道中心当然是可以精确确定的.

**9.5**　已知质量为 $m$，电荷为 $q$ 的粒子处于态 $\psi(\boldsymbol{r})$ 时，其电荷密度和电流密度分别为 $\rho(\boldsymbol{r})=q\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$，$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*]$. 问如何引入电荷密度和电流密度算符？解释这两个算符的物理意义，并证明它们的平均值就是这里的表达式.

**解**：在量子力学中，“带电粒子”是当作点电荷对待的，因此，当粒子位置是 $\boldsymbol{r}$ 时，$\boldsymbol{r}'$ 处的电荷密度为

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')=q\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

此即定义为电荷密度算符. 若粒子处于 $\psi(\boldsymbol{r})$ 所描述的状态，则粒子在 $\boldsymbol{r}$ 附近 $\mathrm{d}\tau$ 体积元中出现的概率为 $\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$，由此造成 $\boldsymbol{r}'$ 处的平均电荷密度为

$$\begin{aligned}\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')\rangle&=\int\psi^*(\boldsymbol{r})q\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau\\&=q\psi^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')=\rho(\boldsymbol{r}')\end{aligned}$$

在经典物理学中，电流密度 $\boldsymbol{j}$ 为

$$\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}\rho\boldsymbol{p}$$

换成量子力学算符，并使其成为厄米算符，即得

$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{2m}(\hat{\rho}\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\hat{\rho})=\frac{q}{2m}[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]$$

当粒子处于 $\psi(\boldsymbol{r})$ 状态，$\boldsymbol{r}'$ 处的平均电流密度为

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\rangle&=\frac{q}{2m}\int\psi^*(\boldsymbol{r})[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}\int\psi^*(\boldsymbol{r})[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla+\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi(\boldsymbol{r}')-\psi(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi^*(\boldsymbol{r}')]\end{aligned}$$

**9.6**　一个带电粒子自旋角动量 $S=s(s+1)\hbar^2$，其中 $s=1/2$，设该粒子的磁矩为 $M$

$=cS$,$c$ 为常数，该粒子的量子态可以用自旋空间来描述，其坐标基矢可以取 $S_z$ 的两个本征态$|\uparrow\rangle$,$|\downarrow\rangle$,且当 $t=0$ 时,体系状态$|\psi(0)\rangle=|\uparrow\rangle$,该粒子沿 $y$ 轴运动，通过一个沿 $y$ 轴的均匀磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{e}_y$. 求

(1) $|\psi(t)\rangle$的表达式；

(2) 自旋算符的三个分量的平均值作为时间函数的表达式.

**解**：(1) 此粒子的 Hamilton 量可以写为

$$H=-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{B}=-cB_0S_y=-\hbar\omega\sigma_y,\quad \omega=\frac{cB_0}{2} \tag{1}$$

则$|\psi(t)\rangle$可写为

$$|\psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\sigma_y}|\uparrow\rangle$$

由公式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\sigma_y}=\cos\theta+\mathrm{i}\sin\theta\sigma_y \tag{2}$$

且注意到 $\sigma_y|\uparrow\rangle=\mathrm{i}|\downarrow\rangle$,则$|\psi(t)\rangle$的表达式为

$$|\psi(t)\rangle=\cos(\omega t)|\uparrow\rangle-\sin(\omega t)|\downarrow\rangle \tag{3}$$

(2) 自旋的三个分量作为时间函数的表达式可写为

$$\langle S_x\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\langle\sigma_x\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\langle\psi(t)|\sigma_x|\psi(t)\rangle=-\frac{\hbar}{2}\sin(2\omega t)=-\frac{\hbar}{2}\sin(cB_0t) \tag{4}$$

计算时，可以利用 $\sigma_x|\uparrow\rangle=|\downarrow\rangle$和 $\sigma_x|\downarrow\rangle=|\uparrow\rangle$.

$$\langle S_y\rangle_t=0;\qquad \langle S_z\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\cos(cB_0t) \tag{5}$$

**9.7** 设带电粒子在相互垂直的均匀电场 $\epsilon$ 和均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动，求能谱及其波函数(取磁场方向为 $z$ 轴方向，电场方向为 $x$ 轴方向).

**解**：(1) 取 $\boldsymbol{A}=B_0x\boldsymbol{e}_y$，$\varphi=-E_0x$,则此粒子的 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2+q\varphi=\frac{1}{2m}[p_x^2+(p_y-qB_0x)^2+p_z^2]-qE_0x$$

因 $H$ 中不含 $y$,$z$,故 $p_y$,$p_z$ 与 $H$ 对易，为守恒量，在式中可以直接用其本征值代替. 将 Hamilton 量整理为

$$\begin{aligned}H&=\frac{1}{2m}p_x^2+\frac{q^2B_0^2}{2m}\left(x-\frac{p_y}{qB_0}-\frac{mE_0}{qB_0^2}\right)^2+\frac{1}{2m}p_z^2-\frac{mE_0^2}{2B_0^2}-\frac{p_yE_0}{B_0}\\&=\frac{1}{2m}p_\xi^2+\frac{m\omega^2\xi^2}{2}+\frac{1}{2m}p_z^2-\frac{mE_0^2}{2B_0^2}-\frac{p_yE_0}{B_0}\end{aligned}$$

其中 $p_\xi=p_x$,$\xi=\left(x-\frac{p_y}{qB_0}-\frac{mE_0}{qB_0^2}\right)$为一对新的共轭变量，$\omega=\frac{qB_0}{m}$，将 $H$ 的表达式同一维谐振子作比较，可得出 $H$ 的本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2m}p_z^2-\frac{mE_0^2}{2B_0^2}-\frac{p_yE_0}{B_0}$$

由于其中含有 $p_z, p_y$，因此简并度是无穷的.

能量本征态为

$$\psi_{n,p_y,p_z}(\boldsymbol{r}) = c\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\xi^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(yp_y+zp_z)}$$

归一化常数为 $c=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}(2^n n!)^{-1/2}$.

**9.8** 设带电粒子在均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 及三维各向同性谐振子场 $V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2 r^2$ 中运动，求能谱公式.

**解**：在直角坐标系中求解，取 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$；矢势 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})=\frac{1}{2}(-By\boldsymbol{e}_x+Bx\boldsymbol{e}_y)$，为对称规范. 则体系的 Hamilton 算符为

$$\begin{aligned}H&=\frac{1}{2\mu}\left[\left(p_x+\frac{qB}{2}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2}x\right)^2+p_z^2\right]+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2\\&=\frac{p^2}{2\mu}-\frac{qB}{2\mu}L_z+\frac{q^2B^2}{8\mu}(x^2+y^2)+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2\\&=H_1+H_2-\omega L_z\end{aligned}$$

其中

$$H_1=\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2z^2;\ H_2=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{1}{2}\mu(\omega^2+\omega_0^2)(x^2+y^2);\ \omega=\frac{qB}{2\mu}$$

$H_1$ 为沿 $z$ 轴方向运动的一维谐振子的 Hamilton 量，其本征值为

$$E_k=\left(k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0,\quad k=0,1,2,\cdots$$

$H_2$ 为 $x$-$y$ 平面上的二维各向同性谐振子的 Hamilton 量，其本征值为

$$E_{n,m}=(2n+1+|m|)\hbar\omega',\quad n=0,1,2,\cdots$$
$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots;\quad \omega'=(\omega^2+\omega_0^2)^{1/2}$$

$L_z$ 的本征值为 $m\hbar$，$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$

由于 $\{H_1,H_2,L_z\}$ 相互独立，相互对易，它们构成了体系的一个力学量完全集，故体系能谱为

$$E_{k,n,m}=(k+1/2)\hbar\omega_0+(2n+1+|m|)\hbar\omega'-m\hbar\omega$$

**9.9** 一个处于磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中的无自旋带电粒子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{P}-e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2$$

其中 $\boldsymbol{P}=(P_x,P_y,P_z)$ 是粒子位置 $\boldsymbol{r}$ 的共轭动量. 设 $\boldsymbol{A}=-B_0y\boldsymbol{e}_x$，对应着一个均匀磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{e}_z$，(1) 证明 $P_x$ 和 $P_z$ 是运动恒量；(2) 求该体系的能级.

**解**：(1) 体系的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}[(P_x+eB_0y)^2+P_y^2+P_z^2]$$

显然

$$[P_x,H]=0,\quad [P_z,H]=0$$

所以 $P_x$ 和 $P_z$ 是守恒量

(2) 我们取

$$\omega_0=\frac{eB_0}{m},\quad \xi=y+\frac{1}{eB_0}p_x,\quad P_\xi=P_y$$

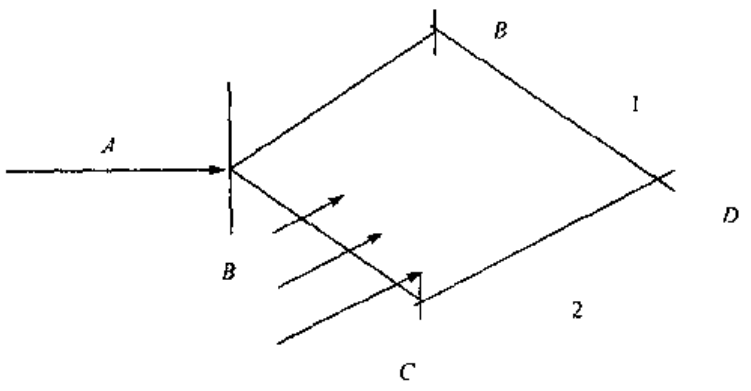
显然有$[\xi,p_y]=i\hbar$,故可将 $\xi$ 与 $p_\xi$ 看作一对共轭变量

$$H=\frac{1}{2m}p_\xi^2+\frac{1}{2}m\omega_0^2\xi^2+\frac{1}{2m}p_z^2$$

则

$$E_{n,p_z}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0+\frac{p_z^2}{2m},\quad n=0,1,2,\cdots,\quad -\infty<p_z<\infty$$

**9.10** 在一次经典的台面试验中，一单色中子束($\lambda=1.4445$Å)在干涉仪的 $A$ 点发生布拉格反射分成两束，然后(经过另一次反射)又交汇于 $D$ 点. 其中一束穿过一磁场强度为 $\boldsymbol{B}$ 的横向磁场区域，经过的距离为 $l$(如图). 假定从 $A$ 到 $D$ 的两条路径除有无磁场外完全一样. 在中子极化方向平行或反平行与磁场的情况下，找出 $D$ 点强度依赖于 $\boldsymbol{B}$，$l$ 及中子波长的明显表达式.




题 9.10 图

**解**：此题属于旋量干涉问题，在磁场区域内，对于不带电荷的中子，有

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}\right)\psi=E\psi$$

设 $\boldsymbol{B}$ 为均匀恒定磁场，则有

$$\psi(t_1)=\exp\left[-\mathrm{i}\frac{H(t_1-t_0)}{\hbar}\right]\psi(t_0),(t_0\text{ 为进入磁场时刻},t_1\text{ 为出磁场时刻})$$

设 $\psi(t)\equiv\psi(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{s},t)$，$\psi(\boldsymbol{r},t)$，$\psi(\boldsymbol{s},t)$ 分别表示 $\psi$ 空间部分和自旋部分，则有

$$\psi(\boldsymbol{r},t_1)=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)(t_1-t_0)\right]\psi(\boldsymbol{r},t_0),(\text{自由粒子波函数})$$

$$\psi(\boldsymbol{s},t_1)=\exp\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t_1-t_0)]\psi(\boldsymbol{s},t_0)$$

干涉是由于磁场使自旋波函数改变引起的.

由 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 为自由粒子波函数,可得

$$t_1-t_0=\frac{l}{v}=\frac{ml}{\hbar k}$$

$$\psi(\boldsymbol{s},t_1)=\exp\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t_1-t_0)]\psi(\boldsymbol{s},t_0)$$

$$=\exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0)$$

所以在 $D$ 点产生的干涉强度正比与

$$|\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{s},t)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t)|^2\propto|\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{s},t)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t)|^2$$

$$=|\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t_0)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t_1)|^2$$

由

$$\exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]=\cos\left(\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2}\right)+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{B}\sin\left(\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2}\right)$$

及 $\sigma$ 与 $\boldsymbol{B}$ 同向或反向假定,有

$$|\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t_0)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t_1)|^2=\left(1+\cos\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2}\right)^2+\sin^2\frac{2\pi\mu ml\lambda B}{h^2}$$

$$=4\cos^2\frac{\pi\mu ml\lambda B}{h^2}$$

所以 $D$ 点干涉强度$\propto\cos^2\dfrac{\pi\mu ml\lambda B}{h^2}$,$\mu$ 为中子内禀磁矩的数值,$\mu<0$.

**9.11**　考虑一个无限长的螺线管,其中通有电流 $I$,结果在螺线管内产生了一个均匀恒定的磁场,假定在螺线管外的区域中,电荷为 $e$,质量为 $m$ 的粒子的运动可以用 Schrödinger 方程描述. 假定对于 $I\equiv0$,方程的解由下式给出

$$\psi_0(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_0t}\psi_0(x)$$

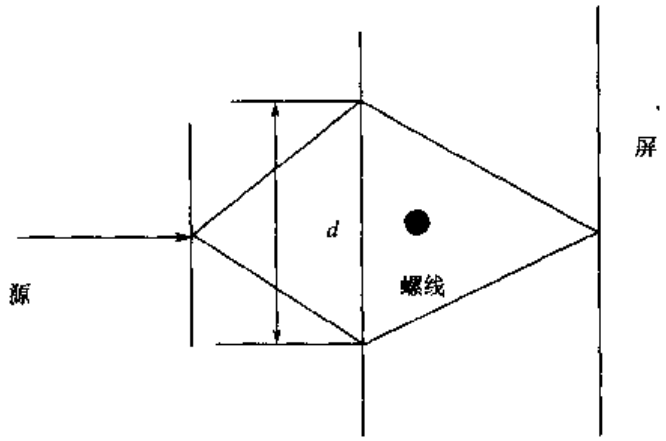
(1) 对 $I\neq0$ 情况给出并求解螺线管外区域中的 Schrödinger 方程 ;

(2) 考虑一个为上述粒子准备的双缝衍射实验(如下图),假定两缝间距 $d$ 远大于螺线管直径. 计算由于 $I\neq0$ 的螺线管的存在而使衍射图像在屏上产生的移动 $\Delta S$,假定 $l\gg\Delta S$($l$ 为双缝到屏的距离).

提示:$\psi(x,t)=\psi_0(x,t)\psi_A(x)$,其中$(\nabla-\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(x))\psi_A(x)=0$　$(\hbar=1)$

解:(1) 作替换 $\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}$,即可由无电磁场情况下的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_0(x,t)=\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(x)\right]\psi_0(x,t),\quad(\hbar=1)\tag{1}$$




题 9.11 图

得到有电磁场存在的 Schrödinger 方程(最小电磁耦合原理)

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\nabla-e\boldsymbol{A})^2+V(x)\right]\psi(x,t) \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=0$,

作变换,令

$$\psi(x,t)=\psi_1(x,t)\exp\left(\mathrm{i}\int_{x_0}^{x}e\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)$$

由式(2)则有

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(x,t)=\left[\frac{p^2}{2m}+V(x)\right]\psi_1(x,t)$$

由题意可知

$$\psi_1(x,t)=\psi_0(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_0t}\psi_0(x)$$

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_0t}\psi_0(x)\exp\left(\mathrm{i}\int_{x_0}^{x}e\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)$$

(2) 由题设条件可知属于 Bohm-Aharonov 效应问题.

未加电流时对屏上任一点,其概率振幅 $f$ 为 $f=f_+ + f_-$,其中 $f_+$,$f_-$ 分别为上下孔的贡献部分.

加上电流后

$$f_+=\exp\left(\mathrm{i}\int_{c_+}^{x}e\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_+,\qquad f_-=\exp\left(\mathrm{i}\int_{c_-}^{x}e\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_-$$

其中 $c_+$,$c_-$ 分别表示积分路径是由在螺线管上方、下方路径构成. 所以

$$f'=f'_+ + f'_-=\exp\left(\mathrm{i}\int_{c_+}^{x}e\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_+ + \exp\left(\mathrm{i}\int_{c_-}^{x}e\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_-$$

$$\sim\exp\left(\mathrm{i}\oint e\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_- + f_+$$

以上两项已抽出一公共的相位常数，这不影响对干涉图形的讨论. 其中$\oint e\boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}$是沿任一包围螺线管的回路的环积分（沿逆时针方向）

$$\oint e\boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}=e\Phi\ (\Phi\text{磁通量})$$

所以引入通电螺线管后相当于下孔对于屏上一点的概率振幅贡献一个相位因子$e\Phi$. 仿光学中杨氏干涉公式推导，可得衍射图像移动$\Delta S$，由$l\gg d, l\gg\Delta S$，有

$$\Delta S\cdot\frac{d}{l}\cdot k=e\Phi\quad (k\text{为中子波数})$$

$$\Delta S=\frac{el\Phi}{dk}=\frac{el\Phi}{d\sqrt{2m_nE_0}}\quad (\hbar=1)$$

上式为非相对论的，$m_n$为中子质量.

**9.12**　两个自旋为1/2，带等量但异号电荷的体系，设粒子的自旋算符为$\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_2$，自旋-自旋耦合为$\Delta E_{SS}$，将其放在均匀磁场$\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$中，此时的 Hamilton 量为$H=\frac{\Delta E_{SS}}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)-(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)\cdot\boldsymbol{B}$，其中$\boldsymbol{\mu}_i=g_i\mu_0\boldsymbol{\sigma}_i$是第$i$个粒子的磁矩. 若用 Pauli 算符的二分量本征态来表示体系的四个状态，其自旋波函数为：$\psi_1=\alpha_1\alpha_2$；$\psi_2=A_-\beta_1\alpha_2+A_+\alpha_1\beta_2$；$\psi_3=A_+\beta_1\alpha_2-A_-\alpha_1\beta_2$；$\psi_4=\beta_1\beta_2$，其中$\alpha_i$为$(\sigma_z)_i$的本征值为$+1$的态函数，$\beta_i$为$(\sigma_z)_i$的本征值为$-1$的态函数，$A_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1\pm\frac{\chi}{(1+\chi^2)^{1/2}}\right)^{1/2}$，$\chi=\mu_0B(g_2-g_1)/\Delta E_{SS}$，求

(1) 每个波函数$\psi_i$相应的能量本征值；

(2) 若初态$\psi(0)$中粒子 1 沿$z$轴方向极化，而粒子 2 在$z$方向是非极化的，求粒子的极化与时间的依赖关系$P_{1z}(t)=\langle\psi(t)|\sigma_{1z}|\psi(t)\rangle$；

(3) 分别讨论$\mu_0B/\Delta E_{SS}\gg1$及$\mu_0B/\Delta E_{SS}\ll1$两种情况.

**解**：(1) 系统的 Hamilton 量为

$$H=\frac{\Delta E_{SS}}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)-\frac{\mu_0B}{2}(g_1\sigma_{1z}+g_2\sigma_{2z})\tag{1}$$

注意到

$$\sigma_x\alpha=\beta;\quad \sigma_x\beta=\alpha;\quad \sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta;\quad \sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha$$

则有

$$H\psi_1=\left(\frac{\Delta E_{SS}}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0B\right)\psi_1$$

所以$\psi_1$为$H$的本征态，本征值为

$$E_1=\frac{\Delta E_{SS}}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0B\tag{2}$$

同理

$$H\psi_2=\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(\frac{2A_+}{A_-}-2\chi-1\right)A_-\beta_1\alpha_2+\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(\frac{2A_-}{A_+}+2\chi-1\right)A_+\beta_2\alpha_1$$

因为

$$\frac{2A_+}{A_-}-2\chi=\frac{2A_-}{A_+}+2\chi=2(1+\chi^2)^{\frac{1}{2}}$$

所以

$$H\psi_2=\frac{\Delta E_{SS}}{4}(2\sqrt{\chi^2+1}-1)\psi_2$$

$$E_2=\frac{\Delta E_{SS}}{4}(2\sqrt{\chi^2+1}-1) \tag{3}$$

类似地

$$E_3=-\frac{\Delta E_{SS}}{4}(2\sqrt{\chi^2+1}+1) \tag{4}$$

$$E_4=\frac{\Delta E_{SS}}{4}+\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0 B \tag{5}$$

(2) 因粒子 2 未极化，处于混合态，它可以表示为

$$\xi_2=a\alpha_2+b\beta_2,\ |a|^2=|b|^2=\frac{1}{2}$$

初始时刻 $t=0$ 时，体系波函数为

$$\begin{aligned}\psi(0)&=\alpha_1\xi_2=a\alpha_1\alpha_2+b\alpha_1\beta_2\\&=a\psi_1+b\frac{A_+}{A_+^2+A^2}\psi_2-b\frac{A_-}{A_+^2+A_-^2}\psi_3\\&=a\psi_1+bA_-\psi_2-bA\ \ \psi_3\end{aligned}$$

其中 $A_+^2+A_-^2=1$. 因此

$$\psi(t)=a\psi_1\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1t\right)+bA_+\psi_2\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2t\right)-bA_-\psi_3\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_3t\right)$$

利用

$$\begin{aligned}\sigma_{1z}\psi_1&=\alpha_1\alpha_2\\\sigma_{1z}\psi_2&=-A_-\beta_1\alpha_2+A_+\alpha_1\beta_2\\\sigma_{1z}\psi_3&=-(A_+\beta_1\alpha_2+A_-\alpha_1\beta_2)\end{aligned}$$

得到

$$\begin{aligned}P_{1z}(t)&=\langle\psi(t)|\sigma_{1z}|\psi(t)\rangle\\&=1-\frac{1}{1+\chi^2}\sin^2(\sqrt{1+\chi^2}\Delta E_{SS}t/2\hbar)\end{aligned}$$

(3) 在极限情况下 $\mu_0B/\Delta E_{SS}\gg1$，则 $\chi\gg1$，所以

$$E_1=\frac{\Delta E_{SS}}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0B\sim-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0B$$

$$E_2 = \frac{\Delta E_{SS}}{4}(2\sqrt{\chi^2+1}-1) \sim \frac{\Delta E_{SS}}{4} \times 2\chi = \frac{g_2 - g_1}{2}\mu_0 B$$

$$E_3 = -\frac{\Delta E_{SS}}{4}(2\sqrt{\chi^2+1}+1) \sim -\frac{g_2 - g_1}{2}\mu_0 B$$

$$E_4 = \frac{\Delta E_{SS}}{4} + \frac{g_1 + g_2}{2}\mu_0 B \sim \frac{g_2 + g_1}{2}\mu_0 B$$

$$P_{1z}(t) \sim 1$$

$\mu_0 B/\Delta E_{SS} \ll 1$，则 $\chi \ll 1$，所以

$$E_1 \sim E_4 \sim \frac{\Delta E_{SS}}{4}, \qquad E_2 \sim \frac{\Delta E_{SS}}{4}$$

$$E_3 \sim -\frac{3\Delta E_{SS}}{4}, \qquad P_{1z}(t) \sim 1 - \sin^2\left(\frac{\Delta E_{SS} t}{2\hbar}\right)$$

**9.13**　在一类核磁共振试验中采用：一个自旋为$\frac{1}{2}$，磁矩为 $\mu$ 的粒子处于磁场 $\boldsymbol{B} = B_1\cos(\omega t)\boldsymbol{e}_x - B_1\sin(\omega t)\boldsymbol{e}_y + B_0\boldsymbol{e}_z$ 中，若 $t=0$ 时粒子的自旋沿 $z$ 轴向上，求出 $t>0$ 时粒子自旋沿 $z$ 轴向下的概率.

**解**：体系的 Hamilton 量为

$$H = -\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{1}$$

令 $\omega_0 = +\frac{\mu B_0}{\hbar}$，$\omega_1 = +\frac{\mu B_1}{\hbar}$，则

$$H = -\hbar\omega_0\sigma_z - \hbar\omega_1\begin{bmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{bmatrix} \tag{2}$$

而体系的波函数为

$$|t\rangle = \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} \tag{3}$$

由 Schrödinger 方程 $i\hbar\partial_t|t\rangle = H|t\rangle$，可导出 $a,b$ 的方程

$$\begin{cases} \dot{a} = +i\omega_0 a + i\omega_1 e^{+i\omega t} b \\ \dot{b} = -i\omega_0 b + i\omega_1 e^{-i\omega t} a \end{cases} \tag{4}$$

令

$$\begin{cases} a = \alpha\exp(+i\omega_0 t) \\ b = \beta\exp(-i\omega_0 t) \end{cases} \tag{5}$$

则(4)可以写为

$$\begin{cases} \dot{\alpha} = i\omega_1\exp[i(-2\omega_0+\omega)t]\beta \\ \dot{\beta} = i\omega_1\exp[-i(-2\omega_0+\omega)t]\alpha \end{cases} \tag{6}$$

假设 $\alpha,\beta$ 具有如下形式

$$\begin{cases} \alpha = A_1\exp[i(-2\omega_0+\omega+\Omega)t] \\ \beta = A_2 e^{i\Omega t} \end{cases} \tag{7}$$

其中 $A_1, A_2$ 为常数，则

$$\begin{cases}(-2\omega_0+\omega+\Omega)A_1-\omega_1 A_2=0\\ -\omega_1 A_1+\Omega A_2=0\end{cases} \tag{8}$$

上式有非零解的充要条件是系数行列式为零，从而解出 $\Omega$，

$$\Omega_{\pm}=-\left(-\omega_0+\frac{\omega}{2}\right)\pm\sqrt{(-\omega_0+\omega/2)^2+\omega_1^2} \tag{9}$$

所以 $\beta$ 的一般形式为

$$\beta=A_{2+}\exp(\mathrm{i}\Omega_+ t)+A_{2-}\exp(\mathrm{i}\Omega_- t) \tag{10a}$$

$$\alpha=\frac{1}{\omega_1}[\Omega_+ A_{2+}\exp(\mathrm{i}\Omega_- t)+\Omega\ A_{2-}\exp(\mathrm{i}\Omega_- t)]\exp[\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega)t] \tag{10b}$$

代入初始条件

$$|t=0\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a(0)\\b(0)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha(0)\\\beta(0)\end{bmatrix} \tag{11}$$

可得

$$\frac{1}{\omega_1}(\Omega_+ A_{2+}+\Omega_- A_{2-})=1$$

$$A_{2+}+A_{2-}=0$$

所以

$$A_{2+}=-A_{2-}=\omega_1/(\Omega_+-\Omega_-)=\frac{\omega_1}{2\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}} \tag{12}$$

$$\begin{aligned}b(t)&=\exp(-\omega_0 t)\beta(t)=\exp(-\mathrm{i}\omega_0 t)A_{2+}\cdot[\exp(\mathrm{i}\Omega_+ t)-\exp(\mathrm{i}\Omega_- t)]\\&=\exp(-\mathrm{i}\omega t/2)2\mathrm{i}A_{2+}\cdot\sin\left(t\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}\right)\\&=\frac{\mathrm{i}\omega_1\exp(-\mathrm{i}\omega t/2)}{\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}}\sin\left(t\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}\right)\end{aligned}$$

所求概率为

$$P=|\langle\sigma_z\downarrow|t\rangle|^2$$

所以

$$P=|b(t)|^2=\frac{\omega_1^2\sin^2\left(t\sqrt{(\omega_0-\omega/2)+\omega_1^2}\right)}{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}$$

**9.14** 一个质量为 $m$、电荷为 $q$ 的粒子被束缚在半径为 $R$ 的圆周上运动，讨论下述几种情况的能级：(1) 粒子的运动是非相对论的；(2) 在与圆周垂直的方向上有一个均匀的磁场 $\boldsymbol{B}$；(3) 穿过圆面的磁通量与(2)相同，但磁通被束缚在半径为 $b(b<R)$ 的螺线管内；(4) 在圆面上有一个极强的电场 $\boldsymbol{E}$ 存在 $\left(q|E|\gg\frac{\hbar^2}{\mu R^2}\right)$.

**解**：(1)体系的 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{1}{2I}L_z^2,\quad I=mR^2$$

相应的本征值、本征态为

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2mR^2},\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\theta}$$

(2) 解法一：在直角坐标系中求解，取 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$ 和 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}=-\frac{1}{2}By\boldsymbol{e}_x+\frac{1}{2}Bx\boldsymbol{e}_y$，则有

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2=\frac{1}{2mR^2}L_z^2-\frac{qB}{2m}L_z+\frac{q^2B^2}{8m}R^2$$

$$=\frac{1}{2mR^2}\left(L_z-\frac{qBR^2}{2}\right)^2$$

进一步得

$$E_n=\frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar-\frac{q\Phi}{2\pi}\right)^2,\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots;\quad \Phi=\pi BR^2.$$

相应的本征态为

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\theta}$$

解法二：粒子在圆周上运动，可取 $\boldsymbol{A}=\frac{Br}{2}\boldsymbol{e}_\theta$，则体系的 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2\psi=E\psi$$

作替换 $\psi=\psi'\exp\left[i\frac{q}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x}\right]$，可有

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\psi'=E\psi'$$

由于粒子被束缚在 $r=R$ 的圆上，所以

$$\psi(\theta)=\psi'(\theta)\exp\left[i\frac{q}{\hbar}\int_{r=R}^{x}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x}\right]\propto\psi'(\theta)\exp\left[i\frac{q}{\hbar}RA(R)\theta\right]$$

采用柱坐标系，有

$$\frac{1}{2m}\left(-\frac{i\hbar}{R}\frac{d}{d\theta}\right)^2\psi'(\theta)=E\psi'(\theta)$$

所以

$$\psi'(\theta)\sim e^{ic_1\theta},\ c_1\text{ 为常数}$$

$$\psi(\theta)\sim\exp\left\{i\left[c_1+\frac{q}{\hbar}RA(R)\right]\theta\right\}$$

$$E=\frac{\hbar^2}{2mR^2}c_1^2$$

由周期性条件 $\psi(\theta)=\psi(\theta+2\pi)$，可得

$$\left[c_1+\frac{qRA(R)}{\hbar}\right]\times 2\pi=2n\pi, n\text{ 为整数},$$

所以

$$c_1=n-\frac{qR}{\hbar}A(R)=n-\frac{qR}{\hbar}\frac{BR}{2}=n-\frac{qBR^2}{2\hbar}$$

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n-\frac{qBR^2}{2\hbar}\right)^2=\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n-\frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2$$

$$n=0,\pm1,\pm2,\cdots,\quad \Phi\text{ 为磁通量}$$

(3) 磁场被限制在螺线管内，在管外(包括粒子运动的圆环上)磁场为零，但矢势 $\boldsymbol{A}$ 不为零，$\boldsymbol{A}$ 可取为

$$A_\theta=\Phi/2\pi R,\quad A_\rho=0,\quad A_z=0$$

体系的 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{1}{2m}(P_\theta-qA_\theta)^2=\frac{1}{2mR^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}-qA_\theta R\right)^2$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2$$

能量本征态方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2\psi(\theta)=E\psi(\theta)$$

作规范变换 $\psi(\theta)\to\Psi(\theta)$，则

$$\Psi(\theta)=\psi(\theta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx(\theta)/\hbar}=\psi(\theta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\Phi\theta/2\pi\hbar}$$

其中 $x(\theta)=\frac{\Phi\theta}{2\pi}$.

则 $\Psi(\theta)$ 满足下列方程

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\Psi(\theta)=E\Psi(\theta)$$

其解为

$$\Psi(\theta)\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}n'\theta},\text{且 }E=n'^2\hbar^2/2mR^2$$

而

$$\psi(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(\mathrm{i}n'\theta+\mathrm{i}\frac{q\Phi\theta}{2\pi\hbar}\right)$$

由周期性条件 $\psi(\theta+2\pi)=\psi(\theta)$，可得

$$n'+q\varphi/2\pi\hbar=n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

因此

$$E_n=\frac{n'^2\hbar^2}{2mR^2}=\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n-\frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2,\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

(4) 在静电场作用下，定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}-qRE\cos\theta\right]\psi=\varepsilon\psi$$

若电场很强，$\psi(\theta)$只有在 $\theta$ 很小处不为零，故可做近似 $\cos\theta=1-\frac{1}{2}\theta^2$，代入上式，从而得到定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+\frac{1}{2}qRE\theta^2\right]\psi=(\varepsilon+qRE)\psi$$

有

$$\varepsilon=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-qER,\quad \omega=(qE/mR)^{1/2}$$

**9.15**　自旋为$\frac{1}{2}$，磁矩为 $\mu_0$ 的粒子，在空间分布均匀但随时间变化的磁场 $\boldsymbol{B}(t)$中运动，证明粒子的波函数可以表示成空间波函数和自旋波函数的积，写出它们满足的波动方程.

**解**：体系的 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})-\mu\cdot\boldsymbol{B}(t)=H_0+H_S \tag{1}$$

其中 $H_0=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})$，$H_S=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}(t)=-\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)$

显然 $H_0$ 与自旋无关，而 $H_S$ 只与自旋有关$[H_0,H_S]=0$，所以波函数可以分离变量，写为

$$\psi(\boldsymbol{r},s_z,t)=\varphi(x,y,z,t)\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix} \tag{2}$$

代入 Schrödinger 方程，有

$$\begin{cases}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\varphi(x,y,z,t)=H_0\varphi(x,y,z,t)\\[2ex]\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=-\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}\end{cases} \tag{3}$$

**9.16**　同上题，设沿磁场 $z$ 轴方向，在 $t=0$ 时，自旋波函数为 $\begin{pmatrix}a(0)\\b(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\cos\delta\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sin\delta\end{pmatrix}$，求 $t$ 时刻的波函数，它是自旋沿何方向的本征态吗？在此时自旋分量的平均值为多少？

**解**：由自旋波函数的 Schrödinger 方程知

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=-\mu_0 B(t)\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}\tag{1}$$

进一步有

$$\begin{cases}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a(t)=-\mu_0 B(t)a(t) & (2a)\\ \mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}b(t)=\mu_0 B(t)b(t) & (2b)\end{cases}$$

则

$$\begin{cases}a(t)=c_1\exp\left[\mathrm{i}\dfrac{\mu_0}{\hbar}\displaystyle\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\\ b(t)=c_2\exp\left[-\mathrm{i}\dfrac{\mu_0}{\hbar}\displaystyle\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\end{cases}$$

$c_1,c_2$ 可以由初始条件 $a(0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\cos\delta, b(0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sin\delta$ 确定为

$$c_1=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\cos\delta, c_2=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sin\delta$$

故

$$\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\delta\exp\left[\dfrac{\mathrm{i}\mu_0}{\hbar}\displaystyle\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau-\mathrm{i}\alpha\right]\\ \sin\delta\exp\left[-\dfrac{\mathrm{i}\mu_0}{\hbar}\displaystyle\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau+\mathrm{i}\alpha\right]\end{pmatrix}$$

是自旋沿$(\theta,\varphi)$方向分量的本征态，其中

$$\theta=2\delta,\varphi=2\left(\alpha-\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t B\mathrm{d}\tau\right)$$

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle&=\frac{\hbar}{2}\langle\sigma_x\rangle\\&=\frac{\hbar}{2}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2},\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\right)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix}\\&=\frac{\hbar}{2}\sin(2\delta)\cos\left(\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B\mathrm{d}\tau-2\alpha\right)\end{aligned}$$

同理可得

$$\langle S_y\rangle=-\frac{\hbar}{2}\sin(2\delta)\sin\left(\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B\mathrm{d}\tau-2\alpha\right)$$

$$\langle S_z\rangle=\frac{\hbar}{2}\cos(2\delta)$$

**9.17**　质量为 $m$、电荷为 $q$ 的粒子受到均匀电场的作用. (1) 写出这个系统的含时方程；Schrödinger(2) 证明当粒子处于任意态时，坐标算符的期望值满足 Newton 第二定律；(3) 证明这一结果在还有一个均匀静磁场时也是正确的. 这一结论在

质谱仪，粒子加速器的设计中有用吗？

**解**：(1) 系统的含时 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\psi$$

(2) 因为

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{r}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{r},H]}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{r},\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right]}=\frac{\langle\boldsymbol{p}\rangle}{m}$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{p}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{p},H]}=\overline{\nabla(q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r})}=q\boldsymbol{E}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle\boldsymbol{r}\rangle=q\boldsymbol{E}$$

(3) 这一结果使我们在观测仪器中带电粒子的运动轨迹时，可以直接用经典力学加以处理.

**9.18** 另有一些对 Lamb 移动中电子位置平方平均的粗略估算：(1) 将电子看作均匀带电小球，其经典半径为 $r_0=e^2/\mu c^2$，小球在外静电场中获得势能 $U(r)=V(r)+\frac{1}{6}r_0^2\nabla^2V(r)+\cdots$，其中 $r$ 为小球球心位置，$V(r)=-\frac{e^2}{r}$. 如果把 $r_0^2$ 项看作微扰，计算 Lamb 移动的数值；(2) 如果将 $r_0$ 换成电子的 Compton 波长 $\lambda\!\!\!^{-}=\hbar/\mu c$，计算结果；(3) 如果像 Bogoliubov 那样，将 $r_0$ 换作两者的几何平均值，即令 $r_0^2\to\langle\delta^2\rangle=r_0\lambda\!\!\!^{-}$，再计算结果.

**解**：(1) 根据题意可知

$$U(r)=-\frac{e^2}{r}+H'$$

利用公式

$$\nabla^2\frac{1}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

即得

$$H'=\frac{2\pi}{3}e^2r_0^2\delta(\boldsymbol{r})$$

能量的一级修正等于 $H'$ 在零级波函数中的平均值，即

$$E^{(1)}=\int\psi^*(0)H'\psi(0)\mathrm{d}^3x=\frac{2\pi}{3}e^2r_0^2|\psi^{(0)}(0)|^2$$

例如对于 2p 态

$$\psi_{2p}(0)=0,\qquad E_{2p}^{(1)}=0$$

对于 1s 态

$$|\psi_{1s}^{(0)}(0)|^2=\frac{1}{\pi a_0^3}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{m_ee^2}{\hbar^2}\right)^2$$

因此

$$E_{1s}^{(1)}=\frac{2}{3}\frac{e^2r_0^2}{a_0^3}=\frac{2}{3}\alpha^5m_ec^2\approx 5.1\times10^5\text{eV}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c\approx1/137$ 为精细结构常数.

和电子静质量 $m_ec^2$ 相比，氢原子能级，能级的精细结构，Lamb 移动的数量级之比为 $\alpha^2:\alpha^4:\alpha^6$.

(2) 将 $\lambda^2$ 替换上式中的 $r_0^2$，可得

$$E_{1s}^{(1)}=\frac{2}{3}\frac{e^2\hbar^2}{a_0^3m_e^2c^2}=\frac{2}{3}\alpha^4m_ec^2\approx 9.6\times10^{12}\text{eV}$$

(3) 用 $r_0\lambda$ 代替 $r_0^2$，可得

$$E_{1s}^{(1)}=\frac{2}{3}\frac{e^2r_0\lambda}{a_0^3}=\frac{2}{3}\alpha^5m_ec^2\approx 7.0\times10^{10}\text{eV}$$

# 第十章　势散射理论

**10.1**　质量为 $\mu$ 的粒子被中心势 $V(r)=\frac{\alpha}{r^2}(\alpha>0)$ 散射

(i) 求各分波的相移 $\delta_l$；

(ii) 设作用势：$8\mu\alpha/\hbar^2\ll 1$ 较弱，求相移、散射振幅和截面的表达式；

(iii) 用 Born 近似计算散射振幅和截面，并与 (2) 式结果比较.

**解**：(i) 由于 $V(r)$ 是有心力场，因此散射体系径向波函数 $R_l(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{l(l+1)+2\mu\alpha/\hbar^2}{r^2}\right]R_l=0 \tag{1}$$

其中 $k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}>0$，若令 $\nu(\nu+1)=l(l+1)+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}$，即

$$\nu+\frac{1}{2}=\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\right]^{1/2} \tag{2}$$

则(1)式可写为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{\nu(\nu+1)}{r^2}\right]R_l=0 \tag{3}$$

(3)式在原点的有限的解为

$$R_l=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{\nu+\frac{1}{2}}(kr) \tag{4}$$

故 $R_l$ 在 $r\to\infty$ 处的渐进行为是

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{\nu\pi}{2}\right) \tag{5}$$

又由分波法的普遍理论

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \tag{6}$$

(5)和(6)两式比较得，$l$ 分波的相移 $\delta_l$

$$\delta_l=-\frac{\pi}{2}(\nu-l)=-\frac{\pi}{2}\left\{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\right]^{1/2}-\left(l+\frac{1}{2}\right)\right\} \tag{7}$$

注意，$\delta_l$ 与入射能量 $(E=\hbar^2k^2/2\mu)$ 无关，散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin(\delta_l)P_l(\cos\theta) \tag{8}$$

显然 $f(\theta)\propto\frac{1}{k}$，因此微分截面 $\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\propto\frac{1}{E}$.

(ii) 若$\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\ll\frac{1}{8}$，可以对(2)式和(7)式作近似展开

$$\nu+\frac{1}{2}=\left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2(l+1/2)^2}\right]^{1/2}$$

$$\approx l+\frac{1}{2}+\frac{\mu\alpha}{\hbar^2(l+1/2)} \tag{9}$$

$$\delta_l=-\frac{\pi}{2}(\nu-l)\approx-\frac{\pi\mu\alpha}{(2l+1)\hbar^2} \tag{10}$$

注意：$|\delta_l|\ll1$，故 (8) 可取

$$e^{i\delta_l}\approx1,\quad \sin\delta_l\approx\delta_l$$

从而得到

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)e^{i\delta_l}\sin(\delta_l)P_l(\cos\theta)\approx\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\delta_lP_l(\cos\theta)$$

$$=-\frac{\pi\mu\alpha}{\hbar^2k}\sum_lP_l(\cos\theta)=-\frac{\pi\mu\alpha}{2\hbar^2k\sin\frac{\theta}{2}} \tag{11}$$

计算中利用了公式

$$\frac{1}{\sin\theta/2}=2\sum_lP_l(\cos\theta) \tag{12}$$

微分截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\approx\frac{\pi^2\alpha^2\mu^2}{4\hbar^4k^2\sin^2\theta/2} \tag{13}$$

由于 $\theta\to0$ 处，$\sigma(\theta)\propto\frac{1}{\theta^2}$，总散射截面是发散的.

即使条件$\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\ll\frac{1}{8}$不成立，对足够大的 $l$，式(10)仍成立，因此 $\theta\to0$ 处 $f(\theta)$和 $\sigma(\theta)$的奇异性由式(11)和式(13)所示，总散射截面仍然是发散的，发散是由于角动量 $l$ 很大的分波造成，亦即来自小角度散射，这是长程力散射的固有特点.

(iii) 由 Born 近似得散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2dr=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\int_0^\infty\frac{\sin qr}{qr}dr$$

$$=-\frac{\pi\mu\alpha}{\hbar^2q}=-\frac{\pi\mu\alpha}{2\hbar^2k\sin\theta/2} \tag{14}$$

这与式(11)一致.

附注：式(12)证明如下：

由 $P_l(x)$的母函数公式可知

$$(1+z^2-2xz)^{-\frac{1}{2}}=\sum_lz^lP_l(x)$$

令 $x\to 1$，即得

$$(2-2x)^{-\frac{1}{2}}=\sum_l P_l(x)$$

再令 $x=\cos\theta$，即得 $\sum_l P_l(\cos\theta)=\dfrac{1}{\sqrt{2(1-\cos\theta)}}=\dfrac{1}{2\sin\dfrac{\theta}{2}}$

这就是(12)式.

**10.2**　粒子被势场 $V(r)=\dfrac{a}{r^4}$ $(a>0)$ 散射，求低能极限下(只考虑 s 波)散射的散射长度、相移、散射振幅和截面.

**解**：s 波($l=0$)波函数可以表示成 $\psi=u(r)/r$，　$E\to 0$ 时径向方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u=\frac{2u}{\hbar^2}V(r)u=\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\frac{u}{r^4} \tag{1}$$

边界条件为

$$u(0)=0,\quad u(\infty)\text{ 有界}$$

令 $\xi=\hbar r/\sqrt{2u\alpha}$，式(1)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}u-\frac{u}{\xi^4}=0 \tag{2}$$

容易验证，上式满足边界条件的解为

$$u=\xi\mathrm{e}^{-1/\xi} \tag{3}$$

当 $r\to\infty$，$1/\xi\to 0$，$u(r)$ 的渐进表示为

$$u(r)\approx\xi\left(1-\frac{1}{\xi}\right)=\xi-1=-\left(1-\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu\alpha}}r\right)=-\left(1-\frac{r}{a_0}\right) \tag{4}$$

得到散射长度

$$a_0=\frac{\sqrt{2\mu\alpha}}{\hbar} \tag{5}$$

可得相移(参阅钱伯初，曾谨言. 量子力学习题精选剖析上册 11.6)

$$\delta_0=-ka_0=-\frac{k}{\hbar}\sqrt{2\mu\alpha}=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sqrt{\alpha E} \tag{6}$$

散射振幅

$$f=-a_0=-\frac{\sqrt{2\mu\alpha}}{\hbar} \tag{7}$$

s 波总截面

$$\sigma_0=4\pi|f|^2=\frac{8\pi\mu\alpha}{\hbar^2} \tag{8}$$

**10.3**　对吸引的球方势阱($V=-V_0$，$r<a$；$V=0$，$r>a$)，求出正能量下 $l=0$ 的相移 $\delta_0$ 的能量依赖关系. 由此证明，高能时 $\delta(k)\to\dfrac{maV_0}{\hbar^2k}$，并从 Born 近似得出这个

结果.

**解**：设 $\chi=rR$，则 $l=0$ 分波有

$$\chi''+k'^2\chi=0,\quad k'^2=k^2\left(1+\frac{V_0}{E}\right),\quad r<a \tag{1}$$

$$\chi''+k^2\chi=0,\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},\quad r>a \tag{2}$$

故有

$$\chi=\begin{cases}A'\sin k'r, & r<a\\ A\sin(kr+\delta_0), & r>a\end{cases} \tag{3}$$

由连接条件

$$(\ln\chi)'|_{r=a}=(\ln\chi)'|_{r=a} \tag{4}$$

得，决定 $\delta_0$ 的方程

$$k'\cot k'a=k\cot(ka+\delta_0) \tag{5}$$

高能时，$k\to\infty$，$\frac{k}{k'}\to1$，由(5)式可得 $\cot k'a\approx\cot(ka+\delta_0)$，因此有

$$\delta_0\to(k'-k)a=k\frac{V_0}{2E}a=\frac{maV_0}{\hbar^2k} \tag{6}$$

另一方面，从 Born 近似和分波法相比较(见曾谨言《量子力学》下册 p. 363)得

$$\delta_0\approx-\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)j_0^2(kr)r^2\mathrm{d}r=\frac{2mk_0V_0}{\hbar^2}\int_0^a\frac{\sin^2kr}{k^2}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2mV_0}{\hbar^2k^2}\int_0^{ka}\sin^2t\mathrm{d}t=\frac{mV_0}{\hbar^2k^2}\left[ka-\frac{1}{2}\sin2ka\right] \tag{7}$$

当 $k\to\infty$ 时，$\delta_0\to\frac{mV_0a}{\hbar^2k}$

**10.4** 质量为 $\mu$ 的粒子束被球壳 $V(r)=V_0\delta(r-a)$ 散射，在高能情况下，用 Born 近似散射截面、微分截面、总截面，并讨论 $\theta=0$ 的微分截面.

**解**：散射振幅的 Born 近似公式为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2q}\int_0^\infty V(r)\sin(qr)r\mathrm{d}r \tag{1}$$

其中 $q=2k\sin\frac{\theta}{12}$，$\theta$ 为散射角. 根据 $\delta$ 函数的积分性质，可以算出

$$f(\theta)=-\frac{2\mu V_0a}{\hbar^2q}\sin qa$$

$$=-\frac{2\mu V_0a^2}{\hbar^2}\frac{\sin\left(2ka\sin\frac{\theta}{2}\right)}{2ka\sin\frac{\theta}{2}} \tag{2}$$

在高能条件($ka\gg1$)下，对于一般的散射角 $\theta$，有 $ka\theta\gg1$，上式中 $\sin\left(2ka\sin\frac{\theta}{2}\right)$ 随

着 $\theta$ 角变化而迅速振荡，其平方可以按1/2 对待，因此微分截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\approx\frac{1}{2}\left[\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2 k\sin\theta/2}\right]^2 \tag{3}$$

$\theta\to0$ 处，由(2)式可知应取

$$\sigma(0)=|f(0)|^2=\left(\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}\right)^2 \tag{4}$$

总截面为

$$\sigma_t=\int\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega=2\pi\int_0^\pi\sigma(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta \tag{5}$$

当 $\theta>1/ka$，$\sigma(\theta)$ 即远小于 $\sigma(0)$，因此 $\sigma_t$ 的值主要来自角范围 $\theta\leqslant1/ka$，由此可得

$$\begin{aligned}\sigma_t&\sim2\pi\sigma(0)\int_0^{1/ka}\sin\theta\mathrm{d}\theta\sim\pi\sigma(0)/k^2a^2\\&\sim4\pi\mu^2V_0^2a^2/k^2\hbar^4=2\pi\mu V_0^2a^2/\hbar^2E\end{aligned} \tag{6}$$

**10.5**　推导半径为 $R$ 的刚球散射 s 分波($L=0$)截面的表达式，并讨论高能近似和低能近似下的总截面.

**解**：刚球的作用相当于位势

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

令 s 分波的径向波函数 $R_0(r)=\chi_0(r)/r$，则

$$\chi_0''(r)+k^2\chi_0(r)=0\quad(r>R)$$

$$\chi_0(r)=0\quad(r<R)$$

解 $r>R$ 的方程，得

$$\chi_0(r)=A\sin(kr+\delta_0)\quad(r>R)$$

利用 $r=R$ 时波函数的连续性条件，得

$$A\sin(kr+\delta_0)=0$$

所以

$$\delta_0=n\pi-kR,\quad\sin\delta_0=(-1)^{n+1}\sin kR\quad(n=0,1,2,3,\cdots)$$

于是 s 分波的总截面为

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2kR$$

低能情况下，$k\to0$，$\sigma_t=4\pi R^2$；高能情况下，$k\to\infty$，$\sigma_t=0$

**10.6**　在 Born 近似下计算一个质量为 $m$ 的粒子被 $\delta$ 函数势 $V(r)=g\delta^3(r)$ 散射的微分截面及总截面.

**解**：
$$f(\theta)=-\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}g\int\exp[-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}']\delta(r')\mathrm{d}r'=-\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}g$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{\mu^2g^2}{4\pi^2\hbar^4}$$

如各向同性，故总截面为

$$\sigma^{T}=\frac{\mu^{2}g^{2}}{\pi\hbar^{4}}$$

**10.7** 一个质量为 $m$ 的粒子，在排斥势 $V=Ae^{-r^{2}/a^{2}}$ 中运动，用 Born 近似求出微分散射截面，确定到一个相乘的常数.

**解**：$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^{2}q}\int_{0}^{\infty}V(r)\sin(qr)\,r\mathrm{d}r$，其中 $q=2k\sin\theta/2$，$\hbar k$ 为入射粒子动量.

$$\begin{aligned}f(\theta)&=-\frac{2mA}{\hbar^{2}q}\int_{0}^{\infty}re^{-r^{2}/a^{2}}\sin(qr)\,\mathrm{d}r=-\frac{mA}{\hbar^{2}q}\int_{-\infty}^{\infty}re^{-r^{2}/a^{2}}\sin(qr)\mathrm{d}r\\&=\frac{mAa^{2}}{2\hbar^{2}q}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{-r^{2}/a^{2}})'\sin(qr)\,\mathrm{d}r=-\frac{mAa^{2}}{2\hbar^{2}}\cdot\int_{-\infty}^{\infty}e^{-r^{2}/a^{2}}\cos(qr)\mathrm{d}r\\&=-\frac{mAa^{3}}{2\hbar^{2}}\sqrt{\pi}e^{-q^{2}a^{2}/4}\end{aligned}$$

上面利用了公式

$$\int_{0}^{\infty}e^{-a^{2}x^{2}}\cos(bx)\mathrm{d}x=\frac{e^{-\frac{b^{2}}{4a^{2}}}}{2a}\sqrt{\pi}$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^{2}=\frac{m^{2}A^{2}a^{6}}{4\hbar^{4}}\pi e^{-q^{2}a^{2}/2}$$

**10.8** 质量为 $m$ 粒子受到中心势 $V(r)=-\frac{\hbar^{2}}{ma^{2}}\frac{1}{\cosh^{2}(r/a)}$ 散射，$a$ 为常数，已知方程 $\frac{\mathrm{d}^{2}y}{\mathrm{d}x^{2}}+k^{2}y+\frac{2}{\cosh^{2}x}y=0$ 的解为 $y=e^{\pm ikr}(\tanh x\mp ik)$，计算能量 $E$ 时，s 分波对总散射截面的贡献.

**解**：考虑 s 分波径向波函数 $\chi_{0}(r)=rR(r)$ 满足的方程，

$$\frac{\mathrm{d}^{2}\chi_{0}(r)}{\mathrm{d}r^{2}}+\frac{2m}{\hbar^{2}}\left[E+\frac{\hbar^{2}}{ma^{2}}\frac{1}{\cosh^{2}(r/a)}\right]\chi_{0}(r)=0$$

作变换

$$x=r/a,\quad \chi_{0}(r)=y(x)$$

则

$$\frac{\mathrm{d}^{2}y(x)}{\mathrm{d}x^{2}}+\frac{2mE}{\hbar^{2}}a^{2}y(x)+\frac{2}{\cosh^{2}x}y(x)=0$$

根据题中所给，$y(x)$ 满足条件 $y(0)=0$ 的解为（其中 $k=\sqrt{2mE/\hbar^{2}}$）

$$\begin{aligned}y(x)&=e^{iakx}(\tanh x-iak)+e^{-iakx}(\tanh x+iak)\\&=2\cos akx\tanh x+2ak\sin akx\end{aligned}$$

所以

$$\chi_0(r)=2\cos kr\tanh\frac{r}{a}+2ak\sin kr$$

$$\frac{1}{\chi_0}\frac{\mathrm{d}\chi_0}{\mathrm{d}r}=\frac{ak^2\cos kr-k\sin kr\tanh\frac{r}{a}+\frac{1}{a}\cos kr\,\mathrm{sech}^2\frac{r}{a}}{ak\sin kr+\cos kr\tanh\frac{r}{a}}$$

$$\xrightarrow{r\to\infty}\frac{ak^2\cos kr-k\sin kr}{ak\sin kr+\cos kr}=k\frac{ak\cot kr-1}{\cot kr+ak}$$

另一方面，已知在无穷远处应有

$$\chi_0(r)=A\sin(kr+\delta_0)\ ;\quad \frac{1}{\chi_0}\frac{\mathrm{d}\chi_0}{\mathrm{d}r}=k\cot(kr+\delta_0)=k\frac{\cot kr\cot\delta_0-1}{\cot kr+\cot\delta_0}$$

比较以上两式，得

$$\cot\delta_0=ak,\quad \sin^2\delta_0=\frac{1}{1+\cot^2\delta_0}=\frac{1}{1+a^2k^2}$$

s 分波对总截面的贡献为

$$\sigma_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\frac{1}{1+a^2k^2}=\frac{2\pi\hbar^2}{mE}\frac{1}{1+\frac{2a^2mE}{\hbar^2}}$$

**10.9**　一个电荷为 $q$ 的粒子被一个核荷为 $Q$ 的原子散射，作用势为 $V=\frac{qQ}{r}\mathrm{e}^{-\alpha r}$，其中 $\alpha^{-1}$ 表示原子中电子的屏蔽长度，用 Born 近似计算散射截面.

**解**：对高能情况，由 Born 近似，散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2}\int\frac{\sin q'r}{q'r}V(r)r^2\mathrm{d}r\quad\left(q'=2k\sin\frac{\theta}{2}\right)$$

$$f(\theta)=-\frac{2mqQ}{\hbar^2q'}\int_0^\infty\sin(q'r)\,\mathrm{e}^{-\alpha r}\mathrm{d}r$$

由积分公式 $\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\alpha r}\sin q'r\mathrm{d}r=\frac{q}{\alpha^2+q'^2}$ 有

$$f(\theta)=-\frac{2mqQ}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

$$\sigma_t=\frac{4m^2q^2Q^2}{\hbar^4[\alpha^2+4k^2\sin^2\theta/2]^2}$$

下面求 $\alpha$ 的表达式. 由托玛斯-费米近似，当 $Z$ 较大时，在原子内静电场 $\varphi(r)$ 变化不大范围内已有足够多的电子，这些电子可看成自由的费米气体.

电子束缚在原子内，故其能量不大于无穷远处能量值 $E(\infty)=0$，于是 $r$ 处可能的最大动量 $P_{\max}$ 满足

$$\frac{1}{2m}P_{\max}^2(r)-e\varphi(r)=0\qquad(1)$$

而 $r$ 处的费米动量

$$P_f(r) = P_{\max}(r) = [2me\varphi(r)]^{\frac{1}{2}} \tag{2}$$

又对于费米气体有

$$P_f = \hbar(3\pi^2 n)^{1/3} \tag{3}$$

其中 $n$ 为电子数密度.

联立(2)式和(3)式得

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}[2me\varphi(r)]^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left[2mZe^2\,\frac{1}{r}e^{-\alpha r}\right]^{\frac{3}{2}}$$

$$Z = \int n\mathrm{d}V = 4\pi\int_0^\infty n(r)r^2\mathrm{d}r = \frac{4}{3\pi\hbar^3}(2mZe^2)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty e^{-\frac{3}{2}\alpha r}\,r^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}r$$

$$= \frac{2}{3\hbar^3\sqrt{\pi}}\left(\frac{4me^2}{3}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}$$

所以

$$a = \frac{2me^2}{3\hbar^2}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}}Z^{\frac{1}{3}} = \frac{4}{3}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}Z^{1/3}\Big/a_0$$

其中 $a_0=\hbar^2/me^2$ 为玻尔半径.

**10.10**　一个自旋为1/2,质量为 $m$,能量为 $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ 的粒子与无限重的自旋为1/2靶粒子散射,相互作用的 Hamilton 量为 $H=A\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\,\frac{e^{-\mu r}}{r}$ $(\mu>0)$,在 Born 近似下求微分散射截面 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$. 其中,对自旋初态求平均,对自旋末态求和.

**解**: 由相互作用势 $V$ 的形式可知,总自旋 $S^2$ 和 $S_z$ 是守恒量. 故在 16 个分道中,仅存如下 4 个分道截面不为零: $S=0$,单态; $S=1$,三重态. 对 $S=0$, $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=-3$. 此时 $V_0=-\frac{3A}{r}e^{-\mu r}$.

由 10.9 题结果知

$$\sigma_0 = \frac{36m^2A^2}{\hbar^4\left[\mu^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right]^2}$$

而对 $S=1$, $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=\frac{1}{2}(\sigma^2-6)=1$,此时有

$$V_1 = \frac{A}{r}e^{-\mu r};\qquad \sigma_1 = \frac{4m^2A^2}{\hbar^4\left[\mu^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right]^2}$$

由于是非极化情况,对自旋初态求平均,自旋末态求和,有微分散射截面

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{4}\sigma_0 + \frac{3}{4}\sigma_1 = \frac{12m^2A^2}{\hbar^4\left[\mu^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right]^2}$$

**10.11**　粒子被势 $V(r)$ 散射，求散射振幅的 Born 一级和二级修正.

**解**：总波函数满足定态 Schrödinger 方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\psi,\quad k=\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \tag{1}$$

取入射波为

$$\psi^{(0)}(r)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2}$$

$\boldsymbol{k}_0=(0,0,k)$ 为入射波波矢量. 在 Born 近似法中，以 $\psi^{(0)}$ 作为 $\psi$ 的零级近似，$\psi$ 的逐级展开为

$$\psi=\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots \tag{3}$$

右端从第二项开始为散射波，它们应该具有出射波的形式，即 $r\to\infty$ 处

$$\psi^{(1)}\approx f^{(1)}(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r};\qquad \psi^{(2)}\approx f^{(2)}(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

$$\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots\approx[f^{(1)}+f^{(2)}+\cdots]\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}=f(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{4}$$

$f(\theta,\varphi)$ 为散射振幅，$f^{(1)}$，$f^{(2)}$ 为 $f$ 的一级近似和二级修正.

入射波 $\psi^{(0)}$ 满足方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi^{(0)}=0 \tag{5}$$

因此，将式(3)代入式(1)，即得

$$(\nabla^2+k^2)(\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots)=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})(\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\cdots) \tag{6}$$

如视 $2\mu V/\hbar^2$ 为小量，而用逐级近似法求解式(6)，可令

$$\begin{cases}(\nabla^2+k^2)\psi^{(1)}=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\psi^{(0)}\\[2ex](\nabla^2+k^2)\psi^{(2)}=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\psi^{(1)}\\[2ex]\cdots\cdots\end{cases} \tag{7}$$

由 Green 函数法，可得(7)式的形式解为

$$\psi^{(1)}(r)=\int G(r,r')\rho_1(r')\mathrm{d}^3x'=\frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(r,r')V(r')\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{8}$$

$$\psi^{(2)}(r)=\frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(r,r')V(r')\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{9}$$

其中

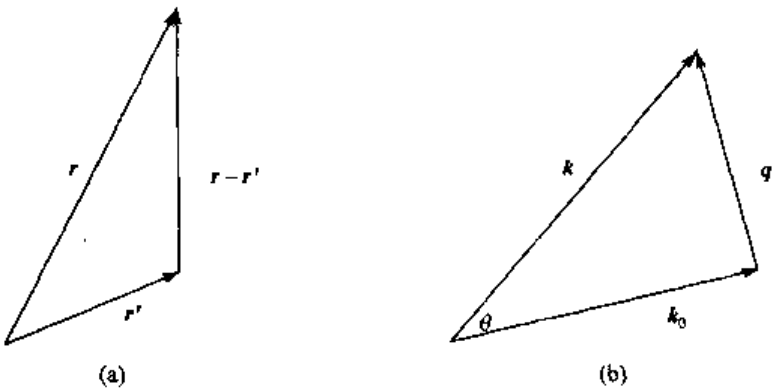
$$G(r,r')=-\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|r-r'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{10}$$

将式(10)代入式(8)中，得到

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r})=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|r-r'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x' \tag{11}$$

在远离散射中心处，$r \gg r'$，可取近似[参看图 10.11(a)]

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \approx r - \boldsymbol{r}' \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{r}; \quad k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \approx kr - k\boldsymbol{r}' \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{r} = kr - \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}' \tag{12}$$




题 10.11 图

$\boldsymbol{k}$ 为出射波波矢矢量，沿 $\boldsymbol{r}$ 方向，即沿散射角方向. $\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{r}/r$. 将近似式(12)代入式(11)，即得散射波的 Born 一级近似：

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int V(\boldsymbol{r}')\, e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'} d^3x' \tag{13}$$

令

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0, \quad q = |\boldsymbol{q}| = 2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{14}$$

如图 10.11(b)所示，并令

$$V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) = \int V(\boldsymbol{r}')\, e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'} d^3x' \tag{15}$$

式(13)可以写成

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) \tag{13'}$$

和式(4)比较，即得散射振幅的一级近似

$$f^{(1)}(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) \tag{16}$$

注意，式(13)和(13')仅适用于 $r \gg r'$ 处，式(11)则对任何 $\boldsymbol{r}$ 值均成立.

将式(8)代入式(9)，并将式(9)中的积分变数 $\boldsymbol{r}'$ 改写成 $\boldsymbol{r}''$，得到

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \iint G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'')V(\boldsymbol{r}'') \cdot G(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'} d^3x' d^3x'' \tag{17}$$

在远离散射区域处，$r \gg r''$，对 $G(r,r'')$ 可作类似于式(12)的近似处理，即

$$G(r,r'') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}''|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}''|} \approx -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}$$

同时取

$$G(r'',r') = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int \frac{1}{k^2-k'^2} e^{ik'\cdot(r''-r')} d^3k'$$

代入(17)式,即得

$$\psi^{(2)}(r) \approx -\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \cdot \iiint d^3k' d^3x' d^3x'' \frac{1}{k^2-k'^2} V(r'') e^{-i(k-k')\cdot r''} \times V(r') e^{-i(k'-k_0)\cdot r'}$$

$$= \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{32\pi^4} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{1}{k'^2-k^2} V(k-k') \cdot V(k'-k_0) d^3k' \qquad (18)$$

和式(14)比较,即得散射振幅的 Born 二级修正公式

$$f^{(2)}(\theta,\varphi) = \frac{1}{32\pi^4}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2 \int \frac{1}{k'^2-k^2} V(k-k') \cdot V(k'-k_0) d^3k' \qquad (19)$$

以上两式中,$k^2$ 均应按式(18),理解成$(k+i\varepsilon)^2$.

从量子跃迁的观点来看,散射过程相当于从初态 $e^{ik_0\cdot r}$ 向终态 $e^{ik\cdot r}$ 的跃迁,$V(k-k_0)$相当于跃迁矩阵元. 式(11)相当于微扰论一级近似. 式(18)相当于二级近似微扰修正,即二级跃迁:先由$k_0$变到中间态$k'$,再变到终态$k$,$V$ 的两个矩阵元清楚地表明了这一点.

**10.12**　质量为 $m$,自旋为1/2,能量为 $E$ 的两个未极化全同粒子,相对入射产生弹性散射,相互作用势为 $V(r)=\frac{\beta}{r}e^{-r/a}$,$(a>0)$. 求:(1)设入射粒子能量 $E$ 很大$(ka\gg1)$,求微分散射截面;(2)设 $\theta$ 及 $\pi-\theta$ 方向测得两个出射粒子,求它们的总自旋为 1 的概率,以及两个粒子自旋都指向入射方向(z 轴)的概率;(3)在(1)中作近似,对能量 $E$ 有何要求?(4)如果 $E\to0$,散射后两个粒子总自旋为 1 的概率是多少?

**解**:本题的实验室坐标系就是质心系,总动能 $E_c=2E$,约化质量 $\mu=m/2$. 令

$$k = \sqrt{2\mu E_c}/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar \qquad (1)$$

(1) 对于高能情况$(ka\gg1)$,如 Born 近似,散射振幅为

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty \frac{\sin qr}{qr} V(r) r^2 dr \quad \left(q = 2k\sin\frac{\theta}{2}\right) \qquad (2)$$

将 $V(r)$的表达式代入(2)式,利用公式

$$\int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr\, dr = \frac{qa^2}{1+q^2a^2}$$

容易求出

$$f(\theta) = -\frac{2\mu\beta a^2}{\hbar^2} \frac{1}{1+4k^2a^2\sin^2\theta/2} \qquad (3)$$

由于 $ka\gg1$,故除 $\theta\to0$ 外,可取近似

$$f(\theta) \approx -\frac{2\mu\beta}{4\hbar^2k^2} \frac{1}{\sin^2\theta/2} = -\frac{\beta}{8E} \frac{1}{\sin^2\theta/2} \qquad (4)$$

由于粒子自旋为1/2，为 Fermi 子，二粒子体系的总波函数应该是交换反对称的，如入射波为自旋单态(S=0)，空间波函数必为对称态，微分散射截面为

$$\sigma_s(\theta)=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2=\frac{\beta}{64E^2}\left(\frac{1}{\sin^2\theta/2}+\frac{1}{\cos^2\theta/2}\right)^2=\frac{\beta^2}{4E^2\sin^4\theta} \tag{5}$$

如入射波为自旋三重态(S=1)，空间波函数必为反对称态，微分散射截面为

$$\sigma_a(\theta)=|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2=\frac{\beta^2\cos^2\theta}{4E^2\sin^4\theta} \tag{6}$$

由于入射粒子自旋取向是混乱的，构成自旋单态的概率为1/4，构成三重态的概率为3/4，故微分散射截面的有效值是

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{4}\sigma_s(\theta)+\frac{3}{4}\sigma_a(\theta)=\frac{\beta^2(1+3\cos^2\theta)}{16E^2\sin^4\theta} \tag{7}$$

(2) 在 $\theta$ 及 $\pi-\theta$ 方向测得出射粒子的概率和微分散射截面成正比，两个出射粒子总自旋 S=0 和 1 的概率显然为

$$P(S=0)=\frac{\frac{1}{4}\sigma_s(\theta)}{\sigma(\theta)}=\frac{1}{1+3\cos^2\theta} \tag{8}$$

$$P(S=1)=\frac{\frac{3}{4}\sigma_a(\theta)}{\sigma(\theta)}=\frac{3\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta} \tag{9}$$

S=1 共有三种状态，即

$$\chi_{1,1}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2,\quad \chi_{1,-1}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2$$

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right]$$

两个粒子自旋均指向入射方向，即状态 $\chi_{11}$，另外两种状态并不包含此种成分，可见，散射后两粒子自旋指向入射方向的概率为

$$P(\uparrow\uparrow)=\frac{1}{3}P(S=1)=\frac{\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta} \tag{10}$$

(3) Born 近似成立的条件相当于微扰论成立的条件. 式(3)来源于散射后波函数的渐进表示式

$$\psi(r)\approx e^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}\int\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}V(r')e^{ikz'}d^3x' \tag{11}$$

按照微扰论的观点，上式即

$$\psi\approx\psi^{(0)}+\psi^{(1)}$$

微扰论成立的条件为 $|\psi^{(1)}|\ll|\psi^{(0)}|$，即在 $V(r)$ 的有效范围内，

$$\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left|\int\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\frac{\beta}{r'}e^{-r'/a}e^{ikz'}d^3x'\right|\ll 1 \tag{12}$$

积分的主要贡献来自 $r'$ 的变化范围 $\Delta r'\sim 1/k$，作为数量级估计，可取

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\sim r',\quad \mathrm{d}^3x'\sim 4\pi r'^2\Delta r'\sim 4\pi r'^2/k,\quad \int\cdots\mathrm{d}^3x'\sim 4\pi\beta/k \tag{13}$$

故条件(12)相当于

$$\frac{2\mu\beta}{\hbar^2 k}\ll 1,\quad E\gg\frac{m\beta^2}{2\hbar^2} \tag{14}$$

在此条件下，式(3)成立.

式(4)成立的条件是 $ka\gg 1$，即 $E\gg\hbar^2/2ma^2$.

(4) 如 $E\to 0$，仅 s 波($l=0$)对散射截面有贡献，这时散射振幅 $f(\theta)$ 为常量，$f(\theta)=f(\pi-\theta)$，所以 $\sigma_a=0$，只有自旋单态对散射截面有贡献. 因此散射后两个出射粒子必然处于总自旋 $S=0$ 的状态，而 $S=1$ 的概率为 0.

**10.13**　求中子-中子低能散射($E\to 0$)s 分波的散射截面. 设两个中子之间的作用势为

$V=\begin{cases}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2V_0 & r\leqslant a\\ 0 & r>a\end{cases}$，其中 $V_0>0$，$\boldsymbol{\sigma}_1$，$\boldsymbol{\sigma}_2$ 为中子的 Pauli 自旋算符，$r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$. 入射中子和靶中子都是未极化的.

**解**：在耦合表象中讨论此问题.

令 $\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\boldsymbol{S}$，即 $\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{S}$，则有

$$3+3+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=4S(S+1),\quad \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=2S(S+1)-3 \tag{1}$$

其中 $S=1$ 或 0. 因而可见 $\boldsymbol{S}$ 的本征值也是 $V(r)$ 的本征态.

只考虑 s 波，即空间波函数是对称的，根据 Pauli 原理，自旋部分应为反对称，所以有

$$S=0,\quad V=\begin{cases}-3V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases} \tag{2}$$

低能只考虑 s 波，当 $r<a$ 时，有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+k_0^2u=0;\quad u(r)=A\sin k_0r \tag{3}$$

其中 $u(r)=r\psi(r)$，$k_0^2=2\mu(E+3V_0)/\hbar^2=k_1^2+3mV_0/\hbar^2$.，其中 $\mu=\frac{m}{2}$ 是中子约化质量.

当 $r>a$ 时，有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+k_1u=0;\qquad u(r)=A\sin(k_1r+\delta_0) \tag{4}$$

其中

$$u(r)=r\psi(r),\quad k_1^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}E$$

利用 $r=a$ 处 $u(r)$ 的一阶导数及其本身连续，有

$$k_0\cot k_0 a = k_1\cot(k_1 a+\delta_0) \tag{5}$$

$k_1\to 0$，则有

$$\delta_0 = \frac{k_1}{k_0}\tan k_0 a - k_1 a = k_1 a\left[\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right] \tag{6}$$

$$k_0^2 = \frac{3mV_0}{\hbar^2}$$

由全同性，有

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0,2,4} 2(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2 \tag{7}$$

只有 s 分波，故

$$\sigma(\theta) = \frac{4}{k_1^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4}{k_1^2}\delta_0^2$$

$$\sigma_{t_{s=0}} = \frac{16\pi}{k_1^2}k_1^2 a^2\left[\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right]^2 = 16\pi a^2\left[\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right]^2 \tag{8}$$

取统计平均 $S=0$ 只占 1/4，有

$$\sigma_t = 4\pi a^2\left[\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right]^2 \tag{9}$$

(9)式中的截面是接收到中子的截面.

**10.14**　质量为 $m$ 的粒子被很重的靶粒子散射，两粒子的自旋均为 1/2. 设相互作用势为 $V=cs_1\cdot s_2\delta(\boldsymbol{r})$，　$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$，$c$ 是很小的常量，因此可以用 Born 一级近似来处理. 设入射粒子的自旋“向上”，靶粒子的自旋取无规分布. 求散射总截面以及散射后粒子自旋仍然保持“向上”的概率.

**解**：由于靶粒子很重，可视为固定的散射中心，质心系和实验室系就是同一的，所以系统的相对运动方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + cs_1\cdot s_2\delta^{(3)}(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

因 $c$ 是一个小的常数，所以可用 Born 近似，在考虑自旋角动量的情况下有

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'}\langle\omega_f|cs_1\cdot s_2|\omega_i\rangle\delta(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}'$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\omega_f|cs_1\cdot s_2|\omega_i\rangle$$

$$= -\frac{mc}{4\pi\hbar^2}\langle\omega_f|s^2-s_1^2-s_2^2|\omega_i\rangle \tag{2}$$

由题意可知，入射粒子自旋“向上”，靶粒子非极化，故入射双粒子自旋态为 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2$ 与 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2$ 的等概率混态，用耦合表象基表示，即 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_{10}\rangle+|\chi_{00}\rangle)$ 和 $|\chi_{11}\rangle$ 的等概率混合. 由于在 $V(r)$ 作用下 $S^2$ 与 $S_z$ 守恒，故散射态中不可能出现

$|\chi_{1-1}\rangle$态，考虑所有不为零的散射通道有

$$f_1 = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\chi_{11}|\frac{1}{2}c(\boldsymbol{s}^2 - \boldsymbol{s}_1^2 - \boldsymbol{s}_2^2)|\chi_{11}\rangle = -\frac{mc}{8\pi}$$

$$f_2 = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 10| + \langle 00|)\frac{1}{2}c(\boldsymbol{s}^2 - \boldsymbol{s}_1^2 - \boldsymbol{s}_2^2)\frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |00\rangle) = \frac{mc}{8\pi}$$

$$f_3 = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 10| - \langle 00|)\frac{1}{2}c(\boldsymbol{s}^2 - \boldsymbol{s}_1^2 - \boldsymbol{s}_2^2)\frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |00\rangle) = -\frac{2mc}{8\pi}$$

对初态求平均，对末态求和，可得总散射截面为

$$\sigma_t = \frac{1}{2}|f_1|^2 + \frac{1}{2}(|f_2|^2 + |f_3|^2) = \frac{3m^2c^2}{64\pi^2}$$

由于 $f_3$ 表示散射态为$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2$，即散射粒子自旋“向下”. 所以散射后，散射粒子自旋向上的概率应为

$$P = \frac{\sigma_t - \frac{1}{2}|f_3|^2}{\sigma_t} = \frac{m^2c^2}{64\pi^2}\Big/\frac{3m^2c^2}{64\pi^2} = \frac{1}{3}$$

**10.15**　设中性原子的电荷分布为球对称，密度 $\rho(r)$ 具有如下性质：$r\to\infty$，$\rho(r)$ 迅速趋于 0，并有 $\int\rho(r)\,\mathrm{d}^3x = 0$，但 $\int\rho(r)\,r^2\mathrm{d}^3x = A \neq 0$（正负电荷分布不均匀）. 今有质量为 $m$，电荷为 $e$ 的粒子沿 $z$ 轴方向入射，受到此电荷分布所产生静电场的散射. 使用 Born 近似计算向前散射（$\theta=0$）的微分截面.

**解**：考虑 Born 近似，有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{m^2e^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int U(r)\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}]\,\mathrm{d}^3x\right|^2$$

其中，$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$，$q = 2k\sin\frac{\theta}{2} = \frac{2p}{\hbar}\sin\frac{\theta}{2}$

$U(r)$ 是静电库仑势，满足泊松方程 $\Delta U = -4\pi\rho(r)$，作傅里叶变换

$$F(q) \equiv \int\rho(r)\,\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}]\mathrm{d}^3x$$

则有

$$F(q) = -\frac{1}{4\pi}\int\Delta U\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}]\mathrm{d}^3x$$

通过分部积分后，可得（注意，因为 $\int\rho(r)\mathrm{d}^3x = 0$ 且 $\rho(r)$ 迅速趋于零故可以认为无限远处 $U(r)$ 趋于零的速度大于 $\frac{1}{r^2}$.）

$$\int U(\boldsymbol{r})\,\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}]\mathrm{d}^3x = \frac{4\pi}{q^2}F(q)$$

于是有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{m^2e^2}{4\pi^2\hbar^4}\cdot\frac{(4\pi)^2}{q^4}|F(q)|^2=\frac{4m^2e^2}{\hbar^4q^4}\cdot|F(q)|^2$$

在向前散射时，$\theta$ 很小，$\cos\theta\approx1$，$q$ 很小，于是

$$\begin{aligned}F(q)&=\int\rho(r)\ \exp[\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}]\mathrm{d}^3x=\int\rho(r)\ \left[1+\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}+\frac{1}{2!}\cdot(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})^2+\cdots\right]\mathrm{d}^3x\\&=\int\rho(r)\ \mathrm{d}^3x-\frac{1}{2!}\int\rho(r)\cdot(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})^2\mathrm{d}^3x=-\frac{1}{6}q^2\int\rho(r)\ r^2\mathrm{d}^3x\\&=-\frac{Aq^2}{6}\end{aligned}$$

代入上式，有

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\theta=0}=\frac{Am^2e^2}{9\hbar^4}$$

# 第十一章　含时问题与量子跃迁

**11.1**　具有电荷为 $q$ 的粒子，在其平衡位置附近作一维简谐运动，在光的照射下发生跃迁，入射光能量密度为 $\rho(\omega)$，波长较长. 求

(1) 跃迁选择定则；

(2) 设离子原来处于基态，求每秒跃迁到第一激发态的概率.

**解**：(1) 选择定则由 $\langle n'|x|n\rangle\neq 0$ 给出，因为

$$x|n\rangle=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle+\sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle\right] \tag{1}$$

所以跃迁的选择定则为

$$\Delta n=n'-n=\pm 1 \tag{2}$$

(2) 非偏振自然光照射下，跃迁速率公式为

$$w_{n'}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}|x_{n'n}|^2\rho(w_{n'n}) \tag{3}$$

初态 $n=0$，末态 $n'=1$，

$$|x_{10}|^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega},\qquad \omega_{10}=\omega \tag{4}$$

故由基态到第一激发态得跃迁速率为

$$w_{01}=\frac{2\pi^2q^2}{3\mu\hbar\omega}\rho(\omega) \tag{5}$$

**11.2**　一维运动的体系，$|m\rangle$ 态跃迁到 $|n\rangle$ 态所对应的振子强度定义为

$$f_{nm}=\frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar}|\langle n|x|m\rangle|^2$$

$\mu$ 为振子质量. 求证 $\sum\limits_n f_{nm}=1$（$\sum\limits_n$ 指对一切能量本征态求和）(Thomas-Reich-Kuhn 求和规则)

**证明**：
$$\sum_n f_{nm}=\frac{2\mu}{\hbar^2}\sum_n(E_n-E_m)|\langle n|x|m\rangle|^2 \tag{1}$$

由 5.16 题结果

$$\sum_n(E_n-E_m)|x_{nm}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{2}$$

代入上式有

$$\sum_n f_{nm}=1 \tag{3}$$

**11.3**　一个处于第一激发态(2p)的氢原子位于一空腔中，当空腔的温度等于多少时，自发跃迁概率和受激跃迁概率相等?

**解**：空腔中氢原子受到处于热平衡状态的腔电磁场的作用而引起的受激跃迁概率为

$$w_{12}=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}|\boldsymbol{r}_{12}|^2\rho(\omega_{21}) \tag{1}$$

自发跃迁概率为

$$A_{12}=\frac{4e^2\omega_{21}^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{12}|^2 \tag{2}$$

要求两者相等，故得

$$\frac{\pi^2}{\hbar}\rho(\omega_{21})=\frac{\omega_{21}^3}{c^3} \tag{3}$$

用黑体辐射公式

$$\rho(\omega)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT)-1} \tag{4}$$

可以得到

$$\exp(\hbar\omega_{21}/kT)=2$$

$$T=\hbar\omega_{21}/(k\ln 2)=1.76\times10^5\mathrm{K}$$

**11.4**　一个电荷为 $e$ 的粒子被禁闭在各边为 $2b$ 的立方盒子中，给定一个电场

$$\boldsymbol{E}=\begin{cases}0, & t<0\\ \boldsymbol{E}_0e^{-at}(a>0), & t>0\end{cases}$$

$\boldsymbol{E}_0$ 垂直于盒子的某一面. $t=0$ 时，带电粒子处于基态，求 $t=\infty$ 时粒子处于第一激发态的概率.

**解**：取势如下

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0, & 0<x<2b,0<y<2b,0<z<2b\\ \infty, & \text{其他}\end{cases} \tag{1}$$

零级波函数为(在盒子内)

$$\psi_{lmn}(x,y,z)=\sqrt{\frac{1}{b^3}}\sin\frac{l\pi x}{2b}\sin\frac{m\pi y}{2b}\sin\frac{n\pi z}{2b}$$

$$E_{lmn}=\frac{\hbar^2\pi^2}{8\mu b^2}(l^2+m^2+n^2) \tag{2}$$

基态为$|1,1,1\rangle$，第一激发态为$|2,1,1\rangle$，　$|1,2,1\rangle$，　$|1,1,2\rangle$.

设 $\boldsymbol{E}_0=E_0\boldsymbol{e}_x$，则 $H'=-eE_0xe^{-at}$，于是

$$\langle1,1,1|x|2,1,1\rangle=\frac{1}{b}\int_0^{2b}x\sin\frac{\pi x}{2b}\sin\frac{\pi x}{b}\mathrm{d}x=-\frac{32b}{9\pi^2} \tag{3}$$

$$\langle1,1,1|x|1,2,1\rangle=\langle1,1,1|x|1,1,2\rangle=0 \tag{4}$$

所以

$$P=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^{\tau}\langle 211|H'|111\rangle\exp\left(\frac{\mathrm{i}\Delta Et}{\hbar}\right)\mathrm{d}t\right|^2;\qquad \Delta E=\frac{3\pi^2\hbar^2}{8mb^2} \tag{5}$$

$$P=\left(\frac{32beE_0}{9\hbar\pi^2}\right)^2\left|\int_0^{\infty}\exp\left(-at+\mathrm{i}\frac{\Delta Et}{\hbar}\right)\mathrm{d}t\right|^2=\left(\frac{32beE_0}{9\hbar\pi^2}\right)^2\frac{\hbar^2}{a^2\hbar^2+\Delta E} \tag{6}$$

**11.5**　一个氢原子放入一个与时间有关的均匀电场$\varepsilon(t)=\frac{B\tau}{e\pi}\frac{1}{t^2+\tau^2}$中，式中$B$和$\tau$为常数，如果在$t=-\infty$时原子处于基态，计算在$t=\infty$时原子处于2p态的概率.

**解**：取外电场方向为$z$轴，则

$$H'(t)=e\varepsilon(t)r\cos\theta;\quad \omega_{21}=\omega=(E_2-E_1)/\hbar=3me^4/8\hbar^2 \tag{1}$$

因为，$\langle nlm|r\cos\theta|100\rangle$不为零的矩阵元满足如下条件

$$m=0,\quad l=1 \tag{2}$$

所以由$|100\rangle$态到2p态惟一可能的跃迁对应于矩阵元

$$\langle 210|r\cos\theta|100\rangle=\frac{1}{4\sqrt{2}}\frac{1}{\pi a^3}\times\int\frac{r}{a}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}}\cos\theta(r\cos\theta)\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{2^7\sqrt{2}a}{3^5} \tag{3}$$

故基态向2p态的跃迁速率

$$w=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\langle 210|H'|100\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t\right|^2=\frac{2^{15}B^2\tau^2a^2}{3^{10}\hbar^2\pi^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\tau^2+t^2}\mathrm{d}t\right|^2 \tag{4}$$

利用积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{t^2+\tau^2}\,\mathrm{d}t=\frac{\pi}{\tau}\mathrm{e}^{-\omega\tau}$$

进一步得出

$$w=\frac{2^{15}B^2a^2}{3^{10}\hbar^2}\mathrm{e}^{-2\omega\tau}$$

**11.6**　当一个带电为$Ze$的重粒子在原子附近通过时，原子的电子将在其影响下从$m$态跃迁到$n$态，设$v$是重粒子的运动速度，$D$为在$t=0$时重粒子离原子最近的距离. 计算这一个过程的概率.

**解**：既然是重粒子，我们假定其运动不会由于与原子的任何相互作用而改变，同时假定原子核保持静止. 选取坐标系，原点在原子核处，$x$轴平行于粒子的运动方向. 令$v$是粒子的(恒定)速度，$\boldsymbol{R}=(vt,D,0)$是粒子在$t$时刻位矢，$D$是$t=0$时刻离原子最近的距离. 如果$\boldsymbol{r}=(x,y,z)$是电子的位矢，则粒子-电子相互作用势能由下式给出

$$W(t)=-\frac{Ze_s^2}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}=-\frac{Ze_s^2}{R}-\frac{Ze_s^2(xvt+Dy)}{R^3}+\cdots \tag{1}$$

式中$R=[(vt)^2+D^2]^{\frac{1}{2}}$，而$Ze$为粒子的电荷，既然$x,y\ll R$，在(1)式中可以仅限于讨论前两项，于是有

$$\langle n|W(t)|m\rangle = -\frac{Ze_s^2}{R^3}(x_{nm}vt + Dy_{nm}) \tag{2}$$

式中 $x_{nm}$ 和 $y_{nm}$ 是电子坐标 $x$ 和 $y$ 的矩阵元.

将(2)式代入跃迁速率公式中,我们得到原子从 $m$ 态跃迁到 $n$ 态的跃迁速率

$$w_{nm} = \frac{Z^2e_s^2}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x_{nm}vt + Dy_{nm}}{[(vt)^2 + D^2]^{3/2}}\,e^{i\omega_{nm}t}\,dt\right|^2 \tag{3}$$

被积函数随 $R$ 很快减小,可以说,粒子和原子间相互作用或"碰撞"的有效持续时间具有 $D/v$ 的量级.

注意:如果绝热条件 $(\omega_{nm}D)/v \ll 1$,可令(3)式中的指数函数等于 1,而积分化为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x_{nm}vt + Dy_{nm}}{[(vt)^2 + D^2]^{3/2}}dt = \int\frac{Dy_{nm}}{[(vt)^2 + D^2]^{3/2}}dt = \frac{2y_{nm}}{vD} \tag{4}$$

最后有

$$w_{nm} = \frac{4Z^2e_s^2|y_{nm}|^2}{\hbar^2D^2v^2} \tag{5}$$

**11.7** 若在 $t=0$ 时,电荷为 $e$ 质量为 $m$ 的线型谐振子处于基态,在 $t>0$ 时,附加一个与谐振子振动方向相同的恒定外电场 $\varepsilon$,求谐振子处于任意态的概率.

**解**:突然近似下,振子在电场 $\varepsilon(\varepsilon,0,0)$ 中的势能为

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}(x - x_0)^2 - \frac{(e\varepsilon)^2}{2m\omega^2} \quad \left(x_0 = \frac{e\varepsilon}{m\omega^2}\right)$$

所以,扰动振子的能量本征态为

$$\psi_n = \frac{(-1)^n}{(2^n n!)^{1/2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{\frac{(\xi-\xi_0)^2}{2}}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^n[e^{-(\xi-\xi_0)^2}]$$

其中

$$\xi = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x, \quad \xi_0 = \frac{e\varepsilon}{(m\hbar\omega^3)^{1/2}}$$

这时 $t=0$ 时体系处于 $H_0$ 的基态可用新能量本征态展开

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \sum_n a_n\psi_n$$

在新 $H$ 量作用下,$t$ 时刻的态矢为

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

体系处于 $\psi_n$ 态的概率振幅为

$$\begin{aligned} a_n &= \int\psi_n^*(x - x_0)\,\psi_0(x)dx \\ &= \frac{\alpha(-1)^n}{(2^n n!\pi)^{1/2}}e^{\xi_0^2/2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi_0\xi}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-(\xi-\xi_0)^2}d\xi \\ &= \frac{\alpha(-1)^n}{(2^n n!\pi)^{1/2}}e^{-\xi_0^2/2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi_0\xi}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}d\xi \end{aligned}$$

式中积分通过 $n$ 次分部积分然后利用泊松积分公式可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_0\xi}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}d\xi = \xi_0^n\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2-\xi_0\xi}d\xi = \xi_0^n\sqrt{\pi}e^{\xi_0^2/4}$$

所以

$$a_n = \frac{\alpha(-1)^n}{(2^n n!)^{1/2}}\xi_0^n e^{-\frac{\xi_0^2}{4}}$$

从基态到激发态 $n$ 的跃迁概率为

$$W_n = |a_n|^2 = \frac{\alpha^2(\alpha x_0)^{2n}}{2^n n!}e^{-\frac{(\alpha x_0)^2}{2}}$$

注意：在 $\varepsilon$ 较大时，本题计算结果依然适用. 结果依然适用.

**11.8**　若在 $t=0$ 时，电荷 $e$ 质量为 $m$ 的线型谐振子处于基态，在 $t>0$ 时，附加一个外场 $\varepsilon=\varepsilon_0 e^{-t/\tau}$，求谐振子处于激发态的概率.

**解：**　$H'=-ex\varepsilon(t)$

因为 $H'_{n0}=-e\varepsilon(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\delta_{n,1}$，所以只有基态 $|0\rangle$ 向第一激发态的跃迁是允许的.

$$a_{01}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{1,0}(t)e^{i\omega_{10}t}dt = i\varepsilon_0 e\left(\frac{1}{2m\omega\hbar}\right)^{1/2}\int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}+i\omega t}\,dt$$

$$= i\varepsilon_0 e\left(\frac{1}{2m\omega\hbar}\right)^{1/2}\frac{1}{\frac{1}{\tau}-i\omega}$$

因此

$$P_{01} = \frac{e^2\varepsilon_0^2\tau^2}{2\hbar m\omega(1+\omega^2\tau^2)}$$

**11.9**　若在 $t=0$ 时，氢原子处于基态，以后受到周期均匀电场 $\varepsilon\sin\omega t$ 的作用而电离，设电离后电子的波函数为平面波，求该周期场最小频率和电子跃迁到电离态的概率振幅.

**解：**若用 $\boldsymbol{r}$ 表示电子位矢，则微扰为

$$V = e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(t) = e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\sin\omega t = \hat{F}e^{-i\omega t}+\hat{F}^* e^{i\omega t}$$

其中 $\hat{F}=\frac{ie}{2}\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{r}$

使电子由基态 $E_1$ 电离，所需最小能量为 $-E_1$，所以电离所需的最小频率为

$$\omega_{\min} = -\frac{E_1}{\hbar} = \frac{\mu e_s^4}{2\hbar^3}$$

设电子的末态（电离态）能量为 $E_k=\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2$，本征函数为

$$\psi_k = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

$$F_{k1}=\int\psi_k^*\,\hat{F}\psi_{100}\,\mathrm{d}\tau=\frac{\mathrm{i}e}{2}(2\pi)^{-3/2}(\pi a_0^3)^{-1/2}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot r-\frac{r}{a_0}}\ (\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

取球坐标系$(r,\theta,\varphi)$，其极轴沿$\boldsymbol{k}$的方向，$\boldsymbol{\varepsilon}$的方位角记为$(\Theta,\varphi_0)$，于是

$$\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{r}=\varepsilon r\left[\cos\Theta\cos\theta+\sin\Theta\sin\theta\cos(\varphi-\varphi_0)\right]$$

上式代入(4)式，对$\varphi$积分后，显然第二项为零，令$x=\cos\theta$

$$F_{k,1}=\frac{\mathrm{i}e}{2^{5/2}\pi^2a_0^{3/2}}2\pi\varepsilon\cos\Theta\int_{-1}^{1}\left[\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx-\frac{r}{a_0}}r^3\,\mathrm{d}r\right]x\,\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\mathrm{i}e\varepsilon\cos\Theta}{\pi(2a_0)^{3/2}}\int_{-1}^{1}\frac{3!x\,\mathrm{d}x}{(1/a+\mathrm{i}kx)^4}\,\mathrm{d}x=\frac{e\varepsilon\cos\Theta}{\pi(2a_0)^{3/2}}\frac{16ka_0^5}{(1+k^2a^2)^3}$$

由基态$\psi_{100}$到电离态$\psi_k$跃迁概率幅为

$$a_{1,k}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t F_{k,1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{k,1}\tau}\,\mathrm{d}\tau=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{k1}-\omega)t}}{\mathrm{i}(\omega-\omega_{k1})}\right]F_{k1}$$

其中

$$\omega_{k1}=\frac{1}{\hbar}(E_k-E_1)=\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}+\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2}\right)$$

**11.10**　将处于基态的氢原子放在一个平行板电容器的电场中，取平行板的法线方向$z$轴方向，则电场沿$z$轴方向可以看作均匀电场，若电容器突然充电，而后放电，则电场随时间的变化为$\varepsilon(t)=\begin{cases}0, & t<0\\ \varepsilon_0\mathrm{e}^{-t/\tau}, & t>0\end{cases}$，其中$\tau$为常数，求时间足够长后，氢原子跃迁到2s态和2p态的概率.

**解：**

$$\hat{H}'=e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(t)=ez\varepsilon(t)$$

由选择定则

$$\langle 2\mathrm{s}|\hat{H}'|1\mathrm{s}\rangle=e\varepsilon(t)\langle 2\mathrm{s}|z|1\mathrm{s}\rangle=0$$

因此由1s→2s跃迁的概率为

$$P(1\mathrm{s}\to 2\mathrm{s})=0$$

2p态三度简并$|2\mathrm{p},m\rangle$，$(m=1,0,-1)$，由矩阵元的选择定则知

$$\langle 2\mathrm{p},1|H'|1\mathrm{s},0\rangle=\langle 2\mathrm{p},-1|H'|1\mathrm{s},0\rangle=0$$

因此1s→2p的跃迁概率归结为求$|1\mathrm{s},0\rangle\to|2\mathrm{p},0\rangle$的跃迁概率.

$$\langle 2\mathrm{p},0|H'|1\mathrm{s},0\rangle=\frac{e\varepsilon(t)}{4\sqrt{2}\pi a_0^4}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\exp\left(-\frac{3r}{2a_0}\right)r^4\cos^2\theta\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{e\varepsilon(t)}{4\sqrt{2}\pi a_0^4}2\pi\cdot\frac{2}{3}\cdot\frac{4!}{(3/2a_0)^5}=\frac{2^7\sqrt{2}a_0e}{3^5}\varepsilon(t)$$

$$c_{2p0,1s0}\equiv\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^{\infty}\langle 2\mathrm{p},0|H'|1\mathrm{s},0\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{21}t}\,\mathrm{d}t$$

$$=\frac{2^7\sqrt{2}a_0e\varepsilon_0}{3^5\mathrm{i}\hbar}\int_0^{\infty}e^{-t/\tau}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{21}t}\,\mathrm{d}t$$

$$= \frac{2^7\sqrt{2}a_0 e\varepsilon_0}{3^5 \mathrm{i}\hbar}\frac{1}{1/\tau - \mathrm{i}\omega_{21}}$$

因此

$$P_{(1s\to 2p)} = |c_{2p0,1s0}|^2 = \frac{2^{15}a^2e^2\varepsilon_0^2\tau^2}{3^{10}\hbar^2(1+\omega_{21}^2\tau^2)}$$

其中

$$\omega_{21} = \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) = \frac{3e^2}{8a_0\hbar}$$

**11.11**　处于基态的氢原子受到脉冲电场 $\varepsilon(t)=\varepsilon_0\delta(t)$ 作用，$\varepsilon_0$ 为常数，用微扰论计算电子跃迁到各激发态的概率以及仍然停留在基态的概率.

**解**：自由氢原子的 Hamilton 量记为 $H_0$，能级记为 $E_n$，能量本征态记为 $\psi_n$（$n$ 代表 $n,l,m$ 三个量子数），满足本征方程

$$H_0\psi_n = E_n\psi_n \tag{1}$$

如以电场方向作为 $z$ 轴，微扰作用势可以表示为

$$H' = e\boldsymbol{\varepsilon}(t)\cdot\boldsymbol{r} = e\varepsilon_0 z\delta(t) \tag{2}$$

在电场作用过程中，波函数满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = H_0\psi + H'\psi \tag{3}$$

初始条件为

$$\psi(t=0^-) = \psi_1 \equiv \psi_{100}(r) \tag{4}$$

令

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar} \tag{5}$$

初始条件(4)亦即

$$C_n(0^-) = \delta_{n1} \tag{4'}$$

以(5)代入(3)式，但微扰项 $H'\psi$ 中 $\psi$ 取初始值 $\psi_1$（这是微扰论的实质性要点!）即得

$$\sum_n \mathrm{i}\hbar\psi_n\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{-E_nt/\hbar} = H'\psi_1 = e\varepsilon_0 z\psi_1\delta(t)$$

以 $\psi_n^*\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_nt/\hbar}$ 左乘上式两端，并全空间积分，即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t} = e\varepsilon_0 z_{n1}\delta(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_nt/\hbar}$$

再对 $t$ 积分，由 $t=0^-\to t>0$，即得

$$C_n(t) = \frac{e\varepsilon_0}{\mathrm{i}\hbar}z_{n1} \quad (n\neq 1) \tag{6}$$

因此 $t>0$ 时（即脉冲电场作用后）电子已经跃迁到 $\psi_n$ 态的概率为

$$P_n = |C_n(t)|^2 = \left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2|z_{n1}|^2 \tag{7}$$

根据选择定则($\Delta l=1,\Delta m=0$),终态量子数必须是

$$(n,l,m)=(n,1,0)$$

即电子只跃迁到各 $np$ 态($l=1$),而且磁量子数 $m=0$.

跃迁到各激发态的概率总和为

$$\sum_n{}'P_n=\left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2\sum_n{}'|z_{n1}|^2=\left(\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\right)^2\left[\sum_n|z_{n1}|^2-|z_{11}|^2\right] \tag{8}$$

其中

$$z_{11}=\langle\psi_1|z|\psi_1\rangle=0,(z\text{ 为奇宇称})$$

$$\sum_n|z_{n1}|^2=\sum_n\langle\psi_1|z|\psi_n\rangle\langle\psi_n|z|\psi_1\rangle$$

$$=\langle\psi_1|z^2|\psi_1\rangle=\frac{1}{3}\langle\psi_1|r^2|\psi_1\rangle=a_0^2 \tag{9}$$

$a_0$ 为 Bohr 半径. 代入式(8)即得

$$\sum_n{}'P_n=(e\varepsilon_0a_0/\hbar)^2 \tag{10}$$

电场作用后电子仍留在基态的概率为

$$1-\sum_n{}'P_n=1-(e\varepsilon_0a_0/\hbar)^2 \tag{11}$$

**11.12** 有一个自旋为 1/2,磁矩为 $\mu$,电荷为 0 的粒子,置于一个磁场中. $t=0$ 时,磁场为 $\boldsymbol{B}_0=(0,0,B_0)$,粒子处于 $\sigma_z$ 的本征态$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$,即 $\sigma_z=-1$,在 $t>0$ 时,再加上沿 $x$ 轴的弱磁场 $\boldsymbol{B}_1=(B_1,0,0)$,求 $t>0$ 时本征态的自旋态,以及测到自旋向上 $\sigma_x=1$的概率.

**解**: 粒子的磁矩算符可以表示成

$$\boldsymbol{\mu}=\mu\boldsymbol{\sigma} \tag{1}$$

$\sigma$ 为 Pauli 自旋算符. 磁场对粒子的作用势为

$$H=-\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\mu}=-\mu(B_1\sigma_x+B_0\sigma_z) \tag{2}$$

在 $\sigma_z$ 的表象中,$H$ 的矩阵表示为

$$H=-\mu B_1\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}-\mu B_0\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}=-\mu\begin{bmatrix}B_0&B_1\\B_1&-B_0\end{bmatrix} \tag{3}$$

以下求 $H$ 的本征值和本征函数. 设本征函数为

$$\psi=C_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+C_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix} \tag{4}$$

本征方程为 $H\psi=E\psi$,即

$$-\mu\begin{bmatrix}B_0&B_1\\B_1&-B_0\end{bmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix} \tag{5}$$

能级方程为

$$\det(E-H)=\begin{vmatrix} E+\mu B_0 & \mu B_1 \\ \mu B_1 & E-\mu B_0 \end{vmatrix}=0 \tag{5'}$$

令　　$\mu B_0=\hbar\omega_0,\quad \mu B_1=\hbar\omega_1,\quad \sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}=\omega$　　(6)

由式(5′)容易解出

$$E=\pm\hbar\omega \tag{7}$$

将 $E$ 的值代回式(5)，即可求出如下本征函数：

$$E=\hbar\omega,\qquad E=-\hbar\omega$$

$$C_1/C_2=-\omega_1/(\omega+\omega_0)\qquad C_1/C_2=\omega_1/(\omega-\omega_0)$$

$$\psi_+=\begin{pmatrix}-\omega_1\\ \omega+\omega_0\end{pmatrix}\qquad \psi_-=\begin{pmatrix}\omega_1\\ \omega-\omega_0\end{pmatrix} \tag{8}$$

注意，这两个本征函数并未归一化.

将 $t=0$ 时初始波函数按能量本征函数展开，

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

因此，$t>0$ 时，波函数

$$\psi(t)=\frac{1}{2\omega}(\psi_+\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\psi_-\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t})$$

$$=\mathrm{i}\frac{\omega_1}{\omega}\sin\omega t\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\left(\cos\omega t-\mathrm{i}\frac{\omega_0}{\omega}\sin\omega t\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{10}$$

注意 $\psi(t)$ 满足归一化条件

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=1 \tag{11}$$

在时刻 $t>0$，测得粒子自旋“向上”($\sigma_z=1$)的概率为

$$P(\sigma_z=1)=\left|\mathrm{i}\frac{\omega_1}{\omega}\sin\omega t\right|^2=\frac{\omega_1^2}{\omega^2}\sin^2\omega t$$

$$=\frac{B_1^2}{B_0^2+B_1^2}\left[\sin\left(\frac{\mu}{\hbar}t\sqrt{B_0^2+B_1^2}\right)\right]^2 \tag{12}$$

**11.13**　证明自由电子不能吸收和发射光子.

**证明**：令 $\psi_1$ 和 $\psi_2$ 是电子的初态和末态波函数，如果电子是自由的，则 $\psi_1$ 和 $\psi_2$ 可以写成平面波的形式

$$\psi_1=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}},\qquad \psi_2=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}} \tag{1}$$

设光与电子作用的 Hamilton 量为

$$H'=-\frac{e}{2m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}=c\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{P},\text{其中 }c=-\frac{e}{2m},\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{r}}$$

这时跃迁矩阵元为

$$\begin{aligned}&\langle\psi_1|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_\lambda\cdot\boldsymbol{r}}(c\boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{p})|\psi_2\rangle\\&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1-\hbar\boldsymbol{k}_\lambda)\cdot\boldsymbol{r}}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}c\boldsymbol{A}_0\cdot\nabla\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3c\boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{p}_2\int\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1+\hbar\boldsymbol{k}_\lambda-\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\end{aligned}\tag{2}$$

由于

$$\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\delta(\boldsymbol{k})$$

所以由(2)式可得

$$\int\psi_1^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_\lambda\cdot\boldsymbol{r}}(c\boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{p})\,\psi_2\mathrm{d}\boldsymbol{r}\sim\delta(\boldsymbol{p}_2-\hbar\boldsymbol{k}_\lambda-\boldsymbol{p}_1)\tag{3}$$

应用于自由电子发射一个光子情况，(3)式表示动量守恒定律，

$$\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{p}_1+\hbar\boldsymbol{k}\tag{4}$$

能量守恒定律要求

$$E_2=E_1+\hbar\omega\tag{5}$$

两个守恒定律不相容，所以电子至少还与其他粒子发生作用.

**11.14** 证明在量子理论(以及经典理论)中，一个带电线型谐振子只能吸收和发射等于它自身的经典振动频率的辐射.

**解**：在一阶近似下谐振子电偶极跃迁的选择定则为，$\Delta n=\pm1$，所以，对于谐振子只有邻近能级才发生跃迁，所以发射和吸收的辐射频率总是等于振子的经典频率.(已作了单光子近似.)

**11.15** 证明激发原子每单位时间的自发发射的总概率具有$\omega/(137)^3$的量级.

**解**：自发辐射的概率为

$$P_{12}=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{d}_{12}|^2,\quad\boldsymbol{d}=e\boldsymbol{r}$$

$$P_{12}=\frac{4}{3}\alpha\left(\frac{|\boldsymbol{r}_{12}|}{c}\right)^2\omega^3,\quad\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}=\frac{1}{137}$$

我们取$|\boldsymbol{r}_{12}|\sim a$，这里$a$是原于半径，以氢原子为例，每单位时间从第一激发态到基态的自发跃迁概率为

$$P_{12}\sim\alpha\omega\left(\frac{a\omega}{c}\right)^2;\quad a=\frac{\hbar^2}{me^2}\sim\frac{e^2}{\hbar\omega}\quad(\text{其中假定}\frac{e^2}{a}\sim\hbar\omega)$$

或

$$P_{12}\sim\frac{\omega}{(137)^3}$$

# 第十二章　量子信息论的物理基础

**12.1**　任何两维纯态$|\Psi\rangle$必定对应于单位球面上的某一点，因为它的密度矩阵总可以表示为$\rho=|\Psi\rangle\langle\Psi|=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$，这里$\boldsymbol{n}$是单位球面上某一点的矢径；任何两维混态必定对应于单位球面内的某一点，因为它的密度矩阵总可以写为$\rho=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma})$，这里$|\boldsymbol{p}|<1$(由于$\det\rho=\frac{1}{4}(1-\boldsymbol{p}^2)$)，根据$\rho$的本征值非负的要求，必有$|\boldsymbol{p}|<1$). 这便是二维量子态的 Bloch 球表示. 现在要求在 Bloch 球上表示下述态

$$|\Psi\rangle=\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle+\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle$$

$$\rho=\frac{1}{2}[|0\rangle\langle0|+|1\rangle\langle1|+(x+iy)|0\rangle\langle1|+(x-iy)|1\rangle\langle0|]$$

**解**：(1) 这是纯态的情况，由于

$$|0\rangle\langle0|=\frac{1-\sigma_3}{2},\ |1\rangle\langle1|=\frac{1+\sigma_3}{2},\ |0\rangle\langle1|=\frac{\sigma_1-i\sigma_2}{2},\ |1\rangle\langle0|=\frac{\sigma_1+i\sigma_2}{2}$$

$$\rho=|\psi\rangle\langle\psi|=\left(\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle+\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle\right)\left(\sin\frac{\theta}{2}\langle0|+\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}\langle1|\right)$$

$$=\sin^2\frac{\theta}{2}|0\rangle\langle0|+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle\langle0|$$

$$+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}|0\rangle\langle1|+\cos^2\frac{\theta}{2}|1\rangle\langle1|$$

$$=\sin^2\frac{\theta}{2}\frac{1-\sigma_3}{2}+\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}\frac{\sigma_1+i\sigma_2}{2}$$

$$+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}\frac{\sigma_1-i\sigma_2}{2}+\cos^2\frac{\theta}{2}\frac{1+\sigma_3}{2}$$

$$=\frac{1}{2}(1+\sin\theta\cos\phi\sigma_1-\sin\theta\sin\phi\sigma_2+\cos\theta\sigma_3)$$

$$=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

其中$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\phi,-\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)$欧拉角为$(\theta,-\phi)$.

(2) 这是混态的情况

$$\rho=\frac{1}{2}[|0\rangle\langle0|+|1\rangle\langle1|+(x+iy)|0\rangle\langle1|+(x-iy)|1\rangle\langle0|]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{1-\sigma_3}{2} + \frac{1+\sigma_3}{2} + (x+\mathrm{i}y)\frac{\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2}{2} + (x-\mathrm{i}y)\frac{\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2}{2}\right]$$

$$= \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 x + \sigma_2 y)$$

所以，$\boldsymbol{p}=(x,y,0)$.

讨论：也可以使用下述公式：

$$\boldsymbol{n} = \langle \Psi \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \Psi \rangle = \{\sin\theta\cos\varphi, -\sin\theta\sin\varphi, \cos\theta\}$$

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$\boldsymbol{p} = \mathrm{tr}(\rho\boldsymbol{\sigma})$$

**12.2**　利用 Bloch 球证明

(1) 任何二维混态 $\rho$ 总可以表示为两个纯态的如下凸性和

$$\rho = \lambda\rho_A + (1-\lambda)\rho_B$$

这里 $\rho_A = |A\rangle\langle A|$，$\rho_B = |B\rangle\langle B|$ 是两个纯态，$\lambda$ 是小于 1 的正数.

(2) 给出极化矢量的相应分解表达式.

(3) 这种表示方法不是惟一的. 说明混态的纯态系综表示是含混的.

**解**：(1) $\rho$ 的本征分解

$$\rho = \lambda_1 \mid \phi_1\rangle\langle\phi_1 \mid + \lambda_2 \mid \phi_2\rangle\langle\phi_2 \mid$$

给出了形如

$$\lambda\rho_A + (1-\lambda)\rho_B$$

的凸组合($\lambda_1+\lambda_2=1$).

(2) $\boldsymbol{p}=\lambda_1\boldsymbol{n}_1+\lambda_2\boldsymbol{n}_2$ 其中

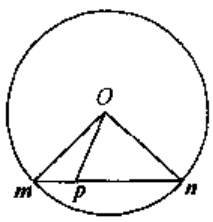
$$\rho = \frac{1+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2},\ \mid\phi_i\rangle\langle\phi_i\mid = \frac{1+\boldsymbol{n}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}$$

(3) 对于任意单位矢量 $\boldsymbol{m}$，定义

$$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{p} + \frac{1-|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{m}-\boldsymbol{p}|^2}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{m})$$

则 $|\boldsymbol{n}|^2=1$ 且

$$\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{m} + (1-\lambda)\boldsymbol{n},\quad \lambda = \frac{1-|\boldsymbol{p}|^2}{2(1-\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{p})}\quad (0\leqslant\lambda\leqslant 1)$$



题 12.2 图

如图

于是　　$\rho=\lambda|\phi_m\rangle\langle\phi_m|+(1-\lambda)|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$

其中

$$\mid\phi_m\rangle\langle\phi_m\mid = \frac{1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2},\ \mid\phi_n\rangle\langle\phi_n\mid = \frac{1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}.$$

**12.3**　假如 $\rho_A = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})$ 和 $\rho_B = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma})$，证明 $\mathrm{tr}(\rho_A\rho_B) =$

$\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)$.

**解：**

$$\rho_A\rho_B=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$=\frac{1}{4}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma}))$$

$$\mathrm{tr}(\rho_A\rho_B)=\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\mathrm{tr}(\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$=\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\mathrm{tr}[\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B+\mathrm{i}(\boldsymbol{n}_A\times\boldsymbol{n}_B)\cdot\boldsymbol{\sigma}]$$

$$=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B$$

(上面用到了 $\mathrm{tr}\sigma_i=0$)

**12.4**　给定系统 $A$ 的一个混态 $\rho_A$，证明它能够作为两体系统 $A$ 和 $B$ 的 Hilbert 空间中某个纯态的约化密度矩阵来得到.

**解：**假设 $\rho_A$ 的谱表示为 $\rho_A=\sum_i\lambda_i|\psi_i\rangle_{AA}\langle\psi_i|$ 同时假定 Hilbert 空间 $B$ 的基为 $|\mu_j\rangle_B$ 我们取 $AB$ 共同组成的系统的纯态为 $|\psi\rangle_{AB}=\sum_i\sqrt{\lambda_i}|\psi_i\rangle_A|\mu_i\rangle_B$ 对 $\rho_{AB}$ 取部分迹则

$$\rho_A=\mathrm{tr}_B(\rho_{AB})=\sum_k{}_B\langle\mu_k|\sum_{ij}\sqrt{\lambda_i}|\psi_i\rangle_A|\mu_i\rangle_B\sqrt{\lambda_j}{}_A\langle\psi_j|{}_B\langle\mu_j|\mu_k\rangle_B$$

$$=\sum_i\lambda_i|\psi_i\rangle_{AA}\langle\psi_i|$$

**12.5**　已知两体系统的一个态为

$$|\Phi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle_A\left[\frac{1}{2}|\uparrow\rangle_B+\frac{\sqrt{3}}{2}|\downarrow\rangle_B\right]+\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle_A\left[\frac{\sqrt{3}}{2}|\uparrow\rangle_B+\frac{1}{2}|\downarrow\rangle_B\right]$$

(1) 计算 $\rho_A=\mathrm{tr}_B|\Phi\rangle\langle\Phi|$ 和 $\rho_B=\mathrm{tr}_A|\Phi\rangle\langle\Phi|$；

(2) 寻找 Schmidt 分解.

**解：**(1)

$$\rho_A=\mathrm{tr}_B(\rho_{AB})={}_B\langle\uparrow|\Phi\rangle\langle\Phi|\uparrow\rangle_B+{}_B\langle\downarrow|\Phi\rangle\langle\Phi|\downarrow\rangle_B$$

$$=\frac{1}{2}|\uparrow\rangle_A\langle\uparrow|+\frac{1}{2}|\downarrow\rangle_A\langle\downarrow|+\frac{\sqrt{3}}{4}|\downarrow\rangle_A\langle\uparrow|+\frac{\sqrt{3}}{4}|\uparrow\rangle_A\langle\downarrow|$$

$$\rho_B=\mathrm{tr}_A(\rho_{AB})={}_A\langle\uparrow|\Phi\rangle\langle\Phi|\uparrow\rangle_A+{}_A\langle\downarrow|\Phi\rangle\langle\Phi|\downarrow\rangle_A$$

$$=\frac{1}{2}|\uparrow\rangle_B\langle\uparrow|+\frac{1}{2}|\downarrow\rangle_B\langle\downarrow|+\frac{\sqrt{3}}{4}|\downarrow\rangle_B\langle\uparrow|+\frac{\sqrt{3}}{4}|\uparrow\rangle_B\langle\downarrow|$$

(2) $\rho_A$ 的矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

求得其本征值为 $\lambda=\frac{1}{2}\pm\frac{\sqrt{3}}{4}$，其本征值对应的本征矢量为

$$\phi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \phi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

$$|\uparrow\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle+|\phi_2\rangle)$$

$$|\downarrow\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle-|\phi_2\rangle)$$

代入$|\phi\rangle$得

$$|\phi\rangle_{AB}=\frac{1+\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|\phi_1\rangle_A|\phi_1\rangle_B+\frac{1-\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|\phi_2\rangle_A|\phi_2\rangle_B$$

**12.6** 已知双量子位系统的一个量子态 $\rho_{AB}=\frac{1}{8}I+\frac{1}{2}|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|$，

(1) 求 $\rho_{AB}$的谱表示；(2)沿 $\boldsymbol{n}$ 测 $\boldsymbol{\sigma}_A$，沿 $\boldsymbol{m}$ 测 $\boldsymbol{\sigma}_B$，这里 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}=\cos\theta$，求它们都沿各自相应轴朝上的概率.

**解**：(1) $\rho_{AB}$的矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{3}{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

由久期方程解出其本征值为 $\lambda_{1,2,3}=\frac{1}{8}$，$\lambda_4=\frac{5}{8}$，进而求得相应的本征态为$|\phi^+\rangle$，$|\phi^-\rangle$，$|\psi^+\rangle$与$|\psi^-\rangle$. 于是 $\rho_{AB}$可以写成，$\rho_{AB}=\frac{1}{8}(|\phi^+\rangle\langle\phi^+|+|\phi^-\rangle\langle\phi^-|+|\psi^+\rangle\langle\psi^+|)+\frac{5}{8}|\psi^-\rangle\langle\psi^-|$

(2) 由投影算子 $\pi_\lambda=|\lambda\rangle\langle\lambda|=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{p}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})$可知，

$$P=\mathrm{tr}\left\{\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\rho_{AB}\right\}$$

由于

$$\sigma_{A1}\mid\psi^-\rangle=\mid\phi^-\rangle,\sigma_{A2}\mid\psi^-\rangle=-\mathrm{i}\mid\psi^+\rangle,\sigma_{A3}\mid\psi^-\rangle=-\mid\phi^+\rangle$$

$$\boldsymbol{\sigma}_A\mid\psi^-\rangle_{AB}=-\boldsymbol{\sigma}_B\mid\psi^-\rangle_{AB}$$

$$\rho_{AB}=\frac{1}{8}I+\frac{1}{2}\mid\psi^-\rangle_{AB}\langle\psi^-\mid$$

$$P=\mathrm{tr}\left\{\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\frac{1}{8}\right\}+$$

$$\mathrm{tr}\left\{\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\frac{1}{2}\mid\psi\rangle_{AB}\langle\psi^-\mid\right\}$$

因为

$$\mathrm{tr}(\mid\psi^-\rangle_{AB}\langle\psi^-\mid)=1$$

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A\mid\psi^-\rangle_{AB}\langle\psi\mid)=\mathrm{tr}(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B\mid\psi^-\rangle_{AB}\langle\psi^-\mid)=0$$

$$\mathrm{tr}[(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\mid\psi^-\rangle_{AB}\langle\psi^-\mid]=-n_im_j\langle\psi^-\mid\sigma_{Ai}\sigma_{Aj}\mid\psi^-\rangle$$

$$=-n_im_j\langle\psi^-\mid\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\sigma_k+\delta_{ij}\mid\psi^-\rangle$$

$$=-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}$$

所以

$$P=\frac{1}{8}+\frac{1}{8}-\frac{1}{8}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}=\frac{1}{4}-\frac{1}{8}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}$$

**12.7**　给定完全非极化态 $\rho=\frac{1}{2}(|0\rangle\langle0|+|1\rangle\langle1|)$，按照算子 $\sigma_{n_A}$，$\sigma_{n_B}$ 和 $\sigma_{n_C}$ 执行一系列过滤操作. 计算下列结果的概率：

(1) 测量 $\sigma_{n_A}$ 并得到 $+1$，接着测 $\sigma_{n_B}$ 得到 $+1$，再测 $\sigma_{n_C}$ 得到 $+1$；

(2) 测量 $\sigma_{n_A}$ 并得到 $+1$，接着测 $\sigma_{n_B}$ 得到 $+1$ 或 $-1$，再测 $\sigma_{n_C}$ 得到 $+1$；

(3) 测量 $\sigma_{n_A}$ 并得到 $+1$，测 $\sigma_{n_C}$ 得到 $+1$.

**解**：(1) 初始时 $\rho=\frac{I}{2}$，测量 $\sigma_{n_A}$ 并得到 $+1$ 的概率为

$$P_1=\mathrm{tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})\rho\right]=\frac{1}{2}$$

测量后系统塌缩到 $\rho_1=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\sigma)$ 描述的态. 于是再测量 $\sigma_{n_B}$ 得到 $+1$ 的概率为

$$P_2=\mathrm{tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})\right]$$

$$=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)$$

测量后系统又塌缩到 $\rho_2=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\sigma)$，与上面相似的计算可得，在此密度矩阵下，测量 $\sigma_{n_C}$ 得到 $+1$ 的概率是

$$P_3 = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B \cdot \boldsymbol{n}_C)$$

测量 $\sigma_{n_A}, \sigma_{n_B}, \sigma_{n_C}$ 所得结果都为 $+1$ 的总概率为，

$$P_{\text{total}} = \frac{1}{8}(1+\boldsymbol{n}_A \cdot \boldsymbol{n}_B)(1+\boldsymbol{n}_B \cdot \boldsymbol{n}_C)$$

(2)

$$P_{\text{total}} = \frac{1}{8}(1+\boldsymbol{n}_A \cdot \boldsymbol{n}_B)(1+\boldsymbol{n}_B \cdot \boldsymbol{n}_C) + \frac{1}{8}(1-\boldsymbol{n}_A \cdot \boldsymbol{n}_B)(1-\boldsymbol{n}_B \cdot \boldsymbol{n}_C)$$

$$= \frac{1}{4}[1+(\boldsymbol{n}_A \cdot \boldsymbol{n}_B)(\boldsymbol{n}_B \cdot \boldsymbol{n}_C)]$$

(3)

$$P = \frac{1}{4}(1+\boldsymbol{n}_A \cdot \boldsymbol{n}_C)$$

**12.8** 考虑下述粒子数 $N \gg 1$ 的五个量子系综：

(1) $S_1$ 由在态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 中随机分布的粒子所组成；

(2) $S_2$ 由在态 $\frac{1}{2}(|0\rangle+|1\rangle)$ 和 $\frac{1}{2}(|0\rangle-|1\rangle)$ 中随机分布的粒子所组成；

(3) $S_3$ 由在态 $\frac{1}{2}(|0\rangle-\mathrm{i}|1\rangle)$ 和 $\frac{1}{2}(|0\rangle+\mathrm{i}|1\rangle)$ 中随机分布的粒子所组成；

(4) $S_4$ 由在态 $\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle+\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|1\rangle$ 的粒子所组成，这里 $\theta$ 和 $\phi$ 是两个常数分布的随机变数；

(5) $S_5$ 由在态 $\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle+\cos\frac{\theta}{2}|1\rangle$ 的粒子所组成，这里 $\theta$ 是一个常数分布的随机变数.

试问有可能去设计一些测量来区分粒子是哪组的吗?

**解**：(1)，(2)，(3)简单计算得 $\rho=\frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|)$

(4)

$$\rho = \frac{1}{4\pi}\int \rho(\theta,\phi)\,\mathrm{d}\Omega$$

$$= \frac{1}{4\pi}\int \sin\theta \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\left(\sin\frac{\theta}{2}\,|\,0\rangle+\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\right)\left(\sin\frac{\theta}{2}\langle 0\,|+\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\langle 1\,|\right)$$

$$= \frac{1}{4\pi}\int \sin\theta \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\,|\,0\rangle\langle 0\,|+\cos^2\frac{\theta}{2}\,|\,1\rangle\langle 1\,|\right.$$

$$\left.+\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,|\,1\rangle\langle 0\,|+\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,|\,0\rangle\langle 1\,|\right)$$

$$= \frac{1}{2}(|\,0\rangle\langle 0\,|+|\,1\rangle\langle 1\,|)$$

(5)

$$\rho=\frac{1}{2\pi}\int \sin\theta \mathrm{d}\theta\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\mid 0\rangle\langle 0\mid+\cos^2\frac{\theta}{2}\mid 1\rangle\langle 1\mid\right.$$
$$\left.+\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\mid 0\rangle\langle 1\mid+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mid 1\rangle\langle 0\mid\right)$$
$$=\frac{1}{2}(\mid 0\rangle\langle 0\mid+\mid 1\rangle\langle 1\mid)$$

因为这五个密度矩阵都相同，故不可区分.

**12.9**　考虑一个初始在$|0\rangle$态上的粒子. 我们执行 $N$ 次关于算符 $\sigma_k\equiv \boldsymbol{n}_k\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 的过滤测量，这里 $n_k=\left[\sin\left(\frac{k\pi}{2N}\right),0,\cos\left(\frac{k\pi}{2N}\right)\right](k=1,2,\cdots,N)$. 计算全部测量结果都是+1 的概率. 当 $N\to\infty$时出现什么?

**解**：第一次测量 $\sigma_1=\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}$，结果为+1 的概率为，

$$P_1=\mathrm{tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_k\cdot\boldsymbol{\sigma})\mid 0\rangle\langle 0\mid\right]=\mathrm{tr}\left(\frac{1}{2}\mid 0\rangle\langle 0\mid\right)+\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\boldsymbol{n}_k\cdot\langle 0\mid\boldsymbol{\sigma}\mid 0\rangle)$$

因为

$$\langle 0\mid\sigma_1\mid 0\rangle=0,\langle 0\mid\sigma_2\mid 0\rangle=0,\langle 0\mid\sigma_3\mid 0\rangle=-1$$

则有

$$P_1=\frac{1}{2}(1-n_{13})=\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{\pi}{2N}\right)\qquad(\text{其中 } n_{13}\text{ 为 }\boldsymbol{n}_1\text{ 的第三分量})$$

第 $k$ 次之后，第 $k+1$ 次测量的概率为

$$P_{k+1}=\mathrm{tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_k\cdot\boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_{k+1}\cdot\boldsymbol{\sigma})\right]$$
$$=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_k\cdot n_{k+1})=\frac{1}{2}\left(1+\cos\frac{\pi}{2N}\right)$$
$$P=\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{\pi}{2N}\right)\frac{1}{2^{N-1}}\left(1+\cos\frac{\pi}{2N}\right)^{N-1}=0$$

若改初态为$|1\rangle$，则

$$P=\frac{1}{2^N}\left(1+\cos\frac{\pi}{2N}\right)^N$$
$$=\frac{1}{2^N}\left[2-\frac{\left(\frac{\pi}{2N}\right)^2}{2}\right]^N$$
$$=\left[1-\left(\frac{\pi}{4N}\right)^2\right]^N$$

当 $N\to\infty,P\to 1$

**12.10**　在 Ramsey 谱学中一个有兴趣的问题是测量如下 Hamilton 量中的频率

$\Delta$，

$$H=-\frac{\Delta}{2}\sigma_x$$

为此，制备一个两能级系统在$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$态上，并让它按这个 $H$ 演化一个固定的时间 $T$. 在 $T$ 之后测量算符 $\sigma_x$.

(1) 计算得到+1 的概率；

(2) 如果重复 $N$ 次实验，计算得到 $n$ 次为+1 的概率；

(3) 计算得到+1 结果的平均次数，以及它的均方差；

(4) 证明 $\Delta$ 的测量误差是 $\delta\Delta=\frac{1}{T\sqrt{N}}$.

**解**：(1) 在 $H=-\frac{\Delta}{2}\sigma_x$ 作用下有

$$|\Psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}|\Psi(0)\rangle=\mathrm{e}^{i\Delta\sigma_x t/2\hbar}|\Psi(0)\rangle$$

将$|\Psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$代入上式，得到

$$|\Psi(T)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\frac{i\Delta T}{2\hbar}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\frac{i\Delta T}{2\hbar}}|1\rangle$$

这时测 $\sigma_x$，结果为+1 的概率为

$$P=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0|+\langle 1|)|\psi(T)\rangle\right|^2=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{-\frac{i\Delta T}{2\hbar}}+\mathrm{e}^{\frac{i\Delta T}{2\hbar}})^2=\cos^2\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)$$

其中$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$为 $\sigma_x$ 本征值为+1 的本征态.

(2) 重复 $N$ 次实验，结果得到 $n$ 次为+1 的概率服从二项式分布，即

$$P_n=C_N^n p^n(1-p)^{N-n}=C_N^n\cos^{2n}\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)\sin^{2(N-n)}\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)$$

其中 $C_N^n=\frac{N!}{n!\ (N-n)!}$，$p$ 为一次测量 $\sigma_x$ 取+1 的概率.

设重复 $N$ 次实验结果为，$\underbrace{A\bar{A}A\bar{A}A\bar{A}AA\bar{A}\bar{A}\cdots\cdots A}$

其中 $A$ 表示结果为+1，$\bar{A}$ 表示结果为−1，上面结果中有 $n$ 个 $A$，$N-n$ 个 $\bar{A}$. 显然，此结果的概率为 $p^n(1-p)^{N-n}$. 而类似的结果(即有 $n$ 次为+1 的)有 $C_N^n$ 种(即从 $N$ 个物件中取出 $n$ 个的排列)，这些事件都是相互独立的，故总概率相加得到二项式分布.

(3) 设“测量结果为+1”这一事件，用“1”代表，“测量结果为−1”的事件用“0”代表. 则测量结果为+1 的平均次数变为求所有数之和的平均值. 由概率论可知

$$\bar{n}=Np+N\times 0\times(1-p)=Np=N\cos^2\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)$$

同样有概率论可知均方差 $\Delta n$ 为

$$\Delta n=\sqrt{\overline{n^2}-\bar{n}^2}=\sqrt{Np(1-p)}=\sqrt{N}\cos\frac{\Delta T}{2\hbar}\sin\frac{\Delta T}{2\hbar}$$

(4) 令 $\delta\bar{n}=\Delta n$,则有

$$2N\cos\frac{\Delta T}{2\hbar}\sin\frac{\Delta T}{2\hbar}\frac{T}{2\hbar}\delta\Delta=\sqrt{N}\cos\frac{\Delta T}{2\hbar}\sin\frac{\Delta T}{2\hbar}$$

化简后,得

$$\delta\Delta=\frac{1}{T\sqrt{N}}$$

**12.11**　对于存在退相干的情况,考虑上面问题. 假设在 $T$ 期间退相干将密度算符的非对角项 $|0\rangle\langle 1|$ 和 $|1\rangle\langle 0|$ 衰减一个因子 $e^{-\gamma t}$. 计算△测量中的误差.

**解**: (1) 用密度矩阵表示同时有退相干情况下系统量子态

$$\rho(T)=\frac{1}{2}[|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|+e^{-i\frac{\Delta T}{\hbar}}e^{-\gamma T}|0\rangle\langle 1|+e^{i\frac{\Delta T}{\hbar}}e^{-\gamma T}|1\rangle\langle 0|]$$

$$P=\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0|+\langle 1|)\rho(T)\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$$

$$=\frac{1}{2}\left(1+e^{-\gamma t}\cos\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right)$$

(2) 由二项式分解,可得

$$P_n=C_N^n\left[\frac{1}{2}\left(1+e^{-\gamma T}\cos\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right]^n\left[\frac{1}{2}\left(1-e^{-\gamma T}\cos\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right]^{N-n}$$

(3) 同 12.10 题,有

$$\bar{n}=\frac{N}{2}\left(1-e^{-\gamma t}\cos\frac{\Delta T}{\hbar}\right)$$

$$\Delta n=\sqrt{Np(1-p)}=\sqrt{\frac{N}{4}\left(1-e^{-2\gamma T}\cos^2\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right)}$$

(4) 由 $\delta\bar{n}=\Delta n$,可得

$$\frac{N}{2}e^{-\gamma T}\sin\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\frac{T}{\hbar}\delta\Delta=\sqrt{\frac{N}{4}\left(1-e^{-2\gamma T}\cos^2\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right)}$$

$$\delta\Delta=\frac{\sqrt{1-e^{-2\gamma T}\cos^2\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)}}{\sqrt{N}e^{-\gamma T}\sin\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\frac{T}{\hbar}}$$

**12.12**　考虑 $n$ 个两能级系统,它们每一个都由 Hamilton 量 $H=-\frac{\Delta}{2}\sigma_z$ 所描述并执行如下 Ramsey 类型的实验 $N$ 次制备高纠缠态

$$|\Psi\rangle=\frac{1}{2}\{|00\cdots00\rangle+|11\cdots\rangle\}$$

让它演化 $T$ 时间，接着执行态 $|\Psi^+\rangle$ 的测量

$$|\Psi^{\pm}\rangle = \frac{1}{2}\{|00\cdots00\rangle \pm |11\cdots11\rangle\}$$

如果执行 $N$ 次这样的测量，计算 $\Delta$ 的测量误差. 将这里的结果和上面 Ramsey 谱学的标准测量办法相比较.

**解**：(1) 初态 $|\Psi\rangle$ 经过时间 $T$ 演化后的态为

$$|\Psi(T)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(\sum_{n=1}^{n}\frac{\Delta\omega_n}{2})T}|\Psi\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{\frac{-i\Delta Tn}{2\hbar}}|00\cdots0\rangle + e^{\frac{i\Delta Tn}{2\hbar}}|11\cdots1\rangle)$$

执行 $|\Psi^+\rangle$ 测量，概率为

$$P_+ = |\langle\Psi^+|\psi(T)\rangle|^2 = \cos^2\frac{\Delta Tn}{2\hbar}$$

执行 $|\Psi^-\rangle$ 测量，概率为

$$P = |\langle\Psi|\psi(T)\rangle|^2 = \sin^2\frac{\Delta Tn}{2\hbar}$$

(2) 作 $N$ 次重复的实验，测得结果为 $|\Psi_+\rangle$ 的平均次数为

$$\bar{n} = N\cos^2\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)$$

均方根为

$$\Delta n = \sqrt{N\cos^2\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)\sin^2\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)}$$

(3) 令 $\delta\bar{n} = \Delta n$，则有

$$2N\cos\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)\sin\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)\frac{Tn}{2\hbar}\delta\Delta = \sqrt{N}\cos\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)\sin\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)$$

$$\delta n = \frac{\hbar}{\sqrt{N}Tn}$$

当 $n$ 越大时，测量误差越小.

**12.13** 确定使下述态成为不可分离的 $F$ 数值：

$$\rho_1 = (1-F)|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| + F|11\rangle\langle11|,$$

$$\rho_2 = F|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| + \frac{1-F}{3}|\Psi^+\rangle\langle\Psi^+| + \frac{1-F}{3}|\Phi^-\rangle\langle\Phi^-| + \frac{1-F}{3}|\Phi^+\rangle\langle\Phi^+|$$

**解**：(1) 由可分离态的判据可知，一个给定的两体二能级系统的密度矩阵 $\rho_{AB}$，只有在作部分转置操作后，仍然是正定的(即无负本征值)，这时 $\rho_{AB}$ 是可分离的. 为此我们先对 $\rho_1$ 作部分转置然后求本征值.

$$\rho_1 = (1-F)|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| + F|11\rangle\langle11|$$

$$= (1-F)\frac{1}{2}[|01\rangle - |10\rangle][\langle01| - \langle10|] + F|11\rangle\langle11|$$

$$=(1-F)\frac{1}{2}[|01\rangle\langle 01|+|10\rangle\langle 10|-|01\rangle\langle 10|-|10\rangle\langle 01|]+F|11\rangle\langle 11|$$

对第二位作部分转置，得到

$$\rho^{\mathrm{T}}=(1-F)\frac{1}{2}[|01\rangle\langle 01|+|10\rangle\langle 10|-|00\rangle\langle 11|-|11\rangle\langle 00|]+F|11\rangle\langle 11|$$

写成矩阵形式，有

$$\rho^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}\frac{1-F}{2}, & 0, & 0, & 0\\ 0, & \frac{1-F}{2}, & 0, & 0\\ 0, & 0, & 0, & \frac{F-1}{2}\\ 0, & 0, & \frac{F-1}{2}, & F\end{pmatrix}$$

易求出其本征值为 $\lambda_{1,2}=\frac{1-F}{2}$，$\lambda_{3,4}=\frac{F\pm\sqrt{F^2+(F-1)^2}}{2}$.

当 $F<1$ 时，由于 $\lambda_4=\frac{F-\sqrt{F^2+(F-1)^2}}{2}<0$ 故 $\rho^{\mathrm{T}}$ 非正定，即 $\rho_1$ 不可分离. 当 $F=1$ 时 $\rho_1$ 便可分离了.

(2)

$$\rho_2=F|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|+\frac{1-F}{3}(|\Psi^+\rangle\langle\Psi^+|+|\phi^+\rangle\langle\phi^+|\phi^-\rangle\langle\phi^-|)$$

$$=\frac{4F-1}{3}|\psi^-\rangle\langle\psi^-|+\frac{1-F}{3}I_{AB}$$

部分转置后，得

$$\rho_2^{\mathrm{T}}=\frac{2F+1}{6}[|01\rangle\langle 01|+|10\rangle\langle 10|]+\frac{1-F}{3}[|00\rangle\langle 00|+|11\rangle\langle 11|]$$

$$-\frac{4F-1}{6}[|00\rangle\langle 11|+|11\rangle\langle 00|]$$

矩阵形式为

$$\rho_2^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}\frac{2F+1}{6} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \frac{2F+1}{6} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{1-F}{3} & \frac{4F-1}{6}\\ 0 & 0 & \frac{4F-1}{6} & \frac{1-F}{3}\end{pmatrix}$$

其本征值为

$$\lambda_{1,2,3}=\frac{2F+1}{6},\lambda_4=\frac{1}{2}-F$$

因为当 $0<F<1$ 时，$\lambda_{1,2,3}>0$ 所以当 $F\leqslant\frac{1}{2}$ 时 $\lambda_4\geqslant 0$，$\rho_2$ 可分离.

**12.14**　寻找变换

$$|\Psi\rangle_A|0\rangle_B\to|\Psi'\rangle_{AB}$$

它们能执行将一个两能级系统 $A$ 的一个态“良好”的拷贝到另一个两能级系统上. 所谓变换能“良好”的拷贝是指可信度

$$F=\mathrm{tr}_A[{}_B\langle\Psi|\Psi'\rangle_{ABAB}\langle\Psi'|\Psi\rangle_B]$$

对所有可能的态 $|\Psi\rangle_A$ 都必须是尽可能的大.

**解**：令 $\hat{X}=\sum_{mn}|m\rangle_A|n\rangle_{BA}\langle n|\langle m|$，它显然与 $|\Psi\rangle$ 无关.

并且有

$$|\Psi_{AB}\rangle=\hat{X}|\Psi_A\rangle|0\rangle_B=|0\rangle_A|\Psi\rangle_B$$
$$F={}_B\langle\Psi|(\mathrm{tr}_A|\Psi'\rangle_{ABAB}\langle\Psi'|)|\Psi_B\rangle=1$$

**12.15**　对于单量子位 $A$ 如下一个 POVM：

$$F_\alpha=\frac{2}{3}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle\langle\boldsymbol{n}_\alpha|,\alpha=1,2,3,\boldsymbol{n}_1+\boldsymbol{n}_2+\boldsymbol{n}_3=0$$

也可用张量积的方式实现. 办法是再添一个量子位 $B$，并且在 $H_A\otimes H_B$ 空间中选择态矢

$$\begin{cases}|\phi_\alpha\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|+\boldsymbol{n}_\alpha\rangle_A|0\rangle_B+\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|1\rangle_B,\alpha=1,2,3\\ |\phi_0\rangle=|1\rangle_A|1\rangle_B\end{cases}$$

设初态为 $\rho_{AB}=\rho_A\otimes|0\rangle_{BB}\langle 0|$，验证

(1) 这四个态是正交归一的，可以看作是相应某组力学量的一个表象；

(2) 在 $H_A\otimes H_B$ 执行向它们投影的正交测量，在 $H_A$ 上就实现了给定的 POVM.

**解**：(1) 由 $\boldsymbol{n}_1+\boldsymbol{n}_2+\boldsymbol{n}_3=0$ 得 $(\boldsymbol{n}_i+\boldsymbol{n}_j)^2=1$ 即 $\boldsymbol{n}_i\cdot\boldsymbol{n}_j=-\frac{1}{2}$，$\forall i\neq j$.

$$|\phi_\alpha\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle_A|0\rangle_B+\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|1\rangle_B$$

这里

$$\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\boldsymbol{n}_\beta\rangle=|\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\boldsymbol{n}_\beta\rangle|e^{i\phi_{\alpha\beta}}=\sqrt{\frac{1+\boldsymbol{n}_\alpha\cdot\boldsymbol{n}_\beta}{2}}e^{i\phi_{\alpha\beta}}=\frac{1}{2}e^{i\phi_{\alpha\beta}}$$

当 $\alpha\neq\beta$ 时

$$\langle \boldsymbol{n}_\alpha \mid \boldsymbol{n}_\beta \rangle = -\frac{1}{2}$$

由上述关系易验证题中所给出的四个态正交，

$$\langle \phi_\alpha \mid \phi_\beta \rangle = \frac{2}{3}\langle \boldsymbol{n}_\alpha \mid \boldsymbol{n}_\beta \rangle + \frac{1}{3}$$

$$= \frac{2}{3} \times \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{3} = 0$$

(2) 设系统处于 $\rho_{AB} = \rho_A \otimes |0\rangle\langle 0|$ 描述的态中. 对系统作正交投影测量，有

$$\langle \phi_\alpha \mid \rho_{AB} \mid \phi_\alpha \rangle = \frac{2}{3}\langle \boldsymbol{n}_\alpha \mid \rho_A \mid \boldsymbol{n}_\alpha \rangle = \mathrm{tr}\left(\frac{2}{3} \mid \boldsymbol{n}_\alpha \rangle\langle \boldsymbol{n}_\alpha \mid \rho_A\right) = \mathrm{tr}(F_\alpha \rho_A)$$

**12.16**　证明上题的 POVM 也能以直和的办法，在一个三能级系统上的正交测量中实现.

**解**：在 $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\}$ 中定义正交归一基

$$| u_\alpha \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \mid \boldsymbol{n}_\alpha \rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \mid 2\rangle, \langle \boldsymbol{n}_\alpha \mid \boldsymbol{n}_\beta \rangle = -\frac{1}{2}$$

其中 $|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle$ 定义在三维 Hilbert 空间里一个由 $|0\rangle, |1\rangle$ 张成的子空间上.

则系统 $A$ 在扩大的三维直和空间的密度矩阵为

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} \rho_A & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

其中 $\rho_A$ 为系统在二维空间中的密度矩阵.

三维空间中的正交投影测量可得

$$\langle u_\alpha \mid \rho_3 \mid u_\alpha \rangle = \frac{2}{3}\langle \boldsymbol{n}_\alpha \mid \rho_A \mid \boldsymbol{n}_\alpha \rangle$$

$$= \mathrm{tr}\left(\frac{2}{3} \mid \boldsymbol{n}_\alpha \rangle\langle \boldsymbol{n}_\alpha \mid \rho_A\right) = \mathrm{tr}(F_\alpha \rho_A)$$

**12.17**　给定如下一组正算符

$$p_1 = \frac{1}{2} |+\boldsymbol{e}_z\rangle\langle +\boldsymbol{e}_z|, p_2 = \frac{1}{2} |-\boldsymbol{e}_z\rangle\langle -\boldsymbol{e}_z|$$

$$p_3 = \frac{1}{2} |+\boldsymbol{e}_x\rangle\langle +\boldsymbol{e}_x|, p_4 = \frac{1}{2} |-\boldsymbol{e}_x\rangle\langle -\boldsymbol{e}_x|$$

证明(1) 它们组成一个 POVM；

(2) 在引入另一个量子位之后，它怎样可以作为双量子位的态空间中一个正交测量来实现.

**解**：(1) 因为 $p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = \frac{1}{2}[|+\boldsymbol{e}_z\rangle\langle +\boldsymbol{e}_z| + |-\boldsymbol{e}_z\rangle\langle -\boldsymbol{e}_z|] +$

$\frac{1}{2}[|\boldsymbol{e}_x\rangle\langle \boldsymbol{e}_x| + |-\boldsymbol{e}_x\rangle\langle -\boldsymbol{e}_x|] = I$，所以 $\{p_i\}$ $i=1,2,3,4$ 具有完备性.

另外容易看出，　　$p_i^{'}=p_i$

最后有　　$\langle\psi|p_1|\psi\rangle=|\langle e_z|\psi\rangle|^2\geqslant 0$

类似有　　$\langle\psi|p_i|\psi\rangle\geqslant 0 \quad (i=2,3,4)$

综上所述，$\{p_i\}$满足完备、厄米、正定，故构成一组 POVM.

(2) 先构成 2qubit 的四维 H 空间，其四个正交归一基矢为

$$|u_1\rangle=|e_z\rangle_A|e_z\rangle_B,\quad |u_2\rangle=|-e_z\rangle_A|e_z\rangle_B$$

$$|u_3\rangle=|e_z\rangle_A|-e_z\rangle_B,\quad |u_4\rangle=|-e_x\rangle_A|-e_z\rangle_B$$

设四维空间的密度矩阵为

$$\rho_4=\rho_A\otimes\frac{1}{2}[|e_z\rangle_B\langle e_z|+|-e_z\rangle_B\langle -e_z|]$$

四维空间作正交投影测量，则有

$$\begin{aligned}&\langle u_1|\rho_4|u_1\rangle\\=&{}_A\langle e_z|_B\langle e_z|\rho_A\otimes\frac{1}{2}[|e_z\rangle_B\langle e_z|+|-e_z\rangle_B\langle -e_z|]|e_z\rangle_A|e_z\rangle_B\\=&{}_A\langle e_z|\frac{1}{2}\rho_A|e_z\rangle_A=\mathrm{tr}\frac{1}{2}[|e_z\rangle\langle e_z|]\rho_A=\mathrm{tr}p_1\rho_A\end{aligned}$$

同理

$$\langle u_i|\rho_4|u_i\rangle=\mathrm{tr}(p_i\rho_A)\quad (i=2,3,4)$$

**12.18**　如果将一般的超算符 $\$:\rho\to\rho'$ 用参数来表示，需用多少各实参数？这里 $\rho$ 是 $N$ 维 Hilbert 空间中的一个密度矩阵.

**解**：设 $\$(\rho_A)=\rho_A'$ 是 $N$ 维 Hilbert 空间 $H_A$ 中的任意一个超算符. 可以证明，$H_A$ 中的超算符和扩展 Hilbert 空间 $H_A\otimes H_B$ 中的满足条件

$$\mathrm{tr}_A\rho_{AB}=1 \tag{1}$$

的密度矩阵 $\rho_{AB}$ 是一一对应的. 而满足(1)式的 $\rho_{AB}$ 的自由度为 $N^4-N^2$，即 $\rho_{AB}$ 中有 $N^4-N^2$ 个实参数.

下面证明 $\$$ 与 $\rho_{AB}$ 的一一对应.

若 $H_A\otimes H_B$ 中上述 $\rho_{AB}$ 给定，则由亲态方法可知超算符可以定义如下

$$\$(\rho)=\mathrm{tr}(\rho_B^{\mathrm{T}}\rho_{AB})\quad (\mathrm{tr}\rho_{AB}=1)$$

其中 $\rho_B$ 是定义在 $H_B$ 空间中的密度矩阵，其矩阵元和 $\rho_A$ 完全相同. 而给定 $\$$ 定义后，

$$\rho_{AB}=\$\otimes I_B(|\Phi\rangle\langle\Phi|),\quad |\Phi\rangle=\sum_i|i\rangle_A|i'\rangle_B$$

其中 $I_B$ 是 $H_B$ 中的恒等超算符. 可以证明 $\mathrm{tr}\rho_{AB}=1$. 由 Kraus 定理可知

$$\$(\rho_A)=\sum_\mu M_\mu\rho_A M_\mu^+$$

所以，

$$\rho_{AB} = \$ \otimes I_B(|\Phi\rangle\langle\Phi|) = \sum_{\mu} M_{\mu} |\Phi\rangle\langle\Phi| M_{\mu}^{\dagger} = \sum_{i} P_i |\Psi\rangle_{ABAB}\langle\Psi|$$

上面第二个等号是因为 $\$ \otimes I_B$ 是完全正定的，所以 $\rho_{AB}$ 可以用 $H_A \otimes H_B$ 中的基 $\{|\Psi\rangle_{AB}\}$ 展开.

设 $|\Psi_i\rangle_{AB} = \sum_{mn} C_{mn}^{i} |m\rangle_A |n\rangle_B = \hat{C}_i \sum_{n} |n\rangle_A |n\rangle_B$ 其中 $\hat{C}_i$ 为 $H_A$ 中的算符，有

$\hat{C}_i |n\rangle_A = \sum_{m} C_{mn}^{i} |m\rangle_A$.

定义 $M_i = \sqrt{p_i}\,\hat{C}_i$. 使得

$$\mathrm{tr}_B(\rho_B^{\mathrm{T}} \rho_{AB}) = \sum_{i} M_i \rho_A M_i^{\dagger} = \$(\rho_A)$$

则需 $\sum_{i} M_i^{\dagger} M_i = \sum_{i} P_i \hat{C}_i^{+} \hat{C}_i = I$

这时应有，

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}_A \rho_{AB} &= \mathrm{tr}_A \sum_{i} P_i |\Psi_i\rangle_{ABAB}\langle\Psi_i| \\
&= \mathrm{tr}_A \Big( \sum_{i} P_i \hat{C}_i \sum_{n} |n\rangle_A |n\rangle_B \sum_{m} {}_A\langle m| {}_B\langle m| \hat{C}_i^{+} \Big) \\
&= \sum_{mn} |n\rangle_{BB}\langle m| {}_A\langle m| \sum_{i} P_i \hat{C}_i^{\dagger} \hat{C}_i |n\rangle_A \\
&= \sum_{mn} |n\rangle_{BB}\langle m| {}_A\langle m|n\rangle_A = \sum_{n} |n\rangle_{BB}\langle n| = I
\end{aligned}$$

**12.19**　证明 Fock 空间中的算符 $\hat{\Omega}: |n\rangle \to |n+1\rangle, n=0,1,2,\cdots$ 是一个等距算子. 就是说，它满足 $\Omega^{+}\Omega = I, \Omega\Omega^{+} \neq I$. 求出第二个表达式等于什么.

**证**：由题意

$$\hat{\Omega} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n+1|$$

因为

$$\hat{\Omega}^{+} \hat{\Omega} = \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle\langle m+1| \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n| = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = I$$

所以

$$\langle\Psi| \hat{\Omega}^{+} \hat{\Omega} |\Psi\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle$$

上式说明 $\hat{\Omega}$ 是一个等距算符，不改变任何态 $|\Psi\rangle$ 的标积.

但是

$$\hat{\Omega}\hat{\Omega}^{+} = \sum_{m=0}^{\infty} |m+1\rangle\langle m| \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n+1|$$

$$=\sum_{m=0}^{\infty}|m+1\rangle\langle m+1|=\sum_{n=1}^{\infty}|n\rangle\langle n|=I-|0\rangle\langle 0|\neq I$$

故$\hat{\Omega}$并非幺正算符.

**12.20** 证明超算符为幺正算符(或可逆算符)的充分必要条件有如下两种等价的提法

a) $M_\mu M_\nu^+=$常数$C_{\mu\nu}$,且 trC=1

b) $\{M_\mu\}$中只有一个是线性独立的,且超算符有逆算符存在.

**证**:条件的充分性:

设$\$=\{M_\mu\}$为满足 a)中条件的超算符,

$$\$(\rho)=\sum_\mu M_\mu\rho M_\mu^+,\ \sum_\mu M_\mu^+M_\mu=1$$

则

$$(C^2)_{\mu\nu}=\sum_\lambda C_{\mu\lambda}C_{\lambda\nu}=\sum_\lambda M_\mu M_\lambda^+M_\lambda M_\nu^+$$

$$=M_\mu\Big(\sum_\lambda M_\lambda^+M_\lambda\Big)M_\nu^+=M_\mu M_\nu^+=C_{\mu\nu}$$

即$C^2-C=0$. 说明矩阵$C$的本征值只为 0 和 1. 但考虑到$\mathrm{tr}C^2=\mathrm{tr}C=1$,所以$C$的非零本征值(为 1)只有一个,其余均为 0. 这就是说,$C$的秩为 1. 可知它的各行(列)线性相关. 即存在常数$\alpha_{\mu\nu},\beta_{\mu\nu}$. 使得

$$\alpha_{\mu\nu}(C_{\mu1},C_{\mu2},\cdots,C_{\mu n})+\beta_{\mu\nu}(C_{\nu1},C_{\nu2},\cdots,C_{\nu n})=0$$

也就是

$$(\alpha_{\mu\nu}M_\mu+\beta_{\mu\nu}M_\nu)(M_1^+,M_2^+,\cdots,M_n^+)=0$$

但$\{M_m^+u\}$不可能全为零,所以

$$\alpha_{\mu\nu}M_\mu+\beta_{\mu\nu}M_\nu=0$$

这就是说$\{M_\mu\}$以及$\{M_\mu^+\}$中只有一个是线性独立的. 其余均和它线性相关. 这也可从下面的论证中得到.

由于$C$为厄米矩阵,总可找到一个幺正矩阵$U$将其对角化. 于是

$$U\begin{pmatrix}M_1\\ \vdots\\ M_\mu\\ \vdots\\ M_n\end{pmatrix}(M_1^+,\cdots,M_\nu^+,\cdots,M_n^+)U^{-1}=U\begin{pmatrix}C_{11},C_{12},\cdots,C_{1n}\\ C_{21},C_{22},\cdots,C_{2n}\\ \cdots\cdots\\ C_{n1},C_{n2},\cdots,C_{nn}\end{pmatrix}U^{-1}$$

$$=\begin{pmatrix}1&&&\\ &0&&\\ &&\ddots&\\ &&&0\end{pmatrix}$$

令 $N_\mu = \sum_\lambda U_{\mu\lambda} M_\lambda$. 即得(令 $N^+ = (N_1^+, \cdots, N_n^+)$)

$$NN^+ = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

或者

$$N_1 N_1^+ = 1 \tag{1}$$

由于其余的 $N_\mu N_\mu^+ = 0$(当 $\mu$ 或者 $\nu \neq 1$ 时). 于是可得 $N_\mu = 0, \mu \neq 1$.

注意这时有

$$\$(\rho) = \sum_\mu M_\mu \rho M_\mu^+ = \sum_{\mu\lambda\delta} (U^{-1})_{\mu 1} N_\lambda \rho N_\delta^+ U_{\delta 1} = \sum_\lambda N_\lambda \rho N_\lambda^+$$
$$= N_1 \rho N_1^+$$

同时,由于 $\$(\rho)$是超算符,所以又有

$$N_1^+ N_1 = 1 \tag{2}$$

由(1)和(2)式知,$N_1$ 是幺正算符. 所以 $\$ 是幺正映射.

条件的必要性

如果一个超算符 $\$ = \{M_\mu\}$是幺正的(可逆的). 它将把任意纯态映射为纯态,然而这在算符 $M_\mu$ 中只有一个是线性独立时才有可能(见教材中 § 12.3.5),即应当有

$$\$(\rho) = M\rho M^+, \qquad M^+ M = 1$$

这时它的逆映射必为

$$\$^{-1}(\rho) = M^+ \rho M, \qquad M^+ M = 1$$

因为

$$\$^+ \$(\rho) = M^+ M \rho M^+ M = \rho$$

注意已设 $\$ 逆映射存在,故又有 $\$ \$^{-1}(\rho) = \rho$,即 $\$^+$也是超算符,有

$$MM^+ = 1$$

所以幺正算符 $M$ 满足题设的条件.

证 b):由上面证 a)借鉴可以得到,不在此赘述.

**12.21** 定义如果 $H_A$ 上一个算符 $\Omega_A$ 没有出现负本征值,就称其为正算符;如果将它推广成任何张量积 $\Omega \otimes I_B$ 的形式,也都不出现负本征值,就称它是完全正的算符. 这里 $I_B$ 是某一任意 $B$ 系统状态空间中的单位算符. 证明 $H_A$ 上的转置算符 $T_A : \rho_A \to \rho_A^T$ 是个正算符,但不是一个完全正的算符.

**证**:设 $H_A$ 和 $H_B$ 的维数都为 $N$,$|\Phi\rangle_{AB}$ 为 $H_A \otimes H_B$ 空间的态矢.

$$|\Phi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} |i\rangle_A \otimes |i'\rangle_B$$

(此态矢为最大纠缠态,有 $\mathrm{tr}_B|\Phi\rangle_{AB}{}_{AB}\langle\Phi|=I_A$)

设

$$\rho_{AB}=|\Phi\rangle_{AB}{}_{AB}\langle\Phi|=\frac{1}{N}\sum_{ij}|i\rangle_{AA}\langle j|\otimes|i'\rangle_{BB}\langle j'|$$

用 $T_A\otimes I_B$ 作用到 $\rho_{AB}$ 上后,得

$$\rho'_{AB}=T_A\otimes I_B\rho_{AB}=\frac{1}{N}\sum_{ij}|j\rangle_{AA}\langle i|\otimes|i'\rangle_{BB}\langle j'|$$

设 $N\rho'_{AB}=\sum_{ij}|j\rangle_{AB}\langle i|\otimes|i'\rangle_{BB}\langle j'|$ 可称为交换算符. 因为,若设有两个态,

$$\begin{cases}|\psi\rangle=\sum_i\alpha_i|i\rangle\\ |\varphi\rangle=\sum_j\beta_j|j'\rangle\end{cases}$$ 则有

$$\begin{aligned}N\rho'_{AB}|\psi\rangle_A|\varphi\rangle_B&=N\rho'_{AB}\sum_i\alpha_i|i\rangle_A\otimes\sum_j\beta_j|j'\rangle_B\\&=\Big[\sum_{ij}|j\rangle_{AA}\langle i|\otimes|i'\rangle_{BB}\langle j'|\Big]\Big[\sum_{ij}\alpha_i|i\rangle_A\otimes\beta_j|j'\rangle_B\Big]\\&=\sum_i\alpha_i|i'\rangle_B\otimes\sum_j\beta_j|j\rangle_A=|\varphi\rangle_A|\psi\rangle_B\end{aligned}$$

即交换算符使两个粒子交换波函数,各自基矢不变. 显然交换两次后,状态还原,故有 $(N\rho')^2=I_{AB}$. 即 $N\rho'$ 本征值为 $\pm1$,对应 $-1$ 本征值的本征态形如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|i\rangle_A|j\rangle_B-|j\rangle_A|i\rangle_B)\quad(i\neq j)$$

故 $N\rho'$ 非完全正定.

**12.22** 证明 Kraus 定理.

**解**:设 $H_A$ 中任一态 $|\Psi\rangle_A=\sum_i\alpha_i|i\rangle_A$,则在 $H_B$ 中可找到一个对应的态 $|\varphi^*\rangle_B=\sum_i\alpha_i^*|i'\rangle_B$,于是我们称 $|\Psi\rangle_B$ 为"亲属态",$|\varphi^*\rangle_B$ 为"指标态". 并且设 $|\Phi\rangle_{AB}=\sum_{i=1}^{N}|i\rangle_A|i'\rangle_B$. 则显然有

$$|\Psi\rangle_A={}_B\langle\varphi^*|\Phi\rangle_{AB}$$

即在 $H_A\otimes H_B$ 中测量 $|\varphi^*\rangle_B$ 可以制备 $|\Psi\rangle_A$ 态. 设 $M_A$ 是 $H_A$ 中的一个算符,则 $M_A\otimes I_B$ 是 $H_A\otimes H_B$ 中的一个算符,其中 $I_B$ 为 $H_B$ 中的恒等算符. 作用到 $|\Phi\rangle_{AB}$ 态上,显然有

$$M_A\otimes I_B|\Phi\rangle_{AB}=\sum_{i=1}^{N}M_A|i\rangle_A|i'\rangle_B$$

进而 ${}_B\langle\varphi^*|$ 左乘等式两边,可得

$${}_B\langle\varphi^*|M_A\otimes I_B|\Phi\rangle_{AB}|=M_A|\phi\rangle_A=M_{AB}\langle\varphi^*|\Phi\rangle_{AB}\qquad(1)$$

由上式可知，先用 $M_A\otimes I_B$ 对 $|\Phi\rangle_{AB}$ 作用. 再同 ${}_B\langle\varphi^*|$ 取内积，等价于先与 ${}_B\langle\varphi^*|$ 求内积，再用 $M_A$ 作用.

下面证明 Kraus 定理.

因为 $\$$ 是完全正的，所以 $\$_A\otimes I_B$ 在 $H_A\otimes H_B$ 中也是完全正的，这时 $\$_A\otimes I_B(|\Phi\rangle_{ABAB}\langle\Phi|)$ 可视为 $H_A\otimes H_B$ 中的某一密度算符 $\rho'_{AB}$，将它用 $H_A\otimes H_B$ 中的完备基矢 $\{|\tilde{\Phi}_\mu\rangle_{AB}\}$ 展开有

$$\rho'_{AB}=\$_A\otimes I_B(|\Phi\rangle_{ABAB}\langle\Phi|)=\sum_\mu q_\mu|\tilde{\Phi}_\mu\rangle\langle\tilde{\Phi}_\mu|$$

这里的 ${}_{AB}\langle\tilde{\Phi}|\tilde{\Phi}\rangle_{AB}=N$，$\sum_\mu q_\mu=1, q_\mu\geqslant 0$

由亲态方法可知

$$\$_A\{|\Psi\rangle_{AA}\langle\Psi|\}=\$_A\{{}_B\langle\varphi^*|\Phi\rangle_{ABAB}\langle\Phi|\varphi^*\rangle_B\}$$

由(1)式可见，上式右边 $|\Phi\rangle_{AB}$ 先与 ${}_B\langle\varphi^*|$ 求内积，再受 $\$_A$ 作用与先用 $\$_A\otimes I_B$ 作用 再与 ${}_B\langle\varphi^*|$ 内积等价，故有

$$\begin{aligned}\$_A\{|\Psi\rangle_{AA}\langle\Psi|&={}_B\langle\varphi^*|\{\$_A\otimes I_B(|\Phi\rangle_{ABAB}\langle\Phi|)\}|\varphi^*\rangle_B\\&={}_B\langle\varphi^*|\left\{\sum_\mu q_\mu|\tilde{\Phi}_\mu\rangle_{ABAB}\langle\tilde{\Phi}_\mu|\right\}|\varphi^*\rangle_B\\&\equiv\sum_\mu M_\mu|\Psi\rangle_{AA}\langle\Psi|M_A^\dagger\end{aligned}$$

上式即为超算符的求和表示. Kraus 定理得证，其中 $M_\mu|\Psi\rangle_A$ 定义为 $\sqrt{q_\mu}{}_B\langle\varphi^*|\tilde{\Psi}_\mu\rangle_{AB}$

**12.23**　任何量子过程都可以用超算符来实现，量子态超空间传送也不例外，试用超算符实现量子态的超空间传送. 即找出描述量子态超空间传送

$$\$(|\psi\rangle_{2323}\langle\psi|\otimes|\phi\rangle_{11}\langle\phi|)=|\phi\rangle_{33}\langle\phi|\otimes\frac{I_{12}}{4}$$

的超算符 $\$$ 的和表示.（这里 $d=4$ 是粒子 1,2 的维数和，其中 $|\psi\rangle_{23}$ 是某个最大纠缠态，$|\phi\rangle_1$ 是任意态）. 也即找出 $\{S_\mu\}$，使得 $\sum_\mu S_\mu S_\mu^+=1$. 且

$$\sum_\mu S_\mu(|\psi\rangle_{2323}\langle\psi|\otimes|\phi\rangle_{11}\langle\phi|)S_\mu^\dagger=|\phi\rangle_{33}\langle\phi|\otimes\frac{I_{12}}{4}$$

**解**：设

$$|\phi\rangle_1=\alpha|0\rangle_1+\beta|1\rangle_1,$$

不失一般性，假设 2、3 粒子处于纠缠态

$$|\psi^-\rangle_{23}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_2|1\rangle_3-|1\rangle_2|0\rangle_3)$$

则 $|\phi\rangle_1|\psi^-\rangle_{23}$ 按照 $|\Phi_\mu\rangle_{12}$ 展开有

$$|\phi\rangle_1|\psi^-\rangle_{23}=\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_\mu|\Phi_\mu\rangle_{12}u_\mu|\phi\rangle_3$$

其中

$$|\Phi_0\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|1\rangle_2-|1\rangle_1|0\rangle_2)$$

$$|\Phi_1\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|0\rangle_2-|1\rangle_1|1\rangle_2)$$

$$|\Phi_2\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|0\rangle_2+|1\rangle_1|1\rangle_2)$$

$$|\Phi_3\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|1\rangle_2+|1\rangle_1|0\rangle_2)$$

$$u_0=-1,\quad u_1=\sigma_1,\quad u_2=\mathrm{i}\sigma_2,\quad u_3=\sigma_3$$

定义 $S_\mu=u_\mu^+\otimes|\Phi_\mu\rangle_{1212}\langle\Phi_\mu|$，

则

$$\sum_\mu S_\mu(|\psi\rangle_{2323}\langle\psi|\otimes|\phi\rangle_{11}\langle\phi|)S_\mu^+=|\phi\rangle_{33}\langle\phi|\otimes\frac{I_{12}}{4}$$

（若$|\psi\rangle_{23}$为其他最大纠缠态，则相应的 $u_\mu$ 将有所变化.）

其中

$$|\Phi_0\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|1\rangle_2-|1\rangle_1|0\rangle_2)$$

$$|\Phi_1\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|0\rangle_2-|1\rangle_1|1\rangle_2)$$

$$|\Phi_2\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|0\rangle_2+|1\rangle_1|1\rangle_2)$$

$$|\Phi_3\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1|1\rangle_2+|1\rangle_1|0\rangle_2)$$

$$u_0=-1,\quad u_1=\sigma_1,\quad u_2=\mathrm{i}\sigma_2,\quad u_3=\sigma_3$$

定义 $S_\mu=u_\mu^+\otimes|\Phi_\mu\rangle_{1212}\langle\Phi_\mu|$，

则

$$\sum_\mu S_\mu(|\psi\rangle_{2323}\langle\psi|\otimes|\phi\rangle_{11}\langle\phi|)S_\mu^+=|\phi\rangle_{33}\langle\phi|\otimes\frac{I_{12}}{4}$$

（若$|\psi\rangle_{23}$为其他最大纠缠态，则相应的 $u_\mu$ 将有所变化.）